

01;05;08

©1994 г.

## ПОВЕДЕНИЕ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ В УЛЬТРАЗВУКОВОМ ПОЛЕ

*И.Н.Кульган, Н.А.Тяпунина*

Методом ЭВМ — моделирования анализируется поведение дислокационных петель в ультразвуковом поле при постоянной нагрузке и при совместном действии постоянной и знакопеременной нагрузок. Показано, что дислокационные петли под действием ультразвука, начиная с некоторой пороговой амплитуды, с неизбежностью аннигилируют. Время жизни петли в ультразвуковом поле зависит от их начального радиуса и параметров УЗ. При заданном постоянном поле напряжений в стационарном состоянии находятся петли с радиусами в определенном интервале. При совместном действии УЗ и постоянной нагрузки последнее играет стабилизирующую роль по отношению к петлям малого радиуса и создает благоприятные условия для расширения петель.

### Введение

Дислокационные петли относятся к числу хакактерных элементов дефектной структуры кристаллов. Петли появляются при гетерогенном зарождении и размножении дислокаций в результате различного рода воздействий, таких как закалка, облучение проникающим излучением, под действием ультразвука и ударных нагрузок и т.д. [1-3].

Эволюция дислокационной структуры в кристаллах под действием ультразвука исследовалась как экспериментально, так и ЭВМ моделированием. Рассматривались процессы размножения дислокаций, образования диполей и мультиполей, полигональных границ [4-10]. Однако эволюция дислокационных петель под действием ультразвука, насколько нам известно, изучалась только в [11]. Дислокационные петли размером 4-30 мкм вводились в LiF путем прокатывания по поверхности кристалла металлического шарика. Было установлено, что в результате действия УЗ с частотой 70 кГц и амплитудой, достигавшей  $1.5 \text{ кГ/мм}^2$ , петли радиусом  $R < 17 \text{ мкм}$  аннигилировали, а с  $R > 17 \text{ мкм}$  расширялись. Изменения в дислокационной структуре определялись по результатам двухкратного избирательного травления до и после действия ультразвука [11].

Представлялось интересным изучить поведение дислокационных петель в процессе воздействия ультразвука. Для этих целей в данной работе был применен метод ЭВМ моделирования.

## Модель и алгоритм

Методом ЭВМ моделирования рассмотрены статика и динамика дислокационных петель в ультразвуковом поле при постоянном напряжении, а также при совместном действии ультразвука и постоянной нагрузки.

Дислокационные петли из полных дислокаций имели форму окружности. Различия между краевыми, винтовыми и смешанными участками петель во внимание не принимались. Среда, в которой находились дислокационные петли, считалась однородной и изотропной.

Уравнения равновесия и движения элементов дислокационной петли имели вид

$$F_{\text{вн}} + F_{\text{сам}} + F_{\text{тр}}^n = 0 \quad (1)$$

$$Bv = F_{\text{вн}} + F_{\text{сам}} + F_{\text{тр}}^n \cdot \text{sign}(F_{\text{вн}} + F_{\text{сам}}). \quad (2)$$

Здесь  $F_{\text{вн}}$  — сила, обусловленная внешним воздействием; были рассмотрены случаи

$$F_{\text{вн}} = \begin{cases} b\sigma \sin 2\pi ft, & (3a) \\ b\sigma = \text{const}, & (3b) \\ b(\sigma \sin 2\pi ft + \sigma). & (3b) \end{cases}$$

Сила самодействия бралась в приближении линейного натяжения

$$F_{\text{сам}} = \frac{Gb^2}{2R}, \quad (4)$$

где  $G$  — модуль сдвига,  $R$  — радиус петли.

Учитывались также силы типа сухого трения  $F_{\text{тр}}^n = b\sigma_{\text{ст}}$ , где  $\sigma_{\text{ст}}$  — стартовое напряжение, и вязкого трения  $Bv$ , где  $B$  — коэффициент динамического торможения дислокации,  $v$  — скорость ее элемента.

Инерционный член  $Ma$  в уравнении движения (2) отсутствует, так как в исследованном интервале частот 20–200 кГц он мал по сравнению с силой вязкого торможения

$$\frac{Ma}{Bv} \ll 1$$

Моделирование проводилось применительно к кристаллам NaCl: петли располагались в плоскостях  $\{110\}$  и  $\{100\}$ , стартовые напряжения для которых, согласно [11,12], соответственно равны  $2.94 \cdot 10^5$  и  $1.47 \cdot 10^6$  Н/м<sup>2</sup>. Остальные параметры в уравнениях (1) и (2) были  $b = 4 \text{ \AA}$ ,  $G = 1.68 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $B = 0.21$  мП.

В отсутствие неоднородностей в поле внутреннего напряжения в кристалле петля сохраняет круговую форму неизменной в процессе своего движения. Это позволяет следить лишь за изменением радиуса петли.

Уравнение движения (2) представляет собой дифференциальное уравнение первого порядка

$$B \frac{dR}{dt} = b\sigma_{\text{вн}} - \frac{Gb^2}{2R} - b\sigma_{\text{ст}} \cdot \text{sign} \left( b\sigma_{\text{вн}} - \frac{Gb^2}{2R} \right). \quad (2a)$$

Динамика дислокационной петли рассматривается при использовании уравнения движения типа (2а) для каждого элемента петли.

Алгоритм дальнейшего решения зависит от выбранного приближения. Сравнение результатов решения уравнения (2а) методами Рунге-Кутты и Эйлера показало, что уточнение, вносимое методом Рунге-Кутты, в данном случае не превышает 1% за время эксперимента (время аннигиляции или расширения петель). Поэтому в дальнейшем был использован метод Эйлера, существенно упрощающий вычисления. С учетом этого уравнения (2а) в безразмерных величинах имеет вид

$$\tilde{R} = \tilde{R}_0 + \Delta\tilde{t} \cdot \left( \tilde{\sigma}_{\text{вн}} - \frac{1}{\tilde{R}_0} - 1 \cdot \text{sign} \left( \tilde{\sigma}_{\text{вн}} - \frac{1}{\tilde{R}_0} \right) \right). \quad (5)$$

Здесь

$$\tilde{R} = \frac{R}{R_{\text{кр}}}, \quad \tilde{\sigma}_{\text{вн}} = \frac{\sigma_{\text{вн}}}{\sigma_{\text{ст}}}; \quad \Delta\tilde{t} = \Delta t / \left( \frac{R_{\text{кр}} \cdot b}{b \cdot \sigma_{\text{ст}}} \right), \quad (6)$$

$R_{\text{кр}}$  — наименьший радиус петли при заданном значении стартового напряжения, определяемый соотношением (7) (см. ниже).

Временной шаг  $\Delta t$  принимали равным  $T/120$  ( $T$  — период ультразвуковых колебаний), чтобы результат практически не зависел от шага  $\Delta t$ . Поскольку аннигиляция дислокации — это микроскопический процесс, то в рамках данной задачи его моделировали феноменологически, введением параметра аннигиляции  $a$  — предельно допустимого наименьшего радиуса петли. При условии что радиус петли становится меньше параметра аннигиляции ( $R \leq a$ ), петля считалась исчезнувшей.

### Равновесные состояния дислокационных петель

Существование силы самодействия приводит к тому, что петля стремится уменьшить свой размер и аннигилировать. Однако при наличии силы трения покоя (стартового напряжения) возможно существование в кристалле петель с радиусом  $R \geq R_{\text{кр}}$ , определяемого из (1) при  $F_{\text{вн}} = 0$ ,

$$R_{\text{кр}} = \frac{Gb}{2\sigma_{\text{ст}}}. \quad (7)$$

При указанных выше значениях стартовых напряжений в NaCl критические размеры петель соответственно равны 11.4 мкм в плоскости {110} и 2.28 мкм в {100}.

При постоянном внешнем напряжении  $\sigma_{\text{вн}}$  получим из (1)

$$\frac{G \cdot b}{2 \cdot (\sigma_{\text{вн}} + \sigma_{\text{ст}})} < R < \frac{G \cdot b}{2 \cdot (\sigma_{\text{вн}} - \sigma_{\text{ст}})} \quad (8а)$$

или

$$\frac{G \cdot b}{2 \cdot R} - \sigma_{\text{ст}} < \sigma_{\text{вн}} < \frac{G \cdot b}{2 \cdot R} + \sigma_{\text{ст}}. \quad (8б)$$

При заданном  $\sigma_{\text{вн}}$  право на существование имеют лишь петли, радиусы которых попадают в определенный (8а) интервал, ширина которого зависит от стартового напряжения  $\sigma_{\text{ст}}$ . Присутствие в ненагруженном кристалле петель с  $R < R_{\text{кр}}$  указывает на существование в

кристалле областей, в пределах которых поле остаточных напряжений превосходит  $\sigma_{ст}$ , т.е. свидетельствует о существенной неоднородности поля внутренних напряжений.

Соотношение (86) позволяет по известным радиусам петель определить условия, при которых петли наблюдаемых размеров могут сохранять стационарные состояния.

### Поведение дислокационных петель в ультразвуковом поле

Процесс эволюции дислокационных петель под действием ультразвука моделировался с использованием уравнения (5). Частота ультразвука принималась равной 60 кГц, интервал амплитуд составлял от 0.05 до 10 МПа.

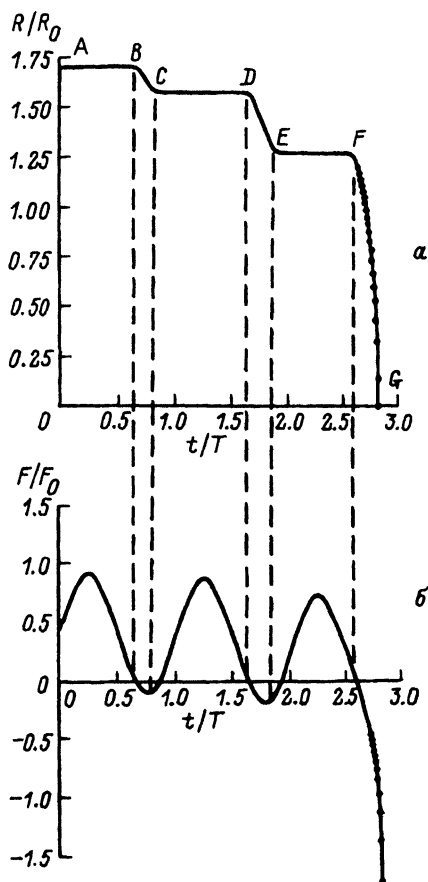


Рис. 1. Эволюция под действием ультразвука дислокационной петли в плоскости  $\{110\}$  кристалла NaCl.

*a* — изменение радиуса петли с течением времени действия ультразвука; *б* — изменение эффективной силы, действующей на элемент дислокационной петли,  $R_0 \approx 19.4$  мкм,  $\sigma^0 = 2.94 \cdot 10^5$  Н/м<sup>2</sup>,  $f = 60$  кГц.

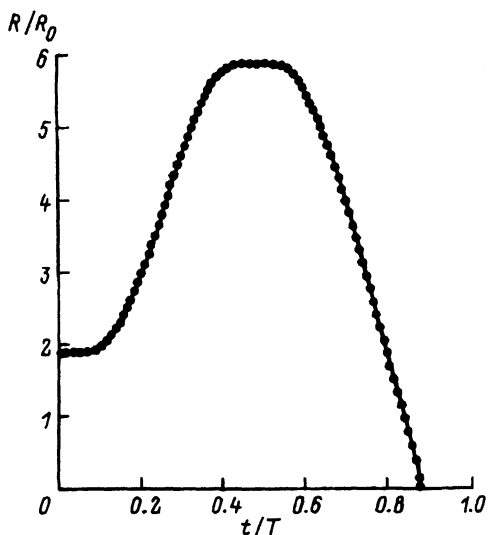


Рис. 2. Изменение радиуса петли под действием ультразвука.

Начальный радиус петли  $R_0 = 21.7$  мкм,  $\sigma^0 = 9.8 \cdot 10^5$  Н/м<sup>2</sup>,  $f = 60$  кГц.

При знакопеременной нагрузке в следующих друг за другом полупериодах сила  $F_{вн}$  изменяет свой знак, тогда как сила самодействия  $F_{сам}$  остается направленной к центру круговой петли. Поэтому возможные изменения размеров петли за эти промежутки времени не будут одинаковыми:  $\Delta R$  при сжатии петли превышает  $\Delta R$  при ее расширении. Кроме того, уменьшение радиуса петли вызывает рост силы самодействия, что в конечном итоге должно привести к аннигиляции. Примеры, иллюстрирующие поведение дислокационных петель под действием ультразвука, приведены на рис. 1 и 2.

Ситуация, когда амплитуда напряжения  $\sigma^\circ$  меньше значения стартового напряжения, представлена на рис. 1. Петля в данном случае аннигилирует за время  $2.8 T$ . Изменение радиуса петли происходит немонотонно; стадии стационарного состояния ( $AB, CD, EF$ ) сменяются стадиями сжатия ( $BC, DE, FG$ ). Последние происходят при смене знака силы, как это можно видеть из рис. 1, б.

При определенных соотношениях между амплитудой ультразвука, начальным радиусом петли и стартовым напряжением петля может первоначально расшириться (в течение первого полупериода ультразвука), но затем, когда внешняя сила и сила самодействия направлены одинаково (во втором полупериоде ультразвука), следуют стадии сжатия и аннигиляции (происходящей за время  $t < T$  на рис. 2).

Время существования петли в ультразвуковом поле при заданной частоте зависит от амплитуды ультразвука  $\sigma^\circ$ , начального радиуса  $R_0$  петли и коэффициента динамического торможения  $B$ . Примеры зависимости времени жизни петли от амплитуды ультразвука и начального радиуса при постоянном  $f$  и  $B$  даны на рис. 3 и 4. При увеличении начального радиуса время жизни петли возрастает. Для размера

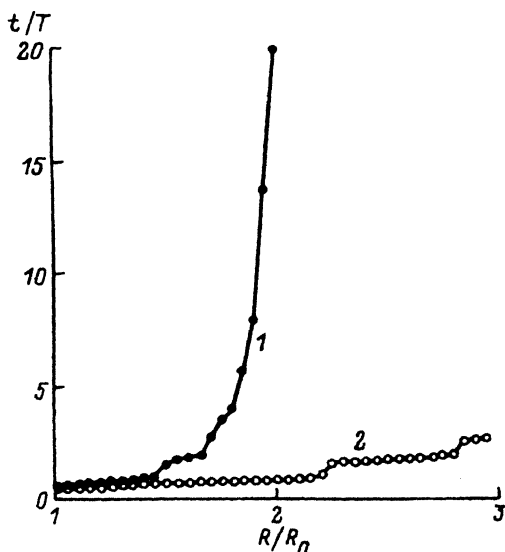


Рис. 3. Зависимость времени жизни дислокационной петли в ультразвуковом поле от ее начального радиуса при постоянных значениях амплитуды напряжения.

1 --  $\alpha^\circ = 1.5 \cdot 10^5$ , 2 --  $9.8 \cdot 10^5$  Н/м<sup>2</sup>

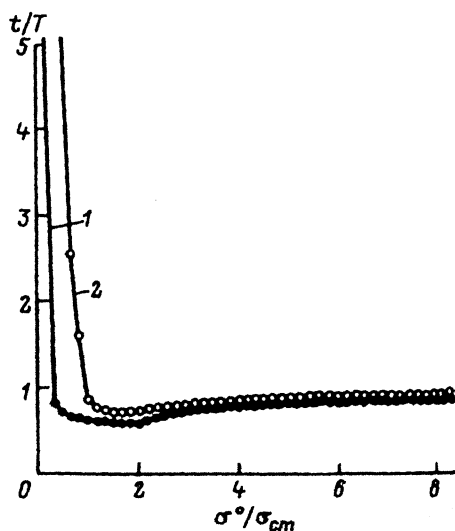


Рис. 4. Зависимость от амплитуды напряжения времени жизни дислокационных петель с начальными радиусами  $R_0 = 13$  (1), 20 мкм (2).

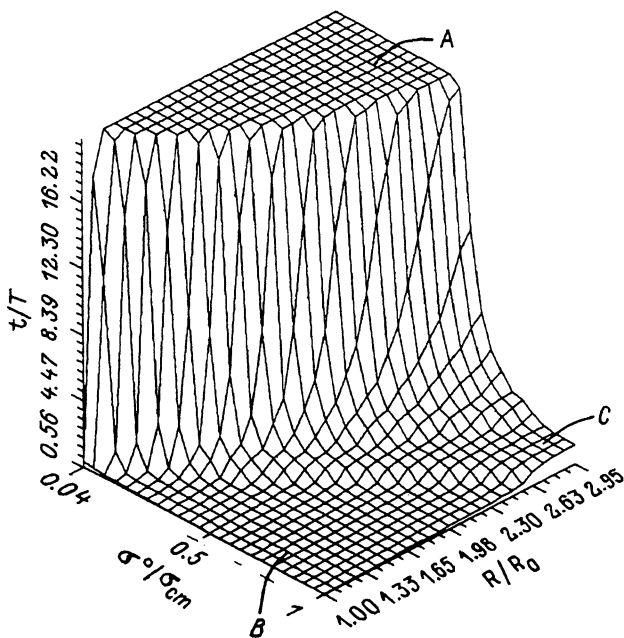


Рис. 5. Зависимость времени существования петли от ее начального радиуса и амплитуды ультразвука.

$R_0 > 2R_{кр}$  при малых амплитудах  $\sigma^0 \ll \sigma_{ст}$  существуют стационарные состояния (кривая 1 на рис. 3). При амплитудах напряжения  $\sigma^0 > \sigma_{ст}$  время жизни петель становится меньше периода ультразвуковых колебаний, как это можно видеть на рис. 4.

В общем случае зависимость времени жизни петли от  $R_0$  и  $\sigma^0$  может быть представлена в виде поверхности (рис. 5). Буквами на рис. 5 обозначены области с характерными для эволюции дислокационных петель под действием ультразвука особенностями. А — область, соответствующая параметрам  $R_0$  и  $\sigma^0$ , при которых аннигиляция петли происходит за время  $t > 20T$  или петля сохраняет стационарное состояние. Таким образом, существует область значений  $\sigma^0$ , при которых под действием УЗ не происходит движения петель. Изменение размеров круговых петель начинается с некоторого порогового  $\sigma_{пор}^0(R_0)$ , различного для разных значений начального радиуса. В — область, в которой аннигиляция петель протекает за время, меньшее одного периода, например, как это показано на рис. 2.

При значениях  $R_0$  и  $\sigma^0$ , соответствующих областям С и В (рис. 5), время жизни дислокационных петель превосходит  $T$  и составляет  $2T$ ,  $3T$  и т.д. Ступенчатый вид поверхности  $t/T(R_0, \sigma^0)$  связан с тем, что аннигиляция петель происходит, как правило, во второй половине периода ультразвуковых колебаний.

Таким образом, дислокационные петли в ультразвуковом поле, если  $\sigma^0 > \sigma_{пор}^0(R_0)$ , с неизбежностью аннигилируют. Время жизни петли в УЗ поле зависит от их начального радиуса и параметров ультразвука.

## Поведение дислокационных петель при совместном действии ультразвука и постоянной силы

При совместном действии ультразвука и постоянного во времени напряжения ситуация существенно иная. Появляются условия (интервалы значений напряжения и амплитуды ультразвука), при которых петли расширяются. Размер петель, сохраняющих стационарное состояние в отсутствие ультразвука, становится другим.

Поведение петли заданного радиуса можно определить, пользуясь диаграммой  $\sigma - \sigma^\circ$ , подобной представленной на рис. 6. Диаграмма рис. 6 была построена для петли радиусом 0.5 мкм, лежащей в плоскости легкого скольжения  $\{110\}$  кристалла NaCl. По осям отложены значения постоянной составляющей напряжения  $\sigma$  и амплитуды знакопеременного напряжения  $\sigma^\circ$ . Цифрой I на рис. 6 обозначена область значений  $\sigma$  и  $\sigma^\circ$ , при которых петля сохраняет стационарное состояние, II — область аннигиляции, III — область расширения петель. Размеры каждой из этих областей изменяются в зависимости от начального радиуса петли и величины стартового напряжения.

Сжатия и расширения петель происходят немонотонно. Путем вариации параметров задачи, были определены условия, при которых изменение радиуса петли становится возвратно-поступательным. Примечательно, что для достижения этого типа движения требуется увеличение коэффициента динамической вязкости по сравнению с использованным выше.

Таким образом, постоянная во времени составляющая поля напряжений играет стабилизирующую роль по отношению к петлям малого радиуса, предотвращая их аннигиляцию, и создает более благоприятные условия для расширения петель под действием ультразвука.

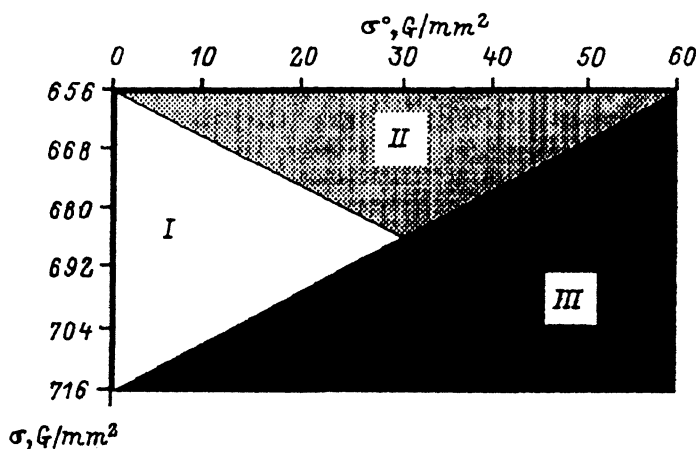


Рис. 6. Диаграмма  $\sigma - \sigma^\circ$ .

## Список литературы

- [1] *Конобеевский С.Т.* Действие облучения на материалы. Введение в радиационное материаловедение. М.: Атомиздат, 1967. 402 с.
- [2] *Иванова В.С., Терентьев В.Ф.* Природа усталости металлов. М.: Металлургия, 1975. 455 с.
- [3] *Грбчак В.П., Кулемин А.В.* // Акуст. журн. 1976. Т. 22. № 6. С. 838-844.
- [4] *Тяпунина Н.А., Благовещенский В.В., Зиненкова Г.М., Ивашкин Ю.А.* // Изв. вузов. Сер. Физика. 1982. № 6. С. 118-128.
- [5] *Зиненкова Г.М., Тяпунина Н.А.* // Моделирование на ЭВМ кинетики дефектов в кристаллах. Л., 1985. С. 52-78.
- [6] *Тяпунина Н.А., Благовещенский В.В.* // ДАН СССР. 1980. Т. 254. № 4. С. 869-872.
- [7] *Благовещенский В.В.* Автореф. канд. дис. М., 1982.
- [8] *Христу Христина.* Автореф. канд. дис. М., 1991.
- [9] *Тяпунина Н.А., Ломакин А.Л., Христу Х.* // ФТТ. 1990. Т. 32. Вып. 4. С. 1097-1101.
- [10] *Зиненкова Г.М., Ломакин А.Л., Христу Х.* // Моделирование на ЭВМ кинетики дефектов в кристаллах. Л., 1988. С. 76-78.
- [11] *Белозерова Э.П., Казак Ф.В.* // Динамика дислокаций. Харьков, 1968. С. 509-518.

Московский университет им. М.В.Ломоносова

Поступило в Редакцию  
26 мая 1993 г.