

УДК 548.4:539.214

## МЕХАНИЗМ ТВЕРДОРАСТВОРНОГО УПРОЧНЕНИЯ: КВАЗИЛОКАЛИЗАЦИЯ ДИСЛОКАЦИОННЫХ КИНКОВ

© 2023 г. Б. В. Петухов\*

*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН,  
Москва, 119333 Россия*

*\*e-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru*

Поступила в редакцию 28.12.2022 г.

После доработки 07.02.2023 г.

Принята к публикации 07.02.2023 г.

Чувствительность механических свойств материалов к нарушениям трансляционной инвариантности кристаллической решетки создает возможность манипулировать этими свойствами в желаемом направлении посредством легирования или создания твердых растворов. В работе теоретически изучены механизмы такого манипулирования применительно к материалам, в которых подвижность дислокаций контролируется в основном потенциальным рельефом кристаллической решетки — так называемым рельефом Пайерлса. Вследствие концентрации легирующих атомов в дислокационных ядрах, играющих роль ловушек для этих атомов, динамические свойства дислокаций изменяются, что приводит и к модификации макроскопических механических свойств материала. Теория влияния легирования на кинковый механизм преодоления барьеров Пайерлса построена с учетом неупорядоченности содержания атомов раствора в дислокационных ядрах. При этом непосредственное описание кинетики характерных для кинков элементарных процессов заменено статистическим описанием. Рассмотрено разнонаправленное воздействие флуктуаций распределения атомов раствора, повышающих частоту образования пар кинков, но тормозящих распространение кинков вдоль дислокационных линий. Торможение кинков может приводить к аномальному характеру их подвижности, называемому квазилокализацией. Найдены условия преобладания ускоряющего или тормозящего фактора, соответствующих в макроскопическом плане упрочнению или разупрочнению материала.

**Ключевые слова:** динамика дислокаций, кинковый механизм пластичности, неупорядоченная подсистема растворенных атомов, спектр энергий активации пар кинков, квазилокализация.

**DOI:** 10.31857/S102809602309008X, **EDN:** ZMOUUQ

### ВВЕДЕНИЕ

Пластичность металлов с объемно-центрированной кубической структурой чрезвычайно чувствительна к легированию даже в малых концентрациях от нескольких единиц до сотен легирующих атомов на миллион собственных атомов [1–15]. Это связано с тем, что движение дислокаций сопровождается увлечением растворенных в кристалле легирующих атомов, поскольку те находят себе в дислокационном ядре энергетически выгодные позиции. В результате в дислокационном ядре собирается избыточная концентрация атомов твердого раствора, на несколько порядков превосходящая среднюю объемную их концентрацию. Это приводит к существенной модификации динамических характеристик дислокаций и пластического течения материала в целом. Как правило, собранные в ядрах легирующие атомы тормозят движение дислокаций, что приводит к упрочнению материала — так называемому ди-

намическому деформационному старению. Понятное качественно, количественно это явление мало изучено. Развитие теории влияния избыточного содержания атомов раствора в дислокационных ядрах на динамические свойства дислокаций являлось целью настоящей работы.

Как известно [16–26], в материалах с высоким потенциальным рельефом кристаллической решетки, превосходящим другие барьеры для движения дислокаций, имеет место пайерлсовский механизм пластичности, при котором дислокации движутся посредством термофлуктуационного образования и распространения пар кинков. При не слишком больших концентрациях твердого раствора кинковый механизм движения дислокаций, хотя и в модифицированном виде, сохраняется. В большинстве работ, посвященных пайерлсовскому механизму пластической деформации, рассмотрено образование пар кинков, характеризующихся некоторой единой энергией ак-

тивации. Это позволяет сравнительно просто рассчитывать скорость движения дислокаций и характеристики пластичности материалов. В то же время при наличии неупорядоченной подсистемы растворенных в кристалле чужеродных атомов естественно ожидать существования значительного разброса условий образования пар кинков и, как следствие, спектра энергий активации. Это существенно меняет расчет кинетики дислокаций, так как требует привлечения статистических методов.

Имеются различные подходы к расчету кинетики дислокаций в неупорядоченных твердых растворах. Например, применяют метод моделирования Монте-Карло [27], позволяющий, в принципе, проследить за движением каждого отдельного атома в выбранной ячейке. Распространены также феноменологические модели, отсекающие часть избыточной информации посредством использования метода “среднего поля”. В отличие от таких работ, где рассмотрено влияние собранных дислокациями атомов твердого раствора “в среднем”, в настоящей работе изучен кинковый механизм преодоления дислокацией потенциальных барьеров, созданных кристаллической решеткой (барьеров Пайерлса) с явным учетом неупорядоченности распределения растворенных атомов. Рассмотрено влияние статистических вариаций распределения атомов раствора на обе существенные стадии пайерлсовского механизма преодоления барьеров: зарождение пар кинков и их распространение вдоль дислокационной линии.

#### ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНОГО СОДЕРЖАНИЯ ДИСЛОКАЦИОННОГО ЯДРА НА ТЕРМОФЛУКТУАЦИОННОЕ ЗАРОЖДЕНИЕ ПАР КИНКОВ

Положение дислокации в долине периодического потенциального поля кристаллической решетки устойчиво по отношению к относительно небольшим тепловым флуктуациям вследствие наличия барьеров, отделяющих одну долину от другой – так называемых барьеров Пайерлса [26]. Высота этих барьеров характеризуется напряжением Пайерлса  $\sigma_p$ , при превышении которого приложенным внешним напряжением  $\sigma$  барьеры подавляются. Внешнее напряжение  $\sigma < \sigma_p$  делает долины кристаллического рельефа неэквивалентными по энергиям, и положение дислокации в одной долине кристаллического рельефа оказывается устойчивым только по отношению к сравнительно небольшим тепловым флуктуациям. Такое состояние метастабильно и имеет конечное время жизни, так как существует механизм, переводящий дислокацию в энергетически более выгодное положение в соседней долине кристаллического потенциального поля в направлении дей-

ствия напряжения. Этот механизм реализуется посредством термофлуктуационного смещения участка дислокации и его последующего разрастания. Зародыш смещения дислокации из одной долины кристаллического потенциального поля в соседнюю в случае напряжений много меньших напряжения Пайерлса, изучаемом в настоящей работе, представляет собой разделенную пару кинк–антикинк. Энергия пары кинков в свободном от чужеродных атомов материале на прямолинейном участке дислокационной линии [26]:

$$E_{kp}(l) = 2E_k - Fl - E_i(l). \quad (1)$$

Здесь  $E_k$  – энергия одного кинка или антикинка;  $l$  – расстояние между составляющими пару;  $F = \sigma bh$  – действующая на кинки движущая сила, создаваемая внешним напряжением  $\sigma$ ;  $b$  – величина вектора Бюргера дислокации;  $h$  – расстояние между долинами кристаллического рельефа.  $E_i(l)$  – энергия взаимодействия кинков в приближении теории упругости, обратно пропорциональная расстоянию между кинками в паре  $E_i(l) = \alpha/l$  [26]. Минимальная энергия, требуемая для активации пары кинков в чистом материале, дается максимумом функции  $E_{kp}(l)$  при оптимальном размере пары  $l_0 = (\alpha/F)^{1/2}$  и равна  $E_0(F) = 2E_k - 2(\alpha F)^{1/2}$ . Частота термоактивационного зарождения пар кинков на единицу длины дислокации в этом случае есть  $J = J_0 \exp[-E_0(F)/kT]$ , где  $T$  – температура,  $k$  – постоянная Больцмана,  $J_0$  малосущественный для дальнейшего размерный предэкспоненциальный фактор. В отсутствие заметного рельефа Пайерлса второго рода кинки свободно распространяются от места рождения до столкновения с соседними кинками или до поверхности образца.

Роль статичных атомов раствора в низколегированных материалах может быть описана влиянием отдельных атомов на элементарные акты кинкового механизма – зарождение и перемещение кинков. В приближении линейного натяжения это было сделано в [28], в более современных атомистических подходах с аналогичными качественными результатами в [29, 30]. В области сравнительно более высоких температур примесные атомы приобретают достаточную подвижность, чтобы вовлекаться в движение силовыми полями дислокаций. При перемещении дислокаций происходит набор примесей дислокационными ядрами – так называемое динамическое старение [31, 32]. Концентрация примесей в дислокационных ядрах, намного превосходящая среднюю концентрацию в объеме, объясняет сильное влияние, казалось бы, ничтожного количества примесей в низколегированных материалах. В простейшей и наиболее часто используемой модели “среднего поля” это влияние описывают однородной модификацией барьера Пайерлса [33]. В описанном выше подходе Лоте и Хирта [26],

справедливом при напряжениях, малых по сравнению с напряжением Пайерлса, однородная перенормировка может быть описана уменьшением движущей кинки силы  $F \rightarrow F - \rho u$ , где  $\rho$  – линейная плотность растворенных атомов,  $u$  – изменение из-за наличия растворенного атома энергии дислокации при переходе между долинами кристаллического поля. Простое обобщение формул для беспримесного материала (1) и последующих формул дает размер зародыша  $2l_r$ ,  $l_r = 1/2[\alpha/(F - \rho u)]^{1/2}$ , энергию в максимуме потенциала пары кинков, представляющую энергию активации,  $E_r = 2E_k - 2[\alpha(F - \rho u)]^{1/2}$ . Частота термоактивного зарождения пар кинков на единицу длины дислокации в этом приближении есть

$$J = J_0 \exp\left(-\left\{2E_k - 2[\alpha(F - \rho u)]^{1/2}\right\}/kT\right). \quad (2)$$

Однако считать линейную плотность примесей  $\rho$  однородной в неупорядоченных твердых растворах нет достаточных оснований. Поэтому представляет интерес произвести расчет с учетом статистических флуктуаций распределения растворенных атомов и сравнить результаты с расчетом “в среднем”.

В процессах термоактивации важную роль играют неоднородности энергетического рельефа. В неупорядоченных твердых растворах распределение примесей в ядре также наследует эту неупорядоченность. Будем предполагать, что барьер для миграции кинки пренебрежимо мал по сравнению с барьерами для трубочной диффузии примесей вдоль дислокации. Это позволит считать примесные конфигурации статичными и не успевающими измениться в процессе образования пар кинков.

В случайно неоднородном распределении атомов раствора вдоль дислокации встречаются флуктуационные сгущения и разрежения. Локальное понижение барьера Пайерлса, уменьшающее энергию активации пары кинков, может быть достигнуто понижением плотности растворенных атомов  $\rho(x) < \rho$  в некотором интервале, что создаст в этом интервале повышение эффективной движущей дислокацию силы.

Рассчитаем функцию распределения  $P_a(E)$  различных значений энергии  $E$  образования пар кинков. Общее выражение для  $P_a(E)$  может быть записано континуальным интегралом по пространству, “точками” которого являются всевозможные конфигурации атомов раствора  $\rho(x)$ . Интеграл вычисляется со статистическим весом  $\exp\{S[\rho(x)]\}$  с соответствующей конфигурации энтропией  $S[\rho(x)]$ :

$$P_a(E) = N_p \int \delta\{E - E[\rho(x)]\} \exp\{S[\rho(x)]\} D\rho(x), \quad (3)$$

где нормировочный множитель есть  $N_p = 1/\int \exp\{S[\rho(x)]\} D\rho(x)$ . Здесь использовано обозначение  $D\rho(x)$  для дифференциала в пространстве конфигураций растворенных атомов.

Будем считать распределение примесей вдоль линии дислокации полностью хаотичным и используем выражение для энтропии  $S[\rho(x)]$  [33]:

$$S[\rho(x)] = -\int \{\rho(x) \ln[\rho(x)/e\rho] + \rho\} dx. \quad (4)$$

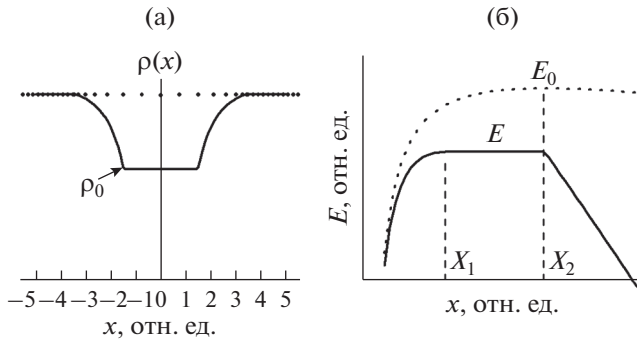
Оценку интеграла в (3) проводят методом “оптимальной флуктуации” [34]. Для этого необходимо в хаотическом расположении атомов раствора в материале найти конфигурацию, обеспечивающую требуемое понижение барьера для зарождения пары кинков и имеющую наибольшую вероятность реализации. Опишем такую оптимальную конфигурацию. Распределение растворенных атомов между местом возникновения еще неустойчивого зародыша пары кинков минимального размера и точкой максимума потенциала пары кинков, то есть размера устойчивого зародыша, не имеет значения и может быть принято однородным. Обозначим его плотность  $\rho_0$ . Максимум энергии пары кинков будет понижен с уменьшением расстояния между кинком и антикинком до величины  $2x_1$ ,  $x_1 = 1/2[\alpha/(F - \rho_0 u)]^{1/2} < l_r$  (в безразмерных переменных  $x_1/l_0 = [f_r/(f_r - r_0)]^{1/2}$ ,  $f_r = F/\rho u$ ,  $r_0 = \rho_0/\rho$ ) и равен  $E_{r0} = 2E_k - 2[\alpha/(F - \rho_0 u)]^{1/2} < E_r$ . Закончиться разрежение при  $x < l_r$  не может, так как в этом случае потенциал продолжил бы рост до точки  $l_r$ . Наиболее вероятным продолжением потенциала является наличие плато, оканчивающегося при  $x_2 = l_r = 1/2[\alpha/(F - \rho u)]^{1/2} = l_0[f_r/(f_r - 1)]^{1/2}$  на склоне однородного потенциала, где  $E_{r0} = 2E_k + 2u[\rho_0 x_1 + N_2(x_2)] - \alpha/2x_2 - F2x_2$ . В промежутке  $x_1 < x < x_2$  на плато  $E_{r0} = 2E_k + 2u[\rho_0 x_1 + N_2(x)] - \alpha/2x - F2x$ , откуда следует:

$$\rho(x) = -[\alpha/2x^2 - 2F]/2u = -F(l_0^2/x^2 - 1)/u. \quad (5)$$

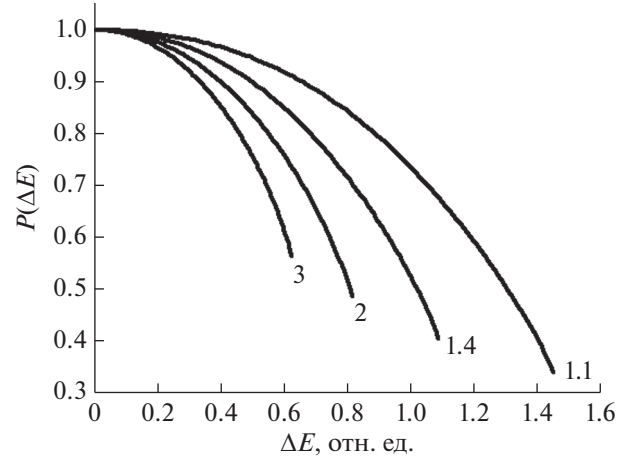
Здесь  $N_2(x) = \int_{x_1}^x (\alpha/2x^2 - 2F) dx / 2u$  – число атомов раствора на интервале  $(x_1, x)$ .

Эта флуктуационная конфигурация проиллюстрирована на рис. 1б. На рис. 1а изображен барьер для образования пары кинков при таком распределении примесей, как на рис. 1б, в сравнении с однородным распределением со средним значением плотности растворенных атомов. Наличие плато легко понять из простых соображений. Опускание потенциала пары кинков ниже нужного уровня в интервале  $(-l_r, l_r)$  требует более сильной флуктуации в распределении атомов раствора, что уменьшает вероятность ее реализации.

Вероятность осуществления описанной выше оптимальной флуктуации в распределении атомов раствора равно  $P\{\rho_{opt}(x)\} = \exp\{S[\rho_{opt}(x)]\}$ .



**Рис. 1.** Иллюстрация флуктуационного разрежения (а) в распределении атомов раствора  $r(x) = \rho(x)/\rho$ , приводящего к понижению потенциального барьера для образования пары кинков (б). Пунктирной линией показан потенциал пары кинков при однородном распределении атомов раствора в ядре дислокации.



**Рис. 2.** Вероятность встретить флуктуационное разрежение плотности атомов раствора  $P_r$ , приводящее к понижению энергии активации пары кинков на  $\Delta E$ . Значения параметра  $f_r = F/\rho u$  указаны цифрами у кривых,  $(\alpha\rho/u)^{1/2} = 1$ .

Подстановка выражений для  $\rho_{opt}(x)$  и вычисление интеграла дают

$$S_r / ((\alpha\rho/u)^{1/2}) = 2\ln(r_0)[(f_r - r_0)^{1/2} - f_r^{1/2}] - 4f_r^{1/2} \ln\{[(f_r - 1)^{1/2} + f_r^{1/2}] / [(f_r - r_0)^{1/2} + f_r^{1/2}]\} - 4[(f_r - r_0)^{1/2} - (f_r - 1)^{1/2}]. \quad (6)$$

Величина высоты барьера, она же энергия активации пары кинков, однозначно связана с величиной  $r_0 = \rho_0/\rho$ , характеризующей флуктуационное относительное уменьшение плотности атомов раствора. Используя безразмерные переменные, имеем

$$E_u = \{2E_k - 2[\alpha(F - \rho_0 u)]^{1/2}\} / u = 2(\alpha\rho/u)^{1/2} [E_{kr} - (f_r - r_0)^{1/2}]. \quad (7a)$$

В обращенном виде

$$r_0 = f_r - \{(2E_{ku} - E_u) / [2(\alpha\rho/u)^{1/2}]\}^2 = f_r - 1/4 [2E_{kr} - E_r]^2.$$

Здесь  $E_{kr} = E_k / (\alpha\rho u)^{1/2}$ ,  $E_r = E / (\alpha\rho u)^{1/2}$ .

Рис. 2 наглядно демонстрирует наличие разброса энергий образования пар кинков в неупорядоченных твердых растворах. Этот разброс может непосредственно проявляться в спектрах внутреннего трения и более завуалировано — в экспериментах с длиннопробежным движением дислокаций.

### СРЕДНЯЯ ЧАСТОТА ОБРАЗОВАНИЯ ПАР КИНКОВ

Найденная функция распределения энергий образования пар кинков дает возможность вычислять различные средние характеристики кинетики процесса преодоления барьера Пайерлса. Наибольший интерес для динамики дислокаций

представляет средняя частота термоактивируемого зарождения пар кинков, даваемая выражением

$$\langle J \rangle = J_0 \int \exp\left\{-\frac{E}{kT} + S(E)\right\} dE. \quad (7б)$$

Если параметр  $(\alpha\rho/u)^{1/2} \gg 1$ , входящая в (7а) экспонента имеет резкий максимум, в основном и определяющий величину интеграла. Из условия экстремальности нетрудно получить соответствующее максимуму значение плотности атомов раствора во флуктуации  $r_0 = \rho_0/\rho = \exp(-u/kT)$ . Подставляя это значение в (7б), получаем оценку средней частоты:

$$\begin{aligned} \ln\left[\frac{\langle J \rangle / J_0}{(\alpha\rho/u)^{1/2}}\right] &= \\ &= 2u/kT (f_r^{1/2} - E_r) - 4f_r^{1/2} \ln\{[(f_r - 1)^{1/2} + \\ &+ f_r^{1/2}] / [(f_r - \exp(-u/kT))^{1/2} + f_r^{1/2}]\} - \\ &- 4\{[f_r - \exp(-u/kT)]^{1/2} - (f_r - 1)^{1/2}\}. \end{aligned} \quad (8)$$

На рис. 3 средняя частота образования пар кинков, характеризуемая величиной  $G = \ln[\langle J \rangle / J_0] / (\alpha\rho/u)^{1/2}$ , показана в сравнении с соответствующей величиной при однородном распределении атомов раствора. Можно видеть, что наличие статистических вариаций распределения атомов раствора повышает частоту образования пар кинков тем сильнее, чем температура ниже.

Средняя частота генерации кинков на единице длины дислокации определяет рост со временем средней плотности кинков  $n_k(t) = \langle J \rangle t$ . При отсутствии сильного влияния примесей на разбегание кинков (противоположная ситуация будет рассмотрена в следующем разделе) за то же время  $t$  типичные пары кинков расширятся до размеров

порядка  $vt$ , где  $v$  — скорость движения кинков. Когда этот размер дорастет до величин порядка среднего расстояния между образовавшимися парами кинков  $1/n_k(t)$ , начнутся их столкновения и слияния, и дислокация завершит процесс перехода в следующую долину потенциального поля кристаллической решетки. Таким образом, время перехода дислокации  $t_a$  определяется соотношением

$$1/n_k(t) = 1/(\langle J \rangle t) \approx vt, \quad (9)$$

так что  $t_a \approx 1/(v\langle J \rangle)^{1/2}$ , что отличается от беспримесного случая простой заменой  $J \rightarrow \langle J \rangle$ .

### ТОРМОЖЕНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ КИНКОВ ФЛУКТУАЦИЯМИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАСТВОРЕННЫХ АТОМОВ

Статистические неоднородности распределения атомов раствора вдоль дислокации оказывают разнонаправленное действие на две существенные стадии преодоления дислокацией барьера Пайерлса. Преобладающее влияние разрежений плотности растворенных атомов в конечном итоге благоприятствует зарождению кинков. Однако на разбегание кинков от места их рождения преобладающее влияние оказывают сгущения плотности атомов раствора, создающие пики потенциального поля, являющиеся барьерами для миграции кинков. Для преодоления этих барьеров требуется термоактивация, и такие барьеры могут замедлять разбегание кинков и тем самым вносить свой вклад в торможение дислокаций.

Статистические закономерности преодоления барьеров дислокационными кинками в случайном созданном растворенными атомами потенциальном кристаллическом поле были изучены в работах [35–39]. Было показано, что влияние атомов раствора на динамику кинков может приводить к кинетическому фазовому превращению с изменением характера движения и переходом к нелинейному дрейфу или, иначе, к так называемой аномальной кинетике. Такой переход был связан с повышением роли экстремально сильных флуктуаций потенциального поля из-за хаотического распределения растворенных атомов, приводящих к возникновению медленно убывающих асимптотик времен задержек кинков на них — так называемых “тяжелых хвостов” [40]. Это предсказание было экспериментально подтверждено в [41]. Обзор многочисленных работ по аномальной кинетике представлен в [42, 43]. В этом случае длина пробега кинков  $x$  зависит от времени нелинейно как  $x \approx x_0(t/t_0)^\delta$ , где  $\delta < 1$ , а  $t_0$  — некоторое характерное время элементарного акта перемещения кинка, Показатель степени есть  $\delta = (kT/u)\varphi$ , где  $\varphi$  находится из соотношения

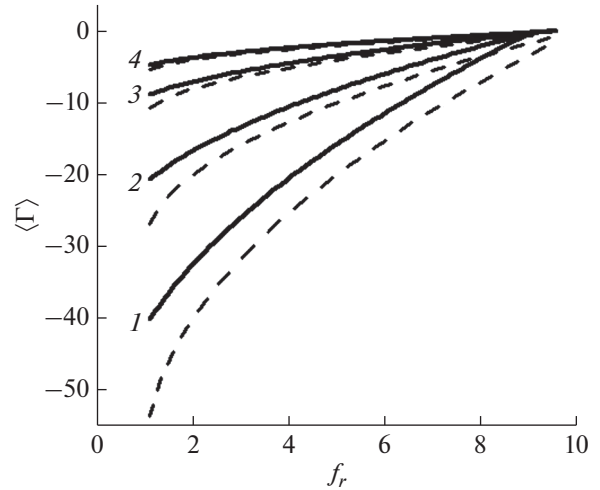


Рис. 3. Иллюстрация зависимости средней частоты образования пар кинков от движущей силы при различной температуре, характеризуемая величиной  $G = \ln[\langle J \rangle / J_0 / (\alpha\rho/u)^{1/2}]$ . Кривые отвечают  $kT/u = 0.1$  (1); 0.2 (2); 0.5 (3); 1 (4). Сопутствующие штриховые линии изображают частоты образования пар кинков при однородном распределении атомов раствора. Параметр  $E_r = 3$ .

$$[\exp(\varphi) - 1]/\varphi = F/\rho u - 1. \quad (10)$$

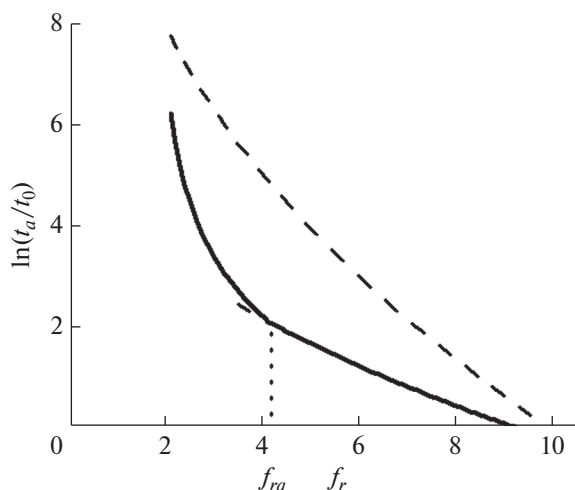
Соотношение (10) выписано применительно к асимметричному случаю, когда учтены атомы раствора только из одной долины кристаллического поля вдоль ядра дислокации. Симметричный случай и более общая ситуация изучены в работах [44, 45]. Аналогия с процессом Венера с дрейфом рассмотрена в работе [46].

Если определяемое из уравнения (10) значение  $\varphi < u/kT$ , т.е.  $\delta < 1$ , движение кинков имеет аномально медленный характер, называемый квазилокализацией. При  $\delta$  обращаемся в 1 закон движения кинков переходит в обычный линейный дрейф. Таким образом, условие  $\delta = 1$  определяет границу кардинальной смены режимов движения кинков и дислокации в целом. Квазилокализация кинков с повышением концентрации атомов раствора является причиной дополнительного замедления движения дислокаций к замедлению “в среднем” и в макроскопическом плане к дополнительному упрочнению материала.

Заменяя в уравнении (9) длину свободного пробега кинка на длину смещения при нелинейном дрейфе, получаем видоизмененное уравнение для времени перехода:

$$1/(\langle J \rangle t) \approx x_0(t/t_0)^\delta. \quad (11)$$

Уравнение (9) соответствует ситуации, в которой влияние флуктуаций в распределении атомов раствора благоприятствует зарождению кинков, приводя к ускорению движения дислокаций по



**Рис. 4.** Иллюстрация смены режимов движения дислокаций от характеризуемого линейным дрейфом кинков при  $f_r > f_{rq}$  к характеризуемому нелинейным квазилокализационным дрейфом при  $f_r < f_{rq}$ . Значения параметров:  $E_r = 3$ ,  $kT/u = 0.5$ .

сравнению с влиянием “в среднем”. Уравнение (11) соответствует ситуации, когда торможение кинков частично компенсирует повышение частоты их зарождения. Рис. 4 наглядно демонстрирует переход к изменению характера движения дислокаций вследствие включения квазилокализационного механизма торможения кинков.

Найдя из уравнений (9)–(11) время перехода дислокации в соседнюю долину кристаллического потенциального поля  $t_a$ , получаем среднюю скорость движения дислокаций  $V_a = h/t_a$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе развита модель учета влияния статической неупорядоченности распределения атомов раствора в дислокационных ядрах на кинетику преодоления дислокациями барьеров Пайерлса. Рассчитан спектр энергий и средняя частота образования кинков в зависимости от движущей силы, температуры, концентрации атомов раствора. Рис. 4 демонстрирует как вносимые неупорядоченностью количественные изменения по сравнению с наиболее употребительной моделью среднего поля, так и качественные изменения. Главное качественное изменение заключается в выявлении квазилокализационного перехода в подвижности кинков. В модели среднего поля подобные явления принципиально не обнаружимы. Другим важным следствием является то обстоятельство, что при наличии спектра значений энергии активации зарождения пар кинков в различных условиях проявляется та или иная эффективная энергия активации движения дислокаций. Это находится в качественном согласии с экспе-

риментальными данными *in situ* наблюдений движения винтовых дислокаций в  $\alpha$ -Fe по пайерлсовскому механизму [47, 48].

## БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

**Конфликт интересов:** Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pink E., Arsenault R.J. // Prog. Mater. Sci. 1979. V. 24. P. 1.
2. Astie P., Peyrade J.P., Groh P. // Scr. Metall. 1982. V. 16. P. 977.
3. Caillard D. // Acta Mater. 2013. V. 61. P. 2793.
4. Chomel P., Cottu J.P. // Acta Mater. 1982. V. 30. P. 1481.
5. Gupta C., Chakravarty // Phys. Stat. Sol. A. 2009. V. 206. P. 685. <https://www.doi.org/10.1002/pssa.200824289>
6. Hu Y.-J., Fellingner M.R., Butler B.G., Paramore J.D., Ligda J.P., Chai Ren., Fang Z.Z., Middlemas S.C., Hemker K.J. // Int. J. Refr. Met. Hard Mater. 2018. V. 75. P. 248. <https://www.doi.org/10.1016/j.jirmhm.2018.04.021>
7. Okazaki K. // J. Mater. Sci. 1996. V. 31. P. 1087.
8. Raffo P.I. // J. Less-Com. Met. 1968. V. 17. P. 133.
9. Romaner L., Ambrosch-Draxl C. // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 104. P. 195503. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.195503>
10. Zhao Y., Marian J. // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2018. V. 26. P. 045002. <https://www.doi.org/10.1088/1361-65Xaaacaf>
11. Vaid A., Wei D., Bitzek E., Nasiri S., Zaiser M. // Acta Materialia. 2022 V. 236. P. 118095. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.118095>
12. Samolyuk G.D., Osetsky Y.N., Stoller R.E. // J. Phys.: Condens. Matter. 2012. V. 25. № 2. P. 025403. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/2/025403>
13. Hachet G., Caillard D., Ventelon L., Clouet E. // Acta Mater. 2022 V. 222. № 1. P. 117440. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117440>
14. Barrera O., Bombac D., Chen Y., Daff T.D., Galindo-Nava E., Gong P., Haley D., Horton R., Katzarov I., Kermode J.R., Liverani C., Stopher M., Sweeney F. // J. Mater. Sci. 2018. V. 53. P. 6251. <https://doi.org/10.1007/s10853-017-1978-5>
15. Петухов Б.В. // Известия РАН. Серия физическая. 2022. Т. 86. № 10. С. 1513. <https://doi.org/10.31857/S0367676522100155>
16. Guyot P., Dorn J.E. // Can. J. Phys. 1967. V. 45. P. 983.
17. Nadgorny E. // Prog. Mater. Sci. 1988. V. 31. P. 1.
18. Seeger A. // Mater. Sci. Eng. A. 2004. V. 370. P. 50.
19. Gong P., Katzarov I.H., Nutter J., Paxton A.T., Rainforth W.M. // Sci. Reps. 2020. V. 10. P. 10209. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-66965-z>
20. Messerschmidt U. Dislocation Dynamics During Plastic Deformation / Ed. Hull R. et al. Berlin, Heidelberg:

- Springer Series in Material Science, 2010. 503 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-03177-9>
21. *Caillard D., Martin J.L.* Thermally Activated Mechanisms in Crystal Plasticity. Amsterdam etc: Pergamon, 2003. 433 p.
  22. *Петухов Б.В.* Динамика дислокаций в кристаллическом рельефе. Дислокационные кинки и пластичность кристаллических материалов. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing, 2016. 385 p.
  23. *Koizumi H., Kirchner H.O.K., Suzuki T.* // *Philos. Mag. A.* 1994. V. 69. P. 895.
  24. *Ngan A.H.W.* // *Philos. Mag. A.* 1999. V. 79:7. P. 1687. <https://www.doi.org/10.1080/01418619908210387>
  25. *Mori H.* // *Mater. Trans.* 2014. V. 55. № 10. P. 1531.
  26. *Хурт Дж., Ломе И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 598 с.
  27. *Katzarov I.H., Drenchev L.B.* // *Crystals.* 2022. № 12. P. 518. <https://doi.org/10.3390/cryst12040518>
  28. *Петухов Б.В.* // *Физ. мет. и металловед.* 1983. Т. 56. № 6. С. 1177.
  29. *Wen M., Fukuyama S., Yokogawa K.* // *Acta Mater.* 2003. V. 51. P. 1767.
  30. *Wang Y., Wang X., Li Q., Xu B., & Liu W.* // *Journal of Materials Science.* 2019. V. 54. № 15. P. 10728. <https://doi.org/10.1007/s10853-019-03564-y>
  31. *Петухов Б.В.* // *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.* 2022. Т. 16. № 1. С. 107. <https://doi.org/10.31857/S1028096022010149>
  32. *Katzarov I.H., Drenchev L.B., Pashov D.L., Zarrouk T.N.A.T., Al-lahham O., Paxton A.T.* // *Phys. Rev. Mat.* 2022. V. 6. P. 063603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.6.063603>
  33. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Москва: Физматлит, 2004. 496 с.
  34. *Лифшиц И.М., Педескул С.А., Пастур Л.А.* Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982. 360 с
  35. *Петухов Б.В.* // *ЖЭТФ.* 2010. Т. 137. № 1. С. 48.
  36. *Maresca F., Curtin W.A.* // *Acta Mater.* 2020. V. 162. P. 144 <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.10.007>
  37. *Suzuki H.* / *Dislocations in solids*, V. 4. Ed. Nabarro F.R.N. North Holland, Amsterdam, 1980. P. 191.
  38. *Antillon E., Woodward C., Rao S.I., Akdim B.* // *Acta Mater.* 2021. V. 215. P. 117012.
  39. *Петухов Б.В.* // *ФТТ.* 1988. Т. 30. № 10. С. 2893.
  40. *Foss S., Korshunov D., Zachary S.* An introduction to Heavy-Tailed and Subexponential Distributions / N.Y.: Springer New York, 2011. 123 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9473-8>
  41. *Iunin Yu.L., Nikitenko V.I., Orlov V.I., Petukhov B.V.* // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 78. № 16. P. 3137. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.3137>
  42. *Bouchaud J.-P., Georges A.* // *Phys. Rep.* 1990. V. 195. P. 127. [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(90\)90099-N](https://doi.org/10.1016/0370-1573(90)90099-N)
  43. *Учайкин В.В.* // *УФН.* 2003. Т. 173. № 8. С. 847. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0173.200308c.0847>
  44. *Петухов Б.В.* // *ФТТ.* 1993. Т. 35. № 5. С. 1121. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0173.200308c.0847>
  45. *Петухов Б.В.* // *ФТТ.* 2022. Т. 64. № 12. С. 1972. <https://doi.org/10.21883/FTT.2022/53651.450>
  46. *Ghafarirollahi A., Curtin W.* // *Acta Mater.* 2021. V. 215. № 6. P. 117078. <https://doi.org/j.actamat.2921.117078>
  47. *Caillard D.* // *Acta Mater.* 2011. V. 59. P. 4974. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.04.048>
  48. *Caillard D.* // *Acta Mater.* 2016. V. 112. P. 273. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.04.018>

## Mechanism of Solid Solution Hardening: Quasilocalisation of Dislocation Kinks

B. V. Petukhov\*

*Shubnikov Institute of Crystallography of Federal Scientific Research Centre “Crystallography and Photonics” of Russian Academy of Sciences”, Moscow, 119333 Russia*

\*e-mail: [petukhov@ns.crys.ras.ru](mailto:petukhov@ns.crys.ras.ru)

The sensitivity of the mechanical properties of materials to violations of the translational invariance of the crystal lattice makes it possible to manipulate these properties in the desired direction by doping or creating solid solutions. The paper theoretically studies the mechanisms of such manipulation in relation to materials in which the mobility of dislocations is controlled mainly by the potential relief of the crystal lattice – the so-called Peierls relief. Due to the concentration of alloying atoms in dislocation nuclei, which play the role of traps for these atoms, the dynamic properties of dislocations change, which also leads to modification of the macroscopic mechanical properties of the material. The theory of the effect of doping on the kink mechanism of overcoming the Peierls barriers is constructed taking into account the disordered content of solution atoms in dislocation nuclei. Correspondingly, the direct description of the kinetics of elementary processes characteristic of kinks has been replaced by a statistical description. The multidirectional effect of fluctuations in the solutes distribution, which increase the rate of formation of pairs of kinks, but inhibit the propagation of kinks along dislocation lines, is considered. Inhibition of kinks can lead to an anomalous nature of their mobility, so-called quasilocalisation. The conditions for the predominance of the accelerating or inhibiting factor corresponding in macroscopic terms to the hardening or softening of the material are found.

**Keywords:** dislocation dynamics, kink mechanism of plasticity, disordered subsystem of solutes, spectrum of kink pair creation, quasilocalisation.