

Потапов Андрей Евгеньевич

**ДИСЛОКАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ
КРИСТАЛЛАХ В УСЛОВИИ КОМПЛЕКСНОГО НАГРУЖЕНИЯ**

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: кандидат физико-математических наук,
доцент Манухина Дарья Владимировна

Официальные оппоненты: Федоров Виктор Александрович
заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук, профессор,
Тамбовский государственный
университет им. Г.Р. Державина

Кристя Владимир Иванович,
доктор физико-математических наук, профессор,
Калужский филиал ФГ БОУ ВПО
«Московский государственный технический
университет имени Н.Э. Баумана»

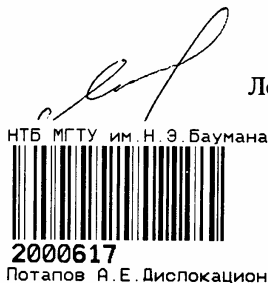
Ведущая организация: ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П.Бардина»

Защита состоится «24» октября 2012г. в 14 часов 30 минут
на заседании диссертационного совета Д 212.141.17 на базе
ФГ БОУ ВПО «Московский государственный технический университет имени
Н.Э. Баумана» по адресу: 248600, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, КФ МГТУ име-
ни Н.Э. Баумана

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке
КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана
(г. Калуга, ул. Баженова, д. 2)

Автореферат разослан «21» сентября 2012г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.т.н., доцент



Лоскутов С.А.

Потапов А.Е. Диспозиционные

Актуальность работы. Одной из фундаментальных проблем современной физики конденсированного состояния является исследование взаимодействия внешних полей и структурных дефектов кристаллов. Физические свойства реальных кристаллов определяются не только плотностью их структурных дефектов, но и взаимодействием структурных дефектов друг с другом. Присутствие внешних полей вызывает перераспределение дефектной структуры, что приводит к изменению физических свойств материала. Установлено, что в щелочно-галоидных кристаллах в присутствии слабого магнитного поля наблюдается явление магнитоупругости - увеличение подвижности дислокаций. Влияние на пластические свойства кристаллов оказывает и ультразвук. В современных технологиях ультразвуковая обработка материалов широко используется для придания образцу наперед заданных свойств. Кроме того, в процессе эксплуатации различные твердотельные детали могут подвергаться длительной высокочастотной вибрации, что в свою очередь может приводить к их деградации и последующему разрушению. Именно поэтому исследование механизмов, вызывающих изменение физических свойств реальных кристаллов при ультразвуковом воздействии, является не только фундаментальной задачей физики конденсированного состояния, но и обуславливается большим прикладным значением.

Для исследования поведения структурных дефектов в кристаллах при воздействии внешних полей в настоящее время применяются экспериментальные и теоретические методы. Экспериментальные методы позволяют установить первоначальные и конечные дефектные структуры, но не позволяют исследовать особенности динамики дислокаций при воздействии ультразвука. Поэтому для исследования взаимодействия внешних полей и дефектов кристаллической структуры применяется метод компьютерного моделирования, адекватность и результативность которого проверена на хорошо изученных системах. Метод компьютерного моделирования позволяет установить взаимосвязь внешних факторов и пластических свойств материала.

В настоящее время с каждым годом увеличивается число публикаций, посвященных влиянию ультразвука на формирование и эволюцию дефектной структуры твердых тел. Однако имеющаяся научно-техническая литература не дает полного представления о механизмах, протекающих на микроуровне в твердых телах, подвергающихся воздействию ультразвука. Современные теории не позволяют однозначно предсказать поведение образца на макроскопическом уровне. Поэтому задача разработки моделей, алгоритмов и программ для осуществления моделирования дислокационных процессов является актуальной.

Целью настоящей работы является исследование физических процессов, происходящих на микроуровне при эволюции источника Франка-Рида, в кристаллах с заряженными дислокациями методом математического моделирова-

Сш. Ком.

ния в условиях сложнагруженного состояния: одновременного воздействии ультразвуковой и постоянной нагрузок.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Провести анализ современных методов исследования дефектной структуры материалов, в частности посвященных решению задачи эволюции источника Франка-Рида. Обосновать выбор метода исследования для достижения поставленной цели.
2. На основе физической модели разработать методику моделирования физических механизмов и процессов, обуславливающих работу источника Франка-Рида в условиях сложнагруженного состояния.
3. Выполнить моделирование процесса эволюции источника Франка-Рида при наличии ультразвукового поля.
4. На основании анализа результатов моделирования выявить особенности срабатывания источника Франка-Рида в условиях сложнагруженного состояния, когда на дислокации леса и скользящую дислокацию могут действовать как постоянная, так и знакопеременная нагрузки.
5. Изучить характеристики электрического поля заряженного дислокационного сегмента; установить роль заряда скользящей дислокации при работе источника Франка-Рида и разрушение ионного кристалла в условиях сложнагруженного состояния.

Научная новизна полученных результатов состоит в том, что:

1. Впервые для исследования процесса эволюции источника Франка-Рида в условиях сложнагруженного состояния используется метод компьютерного моделирования с высокой степенью параллелизма вычислений на ЭВМ.
2. Установлено, что число сработавших источников Франка-Рида зависит от первоначальной длины сегмента, амплитуды ультразвука и величин постоянной нагрузки, действующих на дислокационный сегмент, а так же состояния фаз колебаний дислокаций леса.
3. Предложена и реализована в виде программы феноменологическая модель, описывающая электрические поля заряженной дислокации. Методом компьютерного моделирования были получены значения напряженности и потенциала вдоль радиальных срезов источника Франка-Рида. Установлено, что для среза силового поля дислокационного сегмента, сделанного через точки закрепления в плоскости дислокации, наблюдается инверсия знака.
4. Оценены характеристики электростатического поля, генерируемого закрепленным дислокационным сегментом в условиях сложнагруженного состояния. Установлено, что при определенных условиях величина напряженности поля может достигать значений, сравнимых с пробойным для атмосферного воздуха. Основываясь на анализе сило-

вых линий электрического поля дислокационного сегмента, визуально показано направление возможного электрического пробоя.

Научная ценность и практическая значимость работы. Полученные в работе данные могут быть использованы при разработке теории прочности и пластичности материалов. Рассмотренная модель работы источника Франка-Рида в условиях сложного нагружения позволяет прогнозировать процесс пластической деформации и разрушения материалов, оценить срок их службы, возможности деградации в зависимости от режимов нагружения. Также результаты работы могут быть использованы при разработке современных технологий обработки материалов: как для достижения высокой пластичности материала, так и для придания материалам заранее заданных свойств.

На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Разработанные модель, алгоритм и пакет программ, позволяющие детально исследовать процесс работы источника Франка-Рида при условии одновременного воздействия постоянной и знакопеременной нагрузок.
2. Закономерности изменения критического напряжения срабатывания источника Франка-Рида в зависимости от параметров ультразвука, свойств пластичности исходного материала и внешней постоянной нагрузки.
3. Разработанные модель, алгоритм и методика моделирования электрических полей заряженного дислокационного сегмента.
4. Закономерности изменения напряженности и потенциала электрического поля, развивающейся дислокационной петли источника Франка-Рида в зависимости от ее геометрических параметров.

Апробация работы. Результаты исследований докладывались на Первых Московских чтениях по проблемам прочности материалов (Москва, 2009); XIV Национальной конференции по росту кристаллов (Москва, 2010); Международной научно-практической конференции "Фундаментальные и прикладные исследования, разработка и применение высоких технологий в промышленности" (СПб., 2011); LII Международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Уфа, 2012); XX Петербургских чтениях по проблемам прочности, посвященных памяти профессора В.А. Лихачева (СПб., 2012).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 2 статьях из перечня ВАК и 8 тезисах докладов на международных и всероссийских конференциях.

Достоверность результатов. Выводы диссертации основаны на проведении комплексных исследований, с последующим сопоставлением полученных при компьютерном моделировании данных с экспериментальными данными других авторов. Полученные результаты не противоречат известным положениям физики конденсированного состояния.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, списка цитированной литературы, содержащего 132 наименования. Полный объем составляет 115 страниц машинописного текста, в том числе 44 иллюстрации и 2 таблицы.

Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертационной работе. В работах, написанных в соавторстве, автору принадлежат разработка программного комплекса эволюции источника Франка-Рида, проведение вычислительных экспериментов, обработка полученных результатов, а также участие в их обсуждении и написании статей.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, определены цель и задачи проводимых исследований, сформулированы научная новизна и практическая значимость работы, перечислены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена литературному обзору основных экспериментальных данных и теоретических представлений о микромеханизмах пластической деформации кристаллов в ультразвуковом поле. Раскрыты основные современные методы исследования дефектной структуры твердых тел, среди которых выделен метод компьютерного моделирования. Известно, что реальные эксперименты, методом повторного избирательного химического травления позволяют зафиксировать только начальные и конечные положение дислокаций, однако не дают сведений о том, как протекает динамика процесса эволюции источника Франка-Рида в ультразвуковом поле. В связи с чем, для исследования процессов происходящих в объеме материала за времена, сравнимые с периодом ультразвуковых колебаний 10^{-5} с, возможно использовать метод компьютерного моделирования.

Вторая глава посвящена описанию физической модели, алгоритма и методики моделирования работы источника Франка-Рида в ультразвуковом поле с использованием динамического подхода.

В первой части рассматривается физическая модель, позволяющая исследовать эволюцию источника Франка-Рида под действием ультразвука. В рамках модели в качестве источника Франка-Рида рассматривается закрепленная на дислокациях леса скользящая дислокация, при движении которой учитывается сила самодействия. Для определения закономерностей движения дислокации использовалось *упругое континуальное приближение* теории дислокации. Среда считалась изотропной, обладающая свойством вязкости. Для начала движения закрепленной дислокации необходимо преодолеть силу сухого трения кристаллической решетки, обусловленную рельефом Пайерлса-Набаро.

Моделирование проводилось применительно к ГЦК (NaCl, LiF, KCl), выбор материалов обусловлен тем, что в рассматриваемой группе кристаллов структурные дефекты достаточно хорошо изучены и имеется широкий спектр

экспериментальных данных об эволюции дислокационной структуры под действием ультразвука.

Дислокационная модель, схематически представленная на рис. 1. Источником Франка-Рида служила скользящая дислокация (1) (рис. 1 а), находящаяся в плоскости легкого скольжения α [1 0 1] (2) (рис. 1 б), закрепленная на дислокациях леса (3), которые находятся под воздействием только ультразвукового поля.

Причиной, вызывающей движение закрепленной дислокации (1), являются внешние постоянная и ультразвуковые нагрузки (4), приложенные к образцу в плоскости легкого скольжения (2). Таким образом, в рамках предложенной модели исследовалось моделирование *сложнонагруженного состояния* образца (на скользящую дислокацию (1), движущуюся в плоскости легкого скольжения (2), действуют постоянная внешняя и ультразвуковые нагрузки (4), а на дислокации леса (3) – только ультразвук.

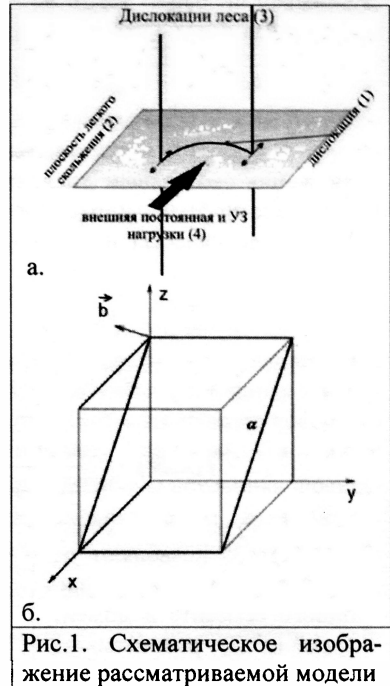


Рис.1. Схематическое изображение рассматриваемой модели

Для физической модели, представленной на рис. 1, уравнение движения скользящей дислокации бралось в виде: $ma = F_s + F_v + F_{ex} + F_{in} + F_{st}$, где

$F_s = -\frac{Gb^2}{2R}$ – сила самодействия в приближении линейного натяжения, обусловленная появлением в краевой дислокации винтовых сегментов; b – вектор Бюргерса; R – радиус кривизны дислокационного сегмента в точке (x, y) ;

$F_v = Bv = B\partial u / \partial t$ – сила вязкого трения; B – коэффициент вязкости;

$F_{in}(x, y) = \frac{Gb^2}{4\pi} y \left(\frac{x+1/2}{((x+1/2)^2 + y^2)} - \frac{x-1/2}{((x-1/2)^2 + y^2)} \right)$ – сила, обусловленная действием дислокаций леса на дислокационный сегмент, x, y – координаты точки сегмента в которой рассчитывается значение силы;

$F_{ex} = \begin{cases} b\sigma \\ b\sigma^0 \sin \omega t \end{cases}$ – сила, характеризующая внешнюю нагрузку;

$F_{st} = b\sigma_{st} \text{sign}(F_{in} + F_{ex} + F_{in})$ – сила, обусловленная стартовым напряжением; ma – инерционный член, которым можно пренебречь в силу его малости. Таким образом, первоначальное уравнение движения скользящей дислокации примет вид:

$$Bv = -\frac{Gb^2}{2R(\lambda, \tau_0)} + \frac{Gb^2}{4\pi} y \left(\frac{x+l/2}{((x+l/2)^2 + y^2)} - \frac{x-l/2}{((x-l/2)^2 + y^2)} \right) + b\sigma^0 \sin \omega t - b\sigma_u \text{sign}(F_u + F_{ex} + F_m) \quad (1)$$

Во второй части рассматривается решение динамического уравнения движения скользящей дислокации (1). Решение такого уравнения возможно двумя способами: методом разложения в ряд Фурье (2), полученное В.В. Благовещенским [1], и методом конечных разностей (3).

$$u(\lambda, \delta\tau) = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ u_k \frac{1 - e^{-a_k^2 \delta\tau}}{a_k^4} + (-1)^k \cos\left(\frac{2\pi P \tau_0}{T}\right) \frac{8P \tilde{\sigma}^0 \delta\tau}{T(2k+1)} \left(\frac{\delta\tau}{a_k^2} - \frac{1 - e^{-a_k^2 \delta\tau}}{a_k^4} \right) \right\} \cos(a_k \lambda). \quad (2)$$

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \left(\frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h_2^2} + f(n, m) \right) h_1, \quad (3)$$

$$f(\lambda, \delta\tau) = -\frac{1}{2R(\lambda, \tau_0)} + \tilde{\sigma}^0 \sin \omega(\tau_0 + \delta\tau) + \tilde{\sigma}_m - \tilde{\sigma}_a \text{sign}\left(\sum_i \tilde{\sigma}_i\right)$$

Полученные решения (2), (3) позволяют по конфигурации дислокационного сегмента в момент времени τ_0 рассчитывать конфигурацию в момент времени $\tau_0 + \delta\tau$ (рис. 2). На рис. 2 изображены две последовательные конфигурации закрепленного дислокационного сегмента для моментов времени τ_0 (рис.2. кривая 1) и $\tau + \delta\tau$ (рис.2. кривая 2). Для получения конфигурации сегмента для момента времени $\tau + \delta\tau$ по конфигурации момента τ_0 для всех точек, образующих сегмент, по (2) (3) находится смещение $u(\lambda, \delta\tau)$, направленное перпендикулярно касательной к сегменту.



Рис.2. Последовательные конфигурации закрепленного дислокационного сегмента

В третьей части главы рассмотрены основные этапы построения алгоритмов и методики моделирования процесса эволюции закрепленной скользящей дислокации в условиях сложонагруженного состояния. Реализовано два алгоритма: первый согласно решению (2), второй согласно решению (3).

Было установлено, что первый подход обладает существенным недостатком, для достижения приемлемой точности моделирования необходимо выполнить огромное количество итераций для получения решения дифференциального уравнения (2). Принимая во внимание, что последующее положение сегмента зависит от предыдущего, и рассчитывается исходя из него, то решение дифференциальных уравнений движения каждой точки выполняется в независимых вычислительных потоках. Оценка сложности алгоритмов пока-

зала, что решение методом конечных разностей имеет меньшую сложность, однако оно показало меньшую стойкость к накоплению вычислительной ошибки.

В рамках третьей главы представлены результаты моделирования работы источника Франка-Рида. Рассматривались следующие варианты нагружения:

1. Дислокации леса неподвижны, на скользящую дислокацию действует постоянная и знакопеременная нагрузка.
2. Дислокационный сегмент подвергается влиянию только постоянной нагрузки, а дислокации леса – знакопеременной.
3. Одновременное влияние постоянной и ультразвуковой нагрузки.

В первой части приводятся результаты исследования при условии, что на скользящую дислокацию действуют две внешних силы: постоянная и изменяющаяся во времени по гармоническому закону. Результирующую внешнюю силу, действующую в плоскости источника, запишем в виде: $F_{\text{сегмента}} = b\sigma_{\text{const}} + b\sigma_0 \sin(\omega t)$. Известно, что началом работы источника Франка-Рида считается момент, при котором дислокационный сегмент теряет устойчивость. Если на сегмент будет действовать только постоянная внешняя нагрузка, то напряжение потери его устойчивости равно $\sigma_{\text{кр}} = \frac{Gb}{l}$. Если же постоянная составляющая напряжения σ_{const} меньше $\sigma_{\text{кр}}$, то при совместном действии постоянной и знакопеременной составляющих напряжения, начиная с некоторой амплитуды σ_0^* , в определенный момент времени t^* напряжение σ^* становится больше $\sigma_{\text{кр}}$. Так как напряжение в плоскости источника $\sigma^* = \sigma_{\text{const}} + \sigma_0^* \sin(\omega t^*)$, и дислокационный сегмент теряет устойчивость, то начинается размножение дислокаций по механизму Франка-Рида. Таким образом, ультразвук запускает механизм генерации дислокационных петель.

Значение критического напряжения, при котором срабатывает источник Франка-Рида в условиях воздействия только постоянной нагрузки, зависит от длины закрепленного дислокационного сегмента. Серия компьютерных экспериментов подтвердила экспериментально полученные данные: при добавлении ультразвуковой компоненты значение постоянной составляющей действующего внешнего напряжения σ_{const} , уменьшится по сравнению с $\sigma_{\text{кр}}$, а зависимость от длины источника будет аналогичной. Причем чем больше будет амплитуда ультразвука при постоянной частоте ($f=60\text{кГц}$), тем меньше будет величина σ_{const} (рис.3).

Полученные результаты подтверждаются данными реальных экспериментов выполненных Н.А. Тяпуниной. В работе [2] показано, что при воздействии только ультразвуковой нагрузки ($\sigma_{\text{const}} = 0$) источник Франка-Рида будет генерировать дислокационные петли.

Таким образом, вокруг источника Франка-Рида генерируется ансамбль из пар разноименных дислокаций, которые будут аннигилировать. Поэтому вокруг закрепленного дислокационного сегмента могут создаваться ансамбли одноименных дислокаций, которые не будут аннигилировать после снятия ультразвукового воздействия, обнаруженные Н.Ф. Мотом в экспериментальных исследованиях [3].

Момент срабатывания источника Франка-Рида, кроме амплитуды ультразвука, определяется и его частотой. Так как при своем движении дислокация испытывает сопротивление кристаллической решетки, в связи с этим появляется характерное время генерации источником замкнутой петли. Этот экспериментальный факт был подтвержден данными компьютерного моделирования рис. 4. На рис. 4 представлена зависимость разности $\Delta\sigma$ между постоянной составляющей напряжения σ_{const} , необходимой для срабатывания источника при текущей частоте ультразвука f , и тестовой частоте $f=60$ кГц для различных длин дислокационных сегментов. Данная зависимость имеет ярко выраженный линейный характер $y=ax+b$, причем с увеличением длины дислокационного сегмента возрастает величина коэффициента пропорциональности a . Компьютерное моделирование показало, что для источников с $l > 8$ мкм, разность между постоянным напряжением, необходимым для срабатывания при частоте 60 кГц и 180 кГц, достигает порядка 30%. Таким образом, при наличии ультразвукового

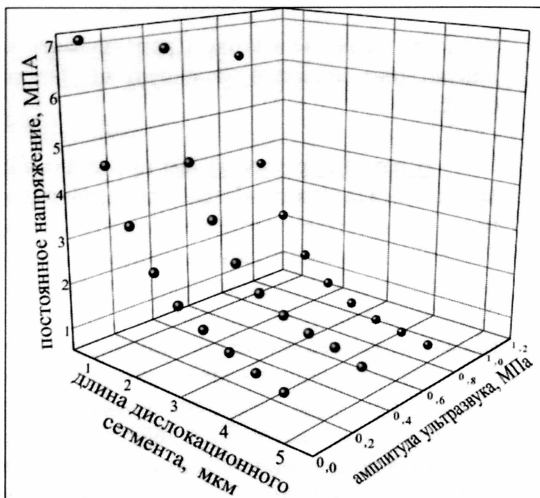


Рис.3. Зависимость внешнего действующего напряжения σ_{const} , необходимого для срабатывания источника Франка-Рида, от длины дислокационного источника и амплитуды действующего ультразвука

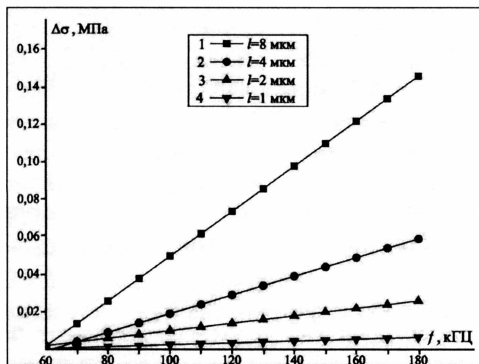


Рис.4. Влияние частоты ультразвука на напряжение срабатывания источника Франка-Рида разных длин

поля происходит уменьшение величины постоянного внешнего напряжения, необходимого для срабатывания источника Франка-Рида. Кроме того, влияние ультразвука объясняет срабатывание источников длиной меньше $l_0 = \frac{Gb}{\sigma_{\text{ср}}}$.

Следовательно, при ультразвуковом воздействии возрастает число срабатывающих источников Франка-Рида, что приводит как к понижению предела текучести, так и к увеличению степени пластической деформации образца.

Во второй части приводятся результаты моделирования, выполненного при условии, что на скользящую дислокацию действует постоянное во времени внешнее напряжение, а дислокации леса подвергаются ультразвуковому воздействию, в результате чего центры закрепления дислокационного сегмента совершают вынужденные гармонические колебания.

В рамках рассматриваемой физической модели считалось, что дислокационный сегмент закреплен на разноименных дислокациях леса. В этом случае под действием ультразвука концы сегмента будут двигаться в противофазе (рис.5). В один из полупериодов действия ультразвука, эффективная длина дислокационного сегмента $l_{\text{эф}}$ будет уменьшаться, а в другой – увеличиваться (т.е. генерация дислокаций источником Франка-Рида будет начинаться при напряжениях $\tilde{\sigma} = \frac{Gb}{l_{\text{эф}}}$, меньших $\sigma_{\text{ср}} = \frac{Gb}{l_0}$, где l_0 – длина дислокационного сегмента с неподвижными точками закрепления).

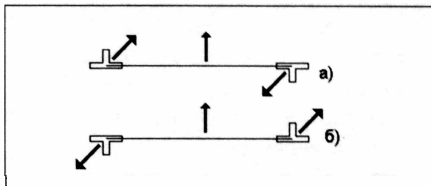


Рис.5. Возможные направления движения дислокаций леса, закрепляющих источник Франка-Рида, под действием ультразвука: а) первый полупериод, б) второй полупериод

Понижение напряжения срабатывания источника Франка-Рида с учетом этого механизма отражает рис.6, где кривая 1 соответствует напряжению срабатывания источника Франка-Рида в отсутствии ультразвукового воздействия, кривые 2, 3 и 4 – точки закрепления дислокационного сегмента на дислокациях леса совершают вынужденные колебания в присутствии ультразвука. Результаты моделирования показывают, что вынужденные колебания дислокаций леса вызывают понижение критического напряжения, необходимого для срабатывания источника Франка-Рида, т.е. происходит увеличение пластичности образца в ультразвуковом поле.

Также рассматривался ситуация, при которой дислокации леса под воздействием ультразвука совершают синфазные вынужденные колебания. Однако предложенная физическая модель не смогла выявить эффект изменения критического напряжения срабатывания источника Франка-Рида.

Таким образом, анализируя полученные с помощью моделирования результаты можно сделать вывод, что изменение (понижение) критического напряжения срабатывания источника Франка-Рида будет определяться соотношением закрепляющих разноименных дислокаций, колеблющихся в противофазе. Таким образом, величина критического напряжения зависит от соотношения разноименных дислокаций в ансамбле, а, следовательно, от структуры и плотности дислокационного леса; в отличие от случая для неподвижных дислокаций леса, где величина критического напряжения определяется только плотностью дислокационного ансамбля и не зависит от его структуры.

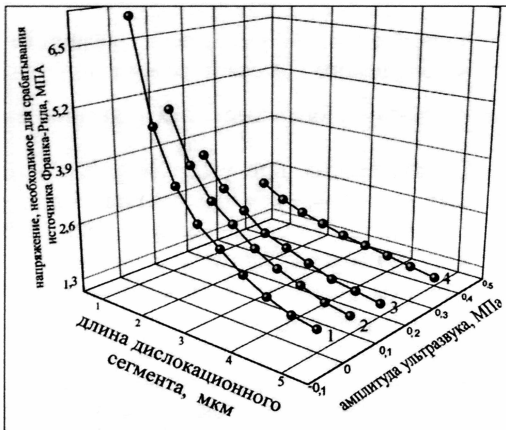


Рис.6. Зависимость напряжения, необходимого для срабатывания источника Франка-Рида от его длины и амплитуды ультразвука с частотой $f=60$ кГц: 1- в отсутствии ультразвука, 2-3 – в присутствии ультразвуковой нагрузки

В третьей части рассматривается моделирование работы источника Франка-Рида в условиях комплексного нагружения. В случае реального эксперимента на скользящую дислокацию воздействуют как постоянная нагрузка, так и ультразвук, а дислокации леса, являющиеся точками закрепления, совершают вынужденные колебания под действием ультразвукового воздействия. Тестовые эксперименты показали, что полученные результаты зависят от соотношения фаз колебаний сегмента и закрепляющих дислокаций леса, а также расстояния между ними.

Зависимость критического напряжения σ_{const} , необходимого для срабатывания источника Франка-Рида, от его длины и амплитуды ультразвука представлена на рис.7.

Анализ результатов моделирования показал, что понижение критического напряжения срабатывания источника прямо пропорционально амплитуде ультразвука в плоскости источника. В данном случае функция $\sigma_{const}(l)$ в рамках относительных погрешностей аппроксимируется логарифмической зависимостью типа $-a \ln(l) + b$ для различных значений амплитуды ультразвука. Анализируя все рассмотренные варианты нагружения, можно сделать вывод, что вероятность срабатывания источника Франка-Рида в реальном кристалле в условиях комплексного нагружения определяется как структурой ансамбля дислокационного леса, а именно процентным соотношением разноименных дислокаций; так и соотношением фаз колебаний закрепляющих дислокаций леса и дислокационного сегмента.

Четвертая часть главы посвящена наглядной демонстрации влияния ультразвука на кристаллы. Была поставлена серия компьютерных экспериментов, визуально отображающих работу источника Франка-Рида в условиях различного нагружения. В рамках данной части все эксперименты проводились применительно к кристаллам NaCl, при воздействии постоянного напряжения равным 1МПа, первоначальная длина дислокационного сегмента – 2 мкм.

На первом этапе исследовалось поведение источника Франка-Рида только под действием постоянной нагрузки. В этом случае дислокационный сегмент под действием постоянного напряжения прогибается и, достигая положения равновесия, прекращает развитие ($R_{max} = 0,14\text{мкм}$). На рис.8 а показаны стадии развития дислокационного сегмента, на рис.8 б – изменение стрелы прогиба – R дислокационного сегмента во времени. Таким образом, как видно из рис. 8, при данных условиях источник Франка-Рида не срабатывает. В другой серии экспериментов было добавлено ультразвуковое воздействие в

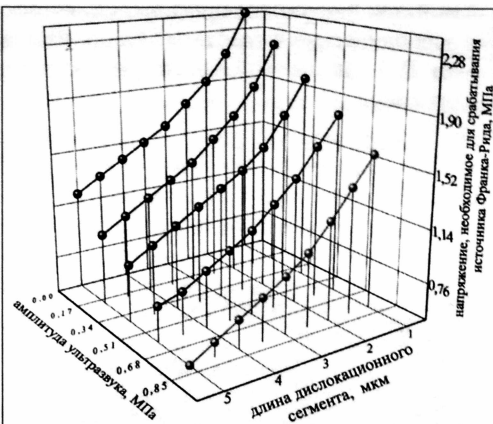


Рис.7. Зависимость критического напряжения σ_{const} (Мпа), необходимого для срабатывания источника Франка-Рида, от длины источника и амплитуды ультразвука, воздействующего на дисл. сегмент

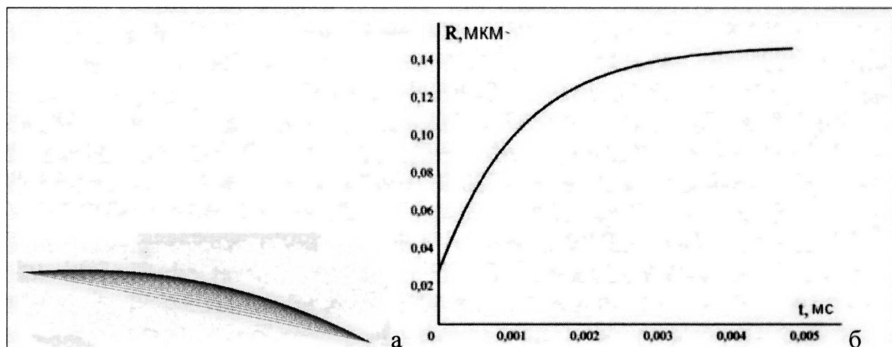
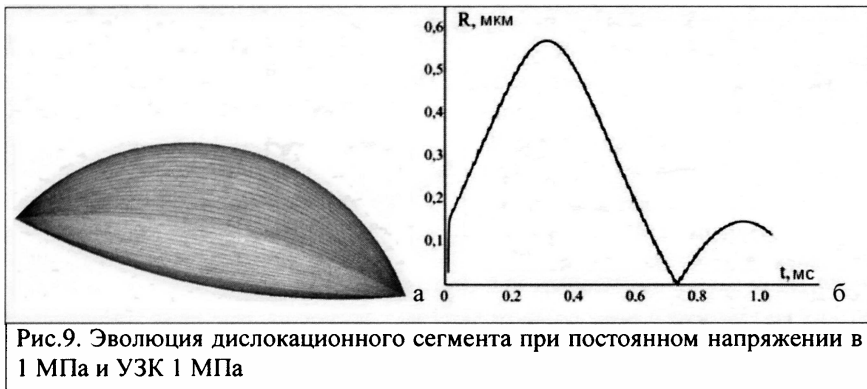


Рис.8. Зависимость критического напряжения σ_{const} (Мпа), необходимого для срабатывания источника Франка-Рида, от длины источника и амплитуды ультразвука, воздействующего на дислокационный сегмент

1 МПа. В этом случае дислокационный сегмент прогибается уже на значительно большее расстояние ($R_{\max} = 0,56 \text{ мкм}$) (рис.9), причем наблюдается как прямой, так и обратные прогибы, т.е. источник начинает совершать вынужденные периодические колебания. Один из периодов таких колебаний показан на рис.9 б, где первый максимум соответствует прямому, а второй — обратному прогибу.



При дальнейшем увеличении величины воздействия ультразвука, закрепленной дислокационный сегмент перестает совершать вынужденные колебания, а раскрывается и образует замкнутую петлю.

В четвертой главе рассмотрено влияние электрического заряда дислокационного сегмента на работу источника Франка-Рида в ионных кристаллах типа NaCl в условиях сложно-нагруженного состояния. Исследована природа возникновения электрического заряда дислокации. Рассмотрен ряд методов, позволяющих определить величину линейной плотности заряда дислокаций. Для исследования влияния заряда дислокационного сегмента на работу источника Франка-Рида, применен феноменологический подход к исследованию электрических характеристик дислокационной петли.

Скользкая дислокация считалась равномерно заряженной с линейной плотностью заряда λ , которую рассчитывали через число f элементарных зарядов e , приходящихся на параметр решетки. Такое предположение о равномерном распределении электрического заряда вдоль линии дислокации является достаточно хорошим приближением и для дискретного распределения носителей заряда на дислокации, если расстояние между точечными зарядами будет меньше среднего расстояния между дислокациями, т.е. $\lambda = ef/b$. Для вычисления электростатического поля (рис.10) заряженной дислокации использовалось аналитическое выражение: $E = \frac{2\pi\sigma}{\epsilon l}$, где l — длина пробега дислокации.

Экспериментально доказано, что уравнения равновесия заряженных дислокаций в плоском скоплении отличаются от уравнений равновесий нейтральных дислокаций только наличием постоянного множителя, что объясняется одинаковой зависимостью упругих напряжений и напряженности электрического поля от расстояния как r^{-1} . Таким образом, становится возможным разработать алгоритм расчета электростатических характеристик работы источника Франка-Рида в условиях комплексного нагружения, согласно расчетной формуле, не изменяя уравнение движения дислокационного сегмента, представленного во второй главе. Кроме того, так как движение дислокационного сегмента дискретно во времени, то допускается использование принципов электростатики. Для расчета величины потенциала и напряженности поля к каждой точке рассматриваемой плоскости целесообразно применить закон Кулона и принцип суперпозиции полей, что позволяет выполнить компьютерное моделирование электростатического поля в окрестности дислокационной петли.

Алгоритмы моделирования реализованы в виде модуля для программного комплекса, позволяющего наблюдать в реальном времени динамическую картину изменения характеристик электростатического поля при образовании дислокационной петли: потенциала, напряженности, линий силового поля. Для детального анализа электростатических и упругих характеристик был разработан модуль анализа, позволяющий получать интересные значения вдоль стрелы прогиба источника Франка-Рида.

На рис.11 показан факт инверсии знака электростатического поля, который подтверждается результатами реальных экспериментов. Смена знака наблюдается еще до достижения предела текучести. После инверсии напряженность электрического поля возрастает, достигая максимального значения на площадке текучести, а затем быстро убывает при дальнейшем нагружении.

Присутствие электрического заряда на дислокациях приводит к росту энергии разрушения и формированию в объеме кристалла электрических полей, напряженность которых может достигать пробойных значений и вызывать разрушение кристалла в областях скопления дислокаций. Именно поэтому важно оценить величины напряженности, для этого разработан модуль визуализации электрических полей.

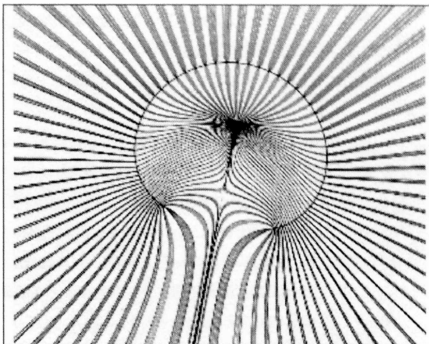


Рис.10. Силовые линии электростатического поля заряженной дислокационной петли

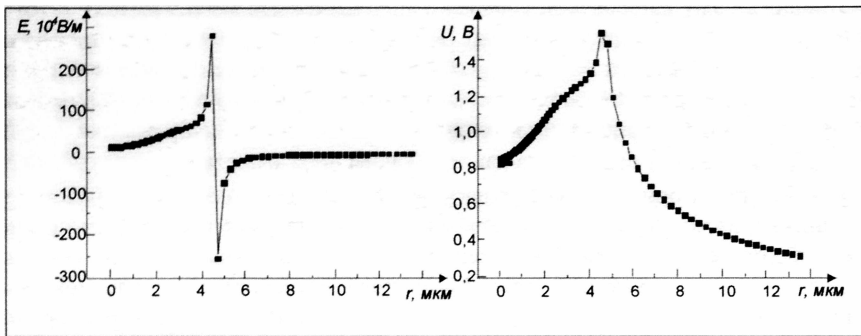


Рис.11. Зависимость напряженности и потенциала вдоль стрелы прогиба источника Франка-Рида: частота УЗК 60 КГц, амплитуда УЗК 2,8МПа, постоянное напряжение 1 МПа, NaCl, первоначальная длина сегмента 2 мкм

Для оценки значений потенциала и напряженности исследовалось их изменение вдоль стрелы прогиба источника. Величина напряженности максимальна при критическом напряжении и составляет величину порядка 10^4 В/м . Если предположить, что источник Франка-Рида сгенерирует определенное количество дислокационных петель, то при определенных условиях, возможно, что величина напряженности поля может сравниться пробойным значением напряженности для атмосферного воздуха, в следствии чего возможен электрический пробой в направлении максимальной густоты линий напряженности электростатического поля.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложено решение уравнения движения скользящей дислокации, закрепленной на дислокациях леса, в условии комплексного нагружения: воздействию постоянной нагрузки и ультразвука, методом конечных разностей.

2. Методами математического моделирования в рамках динамического подхода выполнено исследование работы источника Франка-Рида в кристаллах типа NaCl с заряженными дислокациями, подвергающихся комплексному нагружению. Реализована программная часть, позволяющая изучать работу источника Франка-Рида в условии комплексного нагружения в реальном времени.

3. Оценены критическое напряжение срабатывания источника Франка-Рида и относительная величина эффекта пластификации в зависимости от внутренних и внешних параметров: первоначальной длины сегмента, коэффициента вязкого трения, величины постоянной нагрузки, частоты и амплитуды ультразвука. Анализ числовых результатов показал, что вынужденные колебания дислокаций леса вызывают понижение критического напряжения, необходимого для срабатывания источника Франка-Рида, т.е. происходит понижение предела пластичности образца в ультразвуковом поле.

4. Рассмотрена природа возникновения электрического заряда краевых дислокаций. Предложена феноменологическая модель, описывающая поведение электрического поля заряженной дислокационной петли, генерируемой источником Франка-Рида. Разработан программный комплекс, позволяющий моделировать изменение электрического поля заряженной дислокации.

5. Рассчитаны основные характеристики электрического поля, образованного заряженным дислокационным сегментом. Показано, что значения напряженности электрического поля дислокационной петли могут достигать величин, сравнимых с пробойным значением напряженности для атмосферного воздуха.

Литература:

1. Благовещенский В.В., Тяпунина Н.А. Особенности работы источника Франка-Рида под действием ультразвука // ДАН СССР. 1980. Т. 254, № 4. С. 869-872.
2. Тяпунина Н.А., Наими Е.К., Зиненкова Г.М. Действие ультразвука на кристаллы с дефектами. М.: МГУ, 1999. 238 с.
3. Mott N.F. Imperfections in Nearly Perfect Crystals. New York :Wiley, 1952. 173p.

Материалы диссертации опубликованы в работах:

1. Математические модели движения сегмента краевой дислокации в ультразвуковом поле /А.Е. Потапов [и др.] // Научные технологии. 2012. №2, т.13. С. 31-35.
2. Различные подходы к математическому и компьютерному моделированию эволюции источника Франка-Рида в ультразвуковом поле /А.Е. Потапов [и др.] // Вестник ТГУ им Г.Р. Державина. 2012. Т.17, вып.4. С. 1095-1099.
3. Разработка программной среды параллельных вычислений для моделирования источника Франка-Рида в условиях комплексного нагружения /А.Е. Потапов [и др.] // Физическое материаловедение: Материалы. V Международной школы с элементами научной школы для молодежи. Тольятти, 2011. С.155-156.
4. Исследование эволюции источника Франка-Рида в условиях комплексного нагружения /А.Е. Потапов [и др.] // Фундаментальные и прикладные исследования, разработка и применение высоких технологий в промышленности: Материалы XII Международной научно-практической конференции. СПб., 2011. С. 186-189.
5. Компьютерное моделирование эволюции источника Франка-Рида в ультразвуковом поле /А.Е. Потапов [и др.] // Актуальные проблемы прочности: Материалы LII Международной конференции. Уфа, 2012. С.60.

6. Анализ электрического поля источника Франка-Рида /А.Е. Потапов [и др.] // Физика прочности и пластичности материалов: Материалы XVIII Международной конференции. Самара, 2012. С.120.

7. Влияние параметров ультразвука на работу источника Франка-Рида в кристаллах типа NaCl /А.Е. Потапов [и др.] // Материалы XX Петербургских чтений по проблемам прочности, посвященные памяти профессора В.А. Лихачева. СПб., 2012. Т.1. С.166-168.

8. Повышение эффективности решения уравнения сегмента краевой дислокации /А.Е. Потапов [и др.] // Материалы докладов Первых Московских чтений по проблемам прочности материалов. М., 2009. С.65.

9. Лосев А.Ю., Музыка П.А., Потапов А.Е. Решение уравнения движения сегмента краевой дислокации методом конечных разностей // Материалы XIV Национальной конференции по росту кристаллов. М., 2010. С.158.

10. Лосев А.Ю., Музыка П.А., Потапов А.Е. Моделирование дислокационных петель в ультразвуковом поле // Научные технологии в приборостроении и развитии инновационной деятельности в ВУЗе: Материалы научно-технической конф. Калуга, 2010. С. 80.

У2000617

Потапов А.Е.

Дислокационные процессы в

2000617

ВОЗВРАТИТЕ КНИГУ НЕ ПОЗЖЕ
обозначенного здесь срока

Потапов Андрей Евгеньевич

Дислокационные процессы в щелочно-галогидных кристаллах в условиях
комплексного нагружения

Автореферат на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук

Подписано в печать 19.09.2012г. Формат бумаги 60х90 1/16.
Бумага типографская №2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Тираж 100 экз. Заказ №410.

Отпечатано в типографии ОАО «КТЗ»,
г.Калуга, ул. Московская, 241