

На правах рукописи

БЕЛОВ Юрий Сергеевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КРАЕВЫХ
ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ СО СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

(специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2009

Работа выполнена на кафедре программного обеспечения ЭВМ, информационных технологий и прикладной математики Калужского филиала московского государственного технического университета им. Н.Э.Баумана

Научные руководители: доктор физико-математических наук,
профессор **Б.М. Логинов**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
В.А.Мелик-Шахназаров
кандидат физико-математических наук,
доцент **О.Г.Бонк**

Ведущая организация: Научно-исследовательский Институт
Материалов Электронной Техники, г.Калуга

Защита состоится «10» июня 2009 г. в 14³⁰ часов на заседании диссертационного совета Д.212.141.17 при Московском государственном техническом университете им. Н.Э.Баумана по адресу: 248600, г.Калуга, ул. Баженова, 2.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета.

Автореферат разослан «4» мая 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
канд. тех. наук, доцент



С.А.Лоскутов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы работы. Краевые дислокационные петли в большом количестве образуются в кристаллических материалах в результате радиационного облучения. Высокие концентрации дислокационных петель приводят к разбуханию и катастрофической потере прочности материала, что наблюдается, например, в результате длительной эксплуатации конструкционных материалов в атомной энергетике.

Любые реальные конденсированные среды ограничены внешними поверхностями и могут иметь внутренние границы раздела. С учетом современных тенденций развития технологий микро- и нано- электроники и тонкопленочных материалов, проблема анализа различных аспектов взаимодействия дислокационных образований со свободной поверхностью несомненно является практически важной и актуальной.

Математический аппарат теории дислокаций позволяет рассчитывать поля смещений и напряжений для любых дислокационных конфигураций в приближении бесконечной среде. Аналитические решения для дислокационных полей в случае ограниченной среды удастся получить лишь для отдельных частных случаев. Таким образом, для адекватного анализа разнообразных аспектов взаимодействия дислокаций со свободной поверхностью необходима разработка эффективных методов решения граничных задач теории дефектов.

Настоящая работа посвящена разработке моделей и методов исследования взаимодействия гибких криволинейных дислокаций со свободной поверхностью и анализу процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью. Моделирование проводилось применительно к кристаллам с ГПУ кристаллам. Такой выбор, наряду с практической важностью этих структур, обусловлен наличием ряда надежных данных относительно влияния свободной поверхности на дислокационные петли.

Целями диссертационной работы являлись:

- построение физических моделей и методик моделирования процессов взаимодействия гибких криволинейных дислокаций со свободной поверхностью;
- исследование средствами моделирования процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью применительно к ГПУ кристаллам.

Научная новизна работы состоит в следующем:

- разработана оригинальная операционно-вычислительная модель (ОВМ) полевого динамического взаимодействия гибких криволинейных дислокаций со свободной поверхностью;

- разработан программно-вычислительный комплекс, интегрирующий ОВМ в программную среду ANSYS для исследований процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью;
- при строгом учете тонкой пространственной структуры полей внутренних напряжений, создаваемых краевыми дислокационными петлями, осуществлено моделирование процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью;
- получены основные характеристики процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью и проведен анализ их зависимости от пространственно-ориентационных параметров системы;
- детально исследован процесс парного взаимодействия краевых дислокационных петель без учета и с учетом влияния свободной поверхности и установлено существование двенадцати пространственных областей взаимного расположения краевых дислокационных петель, для которых выявлены четыре типа эволюционного развития парного взаимодействия;
- установлено, что в процессе взаимодействия хаотического ансамбля краевых дислокационных петель со свободной поверхностью в условиях воздействия внешней сдвиговой нагрузки возникают условия для образования приповерхностных пор.

Теоретическая и практическая ценность работы состоят в том, что в работе предложен новый подход к решению задачи взаимодействия дислокационных петель со свободной поверхностью на основе интеграции авторской операционно-вычислительной модели в высокоэффективную программно-вычислительную среду ANSYS. Развитые в работе методы моделирования позволяют точно учитывать пространственно геометрические характеристики системы, адекватно воспроизводить гибкие свойства дислокаций и тонкую структуру внутренних полей, обуславливающих данный вид взаимодействия. Практическая ценность работы заключается также в том, что полученные в ней результаты и развитые методы могут быть использованы для количественного анализа широкого круга вопросов физики свободной поверхности, тонкопленочной техники и стимулируют постановку и проведение новых вычислительных и экспериментальных исследований граничных задач взаимодействия дислокаций.

Достоверность результатов работы обусловлена корректной постановкой задачи, применением математически обоснованных методов ее решения, сравнением результатов с известными аналитическими данными.

На защиту выносятся следующие положения:

- операционно-вычислительная модель полевого динамического взаимодействия гибких криволинейных дислокаций со свободной поверхностью;
- методика моделирования процессов взаимодействия гибких дислокаций со свободной поверхностью, на основе интеграции разработанной операционно-вычислительной модели в программно-вычислительную среду ANSYS;
- результаты исследования средствами моделирования процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью.

Апробация результатов. Результаты диссертационной работы докладывались на конференциях:

1. Региональной научно-технической конференции «Прогрессивные технологии, конструкции и системы в приборо- и машиностроении» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, 2004);
2. Региональных научно-технических конференциях «Научное развитие технологий в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, 2006, 2007, 2008, 2009);
3. Всероссийской научно-технической конференции «Прогрессивные технологии, конструкции и системы в приборо- и машиностроении» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, 2005);
4. Всероссийских научно-технических конференциях «Научное развитие технологий, в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, 2006, 2007, 2008, 2009).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 10 печатных работ.

Объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, выводов и списка литературы. Она изложена на 136 страницах текста, содержит 38 рисунков, 2 таблицы, 99 библиографических названий.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, ее практическое значение, формулируются основные цели исследования и основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации посвящена обзору литературы. В ней проводится рассмотрение и анализ результатов современных исследований взаимодействия краевых дислокационных петель (КДП) со свободной поверхностью.

Во второй главе диссертации проводится описание использованных и разработанных моделей и методик моделирования.

Для расчета влияния реакции свободной поверхности на поля внутренних напряжений рассматривалась следующая декомпозиция задачи. Пусть исходный объем V , содержит дислокации и ограничен поверхностью S , подверженной действию внешних поверхностных сил $T_i^0 = S_{ij} \cdot n_j$ и внешних смещений u_i^0 . Для декомпозиции задачи, компоненты векторных полей смещений (u) и тензорных полей деформаций (e) и напряжений (S) представляются в виде двух аддитивных составляющих:

$$u_i = \mathcal{U}_i^0 + \hat{u}_i, \quad e_{ij} = \mathcal{E}_{ij}^0 + \hat{e}_{ij}, \quad S_{ij} = \mathcal{S}_{ij}^0 + \hat{S}_{ij},$$

где поля \mathcal{U}_i^0 , \mathcal{E}_{ij}^0 , \mathcal{S}_{ij}^0 связаны только с дислокациями текущих конфигураций в объеме V , который считается погруженным в бесконечный континуум, т.е. считается неподверженным действию внешних поверхностных сил $T_i^0 = S_{ij} \cdot n_j$ и внешних смещений u_i^0 . В свою очередь поля \hat{u}_i , \hat{e}_{ij} , \hat{S}_{ij} являются компенсационными, они соответствуют бездислокационному объему, ограниченному поверхностью S , при этом, в соответствии с начальными и граничными условиями исходной задачи, начальные и граничные условия для бездислокационного объема выбираются на основе соотношений:

$$\hat{u}_i|_S = (u_i^0 - \mathcal{U}_i^0)|_S, \quad \hat{T}_i|_S = (T_i^0 - \mathcal{T}_i^0)|_S,$$

где смещения \mathcal{U}_i^0 и поверхностные силы \mathcal{T}_i^0 на поверхности S – интегральные характеристики, порождаемые текущими конфигурациями дислокаций, находящимися в объеме V , ограниченном поверхностью S .

Поскольку для бездислокационного объема все деформации являются упругими, решение задачи для бездислокационного объема проводится в рамках классической механики сплошных сред, на основе метода конечных элементов в программной среде ANSYS. При этом анализ развития полной деформации в объеме в условиях воздействия внешних нагрузок и смещений решается в соответствии со следующим алгоритмическим циклом:

1-ый этап (расчет дислокационного влияния)

Для заданной пространственной конфигурации дислокаций внутри объема V , в предположении отсутствия у объема свободной поверхности, воздействия полей внешних нагрузок и смещений, производится расчет порождаемых дислокациями полей \mathcal{U}_i^0 , \mathcal{E}_{ij}^0 , \mathcal{S}_{ij}^0 на поверхности S ;

2-ой этап (реакция упругого бездислокационного континуума)

Для вычисленных на первом этапе значений T_i^0 , u_i^0 на поверхности S определяются граничные условия $\hat{T}_i = T_i^0 - T_i^0$, $\hat{u}_i = u_i^0 - u_i^0$, и средствами ANSYS решается краевая задача нахождения полей \hat{u}_i , $\hat{\epsilon}_{ij}$, $\hat{\sigma}_{ij}$ внутри объема V ;

3-ий этап (обновление дислокационных конфигураций)

На основании найденных полей \hat{u}_i , $\hat{\epsilon}_{ij}$, $\hat{\sigma}_{ij}$, действующих внутри объема V , производится анализ динамического поведения дислокаций и производится расчет их новых конфигураций.

Для обновленных пространственных конфигураций дислокаций осуществляется переход к 1-ому этапу, и циклическая процедура повторяется до тех пор, пока погрешность выполнения исходных граничных условий на поверхности S превышает порог задаваемой точности d .

Механическая энергия в процессе виртуального движения дислокации состоит из двух частей: 1) изменений упругой энергии среды за счет поля самой дислокации, т.е. изменения собственной энергии дислокации; 2) работы произведенной на перемещение дислокации в результате внешних и внутренних полей напряжений, исключая вклад полей напряжений, порождаемых самой дислокацией. Введение отображения криволинейного дислокационного сегмента на скалярный параметрический интервал $\{w \in [0,1]\}$ позволяет свести нахождение дислокационных полей напряжений к процедурам быстрого численного расчета квадратурных сумм. Сила Пича-Келера, действующая на произвольный дислокационный сегмент, может быть вычислена на основе суммарного поля внешних и внутренних напряжений в соответствии с выражением:

$$\dot{\mathbf{F}}_{PK} = \mathbf{s} \dot{\mathbf{b}} \times \dot{\mathbf{t}}. \quad (1)$$

Поскольку локальная кривизна дислокационного сегмента является реакцией на действие всех сил, включая силы дислокационного самодействия, эволюционное движение дислокационной петли можно определить с помощью вариационного уравнения:

$$\int_L (F_k^t - B_{ak} v_a) dr_k | d\dot{\mathbf{l}} | = 0, \quad (2)$$

где F_k^t – компоненты результирующей силы, состоящей из силы Пича-Келера и силы самодействия; B_{ak} – матрица резистивности; v_a – компоненты вектора скорости. При решении уравнения (2) целесообразно введение следующих безразмерных переменных:

$$\mathbf{r}^* = \frac{\mathbf{r}}{a}, \quad \mathbf{f}^* = \frac{\mathbf{F}}{ma}, \quad t^* = \frac{mt}{B}, \quad (3)$$

где a – параметр решетки; t – время. С учетом (3), уравнение (2) приобретает вид:

$$\int_{L^*} d\mathbf{r}^*{}^T \left(\mathbf{f}^* - \frac{d\mathbf{r}^*}{dt^*} \right) \Big|_{dl^*} = 0, \quad (4)$$

где величины $\mathbf{f}^* = [f_1^*, f_2^*, f_3^*]^T$, $\mathbf{r}^* = [r_1^*, r_2^*, r_3^*]^T$ зависят от безразмерного времени t^* . При расчетах дислокационную петлю целесообразно разбить на N_s сегментов и для концов каждого j -ого сегмента выбрать множество обобщенных координат q_m , параметризующих форму:

$$\mathbf{r}^* = \mathbf{C} \mathbf{Q}, \quad (5)$$

где $\mathbf{C} = [C_1(w), C_2(w), \dots, C_m(w)]$, $C_i(w)$, ($i = 1, 2, \dots, m$) функциональные формы, зависящие от параметра w ($0 \leq w \leq 1$), $\mathbf{Q} = [q_1, q_2, \dots, q_m]^T$. Подстановка (5) в (4) дает:

$$\sum_{j=1}^{N_s} \int_{L_j} d\mathbf{Q}^T \left(\mathbf{C}^T \mathbf{f}^* - \mathbf{C}^T \mathbf{C} \frac{d\mathbf{Q}}{dt^*} \right) \Big|_{dl^*} = 0. \quad (6)$$

Введение

$$\mathbf{f}_j = \int_{L_j} \mathbf{C}^T \mathbf{f}^* \Big|_{dl^*}, \quad \mathbf{k}_j = \int_{L_j} \mathbf{C}^T \mathbf{C} \Big|_{dl^*}$$

и компоновка в соответствии с методом конечных элементов уравнений движения для всех смежных дислокационных сегментов в глобальные матрицы и вектора:

$$\mathbf{F} = \sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{f}_j, \quad \mathbf{K} = \sum_{j=1}^{N_s} \mathbf{k}_j,$$

позволяет представить уравнение (6) в окончательном виде:

$$\mathbf{K} \frac{d\mathbf{Q}}{dt^*} = \mathbf{F}. \quad (7)$$

Таким образом, операционно-вычислительная модель с учетом декомпозиции задачи, позволяет проводить анализ эволюционных процессов изменения конфигураций криволинейных дислокаций и их движения на основании решения множества обыкновенных дифференциальных уравнений (7) с использованием программных средств аппарата метода конечных элементов.

Третья глава диссертации посвящена описанию разработанного программно-вычислительного комплекса (ПВК), предназначенного для исследования взаимодействия гибких криволинейных дислокаций со свободной поверхностью на основе ОБМ, интегрированной в вычислительную среду ANSYS. ПВК функционирует на основе пяти модулей (см. рис. 1).

Первый модуль обеспечивает начальный ввод в заданный объем V с границей S исходных дислокаций $D_i^{(0)}$, в соответствии с решаемыми задачами.



Рис. 1. Модульное представление ПВК

Второй модуль производит расчет необходимых полей, создаваемых на исследуемой границе S текущими конфигурациями дислокаций $D_i^{(j)}$, ($j = 0, 1, 2, \dots$).

Третий модуль, в соответствии с концепцией декомпозиции ОВМ, средствами универсальной вычислительной среды ANSYS, производит расчет компенсационных полей в объеме V .

Четвертый модуль реализует возможные изменения текущих конфигураций дислокаций с учетом компенсационных полей, вычисляемых в третьем модуле.

Пятый модуль обеспечивает визуализацию и наглядное представление необходимых результатов в процессе функционирования комплекса.

Четвертая глава диссертации посвящена оптимизации параметров моделирования для анализа процессов взаимодействия КДП со свободной поверхностью. Здесь и далее рассмотрение проводилось применительно к ГПУ кристаллам, КДП размещались в плоскости базиса, упругие характеристики материала выбирались применительно к монокристаллам цинка. В соответствии с методикой моделирования на основе разработанного ПВК, расчет полей напряжений в объеме материала производился на основании аппроксимации значений полей вычисляемых в программной среде ANSYS в узлах кубической сетки разбиения с ребром c – значение которого и являлось первым определяемым параметром моделирования. Вторым определяемым параметром моделирования являлся угол сегмента разбиения КДП – φ . Для оптимального выбора параметров c и φ производилось вычисление относительной ошибки расхождения результатов моделирования с результатами расчета на основании известных аналитических выражений для различных точек

$$\text{модельного объема} - e(c, j, u, y, v) = \left| \frac{s_{ij}^{\text{аналит}} - s_{ij}^{\text{моделир}}}{s_{ij}^{\text{аналит}}} \right|, \text{ где } u = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{R}, y -$$

азимутальный к оси ОХ угол, $v = z/R$. В силу симметрии внутренних полей создаваемых КДП, анализ проводился только в первом пространственном октане.

Для обеспечения репрезентативности выборки, поскольку порождаемые КДП поля характеризуется высокой степенью неоднородности, плотность распределения вдоль азимутального луча – функция $f(u)$ выбиралась пропорциональной градиенту поля $f(u) =$

$\bar{\varepsilon} \cdot \text{grad} S_{ij}(u)$, где $\bar{\varepsilon} = \left(\int_0^4 \text{grad} S_{ij}(u) du \right)^{-1}$. Таким образом, в областях с

высокими значениями градиента поля объем выборки становился большим, в то время как для областей характеризуемых медленным и незначительным пространственным изменением поля объем выборки оказывался незначительным.

Совокупность полученных результатов (см. таблицу) позволила установить, что значения параметров c и φ , равные соответственно $R/8$ и $\pi/32$ оказываются оптимальными, при этих значениях модельные характеристики полей КДП в полной мере адекватны соответствующим характеристикам, полученным на основании аналитических методов и дальнейшее уменьшение данных параметров представляется нецелесообразным.

Значения среднего ($\bar{\varepsilon}$), среднеквадратического отклонения ($S(\varepsilon)$) и третьего центрального момента ($m_3(\varepsilon)$) в распределениях относительной ошибки при различных значениях параметров c и φ

φ	c			
	$R/3$	$R/5$	$R/8$	$R/10$
$\pi/4$	$\bar{\varepsilon} = 63,2 \pm 4,8$ $S(\varepsilon) = 26,1 \pm 1,9$ $m_3(\varepsilon) = 2,7 \pm 0,3$	–	–	–
$\pi/8$	–	$\bar{\varepsilon} = 45,4 \pm 3,2$ $S(\varepsilon) = 17,4 \pm 1,3$ $m_3(\varepsilon) = 2,1 \pm 1,6$	$\bar{\varepsilon} = 36,6 \pm 3,1$ $S(\varepsilon) = 14 \pm 1,2$ $m_3(\varepsilon) = 2,6 \pm 0,2$	–
$\pi/16$	–	$\bar{\varepsilon} = 12,6 \pm 1,4$ $S(\varepsilon) = 4,7 \pm 3,8$ $m_3(\varepsilon) = 2,0 \pm 1,8$	–	–
$\pi/32$	–	–	$\bar{\varepsilon} = 3,4 \pm 0,3$ $S(\varepsilon) = 1,3 \pm 0,1$ $m_3(\varepsilon) = 1,0 \pm 0,1$	$\bar{\varepsilon} = 2,8 \pm 0,3$ $S(\varepsilon) = 1,0 \pm 0,1$ $m_3(\varepsilon) = 0,9 \pm 0,1$
$\pi/64$	–	–	$\bar{\varepsilon} = 2,1 \pm 0,2$ $S(\varepsilon) = 0,8 \pm 0,1$ $m_3(\varepsilon) = 0,7 \pm 0,1$	–

Пятая глава диссертации посвящена анализу реакции свободной поверхности на поля внутренних напряжений, создаваемые КДП. Анализ совокупности полученных результатов позволил установить, что реакция

свободной поверхности начинает проявляться, когда КДП отстоят от свободной поверхности на расстоянии не более половины своего радиуса. По мере дальнейшего сближения реакция свободной поверхности прогрессирует, что может проявляться как на полевом, так и на силовом уровнях. В результате реакции свободной поверхности, в пространстве над КДП и в небольшом слое под ними, полевые поверхности равного уровня претерпевают деформацию. В частности, поверхности нулевого уровня, которые ранее выстилались вдоль плоскости $v=0$, теперь трансформируются в конические поверхности, с неподдающимися простому аналитическому описанию образующими, касательные к которым составляют с осью v тупые углы, с увеличивающимися по мере сближения значениями. Расчет сил реакции свободной поверхности, выполненный в соответствии с ОВМ для различных значений v и R , позволил установить, что физически значимые значения сил, выраженные в относительных единицах силы самодействия, начинают появляться лишь когда расстояние между КДП и свободной поверхностью становится менее $0,2R$. При этом, во всем рассмотренном диапазоне значений R , изменяющемся от $100b$ до $500b$, независимо от R , уменьшение расстояния от $0,2R$ до $0,02R$ сопровождается ростом относительных сил и их компонент (нормальной и компланарных к плоскости залегания КДП) от десятых долей до значений близких к единице.

В шестой главе диссертации проведено моделирование процессов взаимодействия хаотических ансамблей КДП со свободной поверхностью. В исследуемых процессах вероятность перекрытия внутренних полей, создаваемых отдельными КДП, может быть значительной, что требует предварительного анализ особенностей парного взаимодействия КДП.

Путем параметрического изменения в плоскости XOY расстояния u_i – разности между центрами дислокационных петель в проекции на плоскость $v=0$, были получены и проанализированы зависимости сил парного полевого воздействия КДП от координаты v . Полученные результаты позволили установить существование двенадцати характерных зон полевого влияния парного взаимодействия КДП. В силу описанной ранее симметрии полей внутренних напряжений, создаваемых краевой дислокационной петлей, из двенадцати зон полевого влияния краевых дислокационных петель содержательно различными являются четыре. Карта зон полевого влияния КДП представлена на рис. 2, где центр безразмерной системы координат UOV совмещен с центром дислокационной петли, краям которой соответствуют точки $(-1; 0)$, $(1; 0)$, а содержательно различные зоны, каждая из которых представляет собой совокупность месторасположения центра второй дислокационной петли, обозначены буквами А, В, С и D.

Краевая дислокационная петля, попадая в области определяемые зонами A_i ($i = 1, 2, 3, 4$), в результате полевого воздействия оказывается вовлеченной в процесс скольжения вдоль цилиндрической поверхности, образованной контуром петли и ее вектором Бюргерса, который продолжается вплоть до достижения петель плоскости $v=0$, после чего петля попадает в область устойчивого равновесия и ее движение прекращается.

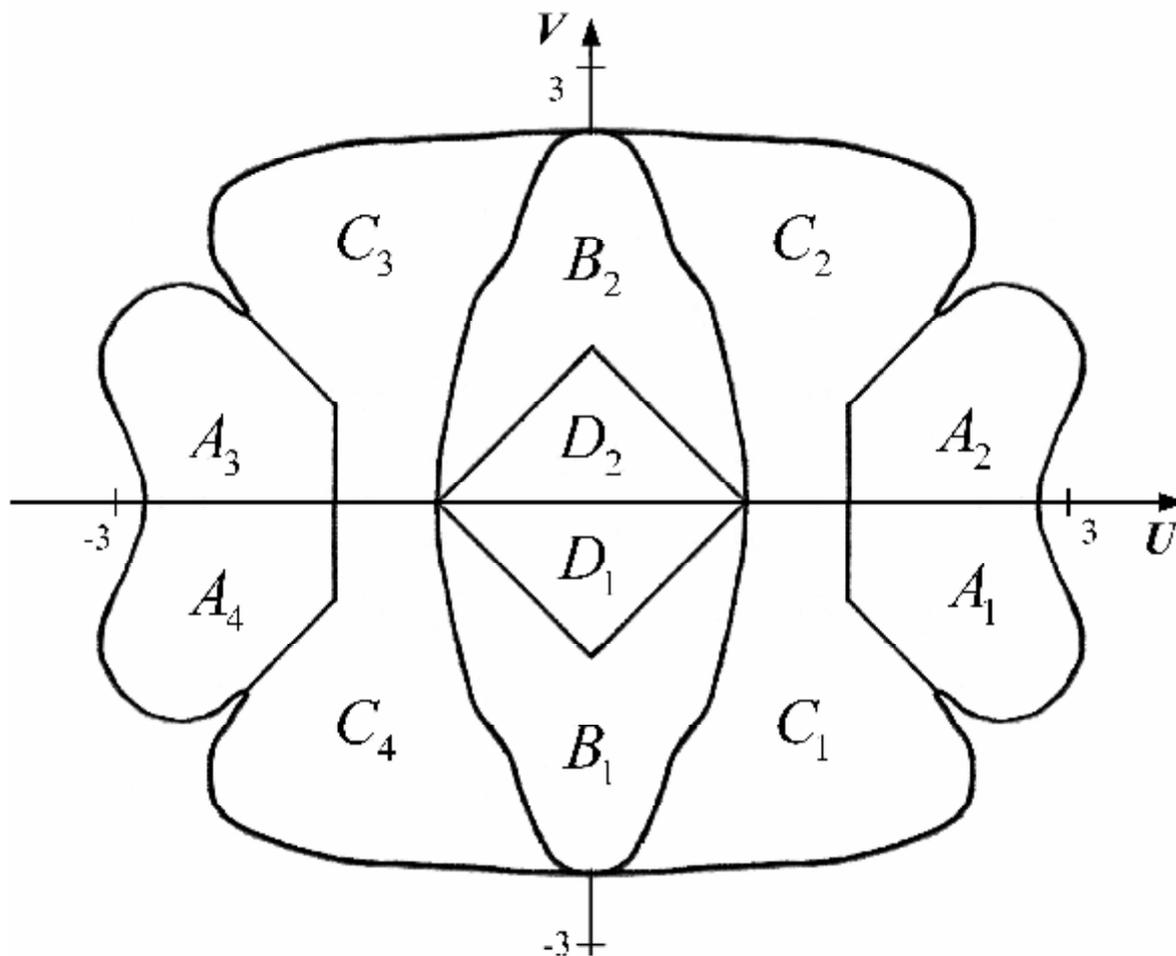


Рис. 2. Схема зон полевого влияния КДП при парном взаимодействии

Зоны C_i ($i = 1, 2, 3, 4$) характеризуются противоположным влиянием полевого воздействия. Если центр дислокационной петли попадает в области определенные зонами C_i , дислокационная петля оказывается вовлеченной в процесс скольжения вдоль цилиндрической поверхности, образованной контуром петли и ее вектором Бюргерса в направлении от плоскости $v=0$, который продолжается вплоть до выхода петли из соответствующей зоны.

Если центр дислокационной петли оказывается расположенным в зонах B_i, D_i ($i = 1, 2$), дислокационные петли скользят по цилиндрической поверхности, образованной контуром петли и ее вектором Бюргерса, в

направлении конических поверхностей, которым в плоскости UOV на рис. 2 отвечают прямые $v=u-1$, $v=-u-1$ ($i=1$), $v=u+1$, $v=-u+1$ ($i=2$), а после их пересечения попадают в область устойчивого равновесия.

Дополнительный анализ парного взаимодействия КДП позволил установить, что в том случае, когда цилиндрические поверхности скольжения двух КДП пересекаются и расстояние между их осями оказывается меньше половины значения наибольшего из радиусов, парное взаимодействие может привести к зарождению поры. Для реализации данного механизма требуется работа внешних сил, что может быть реализовано в условиях действия внешней сдвиговой нагрузки в непосредственной близости от свободной поверхности. С целью установления количественных закономерностей отмеченного эффекта было проведено моделирование взаимодействия хаотических ансамблей КДП со свободной поверхностью.

Моделирование проводилось при следующих предположениях. Модельный объем представлял собой прямоугольный параллелепипед, основанием которого служил квадрат со стороной $25 \cdot 10^{-6}$ м, а верхняя грань представляла собой свободную поверхность. КДП с вектором Бюргерса нормальным к свободной поверхности размещались в приповерхностном слое толщиной $3 \cdot 10^{-6}$ м, координаты их центров в модельном объеме задавались случайным образом, а распределение по радиусам выбиралось в соответствии с известными экспериментальными данными, при этом значение среднего радиуса составляло $1,8 \cdot 10^{-7}$ м. Моделирование проводилось для трех вариантов со значениями объемной плотности $n_v = 5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$, $n_v = 1 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$ и $n_v = 1,5 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$. Уровень внешней сдвиговой нагрузки выбирался из интервала значений $[0,00001 \div 0,003] \cdot G$, что, с одной стороны, позволяло КДП преодолевать барьер Пайерлса и скользить вдоль цилиндрической поверхности, образованной ее вектором Бюргерса и контуром, а, с другой стороны, такой уровень внешней нагрузки не позволял КДП преодолевать барьер Гриффитса и выходить на свободную поверхность (сохраняя ее в приповерхностном слое).

Результаты проведенного моделирования показали (см. рис. 3), что линейный рост плотности КДП сопровождается не менее чем степенным ростом образующихся приповерхностных пор. Таким образом, даже не смотря на ограничения рассмотренной модели, связанные, в частности, с отсутствием учета влияния других дефектов, затрудняющих движение КДП, вероятность образования пор в соответствии с рассмотренным механизмом следует считать достаточно высокой.

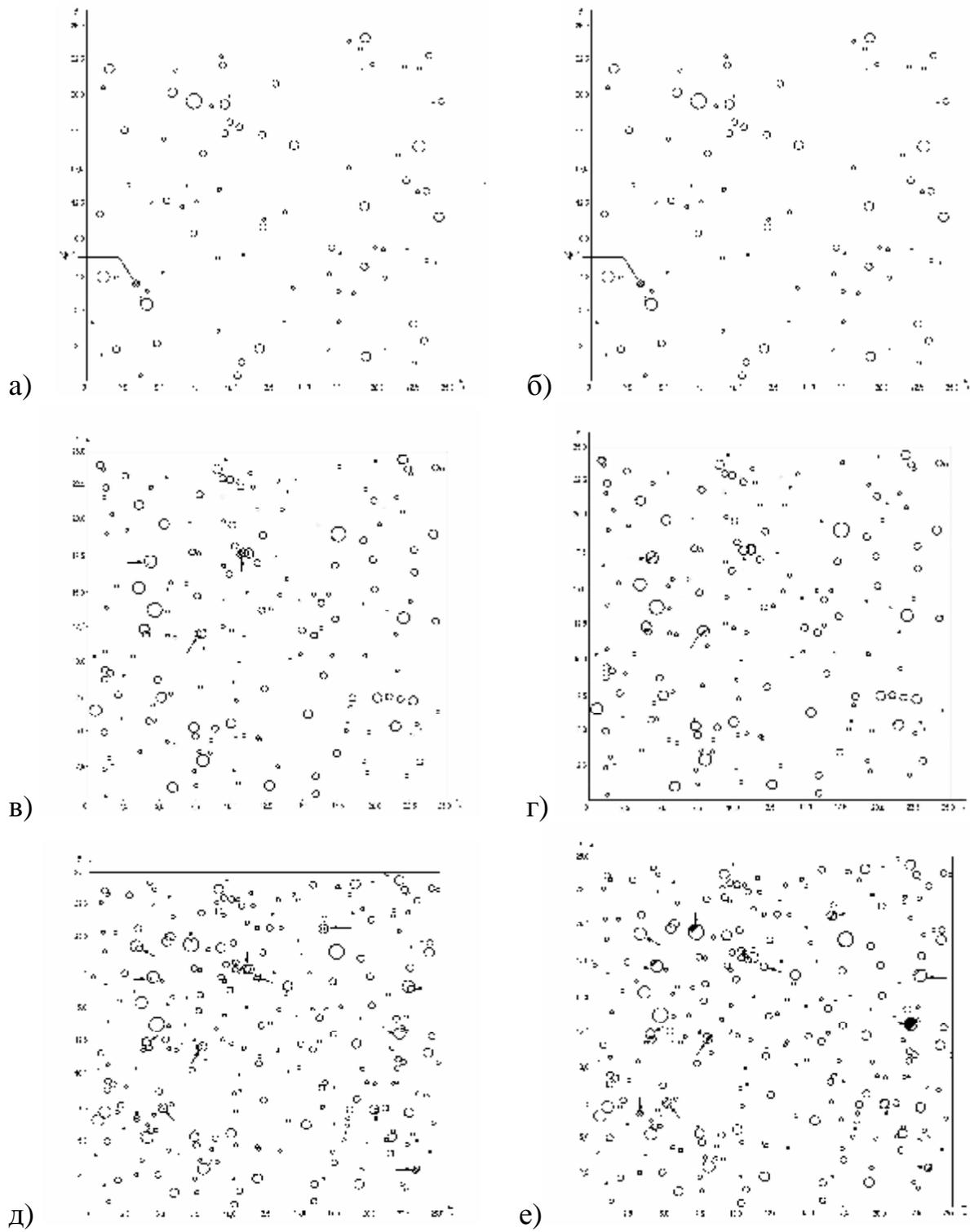


Рис. 3. Приповерхностные узоры КДП для слоев $h^{(1)}$ (а,б), $h^{(2)}$ (в,г), $h^{(3)}$ (д,е) до (а,в,д) и после (б,г,е) образования пор

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана математическая модель, методика моделирования и программное обеспечение для исследований процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью при строгом учете тонкой структуры полей внутренних напряжений, создаваемых краевыми дислокационными петлями.

2. Проведен детальный анализ влияния параметров моделирования на статистические характеристики полей внутренних напряжений, создаваемых краевыми дислокационными петлями. На основе сравнения результатов моделирования с известными аналитическими данными определены оптимальные параметры моделирования.

3. На основе разработанных моделей и методик моделирования проведено исследование процессов взаимодействия краевых дислокационных петель со свободной поверхностью. Всесторонне изучены статистические характеристики рассматриваемого процесса (изменения полей внутренних напряжений, силы реакции свободной поверхности и др.) и их зависимости от пространственно-ориентационных параметров системы.

4. Впервые, при строгом учете тонкой структуры полей внутренних напряжений, детально исследован процесс парного взаимодействия краевых дислокационных петель. Установлено существование двенадцати пространственных областей взаимного расположения краевых дислокационных петель, для которых выявлены четыре характерных типа эволюционного развития парного взаимодействия.

5. Впервые, при строгом учете тонкой структуры полей внутренних напряжений, проведено моделирование процесса взаимодействия хаотического ансамбля краевых дислокационных петель со свободной поверхностью в условиях воздействия внешней сдвиговой нагрузки; показано, что реализация данного процесса приводит к образованию приповерхностных пор.

Основные результаты диссертации отражены в следующих работах:

1. Логинов Б.М., Белов Ю.С., Смирнов А.А. Операционно-вычислительная модель квазидинамического дислокационного моделирования // Труды МГТУ. – 2007. – Т. 594. – С.162-168.
2. Программный комплекс для исследований взаимодействия свободной поверхности с дислокационными скоплениями / Б.М. Логинов, Ю.С. Белов, Чжо Хтун и др. // Научные технологии. – 2009. – №4. – С. 3-8.
3. Белов Ю.С. Оптимизация параметрических характеристик вычислительной среды Ansys при расчете взаимодействия дислокационных скоплений со свободной поверхностью // Научные технологии в приборостроении и машиностроении и развитие инновационной

- деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. – М., 2008. – Т. 2. – С. 55-63.
4. Белов Ю.С., Арсентьев Н.К. Визуализация результатов влияния свободной поверхности на поля внутренних напряжений в кристаллах с дислокациями // Научные технологии в приборостроении и развитии инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. – М., 2008. – Т. 2. – С. 41-44.
 5. Белов Ю.С., Кореньков Д.П. Динамическая интеграция операционно-вычислительной модели в вычислительную среду Ansys // Научные технологии в приборостроении и развитии инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. – М., 2008. – Т. 2. – С. 45-49.
 6. Логинов Б.М., Белов Ю.С. Моделирование сил реакции свободной поверхности для краевых дислокационных петель на основе операционно-вычислительной модели // Труды МГТУ. – 2008. – Т.596. – С. 89-98.
 7. Логинов Б.М., Белов Ю.С. Моделирование процессов парного взаимодействия краевых дислокационных петель // Труды МГТУ. – 2008. – Т. 596. – С. 84-88.
 8. Белов Ю.С., Кореньков Д.П. Особенности моделирования парного взаимодействия краевых дислокационных петель // Актуальные проблемы фундаментальных наук / Под ред. проф. К.Е. Демикова. – М.: НТА, 2009. – Т.6, ч.2. – С.207-208.
 9. Белов Ю.С. Анализ процессов взаимодействия краевых петель со свободной поверхностью в условиях внешнего воздействия // Научные технологии в приборостроении и развитии инновационной деятельности в вузе: Материалы Юбилейной региональной научно-технической конференции. – М., 2009. – Т.1. – С. 239-240.
 10. Белов Ю.С. Моделирование процессов образования приповерхностных пор // Научные технологии в приборостроении и развитии инновационной деятельности в вузе: Материалы Юбилейной региональной научно-технической конференции. – М., 2009. – Т.1. – С. 244-246.

Белов Юрий Сергеевич

Моделирование процессов взаимодействия краевых
дислокационных петель со свободной поверхностью

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 24.04.009г. Формат бумаги 60x84 1/16.
Бумага типографская № 2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 023-80-05.

Московский государственный
технический университет имени Н.Э. Баумана
Калужский филиал
248600, г. Калуга, ул. Баженова, 2.