

# Закономерности процессов движения дислокаций через ансамбли дислокаций леса и точечных препятствий в условиях одновременного действия статической и циклической нагрузки

© Б.М. Логинов, А.Н. Проскурнин, Е.В. Вершинин

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, 248600 Калуга, Россия

E-mail: loginov@kaluga.ru

(Поступила в Редакцию 11 декабря 2001 г.

В окончательной редакции 15 января 2002 г.)

Методами компьютерного моделирования применительно к ГПУ кристаллам проведен анализ особенностей процессов движения скользящих дислокаций через композиционные ансамбли точечных препятствий и колеблющихся дислокаций леса. Показано, что возможность дислокаций леса совершать вынужденные колебания приводит к увеличению прозрачности композиционного ансамбля. Установлено, что при достижении амплитудой дислокационных колебаний определенного значения, зависящего от мощности точечных препятствий, также препятствия в композиционном ансамбле практически полностью утрачивают возможность оказывать сопротивление продвижению скользящих дислокаций.

Взаимодействие скользящих дислокаций с хаотическими ансамблями дефектов в существенной мере определяет деформационное упрочнение и пластическое течение кристаллов. К числу наиболее характерных ансамблей дефектов относятся, прежде всего, ансамбли точечных препятствий и так называемый лес дислокаций. Теоретическое исследование данных процессов аналитическими методами из-за множественного характера взаимодействий и сложной геометрической статистики оказывается малоэффективным. При экспериментальных исследованиях лишь в редких, исключительных случаях удается выделить и проанализировать влияние отдельных факторов на происходящие процессы [1–4]. Вместе с тем опыт последних десятилетий показал, что методы машинного моделирования могут служить тонким инструментом для систематических исследований особенностей процессов взаимодействия скользящих дислокаций с хаотическими ансамблями препятствий различной природы. Средствами моделирования в [5,6] проведен анализ влияния свойств гибкости дислокаций леса на его прозрачность. В [7] исследованы процессы движения скользящих дислокаций через композиционные ансамбли дислокаций леса и точечных препятствий. В [8] проанализированы особенности процессов движения скользящих дислокаций через колеблющийся дислокационный лес. Настоящая работа является продолжением данных исследований и посвящена анализу результатов моделирования процессов движения скользящих дислокаций через композиционные ансамбли точечных препятствий и колеблющихся дислокаций леса.

## 1. Модель

Моделирование проводилось применительно к ГПУ кристаллам (рис. 1). Рассматривалось движение пробной краевой дислокации с вектором Бюргера  $\mathbf{b} = 1/3 [\bar{1}2\bar{1}0]$ , в плоскости базиса (0001), под

действием внешнего напряжения сдвига. В этом случае дислокационный лес состоял из 12 сортов винтовых дислокаций, расположенных в плоскостях пирамид второго рода  $\{2\bar{1}\bar{1}2\}$  с векторами Бюргера  $\mathbf{b} = \pm 1/3 \langle 2\bar{1}13 \rangle$  и с одинаковой плотностью заполнения для каждого сорта.

Мощность точечных препятствий характеризовалась критическим углом огибания  $\varphi_{cr}$ .

Координаты точек пересечения дислокаций леса с плоскостью движения пробной дислокации, так же как и координаты точечных препятствий, задавались случайным образом.

Направление и плоскость приложения внешней периодической нагрузки составляли соответственно  $[10\bar{1}0]$  и  $(10\bar{1}0)$ . В этом случае фактор Шмида в системе скольжения пробной дислокации оказывался равным

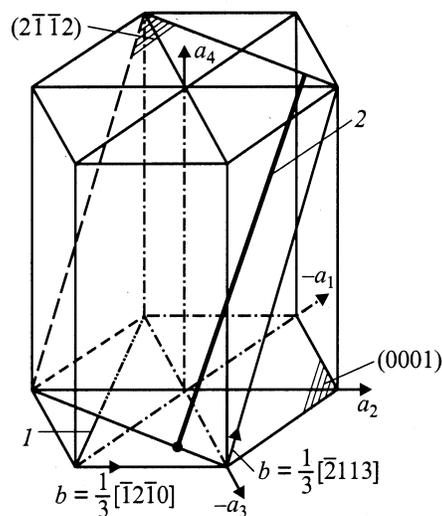


Рис. 1. Схематическое расположение дислокаций в ГПУ кристаллах. Показана дислокация леса, расположенная только в одной плоскости  $(2\bar{1}\bar{1}2)$ ; 1 — пробная скользящая дислокация; 2 — дислокация леса.

нулю, т.е. базисная дислокация оказывалась неподверженной непосредственному воздействию периодической нагрузки. В то же время восемь сортов дислокаций леса находились в системах скольжения, для которых фактор Шмида был равен  $m = \pm \frac{\sqrt{3}c}{4\sqrt{a^2+c^2}}$  ( $a$  и  $c$  — постоянные решетки), а четыре сорта дислокаций леса принадлежали системам скольжения с величиной  $m = 0$ . Предполагалось, что за счет внешней периодической нагрузки дислокации леса совершают вынужденные периодические колебания в своих плоскостях скольжения, оставаясь прямолинейными и сохраняя первоначальную ориентацию относительно линии пересечения плоскости своего скольжения с плоскостью скольжения пробной дислокации. Рассматривались синхронные периодические колебания дислокаций леса с начальной фазой, равной нулю, и с амплитудой колебаний, пропорциональной фактору Шмида.

Движение пробной скользящей дислокации через композиционный ансамбль препятствий рассматривалось в квазистатическом приближении. При этом задача сводилась к нахождению последовательностей таких препятствий, которые при фиксированном уровне внешнего напряжения сдвига оказывались способными удерживать скользящую дислокацию в течение всего периода колебаний дислокаций леса.

Моделирование проводилось при следующих предположениях.

1) Пробная скользящая дислокация считалась гибкой, ее форма для каждого фиксированного значения фазы колеблющихся дислокаций леса определялась внешним напряжением сдвига и суммарным полем внутренних напряжений, создаваемых дислокациями леса.

2) Самодействие скользящей дислокации учитывалось в приближении линейного натяжения.

3) Образование порогов и зон рекомбинаций при пересечении скользящей дислокации с дислокациями леса во внимание не принималось.

4) Для исключения влияния края модельной площади на движение пробной дислокации использовались периодические граничные условия.

5) Уровень внешнего напряжения сдвига, при котором скользящая дислокация преодолевала модельную площадь, принимался за напряжение прохождения —  $\tau_{cr}$ .

В рамках сформулированных предположений равновесная конфигурация скользящей дислокации при рассматриваемом уровне внешнего напряжения сдвига  $\tau_{yz}^{ex}$  и для всех значений фазы колеблющихся дислокаций леса ( $|\psi| \leq \pi/2$ ) должна описываться уравнением

$$T \cdot \kappa(x_j, y_j, 0) = b \cdot \left\{ \tau_{yz}^{ex} + \sum_D \tau_{yz}^{in}[(x_j - x_i), (y_j - y_i), 0] \right\}, \quad (1)$$

где  $T = G \cdot b^2/2$ ,  $G$  — модуль сдвига;  $b$  — вектор Бюргера скользящей дислокации;  $\kappa(x_j, y_j, 0)$  — локальная кривизна скользящей дислокации в точке с координатами  $(x_j, y_j, 0)$ ;  $\tau_{yz}^{in}[(x_j - x_i), (y_j - y_i), 0]$  — внутреннее напряжение в точке  $(x_j, y_j, 0)$ , создаваемое дислокацией леса, расположенной в точке  $(x_i, y_i, 0)$ . Об-

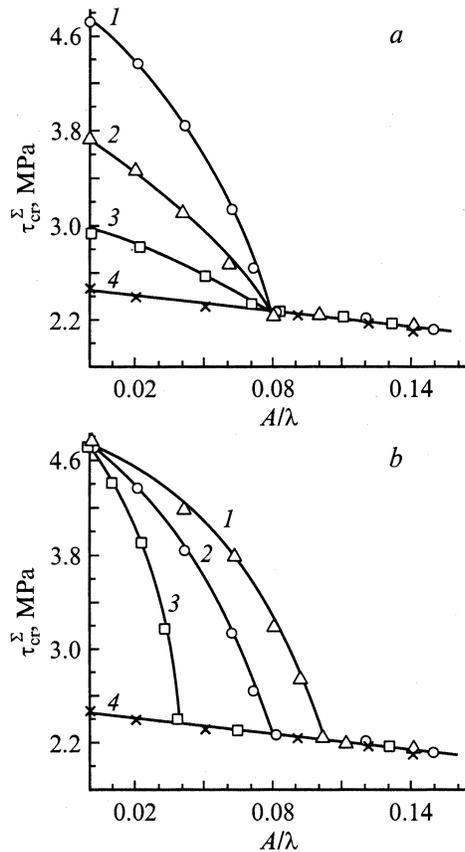
ласть  $D$ , по которой производилось суммирование, определялась в соответствии с критерием Предводителя-Стратана [9]. Необходимо отметить, что в точках пересечения пробной дислокации с дислокациями леса правая часть уравнения (1) имеет особенности. В окрестностях особых точек решение уравнения (1) находилось в виде степенного ряда с иррациональными показателями, значения которых зависят от сорта дислокаций леса [10]. На участках между препятствиями построение равновесной конфигурации скользящей дислокации проводилось по методу радиуса кривизны [10], когда форма дислокации аппроксимировалась сегментами соединяющихся без излома окружностей. Радиусы указанных окружностей в точках с координатами  $(x_j, y_j, 0)$  определялись в соответствии с уравнением (1).

Процедура нахождения решения уравнения (1) представляла собой модификацию разработанных ранее методик построения равновесных конфигураций скользящих дислокаций,двигающихся через неподвижные композиционные ансамбли [7] или через колеблющийся лес дислокаций [8].

Параметры моделирования выбирались применительно к кристаллам цинка:  $b = |a| = 2.66 \cdot 10^{-10}$  м,  $|c| = 4.94 \cdot 10^{-10}$  м,  $G = 3.83 \cdot 10^{10}$  Н · м<sup>-2</sup>. Моделирование проводилось для композиционных ансамблей дислокаций леса и точечных препятствий, для которых значения мощности  $\varphi_{cr}$  и плотности  $\rho_p$  варьировались. Во всех случаях плотность дислокаций леса составляла  $\rho_f = 4 \cdot 10^{10}$  м<sup>-2</sup>.

## 2. Полученные результаты и обсуждение

Зависимости критического напряжения прохождения  $\tau_{cr}$  от относительной амплитуды колебаний дислокаций леса  $A/\lambda$  (где  $\lambda = \rho_f^{-1/2}$ ), полученные для различных композиционных ансамблей дислокаций леса и точечных препятствий, представлены на рис. 2. Кривые 1–3 на рис. 2, а отвечают зависимостям  $\tau_{cr}(A/\lambda)$ , полученным для композиционных ансамблей, составленных из дислокаций леса и точечных препятствий мощности  $\varphi_{cr} = 2.7925$  рад, при различных значениях относительной концентрации плотности точечных препятствий в композиционных ансамблях. Можно видеть, что во всех случаях влияние точечных препятствий в композиционном ансамбле на величину критического напряжения прохождения проявляется лишь в интервале относительных значений амплитуды колебаний (0–0.08). При этом чем больше значение относительной концентрации точечных препятствий в композиционном ансамбле, тем выше оказывается уровень критического напряжения прохождения  $\tau_{cr}$ . Однако увеличение амплитуды колебаний дислокаций леса приводит к снижению способности точечных препятствий оказывать сопротивление движению скользящих дислокаций. И начиная со значения относительной амплитуды колебаний  $A/\lambda = 0.08$ , точечные препятствия практически полностью переста-



**Рис. 2.** Зависимости критического напряжения прохождения  $\tau_{cr}$  от относительной амплитуды колебаний дислокаций леса  $A/\lambda$ , полученные для различных композиционных ансамблей дислокаций леса и точечных препятствий мощности ( $\varphi_{cr}$ ) и плотности ( $\rho_p$ ). *a* —  $\varphi_{cr} = 2.7925$  rad и  $\rho_p; 10^{13} \text{ m}^{-2}$ : 1 — 3.75, 2 — 1.81, 3 — 0.63. *b* —  $\varphi_{cr}$ , rad и  $\rho_p; 10^{13} \text{ m}^{-2}$ : 1 — 2.6878 и 1.88, 2 — 2.7925 и 3.75, 3 — 2.8798 и 6.83. Во всех случаях плотность дислокаций леса  $\rho_f$  составляла  $\rho_f = 4.0 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-2}$ . 4 — зависимость, полученная в случае движения скользящих дислокаций через соответствующие однокомпонентные ансамбли дислокаций леса.

ют оказывать какое-либо сопротивление двигающимся через композиционные ансамбли скользящим дислокациям. Как видно из рис. 2, *a*, при  $A/\lambda \geq 0.08$  характер функций  $\tau_{cr}(A/\lambda)$  для рассмотренных композиционных ансамблей дислокаций леса и точечных препятствий полностью соответствует зависимости, полученной для соответствующих однокомпонентных ансамблей дислокаций леса.

Таким образом, результаты, представленные на рис. 2, *a*, позволяют заключить, что значение величины относительной амплитуды колебаний дислокаций леса, при которой наблюдается излом в характере зависимостей  $\tau_{cr}(A/\lambda)$ , непосредственно обусловленной и связанной с мощностью точечных препятствий в композиционном ансамбле. Для проверки данной гипотезы было проведено моделирование процессов движения скользящих дислокаций через композиционные ансамбли дислокаций леса и точечных препятствий различной мощности.

На рис. 2, *b* представлены зависимости критического напряжения прохождения  $\tau_{cr}$  от относительной амплитуды колебаний дислокаций леса  $A/\lambda$ , полученные для композиционных ансамблей дислокаций леса и точечных препятствий, характеризующихся различной мощностью. В соответствии с результатами [7] значения однокомпонентных ансамблей точечных препятствий, входящих в состав композиционных, подбирались таким образом, чтобы при  $A/\lambda = 0$  различные однокомпонентные ансамбли точечных препятствий, характеризующиеся различной мощностью, вносили равноценный вклад в деформационное упрочнение соответствующих композиционных ансамблей. Можно видеть, что и в данном случае увеличение амплитуды колебаний дислокаций леса приводит к снижению способности точечных препятствий оказывать сопротивление движению скользящих дислокаций через композиционные ансамбли. Однако теперь точечные препятствия в соответствии с их мощностью перестают оказывать сопротивление движению скользящих дислокаций при различных значениях относительной амплитуды колебаний дислокаций леса. Полученные результаты позволили установить, что слабые точечные препятствия, характеризующиеся мощностью  $\varphi_{cr} = 2.8798$  rad, прекращают оказывать какое-либо заметное сопротивление в продвижении скользящих дислокаций через композиционные ансамбли, начиная со значения относительной амплитуды колебаний дислокаций леса, равного 0.04. Однако в случае увеличения мощности точечных препятствий до значения  $\varphi_{cr} = 2.6878$  rad их влияние на сопротивление движению скользящих дислокаций в композиционном ансамбле оказывается заметным вплоть до значений относительной амплитуды колебаний, не превышающих 0.10. Таким образом, совокупность полученных результатов показывает, что уровень относительной амплитуды колебаний дислокаций леса в композиционном ансамбле, при котором наблюдается излом в зависимости  $\tau_{cr}(A/\lambda)$ , непосредственно связан с мощностью точечных препятствий, входящих в состав композиционного ансамбля.

## Список литературы

- [1] Б.И. Смирнов. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Наука, Л. (1981). 235 с.
- [2] И.Н. Зимкин, Т.В. Самойлова, Б.И. Смирнов. ФТТ **17**, 6, 1841 (1975).
- [3] И.Н. Зимкин, Т.В. Самойлова, Б.И. Смирнов. ФТТ **20**, 12, 3703 (1978).
- [4] В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Б.И. Смирнов, А.Б. Лебедев, В.В. Ветров, С.А. Пульнев, В.И. Копылов. ФТТ **40**, 9, 2621 (1998).
- [5] Б.М. Логинов, А.А. Предводителев. ФТТ **23**, 1, 112 (1981).
- [6] А.А. Предводителев, Б.М. Логинов. ФТТ **25**, 10, 3181 (1983).
- [7] Б.М. Логинов, С.В. Толстых. ФТТ **35**, 2, 469 (1993).
- [8] В.М. Loginov, V.T. Degtyarev. Phys. Stat. Sol. (a) **120**, 387 (1990).
- [9] И.В. Стратан, А.А. Предводителев. ФТТ **12**, 7, 2141 (1970).
- [10] А.А. Предводителев, Г.И. Ничуговский. Кристаллография **17**, 1, 166 (1972).