На правах рукописи

Чжо Тант Зин

НАНОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОПЕРЕЧНОГО СКОЛЬЖЕНИЯ В ГЦК КРИСТАЛЛАХ

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2012

Работа выполнена в Калужском филиале федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор **Логинов Борис Михайлович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, с.н.с. **Мелик-Шахназаров Владимир Алексеевич**

кандидат физико-математических наук, доцент **Бонк Ольга Григорьевна**

Ведущая организация: Калужский государственный университет имени К.Э. Циолковского

Защита состоится «14» марта 2012 г. в 14^{30} часов на заседании диссертационного совета Д 212.141.17 при ГОУ ВПО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана» по адресу: 248600, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. по адресу: г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5.

Автореферат разослан «10» февраля 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
канд. тех. наук, доцент С.А.Лоскутов

НТБ МГТУ им. Н.Э. Баумана
1988116
Чжо Тант ЗинНаноскопическо

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы работы. Процесс пластической деформации кристаллических материалов реализуется за счет множественного движения дислокаций. В процессе своего движения дислокации взаимодействуют. В результате дислокационных взаимодействий реализуется широкий спектр процессов, основанный на дислокационных реакциях, которые могут приводить как к аннигиляции, так и к формированию устойчивых дислокационных образований, при этом поперечное скольжение может иметь ключевое значение.

Традиционные экспериментальные методы, такие как рентгеновская микроскопия, тонкопленочная электронная микроскопия, и, даже самые современные, такие как сканирующая туннельная микроскопия, трехмерная рентгеновская дифракционная микроскопия, не позволяют проанализировать специфические особенности процессов поперечного скольжения.

Анализ данных физических процессов аналитическими методами, основанными на теории упругости, наталкивается на непреодолимые препятствия, связанные с сингулярностью полей напряжений в непосредственной близости к дислокационным линиям, а также с высокой неопределенностью радиуса отсечения в области дислокационного ядра. В результате этого количественные результаты данных процессов, полученные разными авторами, использующими различные модели и подходы, отличаются друг от друга более, чем на порядок.

По-видимому, преодоление отмеченных трудностей следует связывать с применением моделирования соответствующих физических процессов на атомарном уровне. Поэтому построение адекватных моделей, методов анализа и моделирование наноскопических дислокационных процессов представляет собой актуальную задачу физики конденсированного состояния, в частности теории прочности и пластичности.

В связи с этим в настоящей работе ставилась задача исследования средствами компьютерного моделирования различных аспектов наноскопических физических процессов поперечного скольжения применительно к кристаллам с гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой.

Целями диссертационной работы являлись:

- построение физических моделей и методик моделирования процессов поперечного скольжения применительно к кристаллам ГЦК структурой;

– исследование средствами моделирования наноскопических особенностей процессов поперечного скольжения дислокаций применительно к монокристаллам алюминия и меди.

Научная новизна работы состоит в следующем:

– разработана физическая модель и методика моделирования для анализа наноскопических особенностей поперечного скольжения дислокаций применительно к ГЦК кристаллам с учетом диссоциации полных дислокаций на частичные и образованием полосы дефекта упаковки;
– для монокристаллов алюминия и меди проведено наноскопическое исследование физического процесса диссоциации дислокаций и определены важнейшие характеристики данного процесса, энергия активации и ширина полосы дефекта упаковки;
– исследованы наноскопические особенности физических процессов попеченного скольжения; показано, что флуктуации внутренних полей напряжений, обусловленные хаотическими дислокационными ансамблями являются эффективной основой возникновения поперечного скольжения; всесторонне изучены физические характеристики флуктуационных полей внутренних напряжений, определены критерии и условия, возникновения поперечного скольжения;
– средствами компьютерного моделирования впервые установлено, что традиционно применяемый механизм поперечного скольжения, основанный на взаимодействии дислокаций с точечными препятствиями, оказывается абсолютно несостоятельным в случае диссоциированных дислокаций в монокристаллах меди, в то время как для монокристаллов алюминия данный механизм является высоко эффективным;
– применительно к монокристаллам алюминия и меди всесторонне исследованы физические процессы аннигиляции дислокаций, залегающих в компланарных системах скольжения и получены основные характеристики процесса, определены их зависимости от физических и геометрических параметров и установлены условия, приводящие к аннигиляции дислокаций.

Теоретическая и практическая ценность работы состоят в том, что в работе предложен новый подход к решению задачи поперечного скольжения применительно к кристаллам с ГЦК структурой. Развитые в работе методы моделирования позволяют точно учитывать пространственно-геометрические характеристики системы, тонкую структуру полей внутренних напряжений,

адекватно воспроизводить реакционные свойства дислокаций и способность дислокационных диссоциировать с образованием полосы дефекта упаковки. 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 прочности и пластичности и стимулируют постановку и проведение новых вычислительных и экспериментальных исследований в физике конденсированного состояния.

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

На защиту выносятся следующие положения:

- методика моделирования физических процессов поперечного скольжения в кристаллах с ГЦК структурой;
- результаты исследования диссоциации дислокаций с образованием полосы дефекта упаковки и процессов поперечного скольжения применительно к монокристаллам алюминия и меди;
- результаты моделирования физических процессов аннигиляции дислокаций, расположенных в компланарных системах скольжения.

Апробация результатов. Результаты диссертационной работы докладывались на конференциях:

1. Региональных научно-технических конференциях «Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва, 2009, 2010);
2. Всероссийских научно-технических конференциях «Наукоёмкие технологии, в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва 2008, 2009, 2010);
3. Всероссийских школах-семинарах студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноинженерия» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва 2008, 2010).

Публикации. Тема диссертации отражена в 9 научных работах, в том числе 1 статья в журнале из Перечня ВАК РФ.

Объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, выводов и списка цитируемой литературы. Она изложена на 109 страницах текста, содержит 26 рисунков, 1 таблицу, 90 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 физических процессов диссоциации и поперечного скольжения дислокаций.

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

Моделирование и анализ дислокационных процессов проводился методами молекулярной динамики. Перемещения атомов рассчитывались на основе классической механики Ньютона, в соответствии с алгоритмом Верле. В качестве межатомарного потенциала был выбран потенциал Ленарда-Джонсона. Шаг интегрирования составлял 0,002 пс, Контроль за температурой проводился на основе термостата Ланжевена. Рабочий модельный объем представлял собой прямоугольный параллелепипед, стороны которого, в зависимости от рассматриваемых задач могли меняться. Для исключения влияния границы модельного объема использовались периодические граничные условия. Параметры моделирования выбирались применительно к кристаллам алюминия и меди. Постоянные решетки составляли a=0,405 нм для алюминия и a=0,361 нм для меди, упругим константам C_{11}; C_{12}; C_{44}, для алюминия и меди соответствовали значения: $10{,}82\cdot10^{10}$ Па; $6{,}13\cdot10^{10}$ Па; $2{,}85\cdot10^{10}$ Па и $16{,}84\cdot10^{10}$ Па; $12{,}14\cdot10^{10}$ Па; $7{,}54\cdot10^{10}$ Па.

Системами легкого скольжения дислокаций в ГЦК кристаллах являются двенадцать систем типа {111}<110>. Данные системы образованы четырьмя взаимно пересекающимися плоскостями типа {111}, в каждой из которых могут образовываться дислокации с тремя различными векторами Бюргерса типа <110>.

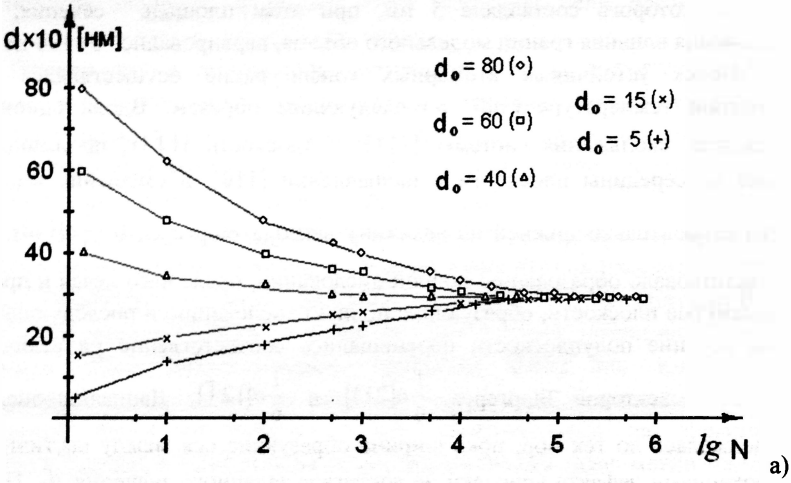
Специфика кристаллографического строения систем скольжения гранецентрированных кристаллов такова, что полные дислокации могут расщепляются на две частичные дислокации Шокли. При этом, между частичными дислокациями образуется дефект упаковки.

Оценки ширины дефекта упаковки между частичными дислокациями Шокли на основе континуальной теории дислокаций, в силу неопределенностей в области ядра дислокаций, могут быть не вполне корректными. Поэтому анализ расщепления полной дислокации на частичные дислокации Шокли требует проведения атомистического

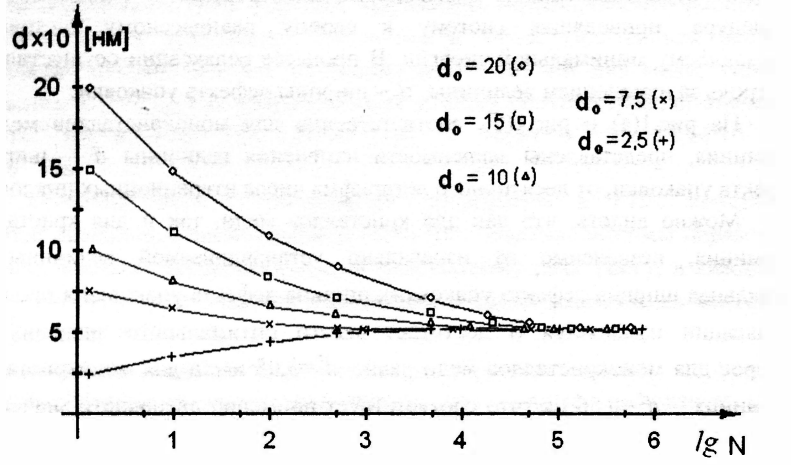
моделирования. Такому моделированию посвящена **третья глава** диссертации. В силу симметрии задачи, модельный объем вдоль дефекта упаковки формировался путем трансляции основной модельной ячейки, толщина которого составляла 5 нм, при этом площадь сечения, для исключения влияния границ модельного объема, варьировались от 100 до 250 нм^2. Поиск устойчивых атомарных конфигураций осуществлялся при комнатной температуре (300° К) следующим образом. Вдоль одной из плоскостей скольжения системы $\{111\}$, в плоскости $(1\bar{1}1)$, производился разрез до середины плоскости в направлении [110], и смещение верхней части относительно нижней на величину вектора Бюргерса $b=\frac{1}{2}a[110]$, что соответствовало образованию полной дислокации, после чего левая и правая незамкнутые плоскости, образующие полную дислокацию и последующие за ними верхние полуплоскости перемещались соответственно на величины частичных векторов Бюргерса $\frac{1}{6}a[211]$ и $\frac{1}{6}a[12\bar{1}]$. Данная процедура продолжалась до тех пор, пока ширина образующегося между частичными дислокациями дефекта упаковки не достигала заданного значения d_0. После этого осуществлялась молекулярно-динамическая релаксационная процедура, приводящая систему к своему равновесному состоянию, отвечающему минимальной энергии. В процессе релаксации осуществлялся контроль за изменением величины d – ширины дефекта упаковки.

На рис.1(а) и рис.1(б), соответственно для монокристаллов меди и алюминия, представлены зависимости изменения величины d – ширины дефекта упаковки, от десятичного логарифма числа итерационных циклов N.

Можно видеть, что как для кристаллов меди, так и для кристаллов алюминия, независимо от изначально устанавливаемой величины d_0 (начальная ширина дефекта упаковки), ширина дефекта упаковки в процессе релаксации изменяется и достигает своего оптимального значения d^*, которое для монокристаллов меди равно d^*=3,05 нм, а для монокристаллов алюминия – d^*=0,56 нм, что соответствует примерно двенадцати значениям полных векторов Бюргерса 1/2[110] для кристаллах меди и двум для кристаллов алюминия. Для выяснения причин данных различий был произведен расчет удельной величины избыточной энергии дефекта упаковки в соответствии с формулой:



а)



б)

Рис.1. Зависимость ширины дефекта упаковки от числа итерационных циклов для монокристаллов меди (а) и алюминия (б)

$$\gamma = \frac{N_{ДУ}(E_{ДУ} - E_O)}{S},$$

где $N_{ДУ}$ – число атомов дефекта упаковки; $E_{ДУ}$, E_O – соответственно потенциальная энергия, приходящаяся на один атом полосы дефекта упаковки и бездефектной решетки; S – площадь полосы дефекта упаковки.

Полученные результаты позволили установить, что для кристаллов меди величина γ составляет $\gamma = 3{,}74 \cdot 10^{-2}$ н·м/м^2 = 37,4 мДж/м^2, а для алюминия удельная величина дефекта упаковки составляет γ=184 мДж/м^2. Таким образом, удельная энергия дефекта упаковки в кристаллах алюминия, практически в пять раз превышает аналогичную величину в кристаллах меди, что и является причиной более узкой ширины полосы дефекта упаковки в кристаллах алюминия.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию поперечного скольжения частичных дислокаций. Во многих случаях определяющим условием направленного движения скользящих дислокаций в основной системе является наличие в данной системе внешнего сдвигового напряжения, уровень которого превышает барьер Пайерлса. Проекция этого напряжения на плоскость поперечного скольжения всегда будет меньше. Поэтому, поперечное скольжение, то есть изменение плоскости движения скользящей дислокации, может происходить только в результате общего действия внешнего и внутренних полей напряжений. В качестве источника полей внутренних напряжений были выбраны дислокации, хаотически размещенные в полосе, граничная плоскость которой была выбрана компланарной к плоскости залегания пробной дислокации.

Для анализа возможности поперечного скольжения проводилось построение таких областей, для которых выполнялось условия:

$$F_y^{ОСС} > F_o, \tag{1}$$

$$F_{x'}^{СПС} > F_x^{ОСС}. \tag{2}$$

Таким образом, во-первых, на скользящую дислокацию должна действовать компонента силы $F_y^{ОСС}$ в направлении перпендикулярном ее движению, причем это сила превышает некоторый уровень F_o, аналог барьера Пайерлса. И, во-вторых, результирующая сдвиговая сила в системе поперечного

скольжения $F_{x'}^{СПС}$ должна быть не меньше исходной силы $F_x^{ОСС}$, действующей в основной системе скольжения. Согласно континуальной теории, компоненты сил f_i, действующих на скользящую дислокацию, выражаются через компоненты тензора поля напряжений σ_{nj} так:

$$f_i = e_{ijk} b_n \sigma_{nj} dl_k, \tag{3}$$

где e_{ijk} - тензор перестановок Леви-Чевитто, b_n и dl_k компоненты вектора Бюргерса и сегмента длины дислокации. В свою очередь значимые компоненты тензора поля напряжений, создаваемого в точке (x, y) винтовыми и краевыми сегментами i-ой дислокации полосы скольжения, определяются выражениями:

$$\begin{gathered}
\sigma_{xz}^{(i)} = -\frac{Gb^{\parallel}}{2\pi}\frac{(y-y_i)}{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}, \\
\sigma_{yz}^{(i)} = \frac{Gb^{\parallel}}{2\pi}\frac{(x-x_i)}{(x-x_i)^2+(y-y_i)^2}; \\
\sigma_{xy}^{(i)} = \frac{Gb^{\perp}}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{(x-x_i)[(x-x_i)^2-(y-y_i)^2]}{[(x-x_i)^2+(y-y_i)^2]^2}, \\
\sigma_{xx}^{(i)} = -\frac{Gb^{\perp}}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{(y-y_i)[3(x-x_i)^2+(y-y_i)^2]}{[(x-x_i)^2+(y-y_i)^2]^2};
\end{gathered} \tag{4}$$

где G - модуль сдвига, ν - коэффициент Пуассона.

При переходе из основной системы скольжения в систему поперечного скольжения:

$$x_i^{СПС} = T_{ij} x_j^{ОСО}, \tag{5}$$

компоненты тензора напряжений преобразуются согласно:

$$\sigma_{ij}^{СПС} = T_{il} T_{jm} \sigma_{lm}^{ОСО}. \tag{6}$$

Таким образом, окончательно, условия (1), (2) принимают вид:

$$-b^{\parallel}\cdot\sum_{i\in D}\sigma_{xz}^{(i)}-b^{\perp}\cdot\sum_{i\in D}\sigma_{xx}^{(i)}-F_o>0, \tag{7}$$

$$\begin{gathered} b^{\parallel}\left[(\cos\alpha-1)\cdot\left(\sigma^{вн}+\sum_{i\in D}\sigma_{yz}^{(i)}\right)-\sin\alpha\cdot\sum_{i\in D}\sigma_{xz}^{(i)}\right]+ \\ +b^{\perp}\left[(\cos\alpha-1)\cdot\sum_{i\in D}\sigma_{xy}^{(i)}-\sin\alpha\cdot\sum_{i\in D}\sigma_{xx}^{(i)}\right]>0 \end{gathered} \tag{8}$$

при этом область суммирования D определяется условием:

$$(x-x_i)^2+(y-y_i)^2\le 7\cdot\frac{1}{\sqrt{\rho}}, \tag{9}$$

где ρ - плотность дислокаций хаотического ансамбля.

При моделировании и анализе выполнения условий (1), (2) рассмотренные значения плотности дислокаций ρ охватывали диапазон от 10^9 м$^{-2}$ до 10^{14} м$^{-2}$. При этом применительно к монокристаллам алюминия и меди, анализ проводился с учетом и без учета возможного расщепления полных дислокаций хаотического ансамбля на частичные дислокации.

Полученные результаты позволили установить следующие закономерности:

1. Поля внутренних напряжений, создаваемые дислокациями полосы скольжения, характеризуются высокой степенью нерегулярности. Начиная с плотности $\rho=10^{11}$ м$^{-2}$, данные поля создают условия благоприятные для поперечного скольжения. По мере увеличения плотности, в интервале значений от 10^{11} м$^{-2}$ до 10^{14} м$^{-2}$, в силу увеличения интенсивности данных полей, возрастает вероятность перехода скользящих дислокаций в плоскость поперечного скольжения.

2. Учет возможности протекания дислокационных реакций для дислокаций составляющих хаотический дислокационный ансамбль, в рассмотренном диапазоне плотностей дислокаций практически не приводит к изменению статистических характеристик полей внутренних напряжений. Предварительные оценки показали, что изменения в характеристиках полей внутренних напряжений, за счет диссоциации полных дислокаций на частичные, начинают проявляться при значениях плотности, порядка 10^{17} м$^{-2}$,

которые не являются характерными для анализируемых хаотических дислокационных ансамблей.

Таким образом, согласно полученным результатам, диссоциация полных дислокаций ансамбля на частичные дислокации в реальных условиях не может влиять на изменение неоднородностей полей внутренних напряжений. Вместе с тем, механизмы поперечного скольжения для полных и частичных дислокаций могут иметь принципиальные отличия. Поскольку для расщепленных дислокаций переход в плоскость поперечного скольжения требует предварительного восстановления в полную конфигурацию, при моделировании предполагалось, что частичные дислокации подвержены действую двух фронтов полей внутренних напряжений, при этом первый фронт обеспечивал фрагментарное восстановление расщепленных дислокаций до полной конфигурации, что гипотетически, соответствует взаимодействию частичных дислокаций с препятствиями с условиях действия внешней сдвиговой нагрузки, а второй фронт обеспечивал фрагментарный выброс дислокации в поперечную плоскость скольжения, что соответствует воздействию флуктуаций внутренних полей напряжений, создаваемых хаотическими дислокационными ансамблями.

В процессе моделирования на каждой стадии последовательного формоизменения частичных дислокаций, переходящих из основной плоскости скольжения, плоскости $(1\bar{1}1)$, в плоскость поперечного скольжении $(\bar{1}11)$, производилось вычисление соответствующих значений энергии активации. Расчет энергии активации проводился на основании выражения:

$$\varepsilon = \frac{1}{N}\sum_i (\Delta E_i + \Delta A_i), \tag{10}$$

где ΔE_i и ΔA_i – изменение потенциальной энергии и работа внешних сил по перемещению для атомов расщепленной дислокации.

На рис.2, для различных стадий формоизменения дислокации в процессе поперечного скольжения в монокристаллах меди, приведены соответствующие значения энергии активации. Анализ полученных результатов показал, что пиковым значениям энергии активации отвечают такие стадии поперечного скольжения, для которых центральные фрагменты частичных дислокаций полностью рекомбинируют, полоса дефекта упаковки

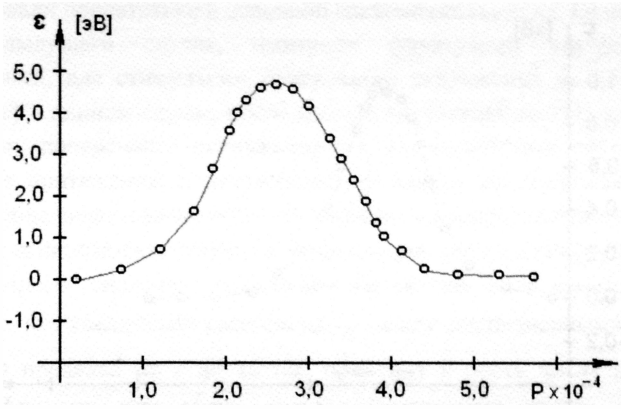


Рис.2. Стадии изменения энергии активации в процессе поперечного скольжения частичных дислокаций в кристаллах меди

между ними полностью захлопывается и образовавшаяся полная дислокация начинает диссоциировать в поперечной системе скольжения. Более ранним стадиям поперечного скольжения соответствует рост энергии активации, однако после зарождения частичных дислокаций в системе поперченного скольжения, дальнейшее развитие процесса происходит с уменьшением энергии активации.

Аналогичное моделирование было проведено для кристаллов алюминия. Значения энергии активации, отвечающие различным этапам формоизменения дислокаций в процессе поперечного скольжения, приведены на рис.3.

Сравнение рис.2 с рис.3 показывает, что для кристаллов алюминия величина пика энергии активации более, чем в пять раз меньше соответствующей величины наблюдаемой для кристаллов меди. При этом, число итераций, при которых достигается пик и начинает эффективно развиваться поперечное скольжение для кристаллов алюминия, оказывается более чем на порядок меньше, чем для кристаллов меди, то есть процесс поперечного скольжения в кристаллах алюминия развивается более динамично. Дополнительный анализ позволил установить, что отмеченные различия связаны с шириной полосы дефекта упаковки, которая у кристаллов меди почти в шесть раз больше, чем у кристаллов алюминия. По этой причине, для активизации поперечного скольжения в кристаллах меди минимальная ширина фронта внешнего воздействия в основной системе

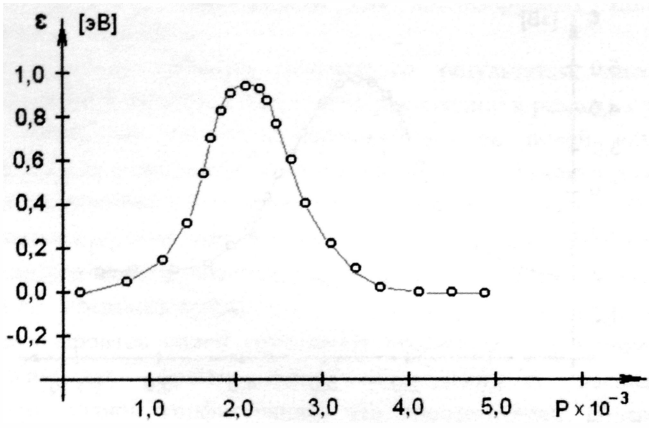


Рис.3. Стадии изменения энергии активации в процессе поперечного скольжения частичных дислокаций в кристаллах алюминия

скольжения, приводящая к поперечному скольжению примерно в семь раз больше, чем соответствующая величина для кристаллов алюминия. Именно по этим причинам величина энергии активации, необходимая для осуществления поперечного скольжения в кристаллах алюминия более, чем в пять раз меньше, чем в кристаллах меди.

Поскольку широкий фронт воздействия на частичные дислокации в основной системе скольжения, необходимый для поперечного скольжения в кристаллах меди, не может быть обеспечен известными характерными препятствиями, такими как точечные препятствия и их конгломераты, можно предположить, что именно в этом заключается причина того, что для кристаллов меди поперечное скольжение экспериментально практически не наблюдается.

Пятая глава диссертации посвящена моделированию процессов аннигиляции скользящих дислокаций, двигающихся в компланарных плоскостях. При моделировании, дислокации противоположных знаков расположенные в компланарных плоскостях $(1\bar{1}1)$ отстоящих друг от друга на расстоянии l_0 размещались в непосредственной близости от ближайшей плоскости поперечного скольжения – плоскости $(\bar{1}11)$. Так же, как и при моделировании поперечного скольжения, переход дислокаций в плоскость поперечного скольжения стимулировался действием внешних сил, которые

имитировали препятствия в основной системе скольжения. Однако в отличии от предыдущего случая, имитации флуктуаций внутренних полей напряжений, для стимуляции поперечного скольжения не использовались, поскольку в данном случае, после выхода дислокаций противоположно знака в систему поперечного скольжения, их взаимодействие обуславливает их взаимное притяжение, и достаточным условием их аннигиляции является превышение силами взаимного притяжения сил сопротивления решетки.

Моделирование процессов аннигиляции дислокаций расположенных в компланарных системах скольжения на основе поперечного скольжения показало, что увеличение расстояния l_0 между компланарными плоскостями $(1\bar{1}1)$, в пределах от 2 до 10 нм, приводит к росту числа итерационных циклов, однако при этом никаких качественно новых эффектов не наблюдается.

Сопоставление результатов моделирования, полученных для кристаллов меди и алюминия, показало, что в обоих случаях в рассмотренном диапазоне значений l_0, критерием обеспечивающем аннигиляцию дислокаций является их выход в плоскость поперечного скольжения. Таким образом, поскольку в кристаллах меди переход диссоциированных дислокаций в системы поперечного скольжения оказывается крайне затруднительным, следует предполагать, что аннигиляция дислокаций двигающихся в компланарных системах скольжения в кристаллах меди практически наблюдаться не будет, в то время как для кристаллов алюминия такие процессы будут протекать практически беспрепятственно.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методами молекулярной динамики, применительно к кристаллам с ГЦК структурой, проведен детальный анализ процесса диссоциации полных дислокаций на частичные с образованием полосы дефекта упаковки, позволивший установить основные характеристики, ширину полосы дефекта упаковки и энергию активации для монокристаллов меди и алюминия.

2. Средствами моделирования применительно к ГЦК кристаллам с учетом диссоциации дислокаций и образования полосы дефекта упаковки, проведено всестороннее исследование физических процессов поперечного скольжения и установлены важнейшие характеристики данного процесса и их зависимость от физических и геометрических характеристик модели.

3. Установлено, что переход с плоскость поперечного скольжения диссоциированных дислокаций регулируется двумя факторами: неоднородным фронтом силового поля в основной системе скольжения, который должен обеспечить рекомбинацию частичных дислокаций и захлопывание полосы дефекта упаковки на стартовом дислокационном сегменте l^*, и флуктуационным фронтом силового поля в системе поперечного скольжения, который имитирует флуктуации полей внутренних напряжений, создаваемых хаотическими дислокационными ансамблями.

4. Для монокристаллов меди и алюминия определены важнейшие статистические характеристики процесса поперечного скольжения и их зависимости от физических и геометрических параметров. Впервые установлено, что для кристаллов меди фактические параметры фронта воздействия в основной системе скольжения, обеспечивающие рекомбинацию частичных дислокаций, не имеют физических аналогов, в силу чего, в реальных условиях поперечное скольжение диссоциированных дислокаций в кристаллах меди представляется маловероятным. В свою очередь, для кристаллов алюминия, характеристики силового фронта для рекомбинации частичных дислокаций в основной системе скольжения, в полной мере соответствуют воздействию точечных препятствий и их конгломератов, что свидетельствует о высокой вероятности наблюдения поперечного скольжения для частичных дислокаций в кристаллах алюминия.

5. Впервые, применительно к кристаллам меди и алюминия, проведено моделирование физических процессов аннигиляции диссоциированных дислокаций, двигающихся в компланарных системах скольжения. Получены основные характеристики данного процесса. Показано, что главным фактором, определяющим возможность протекания данных аннигиляционных процессов, является условие, обеспечивающее рекомбинацию частичных дислокаций в основной системе скольжения.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Чжо Тант Зин, Белов Ю.С., Логинов Б.М. Особенности процессов поперечного скольжения диссоциированных дислокаций в гранецентрированных кристаллах // Наукоемкие технологии. 2011. Т. 12, №9. С. 53-57.
2. Чжо Тант Зин, Семикин С.А. Молекулярно-динамические методы моделирования гибридных наноструктур // Наноинженерия. Сборник

трудов 1-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2008. С. 345-365.

3. Чжо Тант Зин, Клочко О.С. Особенности и характеристики потенциалов взаимодействия в методах молекулярной динамики // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 93-96.
4. Чжо Тант Зин. Адаптация алгоритма Верлета для моделирования динамических процессов в микроканоническом ансамбле // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 97-100.
5. Чжо Тант Зин, Клочко О.С. Применение сплайновых потенциалов в моделях молекулярной динамики // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 101-102.
6. Чжо Тант Зин. Наноскопическое моделирование аннигиляции винтовых дислокаций в ГЦК кристаллах // Наноинженерия. Сборник трудов 1-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2008. С. 366-368.
7. Чжо Тант Зин. Наноскопическое моделирование формирования равновесных конфигураций частичных дислокаций в ГЦК кристаллах // Наноинженерия. Сборник трудов 3-ей Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2010. С. 417-421.
8. Чжо Тант Зин. Анализ особенностей поперечного скольжения в ГЦК кристаллах // Наноинженерия. Сборник трудов 3-ей Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2010. С. 422-426.
9. Чжо Тант Зин. Атомистическое моделирование поперечного скольжения в ГЦК кристаллах // Наноинженерия. Сборник трудов 3-ей Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2010. С. 427-430.

Чжо Тант Зин

Наноскопическое моделирование процессов
поперечного скольжения в ГЦК кристаллах

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 18.01.2012 г. Формат бумаги 60x84 1/16.
Бумага типографская № 2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 028-88-11.

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