

УДК 593.3

## ДВИЖЕНИЕ СКОльзящей ДИСЛОКАЦИИ СКВОЗЬ ДИСЛОКАЦИОННЫЙ ЛЕС В УСЛОВИЯХ КОМПЛЕКСНОГО НАГРУЖЕНИЯ

© Д.В. Манухина, Ф.А. Плотников, А.Е. Потапов, А.Ю. Лосев, М.В. Бойцова

*Ключевые слова:* компьютерное моделирование; дислокации; источник Франка–Рида; ультразвук.

Приведены результаты комплексного исследования движения скользящей дислокации сквозь дислокационный лес, предварительно обработанный ультразвуком, методом компьютерного моделирования. При этом рассматривается ряд моделей, учитывающих особенности поведения системы на каждом шаге моделирования: от работы источника Франка–Рида до влияния ультразвука на перераспределение дислокаций леса в ионных кристаллах.

Физические свойства кристаллов определяются не только наличием и концентрацией дефектов, но и характером их взаимодействия, вызываемого различными внешними воздействиями. Известно, что воздействуя на кристалл различными полями, возможно целенаправленно изменять систему его структурных дефектов, а следовательно, и его физические свойства. Одним из таких воздействий, широко использующихся в технике, является ультразвук, который позволяет изменять свойства кристаллов благодаря не только перераспределению дефектов, но и изменению плотности дислокаций. Однако нельзя с уверенностью сказать, что будет происходить в результате действия ультразвука – упрочнение или разупрочнение материала. Эффект будет зависеть не только от ультразвукового воздействия, но и от исходного состояния образца [1].

В данной работе методом компьютерного моделирования рассматривается процесс движения скользящей дислокации сквозь дислокационный лес в условиях сложонагруженного состояния (действие постоянной во времени внешней нагрузки и влияние ультразвукового поля), для исследования закономерностей которого были рассмотрены следующие модели.

На первом этапе рассматривалось поведение единичного источника Франка–Рида под действием комплексного нагружения, в качестве точек закрепления выступали дислокации леса. Такая модель необходима, т. к. движущуюся дислокацию сквозь дислокационный лес можно рассматривать как совокупность таких источников. Модель, алгоритмы, методики расчета и программный комплекс моделирования работы источника Франка–Рида представлены в работах [2–4]. Уравнение, описывающее поведение сегмента, решалось методом конечных разностей. В качестве объекта исследования были выбраны кристаллы с решеткой типа NaCl. Для более детального рассмотрения поведения источника Франка–Рида моделирование проводилось в 3 этапа: на первом считалось, что дислокации леса неподвижны, на втором было учтено влияние ультразвукового воздействия на дислокации леса, т. е. центры закрепления дислокационного сегмента совершали вынужденные гармонические колебания, третий этап максимально соответствовал условиям реального

эксперимента. Результаты моделирования и последующий анализ результатов позволили сделать вывод, что вероятность срабатывания источника Франка–Рида в реальном кристалле в условиях комплексного нагружения определяется структурой ансамбля дислокационного леса (процентным соотношением разноименных дислокаций) и соотношением фаз колебаний закрепляющих дислокаций леса и дислокационного сегмента.

Следующим этапом было выполнение компьютерного моделирования движения скользящей дислокации сквозь дислокационный лес в условиях сложно нагруженного состояния на основе полученных данных при моделировании единичного источника Франка–Рида. В рамках рассматриваемой модели считалось, что пробная дислокация движется консервативно по плоскости легкого скольжения и преодолевает ансамбль дислокаций леса, совершающих вынужденные колебания под действием ультразвука (рис. 1). Первоначально распределение точек пересечения дислокаций леса с модельной площадкой задавалось случайным распределением.

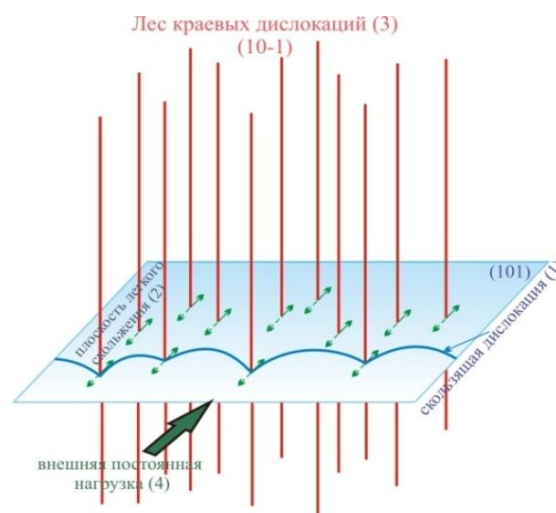


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемой модели

Для начала движения дислокации в рассматриваемой среде необходимо преодолеть силу Пайерлса. Уравнение и алгоритм моделирования приведены в [5]. Результаты исследования позволили выявить следующие особенности. При неподвижных дислокациях леса критическое напряжение, необходимое для преодоления скользящей дислокации модельной площадки, прямо пропорционально корню из плотности дислокаций леса. Если же они будут совершать вынужденные колебания, то величина *эффекта пластификации* будет определяться двумя факторами:

- 1) плотностью дислокаций леса;
- 2) процентным соотношением положительных и отрицательных дислокаций в ансамбле.

Максимальная величина эффекта пластификации наблюдается при условии равенства положительных и отрицательных дислокаций в ансамбле. При изменении соотношения разноименных дислокаций происходит незначительное изменение величины эффекта пластификации: так, при изменении соотношения знаков дислокаций леса с 50:50 на 20:80 он уменьшается приблизительно на 7 % (плотность дислокационного ансамбля  $\sim 10^9 \text{ см}^{-2}$ ). Таким образом, если ансамбль состоит из одноименных дислокаций, то будет наблюдаться *эффект упрочнения*, определяемый только плотностью дислокационного леса (как для покоящихся дислокаций, так и для дислокаций, совершающих вынужденные колебания); если дислокационный ансамбль содержит разноименные дислокации, то эффект упрочнения будет зависеть от их состояния: покоя или колебаний.

Известно [1], что результатом воздействия ультразвукового поля на дислокационный ансамбль является его структурирование. Поэтому на следующем этапе моделирования распределение дислокаций леса с площадкой задавалось не случайным образом, а учитывалось упорядоченное распределение дислокаций леса, вызванное предварительной обработкой образца ультразвуком. Таким образом, необходимо было получить структурированное распределение дислокационного леса, а затем провести последний этап моделирования.

Из литературных данных известно, что характеристики движения дислокаций под ультразвуковым воздействием будут определяться:

- 1) амплитудой ультразвука;
- 2) его частотой;
- 3) временем воздействия на образец;
- 4) свойствами реального кристалла;
- 5) структурой дислокационного ансамбля.

Рассмотрим поведение *дислокационного диполя* под воздействием ультразвука на примере модели, представленной на рис. 2.

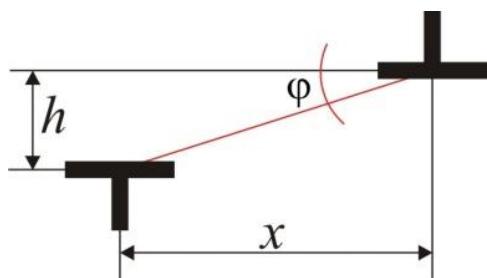


Рис. 2. Схема дислокационного диполя

В ходе компьютерного эксперимента задавались постоянные значения амплитуды и частоты ультразвукового поля для того, чтобы определить траекторию движения взаимодействующих краевых дислокаций. Начальные положения дислокаций варьировались.

Две типичные картины взаимодействия краевых дислокаций противоположных знаков приведены на рис. 3; видно, что поведение дислокаций оказалось различным в зависимости от амплитуды УЗК.

При небольших значениях амплитуды ультразвука (0,8 МПа) дислокации совершают периодические колебания, а также сближаются навстречу друг другу по  $x$  (т. к. находятся в зоне взаимного притяжения), до расстояния порядка 2 мкм (рис. 3а). Последующее сближения дислокаций не происходит, т. к. они попадают уже в зону взаимного отталкивания. При достижении расстояния между дислокациями порядка 2 мкм, они совершают практически гармонические колебания около новых положений устойчивого равновесия. Таким образом, при малых амплитудах ультразвука, дислокации колеблются в противофазе около положений устойчивого равновесия, характерных для *покоящегося диполя*. Таким образом, ультразвук стимулирует релаксацию дислокационной структуры [1].

В дальнейшем, при увеличении значения амплитуды ультразвука, центры колебаний дислокаций сближаются по  $h$  (рис. 2). Минимальная энергия пары колеблющихся дислокаций противоположного знака соответствует условию, когда точки, относительно которых дислокации колеблются, располагаются на одной прямой, перпендикулярной плоскостям скольжения. Последующее увеличение амплитуды будет приводить к трансформации дислокационного диполя, и дислокации будут совершать колебания, соответствующие положениям неустойчивого равновесия дислокаций покоящегося диполя, т. е. колебания, возбуждаемые внешним гармоническим воздействием, будут ангармоничны [1].

Таким образом, в ультразвуковом поле достигается динамически устойчивая дислокационная конфигурация — *динамический дислокационный диполь*, причем центры колебания дислокаций динамического диполя будут лежать на одной прямой (рис. 3б).

Исследование поведения дислокационного ансамбля, состоящего из 6 дислокаций, находящихся в ультразвуковом поле (с одинаковым числом дислокаций разного знака) (рис. 4), выявило, что образуются две дислокационные стенки, состоящие из одноименных дислокаций, колеблющихся противофазно относительно общего центра. По окончании действия ультразвука и релаксации напряжений образовавшиеся дислокационные структуры сохраняются. Таким образом, в кристалле будут происходить необратимые изменения дислокационной структуры под действием УЗК, что согласуется экспериментальными данными [6].

Полученные результаты стали отправной точкой для завершающего этапа моделирования движения скользящей дислокации сквозь дислокационный лес, предварительно обработанный ультразвуком, в условиях сложного нагружения. В этом случае точки пересечения дислокаций леса с модельной площадкой располагались не случайным образом, а в соответствии со схемой, представленной на рис. 5 [7]. Дислокации леса, образующие стенку, имеют один и тот же знак, а расстояние между ними задавалось случайным образом.

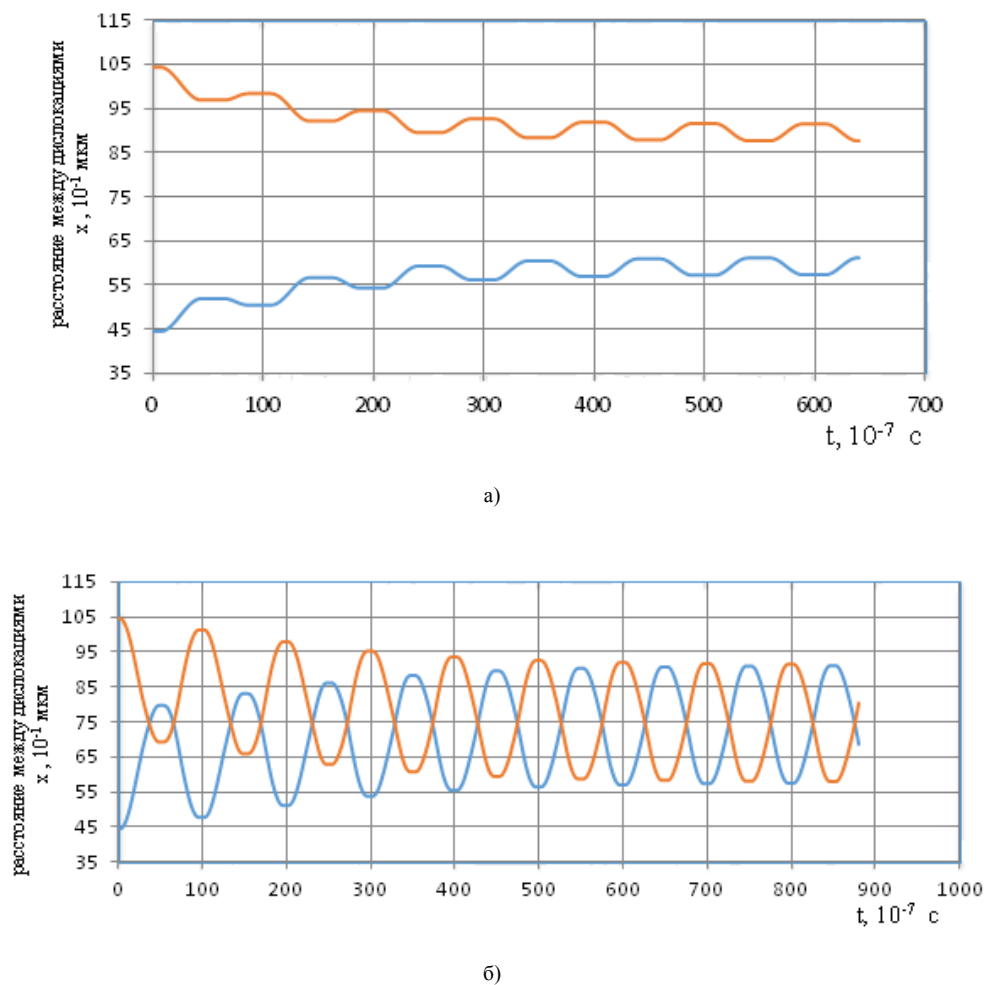


Рис. 3. Траектории движения двух взаимодействующих краевых дислокаций; амплитуда ультразвука: а) 0,8 МПа; б) 2,2 МПа

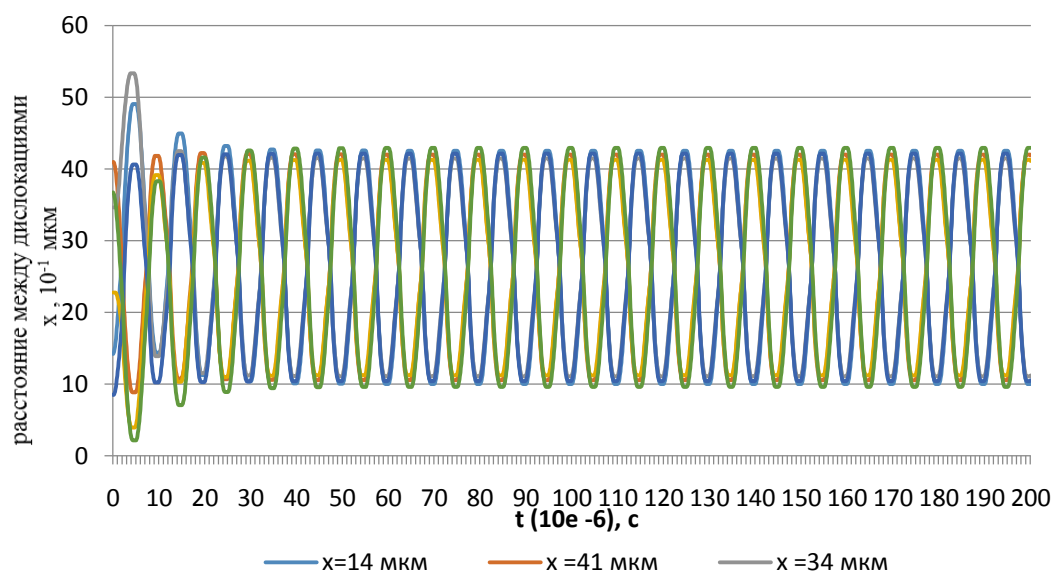


Рис. 4. Траектории движения 6 краевых дислокаций

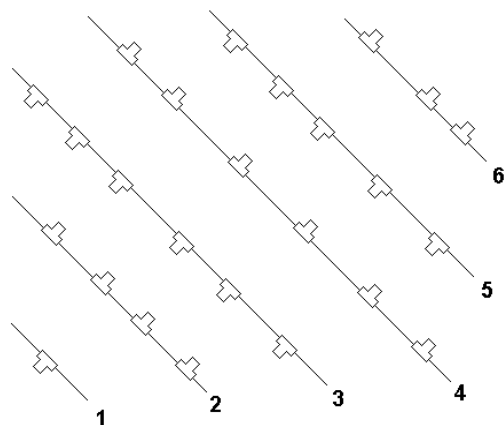


Рис. 5. Схематическое изображение ансамбля дислокационного леса, предварительно обработанного ультразвуком

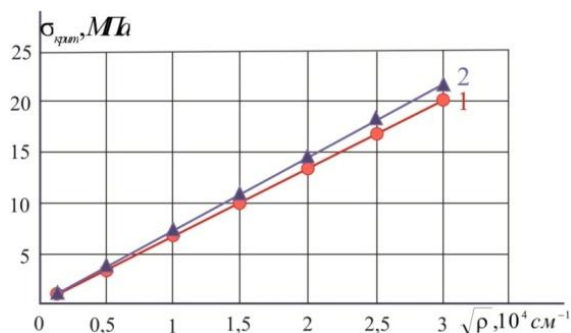


Рис. 6. Напряжение преодоления пробной дислокацией модельной площадки при неподвижном лесу: 1 – дислокации леса расположены случайным образом; 2 – дислокации леса расположены структурировано

Компьютерное моделирование показало, что критическое напряжение, необходимое для преодоления скользящей дислокацией модельной площадки, меньше чем в случае случайно расположенных дислокаций леса (рис. 6). Уменьшение критического напряжения максимально в области высоких плотностей и составляет величину порядка 10–15 %.

Манухина Дарья Владимировна, Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры систем автоматизированного проектирования, e-mail: dmanuhina@gmail.com

Manuhina Darya Vladimirovna, Bauman Moscow State Technical University, Kaluga branch, Kaluga, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of Systems of Automated Simulation Department, e-mail: dmanuhina@gmail.com

Плотников Федор Алексеевич, Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры систем автоматизированного проектирования, e-mail: blackdef@bk.ru

Plotnikov Fedor Alekseyevich, Bauman Moscow State Technical University, Kaluga branch, Kaluga, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of Systems of Automated Simulation Department, e-mail: blackdef@bk.ru

Потапов Андрей Евгеньевич, Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры систем автоматизированного проектирования, e-mail: jerry1st@mail.ru

Из рис. 6 видно, что в случае колеблющихся дислокаций леса, закон их распределения не оказывает влияния на величину критического напряжения, необходимого для преодоления скользящей дислокацией модельной площадки. Поэтому для модели, описывающей движение дислокации сквозь предварительно обработанный дислокационный лес, справедливы выводы, сделанные на предыдущем этапе.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Тяпунина Н.А., Наими Е.К., Зиненкова Г.М. Действие ультразвука на кристаллы с дефектами. М., 1999. С. 51.
2. Лосев А.Ю., Потапов А.Е., Музыка П.А., Дегтярев В.Т. Математические модели движения сегмента краевой дислокации в ультразвуковом поле // Научные технологии. 2012. Т. 13. № 2. С. 31–35.
3. Манухина Д.В., Потапов А.Е., Лосев А.Ю., Супрун И.В. Различные подходы к математическому и компьютерному моделированию эволюции источника Франка–Рида в ультразвуковом поле // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2012. Т. 17. Вып. 4. С. 1095–1099.
4. Манухина Д., Лосев А., Потапов А. Моделирование эволюции источника Франка–Рида в ультразвуковом поле. Саарбрюккен: Изд-во Lap Lambert Academic Publishing, 2012. С. 97.
5. Манухина Д.В., Потапов А.Е., Лосев А.Ю., Супрун И.В. Математическое моделирование процесса движения скользящей дислокации сквозь дислокационный лес, находящийся в ультразвуковом поле // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2013. Т. 18. Вып. 4. С. 1895–1896.
6. Бушуева Г.В., Зиненкова Г.М., Тяпунина Н.А., Дегтярев В.Т., Лосев А.Ю., Плотников Ф.А. Самоорганизация дислокаций в ультразвуковом поле // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 3. С. 507–512.
7. Плотников Ф.А., Манухина Д.В. Математическое моделирование процесса самоорганизации дислокаций леса в ультразвуковом поле // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2013. Т. 18. Вып. 4. С. 1879–1880.

Поступила в редакцию 17 апреля 2014 г.

Manuhina D.V., Plotnikov F.A., Potapov A.E., Losev A.Yu., Boytsova M.V. MOTION OF SLIDING DISLOCATION THROUGH DISLOCATION FOREST IN THE INTEGRATED LOADING CONDITION

This paper presents the results of complex studying the motion of the dislocation sliding through the dislocation forest previously treated with ultrasound by computer simulation. With this a range of models, which takes into account the behavior of the system at each step of the simulation, from the Frank-Read source to the effect of ultrasound on the forest dislocations redistribution in ionic crystals, is considered.

**Key words:** computer simulation; dislocations; Frank-Read source; ultrasound.

Potapov Andrey Evgenyevich, Bauman Moscow State Technical University, Kaluga branch, Kaluga, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of Systems of Automated Simulation Department, e-mail: jer-ry1st@mail.ru

Лосев Алексей Юрьевич, Газэнергобанк, г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, начальник сектора Интеграции информационных систем, e-mail: losev-al@yandex.ru

Losev Aleksey Yuryevich, Gazenergobank, Kaluga, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Head of Integration of Information Systems, e-mail: losev-al@yandex.ru

Бойцова Маргарита Викторовна, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, г. Тамбов, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики, e-mail: feodorov@tsu.tmb.ru

Boytsova Margarita Viktorovna, Tambov State University named after G.R. Derzhavin, Tambov, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of General Physics Department, e-mail: feodorov@tsu.tmb.ru