

## ПОДХОДЫ К МОДЕЛИРОВАНИЮ ДИНАМИКИ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ

Манухина Д.В., Потапов А.Е., Лосев А.Ю., Супрун И.В.

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана,  
Калужский филиал, Калуга, Россия.  
[dragonflv0516@mail.ru](mailto:dragonflv0516@mail.ru)

При моделировании динамики дислокаций в реальном кристалле, подвергающемся различным внешним воздействиям, возникает вопрос: какой тип модели выбрать? Динамика дислокаций – это очень сложно теоретически описываемый и моделируемый процесс, так как дислокационный ансамбль объединяет в себе черты, присущие разнообразным динамическим системам. Такая сложность объясняется не только высокой плотностью дислокаций в кристалле, их взаимодействием, но и тем фактом, что дислокации – это термодинамически неравновесные дефекты. Более того, дислокации взаимодействуют с другими дефектами кристалла и подвергаются комплексному внешнему воздействию. Можно выделить следующие способы решения данной проблемы [1]:

1. *Реакционно-диффузионная* схема, основанная на аналогии между формированием дислокационных структур и явлениями самоорганизации в химии и биологии.

2. Метод, основанный на *молекулярной динамике*: задается случайное исходное распределение дислокационных сегментов в трехмерном пространстве и численно решаются уравнения их движения, взаимодействия, аннигиляции и размножения в решетке симметрий моделируемого кристалла.

3. *Мезоскопические модели*, где полностью отвлекаются от рассмотрения дислокаций. Моделирование движения дислокационного сегмента через систему стопоров.

В рамках данной работы проводились исследования возможных подходов к математическому и компьютерному моделированию акустопластического эффекта. Данной тематике посвящено достаточно большое количество публикаций, первой из которых была работа А. Формана и М. Мэйкина [2]. Движению дислокаций в ионных кристаллах препятствуют различные дефекты кристаллической решетки – стопоры, которые в свою очередь и определяют пластические свойства кристаллов. Таким образом, изменяя состояние стопоров можно влиять на характеристики пластической деформации. Скользящая дислокация может преодолеть стопор двумя способами: перерезание и огибание (с образованием вокруг стопора дислокационной петли).

В работе [3] исследовалось поведение дислокационных сегментов, которые на концах закреплены сильными (дислокационные узлы) или слабыми (точечные дефекты) центрами. Под действием ультразвука дислокационные сегменты совершают вынужденные колебания. Перераспределение точечных дефектов вдоль линии колеблющейся дислокации сопровождается увеличением эффективной длины,  $l_{эфф}$  сегментов, служащих источниками дислокаций, что на макроскопическом уровне приводит к понижению критического напряжения начала пластической деформации. Авторы приходят к выводу, что в данном случае причиной акустопластического эффекта является рост эффективной длины колеблющихся дислокационных сегментов и источников дислокаций.

Анализ литературных данных показал, что присутствие ансамблей дислокаций леса в реальных кристаллах, приводит к упрочнению материалов, что исследовалось в работах А.А. Предводителяева и Б.М. Логинова [4]. Однако, если дислокации леса будут совершать вынужденные колебания под воздействием УЗК, то мы будем наблюдать противоположный эффект [5]. Поэтому следует также рассмотреть немаловажный механизм акустопластического эффекта, связанный с особенностями преодоления скользящей дислокации площадки с ансамблем колеблющихся дислокаций леса.

В литературе в основном рассматривалась ситуация, при которой кристалл находился в сложно нагруженном состоянии: на дислокации леса действует гармонически изменяющаяся во времени составляющая нагрузки, а на скользящую дислокацию действует только постоянная нагрузка. Задача заключается в определении величины критического напряжения, при котором скользящая дислокация преодолевает модельную площадку.

Для решения данной задачи можно выделить два подхода: *квазистатический* и *динамический*.

При моделировании эволюции дислокационного сегмента *квазистатическим методом* используются уравнения равновесных конфигураций дислокационных сегментов в рамках заданных параметров [4]. Для каждой точки скользящей дислокации с координатами  $(x, y)$  в каждый момент времени должно выполняться условие:

$$0,5Gb^2\phi(x, y; t) = b\left[\tau^{00} + \sum_{(x, y) \in D} \hat{\tau}_j(x, y; x, y, t)\right] \quad (1)$$

где  $\phi$  – локальная кривизна скользящей дислокации;  $\hat{\tau}_j$  – напряжение, обусловленное  $j$ -ой дислокацией леса;  $D$  – область суммирования, удовлетворяющая критерию А.А. Предводителяева, И.В. Стратана:  $\sqrt{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2} \leq (5 + 7)\lambda$ .

При решении поставленной задачи таким методом, возникает ряд существенных трудностей:

1) Наличие особых точек в местах пересечения плоскости скольжения пробной дислокации с дислокациями леса.

2) Учет действия большого числа дислокаций леса. При решении задачи о движении пробной дислокации через дислокационный лес в каждой точке плоскости скольжения пробной дислокации рассматривалось действие примерно  $10^3$  дислокаций леса.

3) При нахождении равновесного состояния скользящей дислокации при данном уровне внешнего напряжения сдвига, необходимо осуществлять контроль за выполнением соотношения (1) в каждый момент времени в течение всего периода колебаний дислокаций леса.

Кроме того, квазистатическая модель обладает рядом недостатков, так как ее применение к решению задачи, связанной с влиянием ультразвука на движение пробной дислокацией сквозь модельную площадку, может дать только качественный результат. Поэтому для исследования влияния ультразвука на процесс движения скользящей дислокации сквозь ансамбль колеблющихся дислокаций леса, в результате воздействия УЗК, рациональнее использовать динамические уравнения движения дислокаций.

Такой подход впервые был использован в работах Нациком и Чишко [6] при исследовании процесса акустической эмиссии. В [7] В.В. Благовещенский исследовал динамику дислокаций под воздействием внешней гармонической нагрузки, автор адаптировал уравнения, полученные в [6] для своей задачи. Решение аналогичной проблемы, было развито в работах [8]. В рассматриваемом подходе уравнение движения берется в виде:

$$ma = F_s + F_v + F_{ex} + F_m + F_u \quad (2)$$

где  $F_s = -\frac{Gb^2}{2R}$  – сила самодействия в приближении линейного натяжения;  $F_v = Bv = B\partial u / \partial t$

– сила вязкого трения;  $F_{ex} = \begin{cases} b\sigma \\ b\sigma^0 \sin \omega t \end{cases}$  – сила, обусловленная внешней нагрузкой;

$F_m(x, y) = \frac{Gb^2}{4\pi} y \left\{ \frac{x + l/2}{((x + l/2)^2 + y^2)^{3/2}} - \frac{x - l/2}{((x - l/2)^2 + y^2)^{3/2}} \right\}$  – сила, обусловленная дей-

ствием лесных дислокаций на сегмент.  $x, y$  – координаты точки сегмента в которой рассчитывается значение силы;  $F_u = b\sigma_u \text{sign}(F_u + F_{ex} + F_m)$  – сила, обусловленная стартовым напряжением;  $ma$  – инерционный член.

Решение уравнения (2) позволяет по конфигурации дислокации в момент времени  $\tau_0$  вычислить конфигурацию в момент времени  $\tau_0 + \delta\tau$  (рис. 1).

На рис. 1 изображены две последовательные конфигурации дислокационного сегмента для моментов времени  $\tau_0$  и  $\tau_0 + \delta\tau$ . Для получения конфигурации сегмента для момента времени  $\tau_0 + \delta\tau$  по конфигурации для момента  $\tau_0$  для всех точек, образующих сегмент, и находится смещение  $u(\lambda, \delta\tau)$ , направленное перпендикулярно касательной к сегменту.

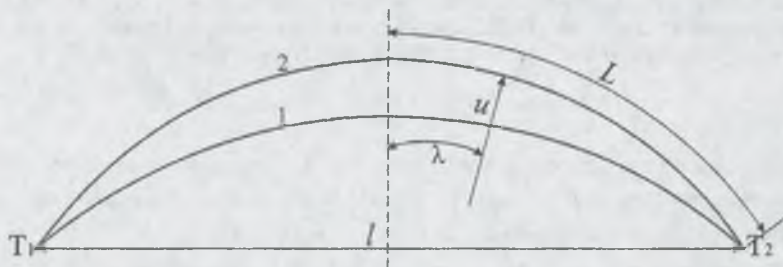


Рис. 1. Схема последовательных конфигураций дислокационного сегмента в моменты времени  $\tau_0$  (1) и  $\tau_0 + \delta\tau$  (2)

#### Список литературы

1. Кристалл, М. М. Общая теория неустойчивости и мезоскопической неоднородности пластической деформации. Известия РАН. Серия физическая. 2004. Т. 68, N 10. С. 1391-1402.
2. Foreman A.J.E., Makin M.J. Dislocation movement-through random array of obstacles. Canadian journal of physics. 1967, Vol. 45, № 2, p. 511.
3. Леготин Д.Л., Бубновская О.В., Тяпунина Н.А. Моделирование поведения дислокационных петель в неоднородных полях. Вестник Моск. ун-та. Сер.3. Физика. Астрономия. 1996 г., № 1, С. 58-64.
4. Логинов Б.М., Предводителев А.А. Моделирование движения дислокаций через лес гибких дислокаций. Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах. 1981 г., № 2, С. 53-55.
5. Логинов Б.М., Дегтярев В.Т., Тяпунина Н.А. Моделирование скольжения дислокаций через дислокационный лес колеблющихся дислокаций в кристаллах с ГПУ структурой. Кристаллография. 1987 г., Т. 32, № 4, С. 967-971.
6. Нацки В.Д., Чижко К.А. Динамика и звуковое излучение дислокационного источника Франка-Рида. Харьков : Препринт, ФТИНТ АН УССР, 1976.
7. Благовещенский В.В. Особенности размножения дислокаций и образования полос скольжения под действием ультразвука: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. : МГУ, 1982. 16 с.
8. Дегтярев В.Т., Пантохов Г.П., Лосев А.Ю., Музыка П.А., Потапов А.Е. Математические модели движения сегмента краевой дислокации в ультразвуковом поле. Научные технологии. №2, 2012, Т.13. С. 31-34.