

УДК 539.2

© 1990

ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ДИПОЛЕЙ ПРИ ДЕЙСТВИИ УЛЬТРАЗВУКА

Н. А. Тянунина, А. Л. Ломакин, Х. Христу

С помощью моделирования на ЭВМ исследовалось поведение дислокационных диполей в кристаллах под действием ультразвука в килогерцевом диапазоне частот. Анализ позволил выяснить, что при ультразвуковом воздействии в зависимости от амплитуды возможны различные динамические структуры диполей.

Известно, что под действием ультразвука изменяются структурно-чувствительные свойства твердых тел. Это обусловлено изменениями состояния, распределения и концентрации дефектов, вызванными внешней знакопеременной нагрузкой. Какие именно процессы будут происходить со структурными дефектами, зависит от исходного состояния системы и параметров внешнего воздействия. В килогерцевом диапазоне частот первичными являются вынужденные колебания дислокационных сегментов. При больших амплитудах могут происходить размножение дислокаций и увеличение концентрации точечных дефектов [1, 2]. Эксперименты показали также, что при определенных амплитудах ультразвука имеет место поступательное движение дислокаций, в результате чего происходит их перераспределение в объеме кристалла [3, 4]. Эффект поступательного движения дислокаций под действием внешнего периодического возмущения был обнаружен методом повторного избирательного травления [3, 4]. Проследить за особенностями этого процесса экспериментально не представляется возможным. Исследовать траектории отдельных дислокаций и выяснить особенности поведения дислокационных ансамблей под действием ультразвука позволяет метод моделирования процесса на ЭВМ [2, 5]. В данной работе этот метод использован для изучения поведения дислокационного диполя под действием ультразвуковых колебаний в килогерцевом диапазоне частот.

1. Модель и алгоритм

В качестве одной из моделей был взят диполь из прямолинейных бесконечных краевых дислокаций, параллельных оси OZ , с вектором Бюргера вдоль оси OX ,двигающихся в плоскости легкого скольжения XZ . Движение считали квазивязким, инерциальным членом в уравнении движения пренебрегали, что для килогерцевого диапазона частот может быть сделано [6, 7]. Уравнение движения дислокации имело вид

$$B\dot{x}^i = b m \sigma^0 \sin(2\pi f t) + \sum_{i \neq j} F^{ij}(\mathbf{r}) - F_{\text{ст}} \times \\ \times \operatorname{sign} \left(b m \sigma^0 \sin(2\pi f t) + \sum_{i \neq j} F^{ij}(\mathbf{r}) \right). \quad (1)$$

Здесь B — коэффициент динамической вязкости; $b m \sigma^0 \sin(2\pi f t)$ — внешнее возмущение, где m — фактор Шмида, σ^0 и f — амплитуда и частота

ультразвука; ΣF^{ij} — сила взаимодействия дислокаций, которая неоднородна по пространству и меняется во времени из-за изменения взаимного расположения дислокаций под действием ультразвука; $F_{ст} = b \tau_{ст}$, $\tau_{ст}$ — стартовое напряжение, при достижении которого начинается движение дислокаций.

В начальный момент времени $t_0 = 0$ произвольно задавали расположение дислокаций. Алгоритм расчета был следующим: в момент времени t для каждой дислокации вычислялась действующая на нее суммарная сила и в случае, если она превышала $F_{ст}$, из уравнения (1) находили $\dot{x} = \Delta x / \Delta t$ и смещение Δx при заданном шаге по времени Δt . Шаг по времени выбирался таким, чтобы точность результатов составляла 1%. Траектории представлялись в параметрическом виде. Поскольку дислокациям разре-

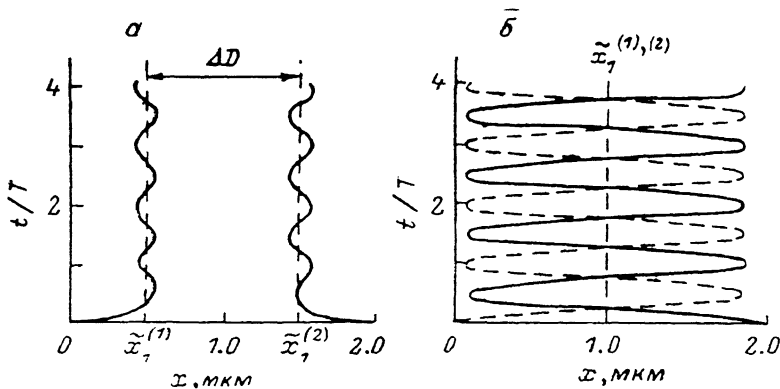


Рис. 1. Зависимости $x^i(t)$ для краевых дислокаций разного знака при амплитуде напряжения $\sigma^0 = 0.4$ (а) и 1 МПа (б) и частоте ультразвука $f = 60$ кГц.

шено только скольжение, т. е. $y^i = \text{const}$, их движение можно было характеризовать зависимостью $x^i = x^i(t)$ для координаты точки пересечения прямой i -й дислокации с плоскостью XY .

Примеры полученных зависимостей $x^i = x^i(t)$ представлены на рис. 1. На рис. 1 изображены зависимости $x^i(t)$ для двухдвигающихся под действием ультразвука разноименных дислокаций; их начальные положения $x_0^{(1)} = y_0^{(1)} = 0$ и $x_0^{(2)} = 2$ мкм, $y_0^{(2)} = 1$ мкм.

При сравнительно малых амплитудах установившиеся колебания происходят около точек, совпадающих с устойчивыми положениями равновесия дислокаций в диполе. На рис. 1, а — это точки с координатами $(\bar{x}_1^{(1)} = 0.5, y_1^{(1)} = 0)$ и $(\bar{x}_1^{(2)} = 1.5, y_1^{(2)} = 1)$.

При больших амплитудах, как это можно видеть на рис. 1, б, обе дислокации колеблются относительно точек, лежащих на одной прямой $x = \text{const}$. Эти точки соответствуют неустойчивым положениям равновесия в отсутствие внешнего возбуждения.

2. Динамическая структура диполя

ЭВМ-эксперименты показали, что поведение дислокаций, обусловленное их взаимодействием и внешней, гармонически изменяющейся во времени нагрузкой, можно описать как сложное движение, представляющее собой суперпозицию колебаний дислокаций относительно некоторой точки и поступательного движения этой точки. В силу того что дислокациям разрешено только скольжение, их траектории, заданные в параметрическом виде, будут

$$x^{(i)}(t) = x_1^{(i)}(t) + x_2^{(i)}(t) \Psi(\omega t + \varphi), \quad y^{(i)}(t) = y_0^{(i)} = \text{const}, \quad (2)$$

причем $x_2^{(1)} = -x_2^{(2)}$. В (2) $x_1^{(i)}(t)$ — координата, относительно которой i -я дислокация совершает колебательное движение. Назовем ее для краткости

«условным центром равновесия». $x_3^{(i)}(t)$ — амплитуда колебательного движения дислокации относительно $x_1^{(i)}$, $\Psi(\omega t + \varphi)$ — некоторая периодическая функция.

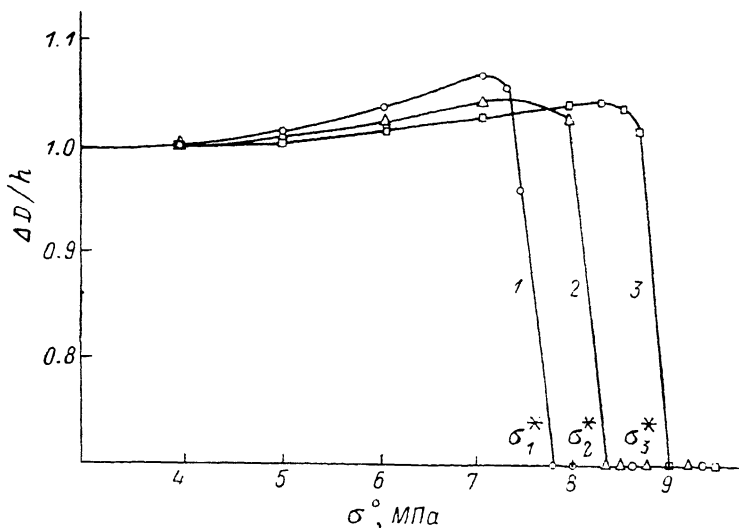


Рис. 2. Зависимость ΔD от σ^0 (10^{-1} МПа) при $f=60$ (1), 80 (2), 100 кГц (3).

Как показали результаты моделирования, с течением времени как $x_1^{(i)}(t)$, так и $x_3^{(i)}(t)$ стремятся к постоянным значениям $\bar{x}_1^{(i)}$ и $\bar{x}_3^{(i)}$ (рис. 1). При достижении установившегося движения

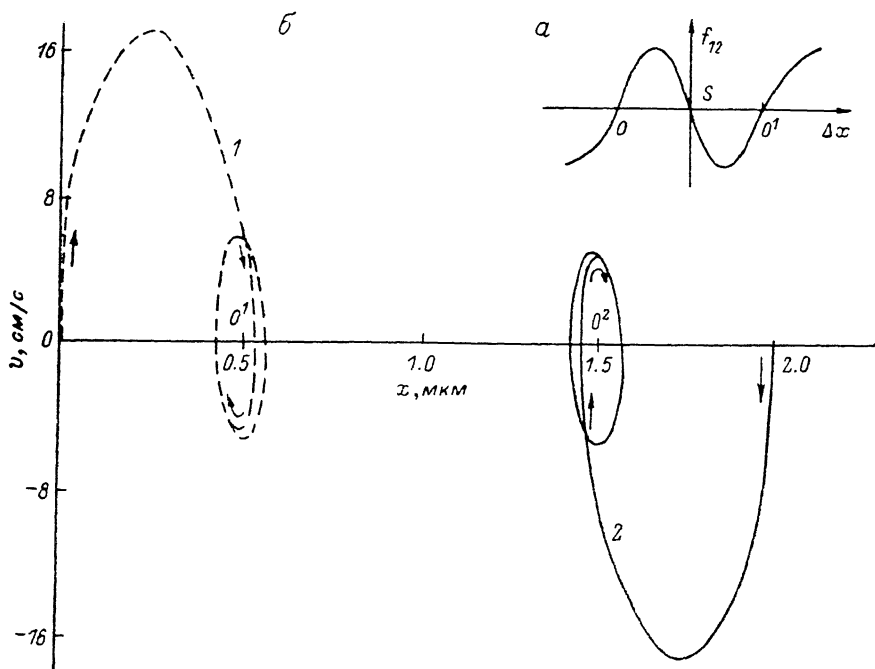


Рис. 3. Сила взаимодействия дислокаций диполя в зависимости от расстояния между ними (а) и фазовые траектории дислокаций диполя при амплитуде $\sigma^0=0.4$ МПа и частоте $f=60$ кГц (б).

Штриховая кривая — положительная дислокация (1), сплошная — отрицательная (2).

$$\Delta D = |\bar{x}_1^{(1)} - \bar{x}_1^{(2)}| = \text{const}, \quad (3)$$

ΔD зависит от амплитуды и частоты ультразвука (рис. 2). Как видно из рис. 2 и 1, а, при малых амплитудах σ^0 колебания дислокаций диполя

происходят около положений их устойчивого положения равновесия в отсутствие внешней нагрузки. В безразмерных единицах $\Delta D/h=1$ (h — плечо диполя). При дальнейшем росте амплитуды ΔD несколько возрастает, а затем практически скачком изменяется до значения $\Delta D=0$ (при амплитудах σ^* ; рис. 2).

Эти особенности поведения дислокаций обусловлены характером сил их взаимодействия. В уравнении движения (1) сила взаимодействия дислокаций играет роль возвращающейся силы, нелинейно зависящей от координат (рис. 3, а).

Особенности движения дислокаций удобно проанализировать по фазовым траекториям. Фазовые траектории для дислокаций диполя при различных σ^0 представлены на рис. 3, б и 4. Если в начальный момент дислокации не находились в положении устойчивого равновесия, под действием ультразвука имеет место их сложное движение, в результате которого достигается «предельный цикл» — замкнутая фазовая траектория, внутри которой размещается один из полюсов (O^1 или O^2 на рис. 3, б), устанавливаются стационарные колебания. На рис. 4 приведены предельные циклы для различных амплитуд ультразвука. При увеличении амплитуды предельные циклы расширяются и приобретают более сложную форму (ср. циклы 1, 1' и 2, 2'). При достижении амплитуды $\sigma^0 \geq \sigma^*(f)$ фазовые траектории охватывают оба полюса O^1 и O^2 и совпадают для разноименных дислокаций (3 и 3' на рис. 4). Однако фазовые точки для колеблющихся дислокаций двигаются со сдвигом фаз на

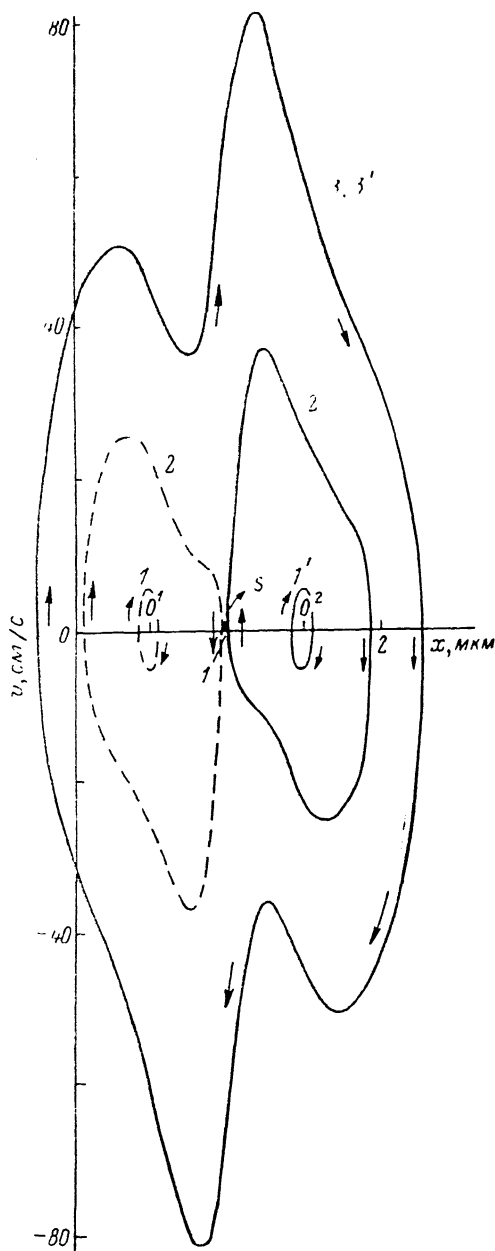


Рис. 4. Замкнутые фазовые траектории для дислокаций диполя при $\sigma^0=0.4$ (1), 0.75 (2), 1 МПа (3). $f=60$ кГц.

π . Направления обхода кривых 3 и 3' фазовыми точками, соответствующими дислокациям разного знака, указаны стрелками. Можно ожидать, что при дальнейшем увеличении амплитуды ультразвука диполь будет разрушаться.

Таким образом, возможны различные динамические структуры дислолей и в их числе конфигурации, существенно отличные от стационарных. Лишь при малых амплитудах ультразвука каждая из дислокаций колеблется относительно своего устойчивого положения равновесия в отсутствие внешней нагрузки. При больших же амплитудах $\sigma^0 > \sigma^*(f)$ условные центры равновесия дислокаций устанавливаются на одной прямой, парал-

дельной оси OY , что соответствует положению неустойчивого равновесия покоящихся дислокаций.

При переходе через амплитуду напряжения σ^* площадь, заключенная внутри фазовой траектории, резко возрастает. Из уравнения можно видеть, что этой площади пропорциональна работа, совершаемая против силы динамического трения. Следовательно, вклад во внутреннее трение системы колеблющихся диполей при переходе амплитуды ультразвука через σ^* будет существенно возрастать.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Тяпунина Н. А., Благовещенский В. В., Зиненкова Г. М., Ивашкин Ю. А. // Изв. вузов, физика. 1982. № 6. С. 118.
- [2] Зиненкова Г. М., Тяпунина Н. А. // Моделирование на ЭВМ кинетики дефектов в кристалле. Л., 1985. С. 30—78.
- [3] Тяпунина Н. А., Штром Е. В., Зиненкова Г. М. // Вестник МГУ, сер. 3, физ., астрон. 1978. Т. 9. № 2. С. 33—39.
- [4] Тяпунина Н. А., Светашов А. // Вестник МГУ, сер. 3, физ., астрон. 1981. Т. 22. № 2. С. 15—20.
- [5] Благовещенский В. В., Тяпунина Н. А. // ДАН СССР. 1980. Т. 254. № 4. С. 809—872.
- [6] Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка, 1981.
- [7] Ломакин А. Л. // Автореф. канд. дис. М., МГУ, 1987.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
3 мая 1989 г.
В окончательной редакции
4 октября 1989 г.