ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ, 2019, том 120, № 7, с. 771-777

## ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ

УДК 539.4.011

# ИЗБЫТОЧНЫЙ ОБЪЕМ МАТЕРИАЛОВ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

© 2019 г. Л. С. Васильев<sup>а, \*</sup>, С. Л. Ломаев<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Физико-технический институт УрО РАН, ул. Кирова, 132, Ижевск, 426000 Россия \*e-mail: VasilyevLS@yandex.ru Поступила в редакцию 27.09.2017 г. После доработки 30.10.2018 г. Принята к публикации 03.12.2018 г.

В рамках нелинейной теории необратимых деформаций проведен расчет избыточного объема краевых дислокаций и их скоплений. Показано, что существование свободного объема у дислокаций является следствием асимметрии изменения энергии кристаллической решетки по отношению к растяжению или сжатию. Установлено, что влияние давления на пластичность металлов определяется величиной избыточного объема основных носителей пластической деформации, входящих в дефектную подсистему материалов. Рассмотрено влияние избыточного объема дислокаций на процессы самодиффузии по дислокационным линиям.

*Ключевые слова:* избыточный объем дислокаций и их скоплений, диффузия по дислокациям **DOI:** 10.1134/S0015323019050176

## введение

Известно, что пластические свойства материалов существенно зависят от условий деформирования. Так, при фиксированной температуре пластичность металлов значительно повышается при увеличении величины внешнего давления [1]. Этот эффект во многом определяет возможности получения наноструктурированных металлических систем в процессах пластического деформирования [2].

Пластичность металлов определяется коллективным поведением основных носителей пластической деформации: точечных, линейных и планарных дефектов кристаллической решетки. Основные механизмы разрушения кристаллов, свойства пор и микротрещин также тесно связаны со свойствами решеточных дефектов [1, 3]. Следовательно, давление, повышая пластичность металлов, должно оказывать определенное влияние на поведение дефектов кристаллической решетки.

С другой стороны, в термодинамике давление рассматривается как обобщенная термодинамическая сила, сопряженная объему. Поэтому влияние давления на поведение дефектов должно означать, что они могут давать определенный вклад в величину объема материала. Однако современная теория дефектов обычно не рассматривает такую возможность. К примеру, в общепринятой линейной теории деформаций вклад дислокаций в полное изменение объема материала равен нулю [3]. Существуют два основных подхода к решению этой проблемы. Первый связан с формальным применением методов нелинейной теории упругости к анализу дислокационных полей дисторсии (см., например, в [4]). Однако его следует признать неполным, поскольку дислокации вносят в материал не только обратимые, но и необратимые, т.е. неупругие деформации.

Второй подход основан на прямых вычислениях объемов для ограниченных конфигураций одиночных дислокаций (например, дислокационных диполей) с использованием модельных представлений о потенциалах межатомных взаимодействий или первопринципных расчетов [5, 6]. Однако эти подходы сталкиваются со значительными трудностями при описании деформационных полей от скоплений дислокаций одного знака.

Цель работы состоит в исследовании объемнозависимых свойств дислокаций и их скоплений в рамках нелинейной теории необратимых деформаций, основанной на континуальной модели Дебая и приближении Грюнайзена [7].

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Избыточный объем и свойства потенциалов межатомных взаимодействий

Рассмотрим структурные особенности прямолинейной краевой дислокации в простой кубической (ПК) решетке. В объеме ПК-решетки выберем произвольную плоскость из семейства {100}, делящую кристалл на две части. Зафиксируем



**Рис. 1.** Структура ПК решетки вокруг прямолинейной краевой дислокации; при отключении межатомных взаимодействий (а), при включенном межатомном взаимодействии (б). Пояснения в тексте.

форму каждой из частей и внедрим между ними лишнюю атомную полуплоскость, предварительно отключив все типы атомных взаимодействий. В результате получим новую кристаллическую решетку, структура которой представлена на рис. 1а (ось *z* ортогональна плоскости рисунка).

Новая структура отличается от начальной тем, что между смещенными со своих мест недеформированными частями кристалла, вдоль плоскости y0z (ее проекция на плоскость рисунка совпадает с линией *у*0*А*) образовалась зона необратимых изменений (деформаций) распределения атомов по узлам решетки.

Заштрихованные символы на рис. 1а обозначают положения атомов, незаштрихованные положения вакансий в узлах вновь образованной кристаллической решетки. Тонкие сплошные линии соответствуют атомным плоскостям, пунктирными линиями обозначены границы недеформированных элементарных ячеек.

Если в этой структуре включить межатомные взаимодействия, решетка испытает деформацию так, как это условно показано на рис. 16. При этом размеры зоны необратимых деформаций решетки могут измениться. В рамках континуального приближения эта зона ограничена плоскостями aa' и bb'. В области материала, заключенной между ними:  $|x| \le \xi_1$ , решетка подвержена полным необратимым деформациям, величина которых определяется суммой начальных и релаксационных изменений атомной структуры. Эту область относят к структуре ядра краевой дислокации. Величину  $\xi_1$  принято называть полушириной ядра дислокации. В остальной части решетки  $|x| \ge \xi_1$  предполагается, что деформирование происходит в упругой области. Здесь описание деформационных полей дислокации обычно проводят в рамках линейной теории упругости [1-3].

Механизм возникновения избыточного объема у дислокации тесно связан с различиями в поведении потенциалов межатомных взаимодействий U(r) (r — расстояние между атомами) при растяжении и сжатии решетки.

В области ядра атомные смещения антисимметричны относительно плоскости скольжения. Это согласуется с расчетами полей напряжений в упругой области  $|x| \ge \xi_1$ . Прямолинейная дислокация Вольтерра создает распределение давления [3]

$$p(x, y) \approx -K_0 \varepsilon_W(x, y), \tag{1}$$

где

$$\varepsilon_W(x, y) = \frac{\mu_0 b(1+v)}{3\pi K_0 (1-v)} \frac{y}{x^2 + v^2}$$
(2)

— поле дилатации. Предполагается, что линия дислокации не ограничена в пространстве и в системе координат (x, y, z) параллельна оси  $z; \mu_0$  и  $K_0$  — модуль сдвига и модуль изотермического сжатия недеформированного материала соответственно, b — вектор Бюргерса дислокации, параллельный оси 0x, v — коэффициент Пуассона.

Нормальная компонента силы, действующей на единицу площади в плоскости *aa*' (или *bb*') со стороны упругой области, равна

$$\mathbf{F}(\pm\xi_1, y) \approx -\operatorname{sign}(x)\mathbf{e}_x p(\pm\xi_1, y). \tag{3}$$

Здесь  $\mathbf{e}_x$  — единичный вектор в направлении оси 0x. На рис. 16 x-компоненты этих сил обозначены символами  $\mathbf{F}_-$  в области сжатия и  $\mathbf{F}_+$  в области расширения решетки. Из соотношений (1)—(3) следует, что вдоль границ *aa*' и *bb*' выполняются условия

$$\mathbf{F}_{-}(\pm\xi_{1}, y) = -\mathbf{F}_{+}(\pm\xi_{1}, -y).$$
(4)

Источником поля сил, определенных выражением (3), являются межатомные взаимодействия в области ядра дислокации. В связи с этим рассмотрим условия равновесия атомов в зоне необратимых деформаций.

Одним из таких условий является равенство химических потенциалов отдельных атомов или групп сильно связанных атомов. При абсолютной температуре T = 0 оно сводится к равенству потенциальных энергий U этих групп в решетке. В частности, в антисимметричных точках зоны  $|x| \le \xi_1$  должно выполняться соотношение

$$U\{u(y)\} = U\{u(-y)\}.$$
 (5)

Здесь u(y) - функция, характеризующая среднее изменение расстояний между атомами в группах ближайшего окружения. Координата*у*указывает на положение центра группы или атома в ее центре. При сжатии материала <math>u(y) < 0, при растяжении u(y) > 0.

Если функция U(u) симметрична относительно значения u = 0:

$$U(u) = U(-u), \tag{6}$$

то для выполнения условия (5) необходимо чтобы u(y) = -u(-y). Тогда сжатие решетки, в области y > 0 полностью компенсируется ее растяжением в области y < 0, и избыточный объем дислокации становится равным нулю. Если же потенциал U(u) несимметричен:  $U(u) \neq U(-u)$ , такой компенсации не происходит, поскольку для выполнения условия (5) теперь нужно чтобы  $u(y) \neq -u(-y)$ . В этом случае дислокация может иметь избыточный объем.

При  $T \neq 0$  условие равновесия зоны  $|x| \leq \xi_1$  требует учета изменений энтропии системы. Однако в теории деформационных полей дефектов кристаллической решетки этими поправками обычно пренебрегают [1–6].

Асимметрия поведения материалов по отношению к сжатию и растяжению проявляется и в нелинейной зависимости давления p от необратимой дилатации  $\varepsilon$ , полученной в рамках континуального приближения (см. Приложение):

$$p(\varepsilon) = \frac{K_0}{2\gamma + 1} \{ (1 - \varepsilon)^{2\gamma + 1} - 1 \}.$$
 (7)

ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ том 120 № 7 2019

Здесь  $\gamma$  – постоянная Грюнайзена. Из формулы (7) следует, что условие антисимметрии по давлению в зоне необратимых деформаций p(y) = -p(-y) не выполняется при нулевом избыточном объеме, который соответствует равенству  $\varepsilon(y) = -\varepsilon(-y)$ .

Выражения (1)–(4) дают условие механического равновесия сил на границе зоны необратимых деформаций на плоскостях *aa*' и *bb*'. Для неограниченной среды его можно записать в виде соотношения

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(\pm\xi_1, y) dy = 0, \tag{8}$$

которое означает равенство нулю полной силы, действующей на каждую из плоскостей *aa*' и *bb*' со стороны упругой области  $|x| \ge \xi_1$ .

## Нелинейная теория избыточного объема краевых дислокаций

Асимметрия потенциалов U(u) существенна лишь в нелинейной области деформирования. Для использования соотношения (8) в этой области представим выражение (7) в виде квадратичного полинома по необратимой дилатации є. В интервале значений  $\varepsilon \approx 0-0.2$  с точностью  $\delta \approx 1\%$  эта зависимость имеет вид

$$p(\varepsilon) \approx -K_0 \{\varepsilon - \gamma \varepsilon^2\}.$$
 (9)

Модель дислокации Вольтерра (1), (2) не подходит для расчетов избыточного объема, поскольку плотность распределения вектора Бюргерса у этой дислокации сингулярна:

$$\rho_W(x, y) = b\delta(x)\delta(y). \tag{10}$$

Здесь в правой части равенства введены δ-функции Дирака соответствующих переменных. Для учета конечного размера ядра будем считать, что плотность вектора Бюргерса краевой дислокации описывается функцией

$$\rho(x, y) = b\rho_1(x)\rho_2(y), \qquad (11)$$

$$\rho_i(x_i) = \frac{\xi_i}{\pi (x_i^2 + \xi_i^2)},$$
(12)

 $x_1 = x, x_2 = y$ . Параметры  $\xi_i \ge 0$  (i = 1, 2) в выражении (12) считаются неизвестными величинами, требующими определения. Распределение дилатации, создаваемое плотностью (11) определяется выражением

$$\varepsilon_{V}(x,y) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_{W}(x-x',y-y')\rho(x',y')dx'dy'.$$
(13)

Его можно интерпретировать как сумму вкладов от элементарных дислокаций Вольтерра с вектором Бюргерса  $db(x', y) = b\rho(x', y')dx'dy'$  находящихся в точке (x', y').

Упругое поле (13) антисимметрично по переменной *у* и также не дает вклада в изменение объема материала. Следовательно, для выполнения поставленной задачи необходимо внести в модель (13) дополнительные изменения, связанные с неупругостью деформаций в ядре дислокации. Поскольку свойства дислокации с ядром (11) полностью определяются свойствами входящих в нее элементарных дислокаций, эти изменения должны быть связаны с введением избыточного объема в структуру ядер элементарных дислокаций. Для этого, распределение дилатационного поля полной дислокации достаточно определить следующим образом:

$$\varepsilon(x, y) = v_0 \rho(x, y) + \varepsilon_V(x, y), \tag{14}$$

Первое слагаемое в этом выражении относится к необратимой части дилатации. Оно задает распределение избыточного объема по ядру дислокации, которое складывается из объемов, сосредоточенных в ядрах элементарных дислокаций. Второе слагаемое заимствовано из модели (13).

Параметр  $v_0$  в выражении (14) имеет простой физический смысл: он равен избыточному объему полной дислокации

$$\delta V = v_0. \tag{15}$$

Значение этого параметра можно найти с помощью выражения (9) и условия (8). Подставив выражения (11)—(14) в эти формулы, получим уравнение, определяющее возможные значения  $v_0$ :

$$\frac{v_0}{2\pi\xi_1} - \gamma \left\{ \frac{v_0^2}{8\pi^3 \xi_1^2 \xi_2} + \eta(\xi_1, \xi_2) \right\} = 0,$$
(16)

$$\eta(\xi_1,\xi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_V^2(\xi_1,y) dy.$$
(17)

Его решение можно представить в виде

$$v_{0} = \frac{2\pi^{2}\xi_{1}\xi_{2}}{\gamma} \left\{ 1 - \left( 1 - \frac{2\gamma^{2}}{\pi\xi_{2}} \eta(\xi_{1}, \xi_{2}) \right)^{1/2} \right\}.$$
 (18)

Анализ этого решения показывает, что требование существования избыточного объема у краевых дислокаций несовместимо с предположением о сингулярной структуре их ядра. Если  $\xi_1 = 0$  (дислокация Вольтерра) избыточный объем  $\delta V = 0$ . Если же  $\xi_1 > 0$  (дислокация Пайерлса–Набарро [3]), в этом случае из формулы (19) следует, что должно выполняться условие  $\xi_2 \ge \xi_0 > 0$ , где  $\xi_0$  – минимальное значение величины  $\xi_2$ , обращающее в нуль выражение в круглых скобках.

При описании деформационных полей в рамках изотропного континуума в формулах (11)— (18) следует положить  $\xi_1 = \xi_2 = \xi_D$ , полагая величину  $\xi_D$  новым неизвестным параметром. Из уравнения (18) в этом случае следует, что задание величины  $\xi_D$  однозначно определяет величину  $v_0$ , структуру ядра (11) и общее деформационное поле (14) дислокации.

#### МЕТОД ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

Континуальная теория дает лишь одно уравнение для двух неизвестных величин  $\xi_D$  и  $v_0$ . Второе уравнение для этих параметров можно получить либо при более детальном рассмотрении атомной структуры в плоскости скольжения дислокации, либо из анализа экспериментальных данных.

В частности, известно, что зависимость коэффициентов самодиффузии в объеме материала от абсолютной температуры *T* определяется соотношением [8, 9]

$$D(p,T) = D_0 \exp\left\{\frac{W}{k_{\rm B}T}\right\}.$$
(19)

Здесь *W* – энергия активации самодиффузии, *k*<sub>B</sub> – постоянная Больцмана.

Величина *W* зависит от давления *p*:  $W(p) = W_{V,0} + pV_a(p)$ ,  $V_a(p) = V_{a,0}/(1-\varepsilon(p))$  – активационный объем,  $W_{V,0}$  и  $V_{a,0}$  – энергия активации объемной диффузии и активационный объем среды при нормальных условиях соответственно,  $\varepsilon(p)$  – поле дилатации.

Отсюда следует, что процесс самодиффузии вдоль дислокационной линии можно интерпретировать как процесс объемной диффузии с учетом давления p, создаваемого дислокацией вдоль своего ядра. В этом случае величина W(p) равна энергии активации диффузии  $W_p$  по ядру дислокации.

В реальности, процесс самодиффузии протекает не только по ядру дислокации, но и по его ближайшей окрестности. Это означает, что общепринятый коэффициент диффузии по ядру носит эффективный характер, суммируя все объемные эффекты, вызванные дислокацией в материале. При расчетах это можно учесть, равномерно распределив весь избыточный объем  $v_0$  по дислокационной трубке радиуса  $\xi_D$ .

Необходимо также учесть, что диффузионные процессы протекают не по всему ядру дислокации, а лишь по его части, подвергнутой суммарному растяжению за счет упругой и неупругой дилатации.



**Рис. 2.** Зависимость давления в растянутой части ядра краевой дислокации в Ag от полуширины дислокации.

Оценим параметры процессов самодиффузии вдоль дислокационных линий в Ag. Для этого рассмотрим основную систему дислокаций ГЦК решетки с вектором Бюргерса  $b = \langle 110 \rangle / 2$  в плоскостях {111}.

Для этой системы график изменения давления в растянутой части ядра  $-p(\xi)$  приведен на рис. 2. Штриховыми линиями на нем отмечены граничные значения  $-p(\xi_0)$  и  $-p(\xi_{PN})$ .  $\xi_{PN}$  – полуширина дислокации в модели Пайерлса—Набарро.

Зависимость давления от суммарной дилатации  $\varepsilon_C$ , равномерно распределенной по растянутой части ядра дислокации, рассчитывали по формуле (30). При проведении расчетов для Ад параметры в формулах (1), (2), (8), (11)–(19) выбирали в следующем виде:  $\mu_0 = 29.4 \ \Gamma \Pi a$ ,  $K_0 = 2/3\mu_0(1+v)/(1-2v)$ ,  $\gamma = 2.4$ , v = 0.37,  $d = a/\sqrt{3}$ ,  $b = a/\sqrt{2}$ . Здесь a — параметр ГЦК-решетки:  $a^3 = 4\Omega$ ,  $\Omega$  — атомный объем  $\Omega = 1.71 \times 10^{-30} \text{ м}^3$  [8].

Для определения значения параметра  $\xi_D$  использовали экспериментальные данные по энергиям активации самодиффузии в Ag из работы [9]. При температуре  $T \approx 600$  К имеем:  $W_V \approx 169$  кДж моль<sup>-1</sup>,  $W_D \approx 82.5$  кДж моль<sup>-1</sup>,  $V_{a,0} \approx \Omega$ . Подставив эти величины в формулу (30), получим среднее значение давления в ядре дислокации:  $p(\xi_D) \approx -7.7$  ГПа. На рис. 2 оно отмечено сплошной горизонтальной линией. По точке пересечения этой линии с графиком можно определить эффективный радиус дислокационной трубки в Ag:  $\xi_D \approx 0.6\xi_{PN} \approx 0.3a$ . Значение полной дилатации в растянутой части ядра  $\varepsilon_C(\xi_D) \approx 0.092$ , а необратимой объемной деформации  $\varepsilon_0(\xi_D) \approx 0.063$ . Учитывая экспоненциаль-



Рис. 3. Плоские дислокационные скопления. Пояснения в тексте.

ный характер зависимости (19) от давления, можно показать, что учет деформации  $\varepsilon_0(\xi_D)$  повышает коэффициент самодиффузии вдоль дислокационных линий на несколько порядков.

## ДИСЛОКАЦИОННЫЕ СКОПЛЕНИЯ

Рассмотрим задачу об определении избыточного объема, приходящегося на единицу длины краевой дислокации, входящей в состав плоского вертикального (AB) и горизонтального скопления (CD), схематично показанных на рис. 3. Такие скопления используются для исследования свойств межкристаллитных и межфазных границ раздела в материалах [3].

При проведении вычислений величины  $v_0$  скопление AB удобно считать неограниченным по вертикали. Для расчетов следует использовать формулы (17), (18), в которые вместо распределения упругой дилатации от одиночной дислокации  $\varepsilon_V(\xi_1, y)$  нужно подставить распределение упругой дилатации от всего скопления в виде суперпозиции отдельных вкладов:

$$\varepsilon_{V,AB}(\xi_1, y') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varepsilon_V(\xi_1, y' + nL).$$
(20)

Скопление CD представляет собой супердислокацию с векторов Бюргерса B = Nb (N – число дислокаций в скоплении), ядро которой равномерно распределено по всей длине скопления. Следовательно, для получения конечных результатов число N должно быть ограничено. На практике длина скоплений типа CD всегда ограничена некоторыми препятствиями  $R_1$  и  $R_2$ .

Основная особенность поля упругой дилатации любых дислокаций, и супердислокации, в частности, состоит в том, что оно всегда принимает экстремальные значения в центре ядра. Это означает, что величина  $v_0$  у каждой дислокации из скопления будет зависеть от ее положения в ядре



**Рис. 4.** Зависимость дилатации, вносимой отдельными дислокациями в скоплениях АВ и CD, от расстояния *L* между ними. Пояснения в тексте.

супердислокации. Поэтому величину  $v_0$  для дислокаций скопления CD следует отмечать дополнительным индексом  $k = \{1, 2, 3, ..., N\}$ , нумерующим дислокации:  $v_{0,k}$ . В этом случае уравнение (18) для избыточного объема k-той дислокации на плоскости (z0x) принимает вид:

$$v_{0,k} = \frac{2\pi^2 \xi_1 \xi_2}{\gamma} \left\{ 1 - \left( 1 - \frac{2\gamma^2}{\pi \xi_2} \eta_k(\xi_1, \xi_2) \right)^{1/2} \right\}; \quad (21)$$

$$\eta_k(\xi_1,\xi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_{V,CD,k}^2(\xi_1,y) dy; \qquad (22)$$

$$\varepsilon_{V,CD,k}(\xi_1, y) = \sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon_V(x_k + \xi_1 + nL, y).$$
(23)

Здесь  $x_k$  — координата центра ядра k-той дислокации.

Результаты расчетов суммарной необратимой дилатации  $\varepsilon_0$  в ядрах отдельных дислокаций для различных скоплений в Ад приведены на рис. 4. При расчетах параметр  $\xi_1$  был фиксирован для всех дислокаций обоих скоплений. В этом случае условие (8) исключает влияние избыточного объема дислокаций на деформационные поля в объеме материала.

Кривая 1 относится к скоплению типа AB. Избыточный объем дислокации  $v_0 = \varepsilon_0 S$ , где  $S \approx 4\xi_D^2$  – площадь поперечного сечения ядра дислокации. Из графика 1 видно, что величина избыточного объема каждой из дислокаций уменьшается при увеличении их линейной плотности в стенке. Это происходит за счет частичной компенсации упругих полей соседних дислокаций. Кривые 2, 3, 4, и 5 описывают зависимость дилатации у крайних дислокаций скопления CD от расстояния L для значений N = 2, 5, 10 и 20 соответственно. Они показывают, что с увеличением мощности супердислокации избыточный объем крайних дислокаций увеличивается. Этот вывод относится ко всем дислокациям скопления CD.

Полученные результаты были использованы при исследовании процессов структурно-фазовых превращений и разрушения, протекающих при интенсивном пластическом деформировании металлов и сплавов под давлением [10]. Они также могут оказаться полезными при изучении механизмов влияния давления на процессы диффузионного массопереноса в деформируемых наноматериалах.

#### выводы

1. Основной причиной возникновения избыточного объема у дислокаций является асимметрия поведения потенциалов межатомных взаимодействий при растяжении и сжатии кристаллической решетки материалов.

2. Избыточный объем отдельных дислокаций в скоплениях может изменяться в широких пределах в зависимости от структуры и размера скопления.

Работа выполнена по НИР рег. № АААА-А17-117022250038-7.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

Определим зависимость давления от необратимой дилатации є используя метод, предложенный в работе [7].

Модуль изотермического сжатия К определяется выражением

$$\frac{1}{K} = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T.$$
(24)

Полагая здесь  $V = V_0/(1 - \varepsilon)$ ,  $\varepsilon < 1$ , получим:

$$dp = -Kd\varepsilon/(1-\varepsilon).$$
(25)

В уравнении (26) величина *К* зависит от параметра є. Эту зависимость можно определить в рамках модели Дебая и приближения Грюнайзена [7, 11]. В однопараметрическом варианте этого приближения постоянная Грюнайзена фиксирована для всех длин волн:

$$\gamma = -\partial \ln \omega_i(\mathbf{k}) / \partial \ln V. \tag{26}$$

Здесь  $\omega_j(\mathbf{k}) = c_j k$  и  $c_j$  (j = l, t) – частота и скорость распространения продольной (l) и поперечной (t) ветвей акустических колебаний кристал-

лической решетки, k — модуль волнового вектора **k**. Скорости распространения колебаний связаны с модулем *K* и коэффициентом Пуассона *v* [12]:

$$c_l^2 = \frac{3K(1-v)}{\rho(1+v)}; \quad c_t^2 = \frac{3K(1-2v)}{2\rho(1+v)}.$$
 (27)

Интегрируя выражения (27) получим:

$$c_j^2(\varepsilon) = c_j^2(0)(1-\varepsilon)^{2\gamma}, \quad j = (l,t).$$
 (28)

Совместно с формулами (28), это дает:

$$K(\varepsilon) = K_0 (1 - \varepsilon)^{2\gamma + 1}; \ v(\varepsilon) = v_0$$
(29)

После интегрирования выражения (26) имеем

$$p(\varepsilon) = \frac{K_0}{2\gamma + 1} \{ (1 - \varepsilon)^{2\gamma + 1} - 1 \}.$$
 (30)

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Полухин П.И., Горелик С.С., Воронцов В.К. Физические основы пластической деформации. М.: Металлургия, 1982. 584 с.
- 2. Валиев Р.З., Александров И.В. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства М.: ИКЦ "Академкнига", 2007. 389 с.

- 3. *Хирт Дж., Лоте И*. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 598 с.
- 4. *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.
- 5. *Henager C.H.Jr., Hoagland R.G.* Dislocation core fields and forces in FCC metals. // Scripta Mater. 2004. № 50. P. 1091–1095.
- Clouet E., Ventelon. L., Willaime F. Dislocation Core Energies and Core Fields from First Principles // Phys. Rev. Letters 2009. V. 102(4). P. 055502.
- 7. *Васильев Л.С., Ломаев С.Л.* Упругие свойства, внутренние напряжения и свободный объем наноматериалов // ФММ. 2017. Т. 118. № 7. С. 735–742.
- 8. Штремель М.А. Прочность сплавов, І. Дефекты решетки. М.: Металлургия, 1982. 278 с.
- Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Group III: Crystal and Solid State Physics. V. 26. Diffusion in Solid Metals and Alloys. *Ed.: H. Mehrer.* Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, N.Y., London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona. 1990. 747p.
- 10. Васильев Л.С., Ломаев С.Л. Влияние давления на процессы формирования и эволюции наноструктуры в пластически деформируемых металлах и сплавах // ФММ. 2019. Т. 120. № 6. С. 654–660.
- 11. Займан Дж. Принципы твердого тела. М.: Мир, 1974. 472 с.
- 12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.