

УДК 548.4:539.37

## ОБРАЗОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОГО СКОПЛЕНИЯ ИСТОЧНИКОМ ФРАНКА—РИДА

© 2015 г. В. В. Благовещенский<sup>1</sup>, И. Г. Панин<sup>2</sup>,  
Д. С. Андрианов<sup>2</sup>, С. Н. Суслина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Костромской государственной университет им. Н. А. Некрасова,  
ул. 1 Мая, д. 14, Кострома, 156961, Россия

<sup>2</sup>Костромской государственной технологической университет,  
ул. Дзержинского, д. 17, Кострома, 156005, Россия

Дислокационные скопления важны в процессах зарождения и распространения деформации в моно- и поликристаллах. Именно они, в основном, приводят к образованию и росту трещин. С дислокационными скоплениями часто связывают прерывистость пластической деформации и деградацию внешней квантовой эффективности ультрафиолетовых светодиодов. Представлена динамическая математическая модель образования дислокационного скопления источником Франка—Рида. Модель построена в вязкой, изотропной среде с использованием методов континуальной теории, и позволяет, кроме структурных свойств, определить временные характеристики образующихся скоплений. Приведены результаты исследования полученных скоплений дислокаций: конфигурации дислокаций в скоплении, зависимости числа дислокаций в заблокированном скоплении от внешнего напряжения, время образования новых дислокационных петель, а также время до блокировки источника обратным напряжением, дислокаций скопления. Проведено сравнение полученных результатов для скоплений, образованных источником Франка—Рида, с результатами для скоплений прямолинейных краевых дислокаций. Учет взаимодействия дислокаций скопления требует значительных вычислительных ресурсов. Для ускорения расчетов применено распараллеливание вычислений с использованием вычислительного 38 ядерного кластера T-Edge-10.

**Ключевые слова:** моделирование, кристалл, дефект, дислокации, скопление, взаимодействие, источник Франка—Рида.

### Введение

Дислокационные скопления важны в процессах зарождения и распространения деформации в моно- и поликристаллах. Именно они в основном приводят к образованию и росту трещин. В работах [1, 2] рассмотрены скопления прямолинейных краевых дислокаций. Отмечено сходство этого процесса с образованием больших сдвиговых напряжений в земной коре перед землетрясением. В работе [3] рассчитаны скопления прямолинейных краевых дислокаций в неоднородном поле приложенного напряжения, когда есть градиент. Показано, что образование трещины при этом облегчается.

Впервые образование дислокационного скопления источником Франка—Рида (ФР) рассмотрено в работе [4] при расчете акустического излучения, сопровождающего образование источника. Теоретически вычисленные таким образом сигналы сравнивали с экспериментальными данными. Но в работе [4] исследовали только начальную стадию образования скопления, задолго до самоблокировки скопления обратным напряжением образовавшихся дислокаций.

Дислокационные скопления представляют интерес, поскольку

с ними часто связывают прерывистость пластической деформации [5, 6], а также, например, деградацию внешней квантовой эффективности ультрафиолетовых светодиодов [7].

В то же время представляют интерес такие параметры дислокационного скопления, производимого источником ФР, как число заблокированных дислокаций при различном внешнем напряжении, время образования дислокационных петель при воздействии на них дислокаций скопления, поля упругих напряжений, создаваемых дислокациями.

Цель работы — показать результаты математического моделирования движения концентрических дислокаций вокруг источника ФР при их взаимном влиянии друг на друга. Построенная модель дает возможность получения зависимостей числа дислокаций и времени образования дислокационных петель в скоплении от внешнего приложенного напряжения.

### Модель образования дислокационного скопления источником Франка—Рида

Движение всех дислокационных сегментов источника в модели задается уравнением

$$p \frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial \lambda^2} = S - \frac{1}{R(\lambda)} + q(\lambda, t); \quad (1)$$

$$U(0, t) = U(L, t) = 0 \quad \forall t; \\ U(\lambda, 0) = 0 \quad \forall \lambda,$$

где  $p = B/Gb^2$ ;  $S = \sigma/Gb$ ;  $t$  — время,  $G$  — модуль сдвига;  $b$  — модуль вектора Бюргера;  $B$  — коэффициент динамической вязкости;  $U$  — смещение точек дислокационного сегмента;  $R(\lambda)$  — радиус кривизны сегмента в точке  $\lambda$ ;  $\sigma$  — внешнее напряжение;  $L$  — длина сегмента в криволинейных координатах ( $L_0$  — расстояние между точками закрепления);  $q$  — сила воздействия со стороны других дислокаций. Уравнение (1) справедливо для таких смещений  $U$  сегмента, когда  $U \ll L$  на каждом временном шаге (рис. 1).

Уравнение движения каждой дислокации в модели (1) решается численно методом сеток [8–10]. При этом, помимо внешнего приложенного напряжения, учитывается взаимодействие между всеми дислокациями скопления, которое играет в данном случае значительную роль. Для расчета взаимодействия между дислокациями в правую часть уравнения (1) введено дополнительное слагаемое  $q$ . Величина  $q$  — это усилие, создаваемое в точке  $\lambda$  данного дислокационного сегмента со стороны всех

уже испущенных источником дислокационных петель:

$$q(\lambda, t) = \sum \frac{\sigma_{yz}}{\sigma_{кр}},$$

где  $\sigma_{yz}$  — скалывающее напряжение в точке с координатами  $(x, y)$ , которое определяет взаимодействие дислокаций между собой;  $\sigma_{кр}$  — критическое напряжение (минимальное напряжение, при котором происходит образование источником ФР петли дислокации без учета воздействия со стороны других дислокаций). Суммирование выполняется по всем прямолинейным отрезкам дислокаций, с помощью которых представляются все дислокационные линии в модели.

Поле напряжений в точке с координатами  $(x, y)$ , создаваемое отрезком дислокации с координатами концов  $(x_1, y_1)$  и  $(x_2, y_2)$  определяли в работе [1]:

$$\sigma_{yz} = -\frac{Gb}{4\pi} \left\{ J_1 \left[ ax + \frac{v}{v-1}(c-y) \right] + J_2 \frac{a}{v-1} \right\}, \quad (2)$$

где  $v$  — коэффициент Пуассона;

$$a = \frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2}; \quad c = \frac{x_1 y_1 - x_2 y_2}{x_1 - x_2};$$

$$J_1 = \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx'}{R^3}, \quad J_2 = \int_{x_1}^{x_2} \frac{x' dx'}{R^3};$$

$$R = \sqrt{(x - x')^2 + (y - ax' - c)^2}.$$

Именно эта компонента  $\sigma_{yz}$  поля напряжений определяет взаимодействие дислокаций в плоскости скольжения.

Головная дислокация, испущенная источником (рис. 2, а), закрепляется на некотором расстоянии от него, как будто встретив на своем пути непреодолимое препятствие. Следующая дислокация, приближаясь к первой, испытывает на себе ее воздействие. Оно возрастает по мере приближения к ней и препятствует дальнейшему продвижению дислокации,

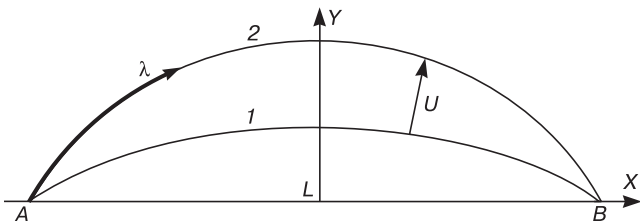


Рис. 1. Движение дислокационного сегмента, закрепленного в точках А и В:  
1, 2 — последовательные конфигурации движения сегмента  
Figure 1. Movement of Dislocation Segment Pinned at Points A and B:  
(1 and 2) sequential segment movement configurations

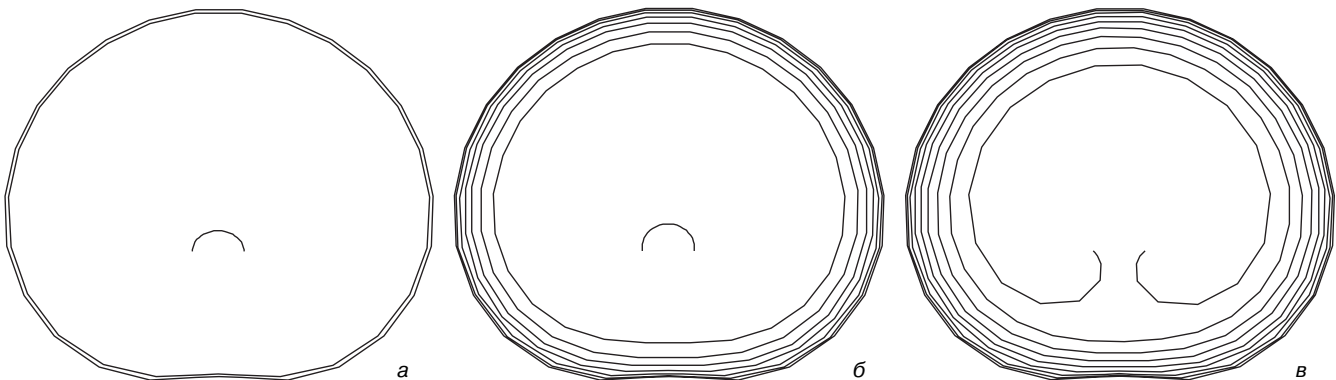


Рис. 2. Скопления, образовавшиеся при различных внешних напряжениях:  
а —  $\sigma/\sigma_{кр} = 1,1$ ; б — 2; в — 4  
Figure 2. Pileups Formed at Different External Stresses:  
 $\sigma/\sigma_{cr} =$  (a) 1.1; (b) 2 and (c) 4

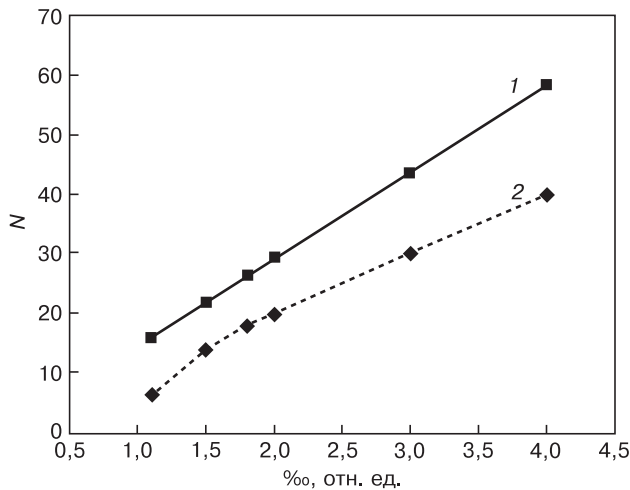


Рис. 3. Зависимости числа (N) дислокаций в скоплении от внешнего напряжения (σ/σ<sub>кр</sub>):  
1 — расчет, согласно работе [1];  
2 — расчет, согласно рассматриваемой модели

Fig. 3. Number of Dislocations in a Pileup (N) as a Function of External Stress (σ/σ<sub>cr</sub>):  
(1) calculation according to [1], (2) calculation using the present model

вплоть до полной остановки. Таким образом, начинает образовываться дислокационное скопление, в котором все дислокационные линии действуют друг на друга. Все последующие дислокации, испущенные источником, испытывают на себе воздействие со стороны скопления. Процесс генерации петель источником прекращается, когда сумма внешнего напряжения и напряжения образовавшегося скопления становится меньше критического напряжения срабатывания источника σ<sub>кр</sub>.

При решении системы линейных уравнений, полученных для численного решения уравнения (1) движения дислокаций без учета воздействия со стороны других дислокаций, применяют метод прогонки [8]. Но в рассматриваемом случае при учете данного воздействия он неприемлем. Это связано с тем, что

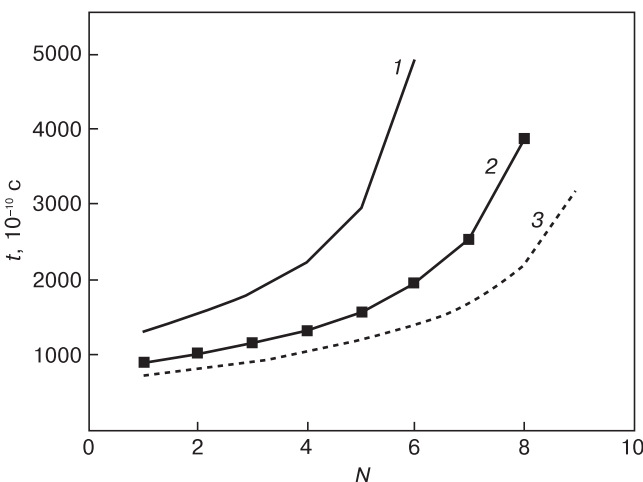


Рис. 4. Зависимости времени образования петель от номера дислокации скопления (K = σ/σ<sub>кр</sub>):  
1 — K = 1,5; 2 — 1,8; 3 — 2

Fig. 4. Loop Formation Time as a Function of Pileup Dislocation Number (K = σ/σ<sub>cr</sub>):  
(1) K = 1.5, (2) 1.8, and (3) 2

появляются ненулевые элементы, не лежащие на одной из трех диагоналей системы уравнений, и матрица коэффициентов перестает быть чисто трехдиагональной. Поэтому применяется метод Гаусса—Зейделя, для которого, во-первых, выполняется условие сходимости, а во-вторых, обеспечивается заданная точность.

Необходимо заметить, что учет взаимодействия дислокаций при образовании скопления требует значительных вычислительных ресурсов, поэтому для ускорения расчетов применено распараллеливание вычислений, проводимое с использованием вычислительного 38-ядерного кластера T-Edge-10 Костромского государственного университета им. Н. А. Некрасова и позволившее свести время вычислений к приемлемым величинам.

### Результаты и их обсуждение

Образующиеся в результате расчетов скопления дислокаций при различных внешних усилиях представлены на рис. 2. Можно отметить очевидное свойство образующихся скоплений. Чем больше внешнее напряжение, тем больше количество дислокаций в скоплении. Источник может быть заблокирован как до достижения сегментом критической конфигурации (см. рис. 2, а), так и после (см. рис. 2, б и в).

На рис. 3 построены две зависимости числа дислокаций в скоплении от внешнего приложенного напряжения. Первая из них — для скопления прямолинейных дислокаций, рассчитанная по формуле, приведенной в работе [1]:

$$N = \frac{(1 - \nu)l\sigma}{Gb},$$

где *l* — длина скопления. Вторая кривая — по результатам работы представленной модели. Из рис. 3 видно, что источник ФР дает меньшее число дислокаций в скоплении по сравнению с данными работы [1]. Это можно объяснить уменьшением действия внешнего напряжения за счет противоположного воздействия линейного натяжения криволинейных дислокаций, продуцируемых источником ФР. В результате дислокационные скопления получаются более «рыхлыми», чем для прямолинейных дислокаций [1, 11].

На рис. 4 представлены зависимости времени образования дислокационных петель в скоплении при различном внешнем напряжении. Очевидно, что чем больше внешнее напряжение, тем время образования петель с одинаковым номером меньше. Кривые имеют асимптотическое поведение из-за блокировки источника обратными напряжениями.

### Заключение

Представлены математическая модель формирования дислокационного скопления, образованного источником ФР, и результаты ее исследования.

Показано, что наиболее значимый результат работы — моделирование движения концентрических дислокаций вокруг источника ФР при их взаимном влиянии друг на друга. Благодаря этому получена возможность визуального отображения скопления круговых дислокаций вокруг источника ФР и их исследования.

Дислокационные скопления, образованные источником ФР и имеющие вид замкнутых петель, обладают меньшей плотностью дислокаций, являются более «рыхлыми» по сравнению со скоплениями прямолинейных дислокаций, исследованными ранее [1].

#### Библиографический список

1. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. — М.: Атомиздат, 1972. — 600 с.
2. Предводителей, А. А. Физика кристаллов с дефектами / А. А. Предводителей, Н. А. Тяпунина, Г. М. Зиненкова, Г. В. Бущева. — М.: Изд-во МГУ, 1986. — 260 с.
3. Akarapu, S. Dislocation pile-ups in stress gradients revisited / S. Akarapu, J. P. Hirth // *Acta Materialia*. — 2013. — V. 61, N 10. — P. 3621—3629.
4. Нацик, В. Д. Акустическая эмиссия при образовании дислокационного скопления источником Франка—Рида / В. Д. Нацик, К. А. Чижко // *Физика твердого тела*. — 1978. — Т. 20, № 7. — С. 1933—1936.
5. Шибков, А. А. Макролокализация пластической деформации при прерывистой ползучести алюминий—магниевого сплава АМг6 / А. А. Шибков, А. Е. Золотов, М. А. Желтов, А. А. Денисов, М. Ф. Гасанов // *Журнал технической физики*. — 2014. — Т. 84, № 4. — С. 41—47.
6. Шибков, А. А. Морфологический переход от евклидовой к фрактальной форме полосы Людерса в алюминий—магниево-сплаве АМг6 / А. А. Шибков, А. Е. Золотов, М. А. Желтов, А. А. Денисов // *Физика твердого тела*. — 2011. — Т. 53, № 5. — С. 833—840.
7. Шмидт, Н. М. Исследование деградации внешней квантовой эффективности ультрафиолетовых светодиодов на основе гетероструктур AlGaIn/GaN, выращенных методом хлоридно-гидридной эпитаксии / Н. М. Шмидт, А. С. Усиков, Е. И. Шабунина, А. Е. Черняков, А. В. Сахаров, С. Ю. Курин, А. А. Антипов, И. С. Бараш, А. Д. Роевков, Ю. Н. Макаров, Н. Helava // *Письма в журнал технической физики*. — 2014. — Т. 40, № 13. — С. 73—80.
8. Хемминг, Р. В. Численные методы / Р. В. Хемминг. — М.: Наука, 1968. — 400 с.
9. Благовещенский, В. В. Увеличение скорости пластической деформации под действием ультразвука / В. В. Благовещенский, И. Г. Панин // *Физика металлов и металловедение*. — 2007. — Т. 103, № 4. — С. 445—448.
10. Благовещенский, В. В. Исследование модели дислокационного скопления источника Франка—Рида / В. В. Благовещенский, И. Г. Панин // *Изв. вузов. Материалы электрон. техники*. — 2012. — № 1. — С. 40—45.
11. Благовещенский, В. В. Акустическая эмиссия при срыве дислокационного скопления / В. В. Благовещенский, И. Г. Панин, Д. С. Андрианов // XIII Международный семинар «Физико-математическое моделирование систем». — Воронеж: ВГТУ, 2014. — Ч. 1. — С. 47—50.

Статья поступила в редакцию 16 декабря 2014 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics. 2015, vol. 18, no. 2, pp. 133–136.

#### Formation Of Dislocation Pileup by Frank–Read Source

Vladimir V. Blagoveshchenskii<sup>1</sup> — Professor, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Associate Professor (blagovvv@list.ru); Igor G. Panin<sup>2</sup> — Professor, Dr. Sci. (Eng.), Associate Professor (igpanin@list.ru); Dmitry S. Andrianov<sup>2</sup> — Graduate Student; Svetlana N. Suslina<sup>2</sup> — Assistant

<sup>1</sup>Kostroma State Nekrasov University,  
14 May 1 Str., Kostroma, 156961, Russia

<sup>2</sup>Kostroma State Technological University,  
17 Dzerzhinsky Str., Kostroma 156005, Russia

**Abstract.** Dislocation pileups play an important role in the formation and propagation of strain in single crystals and polycrystals. They are the main source of cracking. Dislocation pileups are often referred to as the cause of serrated plastic strain pattern and degradation of the external quantum efficiency of UV LEDs. A dynamic physical model describing the formation of dislocation pileup by Frank–Read source has been presented that allows characterizing not only the structure but also time parameters of pileups. We provide data on the dislocation pile-ups e.g. dislocation configuration in a pileup, number of dislocations in a pile-up as a function of external stress, formation time of new dislocation loops and time to source blocking by the opposite strain generated by pileup dislocations. We compare our experimental results for pileups formed by Frank–Read source with results for pileups of straight edge dislocations. A large calculation effort is required to take into account the interaction of pileup dislocations. To accelerate our calculations we conducted them in parallel runs using a T–Edge–10 38–nuclei cluster.

**Keywords:** modeling, crystal, dislocation, pileups, defect, interaction, Frank–Read source.

#### References

1. Khirt Dzh., Lote I. *Teoriya dislokatsii* [The theory of dislocation]. Moscow: Atomizdat, 1972. 600 p. (In Russ.)
2. Predvoditelev A. A., Tyapunina N. A., Zinenkova G. M., BUSHUEVA G. V. *Fizika kristallov s defektami* [Physics crystals with defects]. Moscow: Izd. MGU, 1986. 260 p. (In Russ.)

3. Akarapu S., Hirth J. P. Dislocation pile-ups in stress gradients revisited. *Acta Materialia*. 2013, vol. 61, no. 10, pp. 3621—3629. DOI: 10.1016/j.actamat.2013.02.049
4. Natsik V. D., Chishko K. A. Acoustic emission during the formation of dislocation pile–source Frank Reed. *Fizika tverdogo tela = Physics of the Solid State*. 1978, vol. 20, no. 7, pp. 1933—1936. (In Russ.)
5. Shibkov A. A., Zolotov A. E., Zheltov M. A., Denisov A. A., Gasanov M. F. Plastic deformation macrolocalization during serrated creep of an aluminum–magnesium Al–6 wt % Mg alloy. *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki = Journal of Applied Physics*. 2014, vol. 84, no. 4, pp. 40—46. (In Russ.)
6. Shibkov A. A., Zolotov A. E., Zheltov M. A., Denisov A. A. Morphological transition from the Euclidean to the fractal shape of the Lüders band in the aluminum–magnesium alloy АМg6. *Fizika tverdogo tela = Physics of the Solid State*. 2011, vol. 53, no. 5, pp. 833—840. (In Russ.)
7. Shmidt N. M., Usikov A. S., Shabunina E. I., Chernyakov A. E., Sakharov A. V., Kurin S. Yu., Antipov A. A., Barash I. S., Roenkov A. D., Makarov Yu. N., Helava N. Study of the degradation of the external quantum efficiency of UV LEDs based on AlGaIn/GaN heterostructures grown by chloride–hydride vapor–phase epitaxy. *Pis'ma v zhurnal tekhnicheskoi fiziki = Technical Physics Letters*. 2014, vol. 40, no. 13, pp. 73—80. (In Russ.)
8. Hamming R. W. *Numerical methods*. NY: MC Grow–Hill Book Company, inc., 1962.
9. Blagoveshchenskii V. V., Panin I. G. An increase in the rate of plastic deformation under the effect of ultrasound. *The Physics of Metals and Metallography*. 2007, vol. 103, no. 4, pp. 424—426. DOI: 10.1134/S0031918X07040163
10. Blagoveshchenskii V. V., Panin I. G. Study of Frank–Read dislocation source model. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics*. 2012, no. 1, pp. 40—45.
11. Andrianov D. S., Blagoveshchenskii V. V., Panin I. G. Acoustic emission during disruption of dislocation pile–ups. *XIII Mezhdunarodnyi seminar «Fiziko–matematicheskoe modelirovanie sistem» = XIII international seminar «Physico–mathematical modeling of systems»*. Voronezh: VSTU, 2014. Vol. 1, pp. 47—50.

Received December 16, 2014