

Поперечное скольжение дислокации в ультразвуковом поле и влияние на этот процесс амплитуды и частоты ультразвука, ориентации образца и коэффициента динамической вязкости

© Н.А. Тяпунина, Г.В. Бушуева, М.И. Силис, Д.С. Подсобляев, Ю.Б. Лихущин, В.Ю. Богуненко

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119899 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 16 июля 2002 г.)

Методом ЭВМ моделирования исследованы особенности движения под действием ультразвука винтовой дислокации с учетом ее поперечного скольжения в неоднородном по пространству поле напряжений, создаваемом одноименной неподвижной дислокацией. Показано, что поперечное скольжение могут испытывать только дислокации, стартующие из определенных областей пространства. Приведены закономерности изменения размера и формы этих областей от параметров ультразвука, кристаллографической ориентации образца и коэффициента динамической вязкости.

Известно, что процесс поперечного скольжения играет важную роль в развитии пластической деформации кристаллов. Особое значение поперечное скольжение приобретает при действии на кристалл знакопеременной нагрузки, в том числе ультразвука (УЗ); в [1] убедительно показано, что в отсутствие поперечного скольжения не может под действием УЗ происходить наблюдаемого в эксперименте увеличения плотности дислокаций на 3–4 порядка.

Физически наиболее обоснованной причиной поперечного скольжения являются поля напряжений, встречающиеся на пути движения дислокаций и имеющие скальвающие компоненты в плоскости поперечного скольжения. В реальных кристаллах источниками таких полей являются дислокации и их ансамбли.

Цель настоящей работы — исследование методом ЭВМ моделирования особенности поперечного скольжения дислокации под действием УЗ в присутствии постоянной во времени, но неоднородной по пространству составляющей упругого поля, а также влияния на этот процесс амплитуды и частоты УЗ, кристаллографической ориентации образца и коэффициента динамической вязкости. Особенности процесса движения дислокации в подобных условиях оказалось возможным выяснить на примере движения винтовой дислокации под действием УЗ в поле одноименной неподвижной винтовой дислокации.

1. Модель и алгоритм

Рассмотрение движения винтовой дислокации с учетом поперечного скольжения проводилось на примере кристаллов NaCl. Плоскостью легкого скольжения являлась плоскость (011), а плоскостью поперечного скольжения — (100), как показано на рис. 1, *a*.

Дислокации считались прямолинейными, бесконечными, параллельными оси [011]. Взаимное расположение дислокаций удобно рассмотреть в проекции на плоскость (011) — плоскость xu на рис. 1, *b*. Положение

каждой из дислокаций характеризуется точкой с координатами (x, y) . Задающая жестко закрепленная дислокация 1 располагается по оси z . Пробная дислокация 2, одноименная с задающей, параллельна оси z и может перемещаться в плоскостях xz легкого скольжения и ортогональных им плоскостях yz поперечного скольжения, следы которых показаны на рис. 1, *b* штриховыми линиями. Кристалл подвергался УЗ деформации растяжения-сжатия вдоль оси $d-d$, лежащей в плоскости (001) под углом θ к оси четвертого порядка [010] (рис. 1, *a*).

Траектория дислокации 2 определяется из уравнения вязкого движения

$$B\mathbf{V} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_3, \quad (1)$$

где \mathbf{V} — скорость дислокации; B — коэффициент динамической вязкости; $F_1 = m\sigma b$ — сила, действующая на дислокацию и обусловленная внешней нагрузкой (b — модуль вектора Бюргера, σ — напряжение, изменяющееся во времени по гармоническому закону, m — соответствующий фактор Шмида); $F_2 = b\tau^{\text{st}}$ — сила типа максимальной силы сухого трения (τ^{st} — пороговое напряжение, при достижении которого дислокация начинает двигаться); $F_3 = b\tau$ — сила, обусловленная неоднородным по пространству полем внутренних напряжений τ , возникающая из-за взаимодействия дислокаций друг с другом [2].

В выбранной системе координат (рис. 1, *b*) уравнение движения (1) пробной дислокации в основной xz и поперечной yz плоскостях скольжения переписется в виде

$$\begin{aligned} V_x &= dx/dt = (b/B)\tau_1^{\text{eff}}, \\ V_y &= dy/dt = (b/B)\tau_2^{\text{eff}}, \end{aligned} \quad (2)$$

где τ_i^{eff} — эффективные скальвающие напряжения, действующие в основной ($i = 1$) и поперечной ($i = 2$) плоскостях скольжения и равные $\tau_i^{\text{eff}} = (m_i\sigma + \tau_i) - \tau_i^{\text{st}} \text{sign}(m_i\sigma + \tau_i)$, $\tau_1 = kx/(x^2 + y^2)$, $\tau_2 = ky/(x^2 + y^2)$, $m_1 = (\cos^2 \theta)/2$, $m_2 = -(\sin 2\theta)/(2\sqrt{2})$, $k = Gb/2\pi$,

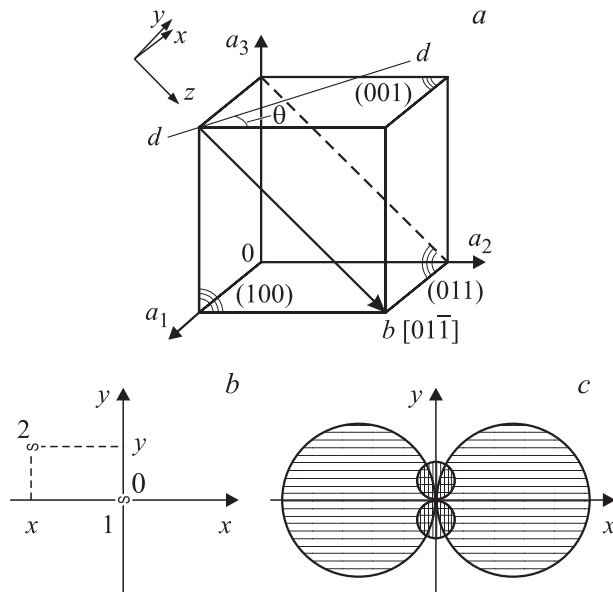


Рис. 1. Плоскости легкого (011) и поперечного (100) скольжения в кристалле NaCl (a); схема расположения выходов дислокаций на плоскость (011) (b); области, в которых пробная дислокация в отсутствие УЗ находиться не может (c).

G — модуль сдвига, $\sigma = \sigma^0 \sin 2\pi f t$, где σ^0 и f — амплитуда и частота УЗ, t — время.

Переход прямолинейной винтовой дислокации из плоскости легкого в плоскость поперечного скольжения и из плоскости поперечного в плоскость легкого скольжения определяется соотношением компонент эффективных скальвающих напряжений, действующих в этих плоскостях [3].

Условие перехода определяется следующей системой неравенств:

$$|m_1 \sigma + \tau_1| - \tau_1^{st} > 0, \tag{3}$$

$$|m_2 \sigma + \tau_2| - \tau_2^{st} > 0, \tag{4}$$

$$|\tau_1^{eff}| > |\tau_2^{eff}|, \tag{5}$$

$$|\tau_2^{eff}| > |\tau_1^{eff}|. \tag{6}$$

При выполнении условия (3) или (4) дислокация может начать движение по соответствующей плоскости скольжения, поскольку сила, действующая на дислокацию, превышает силу типа силы сухого трения. При выполнении этих двух условий дислокация должна двигаться в плоскости легкого скольжения, если выполняется неравенство (5), и в плоскости поперечного скольжения при выполнении (6).

По мере своего движения в неоднородном по пространству поле напряжения, а также при изменяющейся во времени внешней нагрузке дислокация, движущаяся в плоскости легкого скольжения, может выйти в плоскость поперечного скольжения, а затем из плоскости поперечного скольжения вновь вернуться в плоскость легкого скольжения, параллельную исходной. Расстояние между

начальной и конечной плоскостями легкого скольжения будем называть высотой выброса.

Между задающей и пробной дислокациями действуют силы отталкивания. В отсутствие внешнего поля из-за наличия сил трения дислокация остается неподвижной в поле задающей, если она располагается в области, где

$$|\tau_1| \leq \tau_1^{st} \quad \text{и} \quad |\tau_2| \leq \tau_2^{st}, \tag{7}$$

т.е. вне кругов с радиусами $r_1 = k/2\tau_1^{st}$ и $r_2 = k/2\tau_2^{st}$, отмеченных соответственно горизонтальной и вертикальной штриховкой на рис. 1, c. Именно в этих областях дислокация может стационарно находиться в реальном кристалле в отсутствие внешней нагрузки.

При моделировании использовался следующий алгоритм. Пусть в момент времени t пробная дислокация находится в точке с координатами (x, y) , где в плоскостях легкого и поперечного скольжения действуют эффективные скальвающие напряжения τ_1^{eff} и τ_2^{eff} соответственно. Сравнивая величины $|\tau_1^{eff}|$ и $|\tau_2^{eff}|$, находим большую и тем самым определяем плоскость, в которой будет двигаться дислокация. Величину перемещений Δx или Δy за промежуток времени Δt получаем из уравнений вязкого движения (2). Тогда в момент времени $t + \Delta t$ пробная дислокация будет находиться в точке с координатами $(x + \Delta x, y)$, либо $(x, y + \Delta y)$. Данная процедура повторяется на каждом шаге по времени. В результате получаем траекторию движения пробной дислокации.

Поскольку от величины временного интервала Δt зависит величина перемещения дислокации Δx (или Δy), а следовательно, и форма траектории ее движения, при моделировании выбирался такой шаг по времени Δt^* , чтобы при $\Delta t < \Delta t^*$ форма траектории существенно не менялась, что выполняется, если на каждом шаге по времени Δx и Δy не превышают $2 \cdot 10^{-8}$ м.

Совокупное действие внешней нагрузки и внутреннего напряжения оказывается идентичным для дислокации, начинающей свое перемещение слева направо в положительный полупериод действия УЗ, и для дислокации, начинающей свое движение справа налево в отрицательный полупериод УЗ. Поэтому решение задачи достаточно получить лишь для одного из этих вариантов.

Рассматривается случай, когда старт подобной дислокации происходит в положительный полупериод УЗ из любой точки пространства, для которой выполняются условия (7).

Расчеты проводились при значениях $G = 1.8 \cdot 10^{10}$ Па, $b = 3.99 \cdot 10^{-10}$ м, $\tau_1^{st} = 0.3$ МПа, $\tau_2^{st} = 1.5$ МПа, отвечающих кристаллу NaCl [4].

Моделирование показало, что на характер движения дислокации оказывают влияние амплитуда и частота УЗ, кристаллографическая ориентация образца, а также коэффициент динамической вязкости. Поэтому при моделировании значения σ^0 , f , θ и B варьировались.

В силу симметрии задачи оказалось достаточным рассмотреть интервал углов $0 \leq \theta \leq 90^\circ$. В соответствии

с реальными экспериментами частоту УЗ воздействия изменяли в диапазоне от 40 до 100 kHz; верхний предел амплитуд УЗ ($\sigma^0 = 12.5$ МПа) выбирался так, чтобы он был меньше напряжения, необходимого для размножения дислокаций [5]. В соответствии с экспериментально полученными данными [6] коэффициент вязкости варьировался от 0.021 до 0.1 мПа · с. Варьирование этого коэффициента представляет и самостоятельный интерес, так как для конкретного кристалла (с данными примесями) B является единственным параметром, который меняется с изменением температуры.

2. Результаты и их обсуждение

При знакопеременной нагрузке важную роль приобретает фактор времени. Какие пары из неравенств (3)–(6) будут удовлетворяться в рассматриваемый момент времени, зависит и от координат скользящей дислокации, и от фазы УЗ колебаний. Образно говоря, для того чтобы реализовать поперечное скольжение, движущаяся дислокация должна попасть в нужное место поля задающей в нужное время.

Дислокация, стартуя из произвольной точки пространства по плоскости легкого скольжения, может не попасть в нужное время в место, где возможен переход в плоскость поперечного скольжения. Таким образом, стартуя из одних областей пространства, дислокация будет претерпевать поперечное скольжение, а стартуя из других, — не будет. При этом тип траектории пробной дислокации зависит от стартовых координат дислокации (x_0, y_0). Поэтому по типам траекторий все пространство делится на ряд областей. Далее будем называть их стартовыми.

Схема возможного расположения стартовых областей представлена на рис. 2. В заштрихованной области в начальный момент времени (когда $\sigma = 0$) дислокация находится не может, поскольку для нее не выполняются условия (7). А следовательно, эта область исключается из рассмотрения. Если дислокация попадает в какую-либо стартовую область в конце очередного периода УЗ (nT , где $n = 1, 2, \dots$), дальнейшее ее движение будет аналогичным тому, как если бы она стартовала из этой области. Поэтому для полного описания траектории движения достаточно рассмотреть только первый период УЗ.

Если дислокация стартует из областей A_i (рис. 2), она не будет испытывать поперечного скольжения и при своем движении всегда останется в первоначальной плоскости легкого скольжения. Ее движение можно описать суперпозицией колебательного движения и дрейфа, т.е. относительно медленного направленного перемещения, обусловленного полем задающей дислокации, налагающегося на ее колебательное движение. При этом наличие сил типа сил сухого трения приводит к тому, что в определенные интервалы времени дислокация остается неподвижной.

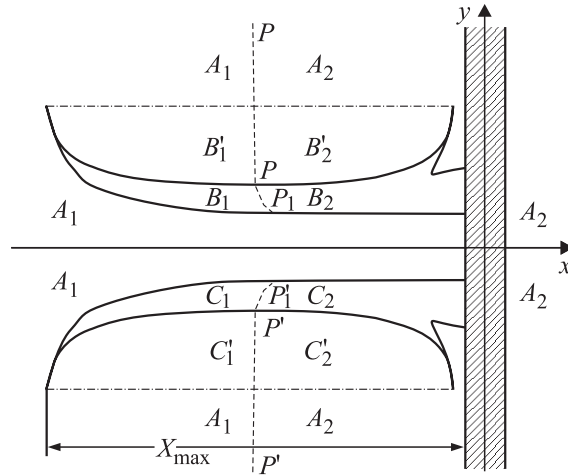


Рис. 2. Схема возможного расположения стартовых областей.

Стартуя из области A_1 , дислокация с течением времени дрейфует в сторону уменьшения x ; можно сказать, что в этом случае дислокация „отбрасывается“ полем задающей дислокации. Начиная движение из области A_2 , она с течением времени дрейфует в сторону увеличения x . При этом область A_2 можно подразделить на две части. При старте из той области, для которой начальная координата $x_0 < 0$, дислокация преодолевает поле задающей, а при старте из части, для которой начальная координата $x_0 \geq 0$, — „отбрасывается“ им.

Дислокация, располагающаяся в начальный момент времени в областях B_i, C_i, B'_i, C'_i , где $i = 1, 2$, при своем движении испытывает поперечное скольжение. Если она стартует из областей B_i и B'_i , поперечное скольжение направлено в сторону возрастания y , а при старте из областей C_i и C'_i — в сторону убывания y .

Если в момент времени $t = 0$ пробная дислокация находится в областях B_1 или B_2 , то при своем движении она испытывает поперечное скольжение уже в первый период УЗ. В результате поперечного скольжения дислокация из области B_1 может в конце периода УЗ оказаться либо в области B_1 , либо в области B'_1 , а при старте из области B_2 — либо в A_2 , либо в B'_2 . Если дислокация в результате поперечного скольжения в конце периода оказывается в областях A_1 или A_2 , то дальнейшее ее движение будет происходить только по основной плоскости скольжения с постепенным дрейфом в направлении уменьшения или увеличения x соответственно.

При попадании дислокации в концы периода УЗ в области B'_1 или B'_2 дислокация будет дрейфовать в течение одного или более периодов по основной плоскости скольжения, пока не достигнет области B_1 или B_2 в конце какого-либо периода УЗ. После чего дислокация опять испытает поперечное скольжение. Этот процесс будет повторяться до тех пор, пока в результате многократного поперечного скольжения дислокация к окончанию какого-либо периода УЗ не окажется в областях A_1 или A_2 .

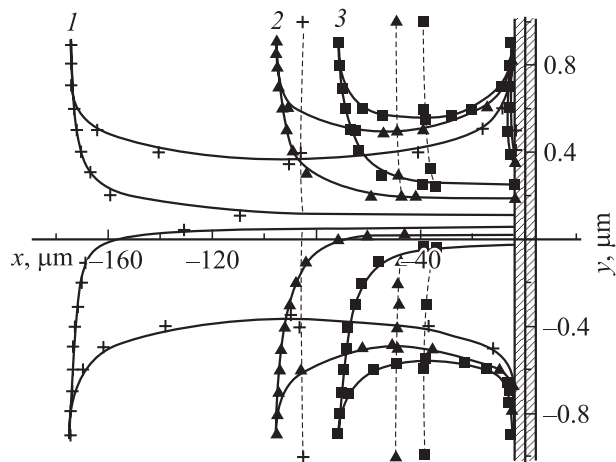


Рис. 3. Области старта пробной дислокации при $\theta = 20^\circ$, $f = 60 \text{ kHz}$, $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ и различных значениях амплитуды УЗ: 1 — $\sigma^0 = 12.5$, 2 — 7.5, 3 — 6.0 МПа.

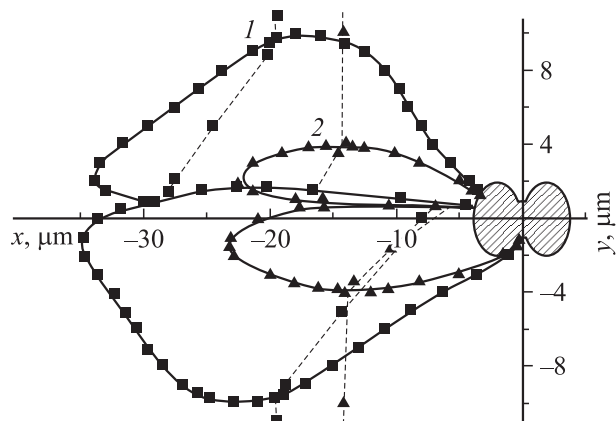


Рис. 4. Области старта пробной дислокации при $\theta = 50^\circ$, $f = 60 \text{ kHz}$, $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ и различных значениях амплитуды УЗ: 1 — $\sigma^0 = 7.5$, 2 — 6.0 МПа.

При старте из областей B'_1 или B'_2 дислокация будет дрейфовать по плоскостям легкого скольжения в сторону уменьшения x или в сторону увеличения x соответственно, пока она в конце очередного периода не окажется в области B_1 , либо в области B_2 .

При старте дислокации из областей C_i и C'_i ее поведение аналогично тому, что имеет место при старте из областей B_i и B'_i , только поперечное скольжение направлено в сторону убывания y .

Штриховая линия, отделяющая на рис. 2 области старта с индексом 1 от областей с индексом 2, является проекцией на плоскость рисунка особой поверхности. Стартуя с ее участков $P-P$ и $P'-P'$, дислокация в конце каждого периода возвращается в свое начальное положение, т.е. испытывает периодическое движение; дрейф отсутствует. Стартуя с участков $P-P_1$ и $P'-P'_1$ поверхности, дислокация в результате поперечного скольжения в конце первого периода УЗ попадает на участок $P-P$

или $P'-P'$ соответственно, а затем испытывает периодическое движение, как описано выше. Эта поверхность в дальнейшем будет называться „поверхностью захвата“.

Форма и размер стартовых областей, начиная движение из которых дислокация может испытать поперечное скольжение, зависят от параметров УЗ, коэффициента динамической вязкости и кристаллографической ориентации образца.

Для заданных f и B размер и форма этих областей старта зависят от σ^0 и θ .

Примеры областей старта для различных значений θ и σ^0 при $f = 60 \text{ kHz}$ и $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ представлены на рис. 3, 4. Видно, что для $\theta < 35.3^\circ$ (рис. 3) и $\theta > 35.3^\circ$ (рис. 4) форма областей существенно различна (угол $\theta = 35.3^\circ$ соответствует случаю, когда $|m_1| = |m_2|$). С ростом σ^0 области старта увеличиваются по площади. При этом для $\theta < 35.3^\circ$ они расширяются преимущественно вдоль оси x , а для углов $\theta > 35.3^\circ$ —

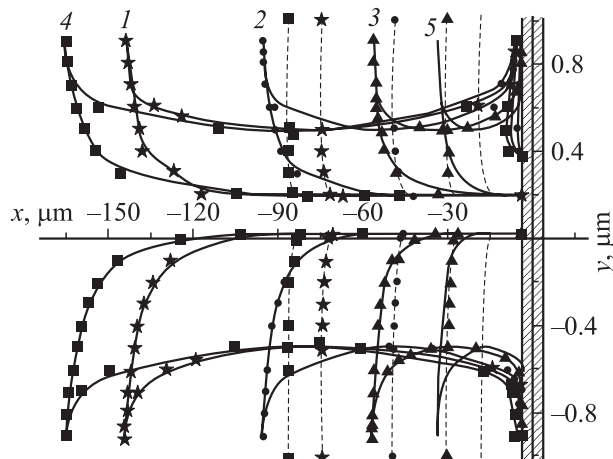


Рис. 5. Форма и размер стартовых областей для $\sigma^0 = 7.5 \text{ МПа}$ и $\theta = 20^\circ$ при различных f и B : 1 — $f = 40 \text{ kHz}$, $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; 2 — $f = 60 \text{ kHz}$, $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; 3 — $f = 100 \text{ kHz}$, $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; 4 — $f = 100 \text{ kHz}$, $B = 0.021 \text{ mPa} \cdot \text{s}$; 5 — $f = 100 \text{ kHz}$, $B = 0.1 \text{ mPa} \cdot \text{s}$.

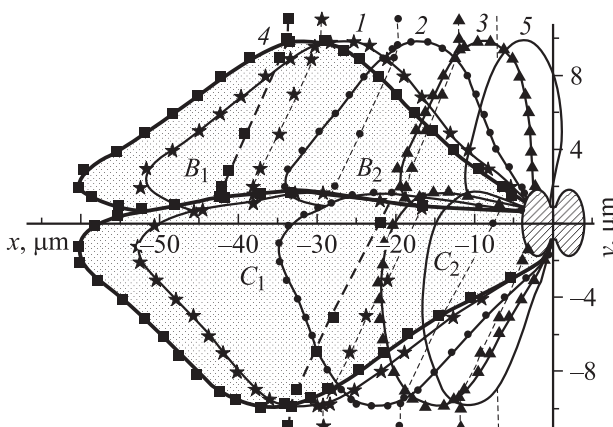


Рис. 6. Форма и размер стартовых областей для $\sigma^0 = 7.5 \text{ МПа}$ и $\theta = 50^\circ$ при тех же значениях f и B , что и на рис. 5.

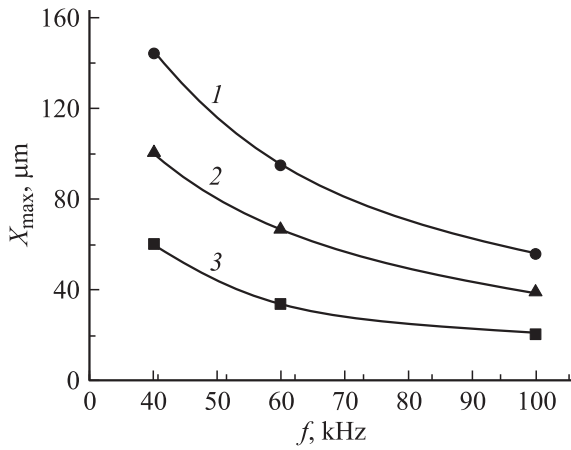


Рис. 7. Зависимости протяженности X_{\max} областей старта от частоты f УЗ при $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$, $\sigma^0 = 7.5 \text{ MPa}$: 1 — $\theta = 20^\circ$; 2 — 35.3° , 3 — 50° .

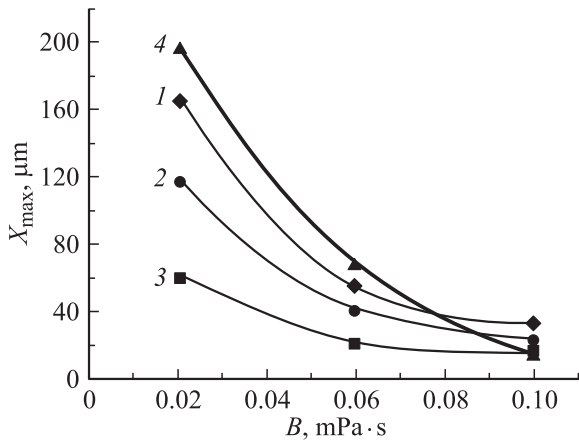


Рис. 8. Зависимости протяженности X_{\max} областей старта от коэффициента динамической вязкости B при $\sigma^0 = 7.5 \text{ MPa}$: 1 — $f = 100 \text{ kHz}$, $\theta = 20^\circ$; 2 — $f = 100 \text{ kHz}$, $\theta = 35.3^\circ$; 3 — $f = 100 \text{ kHz}$, $\theta = 50^\circ$; 4 — $f = 60 \text{ kHz}$, $\theta = 35.3^\circ$.

и вдоль оси x , и вдоль оси y . По мере увеличения σ^0 уменьшается расстояние между областями B_i и C_i и происходит сдвиг „поверхности захвата“ в область меньших значений x . Если же при постоянной амплитуде УЗ мы увеличиваем угол θ , „поверхность захвата“ сдвигается в область больших значений x .

Было установлено, что закономерности изменения формы и размера стартовых областей при изменении f и B при различных σ^0 и θ подобны.

Проиллюстрируем влияние f и B на форму и размер стартовых областей на примере, когда $\sigma^0 = 7.5 \text{ MPa}$ для двух углов θ (20° и 50°), один из которых меньше, а другой больше 35.3° (рис. 5, 6).

Стартовые области для $\theta = 20^\circ$ и $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ при различных значениях f приведены на рис. 5 (кривые 1–3). Видно, что меняется только протяженность (X_{\max} на рис. 2) этих областей вдоль оси x . Наибольший размер этих областей вдоль оси y остается при этом

неизменным. Аналогичные стартовые области для угла $\theta = 50^\circ$ представлены на рис. 6. Видно, что форма областей другая, а закономерность ее изменения при изменении f аналогична описанной выше для $\theta = 20^\circ$. В обоих случаях размер областей с увеличением f уменьшается за счет уменьшения протяженности вдоль оси x .

Зависимость X_{\max} от частоты УЗ для различных углов θ (при $B = 0.06 \text{ mPa} \cdot \text{s}$) представлена на рис. 7. Видно, что изменение X_{\max} , а следовательно и размера областей, происходит не по линейному закону.

Стартовые области для $\theta = 20^\circ$ и 50° при $f = 100 \text{ kHz}$ и различных B представлены кривыми 3–5 на рис. 5 и 6. Видно, что для обоих углов меняется также только протяженность областей вдоль оси x . Размер областей с увеличением B уменьшается.

Зависимости X_{\max} от B при $f = 100 \text{ kHz}$ для $\theta = 20^\circ$, 35.3° и 50° представлены на рис. 8 (кривые 1–3 соответственно). На этом же рисунке приведена зависимость X_{\max} от B для $\theta = 35.3^\circ$ и $f = 60 \text{ kHz}$ (кривая 4). Видно, что изменение размера областей при изменении B происходит не по линейному закону, как и при изменении f (рис. 7). Сравнивая кривые 2 и 4 на рис. 8, можно заключить, что с уменьшением f зависимость X_{\max} от B становится более резкой.

При уменьшении f и B происходит сдвиг „поверхности захвата“ в область меньших значений x . Для углов $\theta < 35.3^\circ$ (рис. 5) при различных значениях f и B соотношение размеров пар областей B_1 и B_2 , B'_1 и B'_2 , C_1 и C_2 , C'_1 и C'_2 сохраняется примерно одинаковым. Для $\theta > 35.3^\circ$ (рис. 6) соотношение площадей пар областей B_1 и B_2 , C_1 и C_2 при увеличении f и B меняется в пользу областей B_1 и C_2 вплоть до практически полного исчезновения областей B_2 и C_1 (кривая 5 на рис. 6). Также в этом случае при увеличении f и B наблюдается небольшой рост размеров областей B'_1 и C'_2 . На рис. 6 обозначения областей B_1 и C_1 указаны только для $f = 100 \text{ kHz}$ и $B = 0.021 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ (тонирующая область).

ЭВМ моделирование позволило не только определить типы траекторий пробной дислокации, стартовой из различных областей пространства, но и получить сведения о временных характеристиках процесса поперечного скольжения и высоте выброса. Установлено, что в УЗ поле дислокации может испытывать как однократное, так многократное поперечное скольжение.

Расчеты показали, что величина и направление выбросов зависят от σ^0 , f , θ , B и от стартовых координат пробной дислокации. Детально зависимости высоты выброса от σ^0 , f , θ , B и от стартовых координат пробной дислокации будут рассмотрены в следующей статье.

Таким образом, предложенный в настоящей работе алгоритм и разработанный для этой цели пакет программ позволяют достаточно полно охарактеризовать процесс поперечного скольжения.

Использованная модель дает возможность определить области, стартуя из которых, дислокация может испытать поперечное скольжение, и области, стартуя

из которых, она будет двигаться только по плоскости легкого скольжения. Найдены зависимости формы и размера этих областей от параметров УЗ, кристаллографической ориентации образца и коэффициента динамической вязкости. Установлено, что в УЗ поле дислокация может испытывать как однократное, так и многократное поперечное скольжение.

Список литературы

- [1] Н.А. Тяпунина, В.В. Благовещенский, Г.М. Зиненкова, Ю.А. Ивашкин. Изв. вузов. Физика 6, 118 (1982).
- [2] Д. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 599 с.
- [3] С.И. Игонин, А.А. Предводителев. Вестн. МГУ. Сер. 3, физика, астрономия 5, 588 (1975).
- [4] Г.И. Ничуговский, В.И. Веселов, Г.В. Бушуева. Изв. вузов. Физика 12, 68 (1988).
- [5] Н.А. Тяпунина, Е.К. Наими, Г.М. Зиненкова. Действие ультразвука на кристаллы с дефектами. Изд-во МГУ, М. (1999). 238 с.
- [6] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. УФН 115, 1, 3 (1975).