На правах рукописи

Чжо Мин Тейн

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГИБКИХ СКОЛЬЗЯЩИХ ДИСЛОКАЦИЙ С ДИСЛОКАЦИОНЫМИ СТЕНКАМИ

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2011

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

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент **Проскурнин Андрей Николаевич**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор **Кристя Владимир Иванович**

кандидат физико-математических наук, с.н.с. **Сафронов Виктор Владимирович**

Ведущая организация: Тульский государственный педагогический университет имени Л.Н. Толстого

Защита состоится «18» января 2012 г. в 16^{00} часов на заседании диссертационного совета Д212.141.17 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. Баумана по адресу: г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5.

Автореферат разослан «15» декабря 2011 г.

НТБ МГТУ им. Н.Э. Баумана
1988020
Чжо Мин ТейнМоделирование

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

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы работы. Общеизвестно, что пластические свойства кристаллических материалов непосредственно обусловлены движением дислокаций. Поэтому в современной теории пластичности важное место занимает изучение движения дислокаций и факторов, влияющих на характер протекания этого процесса. Отсюда также следует, что сопротивление движению дислокаций в значительной мере должно определять механические свойства кристаллов и деформационное упрочнение в частности.

Взаимодействие дислокаций двигающихся в пересекающихся системах скольжения является одной из главных форм их взаимодействия при пластической деформации. Поэтому теоретическое изучение подобных дислокационных взаимодействий с точки зрения физической теории пластичности представляет первостепенный интерес. К сожалению, высокая сложность в проведении адекватного как экспериментального, так и теоретического анализа данного вопроса, все еще оставляет недостаточно исследованными большое число нерешенных проблем, а в тех случаях, когда подобный анализ предпринимался, использовались существенные упрощающие предположения, в значительной степени отдаляющие рассматриваемые модели от реальной ситуации в кристаллах и снижающие ценность полученных результатов. Таким образом, построение адекватных физических моделей, методов анализа и всестороннее обоснование и моделирование на их основе физических процессов взаимодействия пересекающихся дислокаций и их скоплений представляет собой актуальную задачу теории прочности и пластичности.

Настоящая работа посвящена разработке моделей, методов исследования и моделирования физических процессов взаимодействия

скользящих дислокаций с дислокационными стенками применительно к кристаллам с ГЦК структурой. Выбор структуры, обусловлен, прежде всего, ее широкой практической значимостью, а также наличием ряда экспериментальных данных.

Целями диссертационной работы являлись:

- построение физических моделей и методик моделирования процессов взаимодействия пересекающихся дислокаций и их образований;
- исследование средствами моделирования физических процессов взаимодействия пересекающихся дислокаций и их образований применительно к ГЦК кристаллам.

Научная новизна работы состоит в следующем:

- разработана физическая модель и методика моделирования применительно к ГЦК кристаллам процессов взаимодействия пересекающихся дислокаций и их образований при точном воспроизведении пространственно-геометрических особенностей и с учетом тонкой структуры полей внутренних напряжений;
- при строгом учете тонкой структуры полей внутренних напряжений, проведено детальное исследование физического процесса взаимодействия гибких скользящих дислокаций с единичными дислокациями, расположенными в пересекающихся системах скольжения, получены основные физические характеристики процессов и проведен анализ их зависимости от пространственно-геометрических и физических параметров системы;
- установлено, что процесс взаимодействия пересекающихся дислокаций характеризуется стадийностью, при этом пересечение дислокаций происходит в динамическом режиме, что связано с переходом системы взаимодействующих дислокаций из

устойчивого состояния в неустойчивое в результате достижения критических значений локализованной кривизны дислокационных конфигураций;

- проведен сравнительный анализ приближений и методов расчета дислокационных взаимодействий, на основании которого установлено, что процессы парного взаимодействия дислокаций физически корректно могут быть исследованы с использованием приближения линейного натяжения;
- при строгом учете тонкой структуры полей внутренних напряжений, проведено моделирование физического процесса взаимодействия скользящих дислокаций с дислокационными стенками, всесторонне исследованы основные характеристики процесса и их зависимости от уровня внешнего напряжения, пространственно-геометрических и физических параметров системы;

Теоретическая и практическая ценность работы состоят в том, что развитые в работе методы моделирования физических процессов взаимодействия пересекающихся дислокаций позволяют точно учитывать пространственно-геометрические характеристики системы, тонкую структуру полей внутренних напряжений и адекватно воспроизводить гибкие свойства дислокаций. Практическая ценность работы заключается также в том, что полученные в ней результаты и развитые методы могут быть использованы для количественного анализа широкого круга вопросов физических процессов прочности и пластичности и стимулируют постановку и проведение новых вычислительных и экспериментальных исследований.

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

На защиту выносятся следующие положения:

- методика моделирования физических процессов взаимодействия пересекающихся дислокаций и дислокационных образований;
- результаты исследования физических процессов парного взаимодействия пересекающихся дислокаций применительно к ГЦК кристаллам;
- результаты моделирования физических процессов взаимодействия гибких скользящих дислокаций с дислокационными стенками.

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, 2008, 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).

Публикации. Тема диссертации отражена в 8 научных работах, в том числе 1 статья в журнале из перечня ВАК.

Объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов и списка цитируемой литературы. Она изложена на 164 страницах текста, содержит 42 рисунка, 2 таблицы, 116 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 скользящих дислокаций с дислокационными стенками.

Вторая глава диссертации посвящена рассмотрению и анализу моделей и методов расчета дислокационных взаимодействий, включая дислокационное самодействие. В этой главе проводится обоснование метода регуляризации интегралов самодействия, основанное на анализе структуры полей внутренних напряжений криволинейных дислокаций вблизи дислокационных линий. Показано, что затруднения, связанные с расходимостью интегралов самодействия могут быть преодолены, если отказаться от математического представления дислокации как линии нулевой толщины и ввести конечные поперечные размеры дислокации. На основании аналитических методов анализа во второй главе диссертации проводится исследование асимптотики полей внутренних напряжений криволинейного дислокационного сегмента в окрестностях сингулярной области. Получены удобные аналитические выражения, позволяющие с учетом кривизны дислокационного сегмента, для краевых и винтовых компонент вектора Бюргерса дислокационного сегмента, записать напряжение в каждой точке пространства в виде разложения на нечетные и четные функции специального типа, соответственно отвечающие за описание напряжения, создаваемого бесконечной прямолинейной дислокацией и напряжения, вызванные отклонением формы дислокации от прямой линии. Для полученной асимптотики предложена схема расчета полей внутренних напряжений в окрестности сингулярной области, связанная с методом рассредоточения криволинейного дислокационного сегмента по пространству с расчетно-нормированной плотностью векторов Бюргерса.

Третья глава диссертации посвящена исследованию процессов парного взаимодействия пересекающихся дислокаций. Анализ проводился применительно к ГЦК кристаллам. Взаимодействующие дислокации

размещались в кристаллографических системах скольжения $\{111\}<\bar{1}01>$, взаимное расположение дислокаций определялось параметром сближения h. Схема взаимодействия дислокаций приведена на рис.1. Физические параметры моделирования выбирались применительно к кристаллам меди:

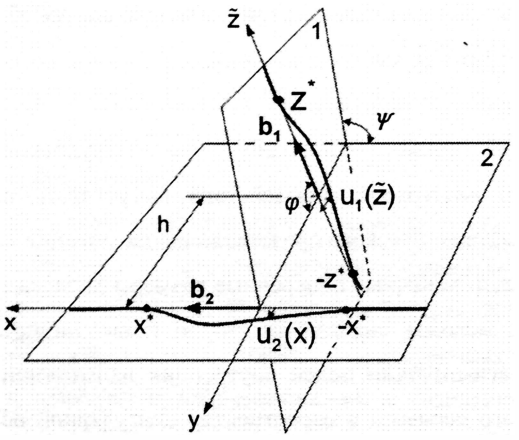

Рис.1. Схема взаимодействия двух пересекающихся дислокаций

вектор Бюргерса b=2,56·10^{-10}м; модуль сдвига G=54,6 ГПа; коэффициент Пуассона ν=0,32; значения стартового напряжения τ_i^0=0,28. Процесс взаимодействия дислокаций рассматривался как квазистатический, то есть считалось, что в каждый момент дислокации успевают принять равновесную форму. Принималось, что обе дислокации испытывают сопротивление своему движению типа сухого трения. Учет сил трения не сводится к простой перенормировке эффективного напряжения, действующего на дислокацию, а вызывает ряд важных особенностей взаимодействия дислокаций, ибо при наличии трения дислокаций могу быть искривлены даже в ненагруженном кристалле. Для корректного анализа с учетом отмеченной особенности была использована оригинальная методика, позволяющая осуществлять контроль за эволюцией изменения граничных условий взаимодействующих

дислокаций, с целью выявления критических областей на линиях взаимодействующих дислокаций, в которых проекция результирующей силы полевого воздействия оказывается равной уровню трения.

Полученные результаты позволили установить, что криволинейные равновесные конфигурации взаимодействующих гибких отталкивающихся дислокаций возможны только при значениях параметра h отвечающих интервалу $h_{кр}^{(1)} = -3,73 мкм < h \le h_{кр}^{(2)} = 0,57 мкм$, при $h < h_{кр}^{(1)} = -3,73 мкм$ силы взаимодействия не превышают максимального уровня сил трения, а при $h > h_{кр}^{(2)} = 0,57 мкм$ система теряет устойчивость и дислокации в динамическом режиме проходят друг через друга. При этом для $-3,73 мкм < h \le 0,57 мкм$ возможны две равновесные формы гибкой дислокации, одна из которых соответствует устойчивому, а другая неустойчивому решениям. Расчеты также показали, что с точки зрения описания эволюции формы дислокации стационарные краевые условия правомерно использовать лишь при значениях параметра h удовлетворяющих условию: $h \le h\left(x_{\max}^{*}\right) = -1,34 мкм$. Применение стационарных граничных условий при $h > -1,34 мкм$, не отвечает истинному формоизменению дислокации в эволюционном смысле. Поэтому, чтобы полностью проследить эволюцию изменения конфигурации гибкой дислокации в процессе ее движения при $h > -1,34 мкм$, необходимо производить контроль за изменением месторасположения критических областей, в которых проекции результирующих полевых сил достигают уровня сил трения.

Полученные результаты позволили установить следующие особенности взаимодействия гибких отталкивающихся дислокаций. Процесс взаимодействия гибких дислокаций и их прохождение друг через друга может быть разбит на три этапа. На первом этапе наблюдается постепенное искривление дислокаций, которое начинается, когда расстоянии между

дислокациями достигает своего первого критического значения, причем степень искривленности дислокаций возрастает по мере их сближения. При этом в интервале между первым и вторым критическими значениями расстояний между дислокациями возможно существование двух устойчивых и трех неустойчивых равновесных конфигураций дислокаций. Второй этап реализуется когда параметр сближения превышает свое второе критическое значение, и характеризуется потерей устойчивости системы. Существенно, что потеря устойчивости происходит, когда дислокации находятся на конечном расстоянии друг от друга. На этом этапе происходит потеря устойчивости и переход дислокационной системы из квазистатического состояния в динамическое. В динамическом режиме происходит пересечение дислокаций. Наконец, на третьем этапе, происходит релаксация формы дислокаций по мере их удаления друг от друга после пересечения.

В случае притягивающегося парного взаимодействия гибких дислокаций (см. рис.2) решение задачи существенно осложняется ввиду того, что оказывается возможным формирование четверных узлов. Эти трудности

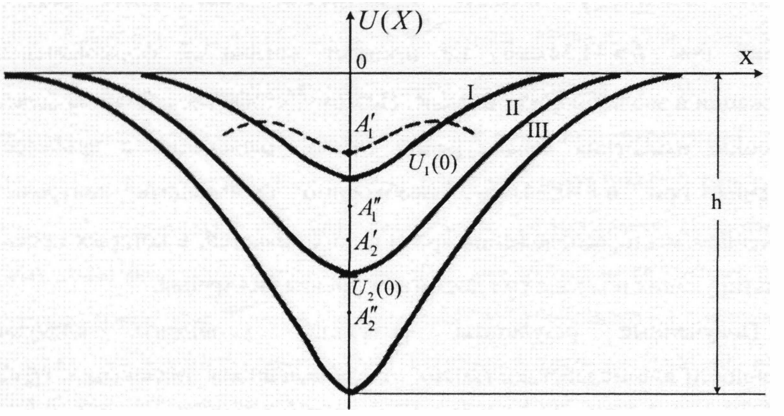

Рис.2. Схема, иллюстрирующая определения устойчивых и неустойчивых равновесных конфигураций двух притягивающихся дислокаций

возникают при нахождении решения в окрестности узловых точек, где имеет место расходимость. На основе метода моментов установлено, что гибкая дислокация в узле должна ориентироваться вдоль направления вектора Бюргерса. Показано, что решение в окрестности четверного узла может быть представлено в виде дробно-степенного ряда. Проведенный анализ позволил выявить следующие закономерности взаимодействия притягивающихся дислокаций. При сближении дислокаций до конечного расстояния $\bar{h}_{кр}^{(1)} = -3,52 мкм$ начинается их изгиб, который постепенно нарастает по мере дальнейшего сближения. В интервале значений $\bar{h}_{кр}^{(1)} = -3,52 мкм < h \le \bar{h}_{кр}^{(2)} = -1,14 мкм$ h становится возможным существование трех равновесных конфигураций, одна из которых является неустойчивой, а две устойчивыми. При этом существует зона устойчивости, в которой гибкая дислокация в принципе может принимать различные конфигурации. Наконец, при $h > \bar{h}_{кр}^{(2)} = -1,14 мкм$ система теряет устойчивость и дислокации скачком переходят в состояние контакта. Дальнейшее развитие процесса заключается в совместном движении дислокаций в соединенном состоянии вплоть до момента их отрыва друг от друга.

Наряду с точным учетом сил самодействия было проведено моделирование в приближении линейного натяжения. Сопоставление полученных результатов позволило установить, что приближение линейного натяжения верно описывает качественные особенности процессов дислокационного взаимодействия. В количественном отношении замена строгого учета сил самодействия приближением линейного натяжения приводит к различиям, относительная величина которых не превышает 5%, что является допустимым основанием для выполнения предварительного анализа дислокационных взаимодействий в приближении линейного натяжения.

В четвертой главе диссертации проведено моделирование процессов взаимодействия и прохождения гибких скользящих дислокаций через дислокационные стенки. Схематическое расположение взаимодействующей дислокации с дислокационной стенкой показано на рис.3. Рассмотрение проводилось применительно к ГЦК кристаллам при строгом учете самодействия дислокаций и тонкой структуры полей внутренних напряжений, создаваемых дислокациями стенки. Рассмотрено два варианта задачи, когда дислокационные стенки оказывают на скользящую дислокацию отталкивающее и притягивающее действие.

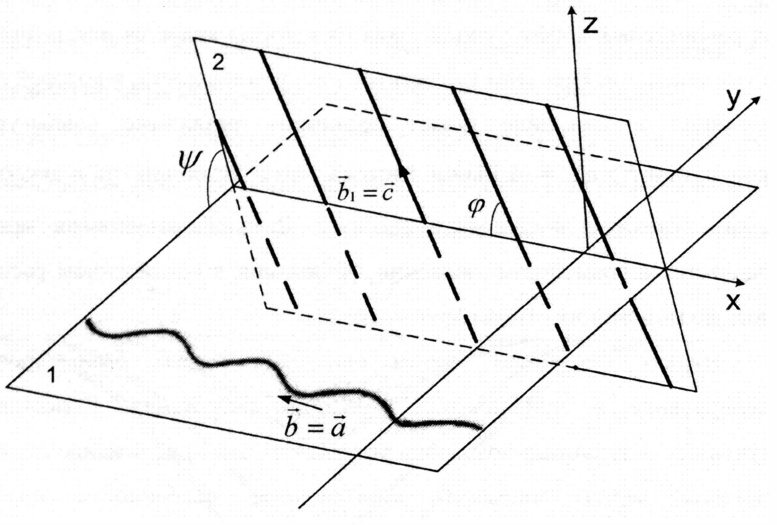

Рис.3. Схема расположения дислокационной стенки и взаимодействующей с ней скользящей дислокации

Расчеты показали, что для случая отталкивания решение соответствующего уравнения равновесия существует только в определенном

интервале внешних напряжений $L\tau_{кр} < 6{,}81$ [$Па{\cdot}м$], где L – расстояние между дислокациями в скоплении. Результаты моделирования позволили установить, что все конфигурации скользящих дислокаций в данном случае оказываются неустойчивыми. Таким образом в случае отталкивания гибкая скользящая дислокация должна проходить дислокационную стенку в динамическом режиме, как только внешнее напряжение скомпенсирует напряжение от дислокационной стенки $\tau_{кр}$. Поэтому, встречающееся в научной литературе мнение о существовании некоторого критического значения параметра сближения гибкой скользящей дислокации и отталкивающей ее дислокационной стенки при возрастании внешнего напряжения является ошибочным и связано с сильными упрощениями рассматриваемых моделей. Полученные результаты позволили также установить, что широко используемый критерий Орована для оценки напряжения прохождения в данном случае является совершено непригодным.

В том случае, когда при взаимодействии между скользящей дислокацией и дислокационной стенкой реализуются силы притяжения, в интервале значений внешнего напряжения $7{,}81\,Па\cdot м < \tau L \le 19{,}24\,Па\cdot м$, возможно существование четырех равновесных конфигураций гибкой скользящей дислокации, два из которых являются устойчивыми. Одна из устойчивых конфигураций отвечает ситуации, когда гибкая дислокация находится в состоянии контакта с дислокациями стенки, образуя четверные узлы. Анализ показал, что в процессе эволюционного перемещения дислокаций при постепенном увеличении внешнего напряжения реализуются только устойчивые узловые конфигурации. Установлено, что при уровне внешнего напряжения $\tau > \tau_{кр}^{(1)}$, никакие равновесные конфигурации гибкой дислокации в поле дислокационной стенки оказываются невозможными. Поэтому $\tau = \tau_{кр}^{(1)}$ следует принять за напряжение прохождения скользящей

дислокации дислокационной стенки. Значение $\tau_{кр}^{(1)}$ существенно отличается от орововского. Таким образом, оценка прозрачности дислокационной стенки для скользящих дислокаций на основе модели Орована и в этом случае может приводить к заметным ошибкам. В заключении показано, что строгий учет самодействия в задачах этого типа является существенным, так как формы дислокации, рассчитанные при строгом учете самодействия заметно отличаются от полученных в приближении линейного натяжения.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Проведен анализ методов расчета и регуляризации полей внутренних напряжений криволинейного дислокационного сегмента в окрестности сингулярной области. Исследованы возможные причины и источники ошибок при вычислении интегралов дислокационного взаимодействия и самодействия. Получены компактные аналитические выражения и их асимптотики для вычисления полей внутренних напряжений в сингулярной области и определены условия, при которых точный расчет самодействия может быть аппроксимирован приближением линейного натяжения.

2. Разработана методика анализа и построения эволюционных изменений конфигураций взаимодействующих дислокаций с учетом сопротивления их движению со стороны кристаллической решетки. Показано, что используемая в литературе перенормировка внешнего напряжения за счет сил трения может приводить к неверным результатам, корректный анализ влияния сил трения должен проводиться на основании учета подвижности граничных условий для краевых задач нахождения эволюционирующих дислокационных конфигураций.

3. Впервые, при строгом учете тонкой структуры полей внутренних напряжений применительно к ГЦК кристаллам проведено физическое исследование парного взаимодействия пересекающихся дислокаций.

Установлено, что физический процесс взаимодействия дислокаций и их прохождения друг через друга происходит в три стадии: постепенное искривление дислокаций, завершающееся потерей устойчивости системы; динамическая стадия совместного движения и последующего пересечения дислокаций; стадия релаксационного формоизменения дислокаций по мере их расхождения. Показано, что анализ парного взаимодействия дислокаций с использованием приближения линейного натяжения правильно описывает качественные особенности данного физического процесса, при этом относительная ошибка расхождения с результатами, полученными на основании строгого учета самодействия не превышает 5%.

4. Впервые, применительно с ГЦК кристаллам, при строгом учете тонкой структуры полей внутренних напряжений, проведено моделирование физических процессов взаимодействия скользящих дислокаций с дислокационными стенками. Установлено, что в случае, когда дислокационные стенки оказывают отталкивающее действие на скользящую дислокацию, возможно существование только неустойчивых равновесных конфигураций скользящих дислокаций, которая преодолевает дислокационную стенку в динамическом режиме, как только внешнее напряжение достигнет уровня нескомпенсированного дальнодействующего напряжения. В тех случаях, когда дислокационные стенки оказывают на скользящую дислокацию притягивающее действие, вблизи стенки возможно существование четырех равновесных конфигураций скользящей дислокации, из которых только две являются устойчивыми.

5. Установлено, что применяемый в литературе подход, связанный с расчетом деформационного упрочнения дислокационной стенки на основании критического параметра сближения является физически некорректным, поскольку определяющими факторами являются конфигурационные условия взаимодействующих дислокаций, при которых

реализуется потеря устойчивости и переход к динамическому режиму пересечения дислокаций.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Разработка методов компьютерного моделирования процессов взаимодействия скользящих дислокаций с упорядоченными ансамблями дислокационных скоплений / Чжо Мин Тейн [и др.] // Наукоемкие технологии. 2010. Т.11, №7. С. 24-32.
2. Чжо Мин Тейн, Проскурнин А.Н., Логинов Б.М. Моделирование процессов взаимодействия гибких дислокаций в ГЦК кристаллах // Труды МГТУ. Методы исследования и проектирования сложных технических систем. М., 2009. Т. 598. С. 269-281.
3. Чжо Мин Тейн. Методы регуляризации интегралов дислокационного взаимодействия // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т.2. С. 77-82.
4. Чжо Мин Тейн. Итерационные методы учета дислокационного самодействия // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т.2. С. 83-86.
5. Чжо Мин Тейн. Говоров Д.С. Расчет вклада в самодействие от периферийных участков дислокации // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т.2. С. 87-92.

6. Чжо Мин Тейн, Проскурнин А.Н. Краевые условия в задачах парного взаимодействия дислокаций // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т.1. С.180-182.
7. Чжо Мин Тейн, Проскурнин А.Н. Методические особенности моделирования процессов парного взаимодействия дислокаций // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т.1. С.183-185.
8. Чжо Мин Тейн, Проскурнин А.Н. Анализ устойчивости дислокационных узлов на основе метода моментов // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т.1. С. 178-179.

Чжо Мин Тейн

Моделирование взаимодействия гибких скользящих дислокаций с дислокационными стенками

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 13.12.2011г. Формат бумаги 60x84 1/16.
Бумага типографская № 2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 026-80-05.

КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана
248600, г. Калуга, ул. Баженова, 2