

УДК 548.4:53.072

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ДИСЛОКАЦИОННОГО ИСТОЧНИКА ФРАНКА—РИДА

© 2011 г. В. В. Благовещенский, И. Г. Панин
Костромской государственной технологической университет

Представлены вычислительные эксперименты, проведенные на динамической модели дислокационного источника Франка—Рида. Модель основана на численном решении уравнения в частных производных параболического типа. Построены зависимости числа образующихся дислокационных петель от значений основания источника и приложенного усилия. Получены графики изменения скорости движения дислокационной петли во время развития источников с разными основаниями и при разных напряжениях. Для каждого графика изменения скорости движения показаны характерные формы, принимаемые дислокационной петлей источника.

Ключевые слова: дислокация, источник, основание, эволюция, напряжение, модель, уравнение, частные производные, численное решение.

Введение

Моделирование дислокационных источников началось и интенсивно развивалось во второй половине прошлого века, но практически все модели были квазистатическими [1—6]. При таком подходе можно получить некоторые статические характеристики материалов, как, например, предел текучести, но невозможно исследовать весь процесс деформации, развивающийся во времени. Ниже рассмотрена динамическая модель эволюции дислокационного источника Франка—Рида (ФР), начало которой было положено в работе [7]. Уравнение движения модели учитывает дислокационную вязкость материала, поскольку в нем присутствует слагаемое, зависящее от времени. Уравнение было решено конечно-разностным методом и использовано в модели движения дислокационной линии, состоящей из отдельных сегментов, через систему точечных дефектов [8, 9]. Также ниже представлены исследования некоторых характеристик работы источника ФР, которые ранее не были опубликованы.

Модель

В динамической модели (с учетом дислокационной вязкости) для малых перемещений U при переходе из одной конфигурации 1 в соседнюю с ней 2 (рис. 1) в континуальном приближении используем уравнение

$$c \frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial \lambda^2} = P - \frac{1}{R(\lambda, t)}; \quad (1)$$

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

В начальный момент времени принимаем, что

$$U(\lambda, 0) = 0 \quad \forall \lambda, \quad (2)$$

а в остальные моменты для исходного положения дислокационной кривой выбираем ее положение, полученное на предыдущем шаге. Здесь $c = B/(Gb)^2$; $P = (\sigma/Gb)$; t — время; G — модуль сдвига; b — модуль вектора Бюргерса; B — коэффициент динамической вязкости; $R(\lambda, t)$ — радиус кривизны дислокационного сегмента (ДС); σ — значение внешнего напряжения; λ — криволинейная координата вдоль ДС; L — длина сегмента в криволинейных координатах. Постоянные величины G , b , B , L характеризуют изучаемый материал и вместе с σ являются параметрами модели. Среда считается неограниченной, однородной и изотропной, силы инерции не учитываются. Уравнения (1) и (2) справедливы для таких смещений сегмента U , что $U \ll L$ для каждого временного шага. При этом суммарное перемещение точек ДС за конечный интервал времени может быть значительным. Уравнение (1) не содержит слагаемого, учитывающего влияние отрезков, закрепляющих дислокацию («возжей»), поскольку, согласно предварительным расчетам, их влияние в данной области значений l несущественно.

Уравнение (1) является уравнением в частных производных параболического типа. Оно допускает решение в виде ряда Фурье, при этом Фурье-образ сил, стоящих в правой части уравнения, выражается через интегралы, которые могут быть вычислены только численно, поскольку

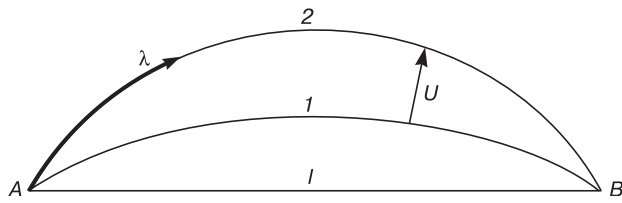


Рис. 1. Последовательные конфигурации ДС

ку численно задается функция $R(\lambda, \tau)$. В работе [10] такое решение использовали для построения математической модели эволюции сегмента. Однако при реализации этой модели стало значимым явление Гиббса [11], которое даже при использовании сглаживающих множителей не позволило выполнить расчеты для всей области значений физических параметров.

Ниже рассмотрено численное решение уравнений (1) и (2) в виде конечных разностей [8], при котором на каждом шаге осуществляется переход из положения 1 кривой АВ в соседнее положение 2 (см. рис. 1). Решение строится в криволинейной системе координат, где одна ось совпадает с кривой АВ, а вторая ось — перпендикулярна к первой оси, точка А — начало координат. Рассматриваемый непрерывный сегмент АВ заменяется ломаной прямой с N точками, которые на первоначальном этапе расположены на прямой линии на равном расстоянии друг от друга.

Вычислительные эксперименты и их обсуждение

Используя принятую выше модель, рассмотрим изменение поведения источника ФР при изменении некоторых параметров модели, а именно: скорости образования дислокационных петель (число образующихся дислокационных петель за определенное время) в зависимости от размера основания источника и приложенной нагрузки; минимального усилия, при котором происходит образование дислокационной петли в зависимости от размера основания источника.

Зависимость числа образующихся дислокационных петель от длины основания источника. По результатам экспериментов, проведенных с источником ФР при различной длине его основания, построены зависимости числа образовавшихся петель в единицу времени при различных приложенных к образцу усилиях (рис. 2). По одной оси будем откладывать длину источника, по другой — количество образующихся петель за 1 с. Из рис. 2 видно, что характер построенных кривых при любом усилии одинаков. Начальной точкой типичной кривой будет точка, соответствующая минимальной длине основания, при которой возможно образование дислокационных петель при заданном напряжении (для $\sigma = 2,88$ МПа, $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м), т. е. при таком соотношении приложенного усилия и длины основания источника,

ДС преодолевает критическое положение и развивается до момента самопересечения. Критическая конфигурация эволюции источника ФР с этой длиной основания и этим усилием нагружения представляет собой положение ДС, при достижении которого скорость движения ДС значительно уменьшается, а после его прохождения — увеличивается. С точностью до масштаба (далее в работе рис. 3, 4, 6, 8 и 10 приведены без учета масштаба) критическое положение ДС выглядит, как показано на рис. 3, а.

При дальнейшем развитии ДС принимает конечное положение (положение самопересечения), показанное на рис. 3, б. Вообще говоря, ДС развивается и дальше: в точке самопересечения происходит аннигиляция, и сегмент разбивается на две части. Одна из них, внутренняя, через несколько шагов переходит в начальное положение, а другая, внешняя, образует замкнутую петлю, которая отрывается от точек закрепления и продолжает увеличиваться до выхода

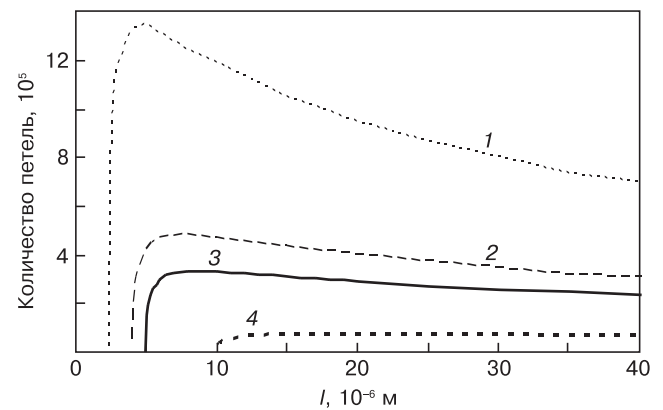


Рис. 2. Зависимость числа образующихся за 1 с дислокационных петель от длины основания источника при различных приложенных к образцу усилиях: 1 — 5,8 МПа; 2 — 3,5; 3 — 2,9; 4 — 1,5

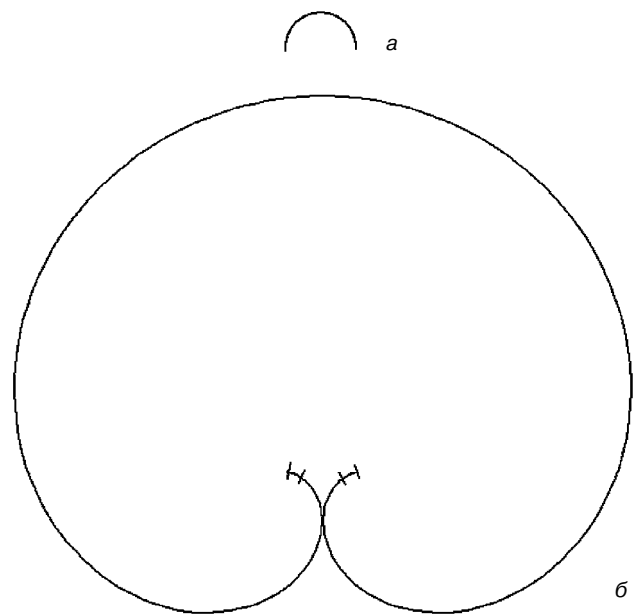


Рис. 3. Развитие ДС при минимальном усилии ($\sigma = 2,88$ МПа, $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м): а — критическое положение; б — конечное положение

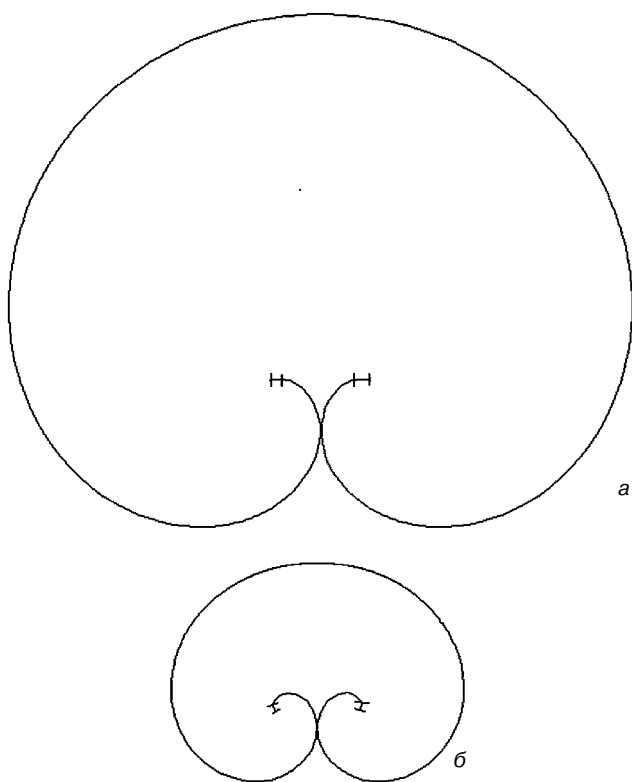


Рис. 4. Конфигурация самопересечения ДС при различных длинах основания:
 а — $\sigma = 2,88$ МПа, $l = 8,1 \cdot 10^{-6}$ м; б — $\sigma = 2,88$ МПа, $l = 30 \cdot 10^{-6}$ м

на границу образца. Но в рассматриваемом случае нас интересует эволюция ДС только до момента самопересечения («отшнуровывания»). Из рис. 3, б видно, что крайние отрезки (первый и последний) ДС не доходят до горизонтального положения, оставаясь ниже уровня точек закрепления. В конечном положении значение общей «заметенной» ДС площади будет составлять $6,57 \cdot 10^{-10}$ м², а максимальный диаметр — $4,41 \cdot 10^{-5}$ м.

При увеличении длины основания число образовавшихся петель увеличивается до максимального значения для данного усилия, при этом ДС принимает конечную конфигурацию, где крайние отрезки сегмента занимают практически горизонтальное положение (рис. 4, а), совпадая с линией, проведенной через точки закрепления. В конечном положении общая заметенная ДС площадь при $\sigma = 2,88$ МПа и $l = 8,1 \cdot 10^{-6}$ м будет составлять $8,92 \cdot 10^{-10}$ м², а максимальный диаметр — $5,31 \cdot 10^{-5}$ м.

При дальнейшем увеличении длины основания число образовавшихся петель начинает уменьшаться, а крайние отрезки ДС начинают подниматься над горизонтальным уровнем, т. е. сегмент закручивается в двойную спираль (рис. 4, б). В конечном положении общая заметенная ДС площадь при $\sigma = 2,88$ МПа и $l = 30 \cdot 10^{-6}$ м будет составлять $2,29 \cdot 10^{-9}$ м², а максимальный диаметр — $1,04 \cdot 10^{-4}$ м.

Аналогичная картина развития ДС источника ФР наблюдается и при других значениях напряжения σ .

Таким образом, для любого усилия, приложенного к источнику ФР, существует определенная длина основания источника, при которой скорость образования дислокационной петли будет максимальной. Общая заметаемая ДС площадь и максимальный диаметр ДС увеличиваются с ростом длины основания источника, и эта зависимость близка к линейной.

Изменение скорости движения дислокационной петли в процессе эволюции источника Франка—Рида.

Скорость движения ДС будем измерять как площадь, заметаемую сегментом в единицу времени, исходя из чего построим ряд зависимостей для источника с постоянной длиной основания ($l = 5 \cdot 10^{-6}$ м) при различных прикладываемых к нему усилиях. Первая кривая построена при постоянном напряжении $\sigma = 2,88$ МПа от момента начала приложения нагрузки до момента самопересечения ДС (рис. 5). Такая кривая характерна для напряжения, минимально необходимого для преодоления критического положения ДС, и на ней можно выделить несколько точек. Точка I соответствует моменту времени $t = 1,1 \times 10^{-7}$ с и конфигурации ДС, изображенной на рис. 6, а. После этого ДС начинает развиваться очень медленно до момента времени $t = 1,05 \cdot 10^{-4}$ с, переходя в критическую конфигурацию (см. рис. 6, б), которой на рис. 5 соответствует точка II. Заметаемая на этом участке площадь практически не увеличивается, скорость движения мала. В момент времени, соответствующий точке II, дислокационная петля теряет устойчивость и за небольшой промежуток времени переходит в точку III, принимая конфигурацию, изображенную на рис. 6, в. Заметаемая площадь и скорость движения ДС существенно увеличиваются. Точка III на рис. 5 соответствует моменту времени $t = 1,07 \cdot 10^{-4}$ с, в который крайние отрезки ДС пересекают вертикальное положение (см. рис. 6, в), после чего скорость движения ДС уменьшается. Развитие сегмента замедляется, поскольку вблизи точек закрепления участки ДС приобретают большую кривизну. В конечном положении общая заметенная ДС площадь будет составлять $6,57 \cdot 10^{-10}$ м², а максимальный диаметр — $4,41 \cdot 10^{-5}$ м.

Увеличивая напряжение до $\sigma = 3,5$ МПа, что соответствует усилию, немногим больше минималь-

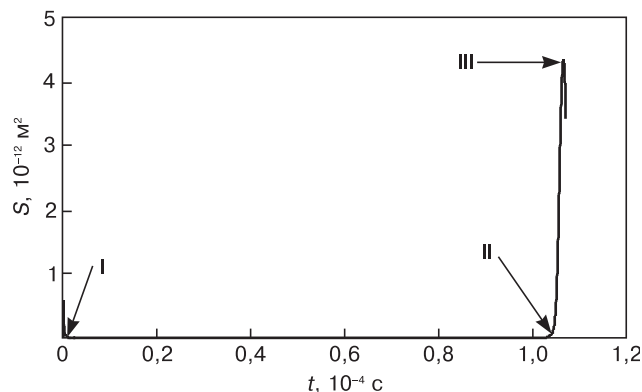


Рис. 5. Изменение скорости движения ДС при $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м и $\sigma = 2,88$ МПа

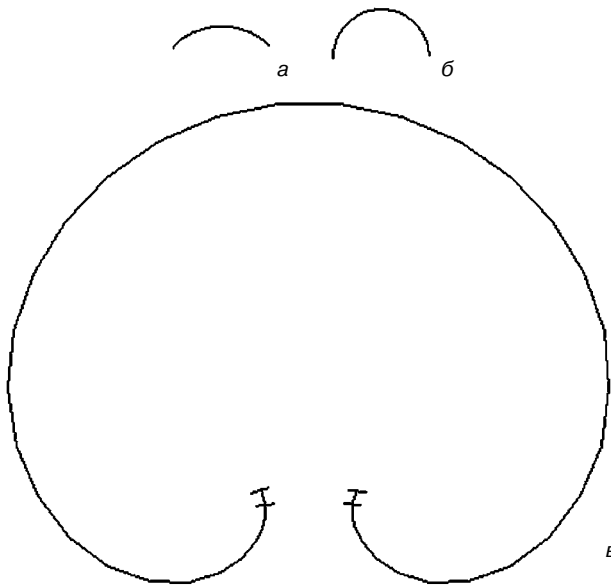


Рис. 6. Последовательные конфигурации движения ДС при $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м и $\sigma = 2,88$ МПа:
а–в — точки I–III (а — $t = 1,1 \cdot 10^{-7}$ с; б — $1,05 \cdot 10^{-4}$; в — $1,07 \cdot 10^{-4}$)

ного, получаем другую типичную кривую изменения скорости движения ДС (рис. 7), отличающуюся от первой. На ней также можно выделить три точки, соответствующие моментам времени $t = 1,7 \cdot 10^{-7}$, $7,2 \cdot 10^{-7}$, $1,94 \cdot 10^{-6}$ с соответственно, и конфигурациям, изображенным на рис. 8. На рис. 8, б изображено критическое положение ДС при данном соотношении длины основания источника и прикладываемого усилия. Конфигурация, представленная на рис. 8, в, после которой происходит снижение скорости движения ДС, также имеет крайние отрезки ДС, расположенные почти параллельно вертикальной прямой. В конечном положении общая заметенная ДС площадь будет равна $5,11 \cdot 10^{-10}$ м², а максимальный диаметр — $3,95 \cdot 10^{-5}$ м.

При значительном увеличении прикладываемого напряжения ($\sigma = 12$ МПа) получаем следующую типичную кривую изменения скорости движения ДС (рис. 9), на которой можно выделить две характерные точки (первая и вторая точки, рассмотренные в двух предыдущих случаях, на данной кривой практиче-

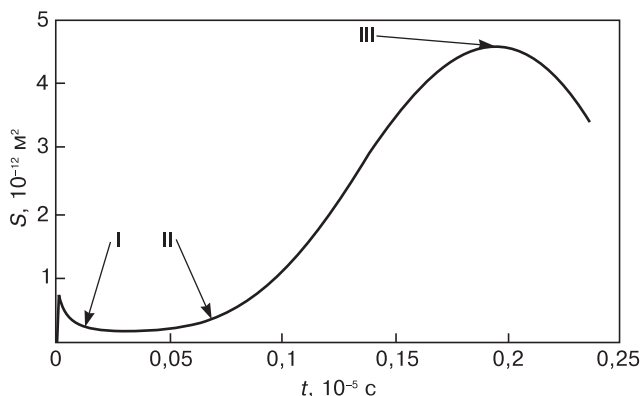


Рис. 7. Изменение скорости движения ДС при $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м и $\sigma = 3,5$ МПа

ски сливаются друг с другом). Этим точкам соответствуют моменты времени $t = 5 \cdot 10^{-9}$ и $3,3 \cdot 10^{-8}$ с, и конфигурации ДС, изображенные на рис. 10, а и б, которые становятся заметно вытянутыми вдоль оси источника. На рис. 10, а изображено критическое положение ДС для данного соотношения длины основания источника и прикладываемого усилия. Но и в этом случае рост скорости движения ДС происходит до того момента, когда крайние отрезки ДС займут положение, близкое к вертикальному (см. рис. 10, б), после чего скорость уменьшается до момента самопересечения (рис. 10, в). В конечном положении общая заметенная ДС площадь будет составлять $4,44 \times 10^{-11}$ м², а максимальный диаметр — $1,57 \cdot 10^{-5}$ м.

Таким образом, на всех представленных кривых изменения скорости движения ДС для любого усилия, прикладываемого к источнику с постоянной длиной основания, существуют две характерные точки, первая из которых соответствует критическому положению ДС для данного соотношения длины основания источника и прикладываемого усилия, а вторая — максимальной скорости развития ДС.

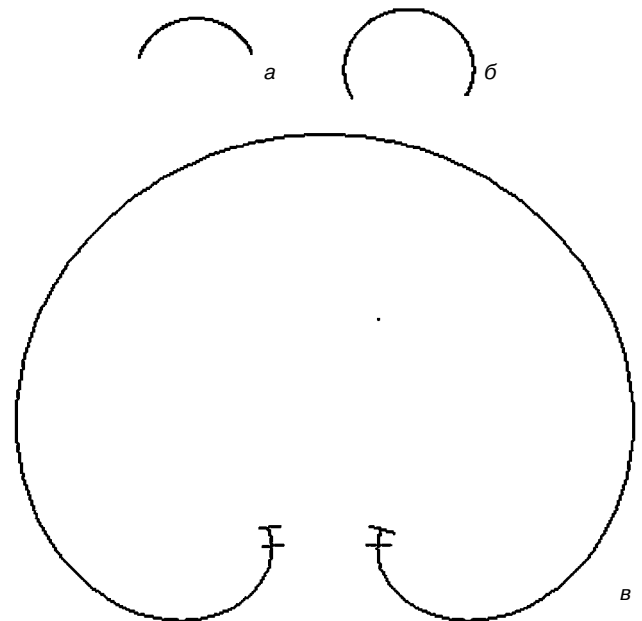


Рис. 8. Последовательные конфигурации движения ДС при $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м и $\sigma = 3,5$ МПа:
а–в — точки I–III (а — $t = 1,7 \cdot 10^{-7}$ с; б — $7,2 \cdot 10^{-7}$; в — $1,94 \cdot 10^{-6}$)

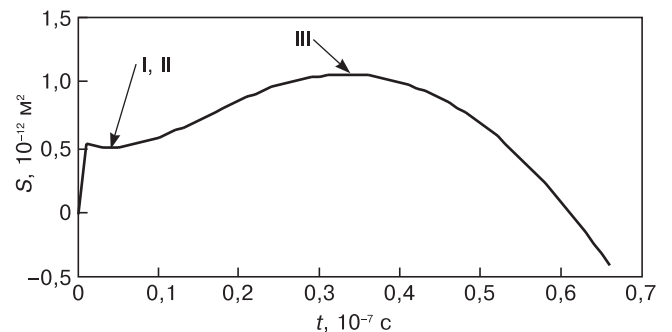


Рис. 9. Изменение скорости движения ДС при $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м и $\sigma = 12$ МПа

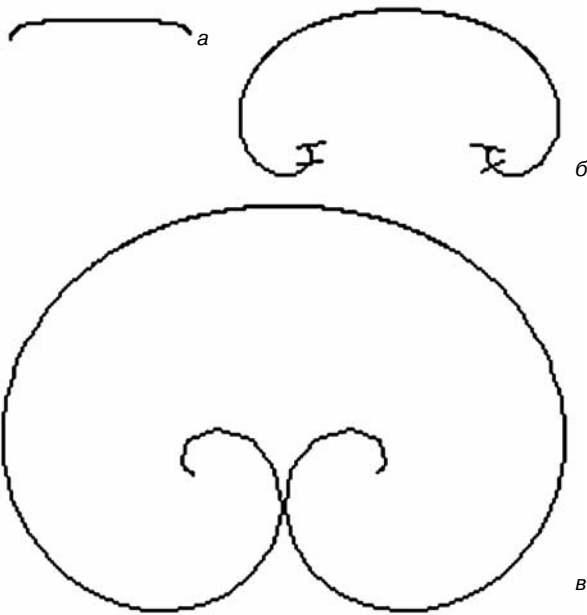


Рис. 10. Последовательные конфигурации движения ДС при $l = 5 \cdot 10^{-6}$ м и $\sigma = 12$ МПа

Конфигурации, принимаемые ДС в обеих точках, зависят от прикладываемого усилия. При этом с увеличением напряжения ДС вытягивается вдоль линии точек закрепления источника, общая заметная площадь, а также максимальный диаметр ДС уменьшаются.

Зависимость числа образующихся дислокационных петель от значения приложенного усилия. Подобная зависимость строится при постоянной длине основания источника ФР (рис. 11). По одной оси будем откладывать напряжение, а по другой — количество образующихся петель за 1 с. Построим четыре кривые для разных длин источников. Из рис. 11 видно, что любая из четырех кривых является монотонно возрастающей, начинающейся от критического, т. е. минимального для данной длины источника напряжения. При своем развитии ДЛ приходится преодолевать сопротивление двух типов. Первый тип — это линейное натяжение дислокации, которое преобладает при нагрузках, прикладываемых к образцу, меньших некоторого значения. Например, для кривой с длиной основания $l = 2,5 \cdot 10^{-6}$ м (см. рис. 11, кривая 1) напряжение будет составлять $\sim 7,5$ МПа. Второй тип — вязкое сопротивление материала. На участке, где напряжение больше некоторого значения (7,5 МПа для кривой 1), линейное натяжение уже не оказывает существенного влияния, и на первое место по значимости выходит вязкость. Этот участок кривых на рис. 11 близок к линейной функции. Из рис. 11 также видно, что все построенные кривые пересекаются друг с другом. Это означает, что из двух источников с разной длиной основания до определенного напряжения генерируется большее количество петель на том из них, длина основания которого больше. Например, для кривой 4 ($l = 1,5 \cdot 10^{-5}$ м) по сравнению с кривой 1 ($l = 2,5 \cdot 10^{-6}$ м) до напряжения $\sigma \approx 6,5$ МПа.

При превышении этого напряжения большее количество петель генерируется на источнике с меньшей длиной основания.

Таким образом, при построении кривых зависимости количества образующихся петель от приложенного усилия имеет место инверсия, которая показывает, что при малых напряжениях источники с большей длиной основания генерируют большее число дислокационных петель в единицу времени, а для больших напряжений — наоборот, источники с меньшей длиной основания генерируют большее число петель.

Зависимость минимального напряжения образования дислокационной петли от длины основания источника. Как уже было показано выше, источники с разной длиной основания начинают свою работу только при определенном напряжении, характерном для данного источника. Построим сводную кривую, которая дает представление о минимальных напряжениях, необходимых для продавливания критического положения источника при различной его длине (рис. 12). По одной оси будем откладывать длину источника, а по другой — напряжение продавливания. Полученная кривая гиперболического типа (см. рис. 12, кривая 1) свидетельствует о том, что чем больше длина основания источника, тем меньше усилия необходимо для его продавливания. По точкам

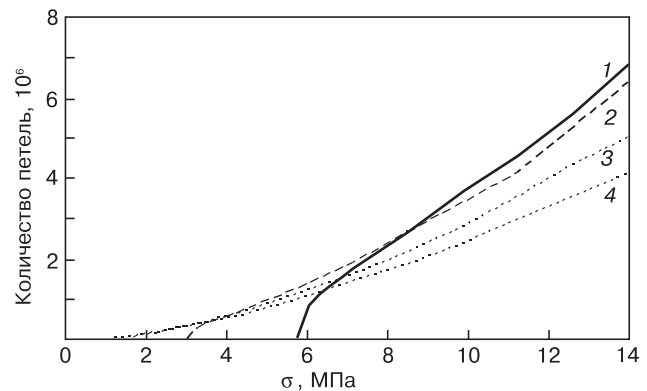


Рис. 11. Зависимость числа образующихся за 1 с дислокационных петель от приложенного усилия при разных длинах основания источника l , м: 1 — $2,5 \cdot 10^{-6}$; 2 — $5 \cdot 10^{-6}$; 3 — $1 \cdot 10^{-5}$; 4 — $1,5 \cdot 10^{-5}$

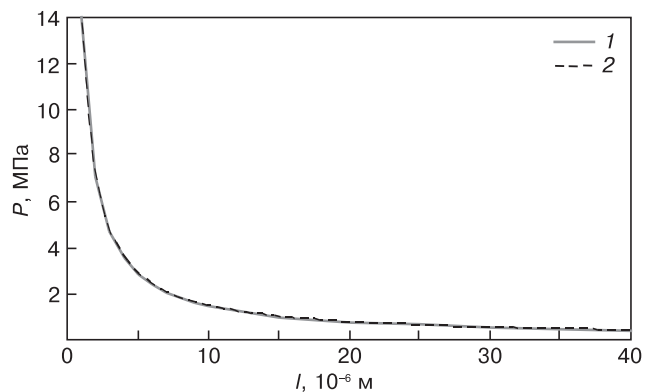


Рис. 12. Зависимости минимального усилия продавливания от длины основания источника: 1 — эксперимент; 2 — расчет

построенной кривой строим аппроксимирующую зависимость (см. рис. 12, кривая 2), которая с хорошим приближением описывает исходную кривую: $y = 14,4/x$. Полученная зависимость практически совпадает с известной теоретической зависимостью $\sigma = Gb/l$.

Заключение

Представлена математическая модель эволюции дислокационного источника ФР, с ее помощью проведены вычислительные эксперименты по исследованию некоторых характеристик источника. Показано, что для любого усилия, прикладываемого к источнику, существует длина основания, при которой количество генерируемых источником петель за единицу времени будет максимально. Установлено, что при работе любого источника ДС проходит некоторое критическое положение, форма которого и момент прохождения зависят от соотношения длины основания источника и приложенной нагрузки. Конечная форма источника в момент «отшнуровывания» также зависит от длины его основания и нагрузки. Количество генерируемых источником петель в единицу времени обусловлено соотношением длины его основания и приложенного напряжения, причем в полученной зависимости наблюдается инверсия. Установлено, что зависимость минимального напряжения продавливания от длины основания источника — гиперболическая. Все приведенные свойства источника могли быть получены только при использовании динамического уравнения развития

источника ФР, учитывающего дислокационную вязкость материала.

Библиографический список

1. **Формен, А.** Актуальные вопросы теории дислокаций. Движение дислокаций сквозь хаотические сетки препятствий / А. Формен, М. Мейкин. – М.: Мир, 1968. – С. 200—215.
2. **Дубнова, Г. Н.** О прогибании дислокационного сегмента и источника Франка—Рида / Г. Н. Дубнова, В. Л. Инденбом, А. А. Штольберг // Физика твердого тела. – 1968. – Т. 10. – С. 1760—1768.
3. **Стратан, Н. В.** Моделирование процесса движения дислокаций в дислокационном ансамбле / Н. В. Стратан, А. А. Предводителев // Там же. – 1970. – Т. 12. – С. 1729—1733.
4. **Попов, Л. Е.** Пластическая деформация сплавов / Л. Е. Попов, Т. А. Кобычев, В. С. Ковалевская. – М.: Металлургия, 1984. – 182 с.
5. **Белан, В. И.** Безактивационное проникновение дислокаций в хаотическую сетку точечных препятствий / В. И. Белан, А. И. Ландау // Металлофизика. – 1986. – Т. 8, № 2. – С. 103—108.
6. **Слободской, М. И.** Исследование явления скольжения в кристаллах методами имитационного моделирования / М. И. Слободской, Л. Е. Попов. – Томск: Изд-во ТГАСУ, 2004. – 450 с.
7. **Нацик, В. Д.** Динамика и звуковое излучение дислокационного источника Франка—Рида / В. Д. Нацик, К. А. Чишко // Физика твердого тела. – 1975. – Т. 17, № 1. – С. 342—345.
8. **Благовещенский, В. В.** Увеличение скорости пластической деформации под действием ультразвука / В. В. Благовещенский, И. Г. Панин // Физика металлов и материаловедение. – 2007. – Т. 103, № 4. – С. 445—448.
9. **Благовещенский, В. В.** Построение и исследование динамической модели преодоления дислокацией дефектов в кристалле / В. В. Благовещенский, И. Г. Панин // Изв. вузов. Материалы электрон. техники. – 2007. – № 2. – С. 51—53.
10. **Благовещенский, В. В.** Эволюция дислокационной структуры под действием ультразвука и неупругость кристаллов: Дис. ... докт. физ.-мат. наук / В. В. Благовещенский – Кострома: Костромской гос. технолог. ун-т, 2001. – 237 с.
11. **Хемминг, Р. В.** Численные методы / Р. В. Хемминг. – М.: Наука, 1968. – 400 с.

УДК 544–971.62:544.353.3:53.091:53.043:53.044

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ВИБРАЦИОННОЙ АКТИВАЦИИ РАСПЛАВОВ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

© 2011 г. И. Х. Аветисов, А. П. Садовский, А. В. Хомяков, С. Д. Белов
Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева

Экспериментально установлено, что теплота кристаллизации расплава сложного неорганического соединения увеличивается при активации расплава низкочастотными вибрациями. Анализ фазовых равновесий в приближении модели квазиидеальных растворов показал, что подобное увеличение при кристаллизации полупроводниковых соединений может быть связано с разрушением кластеров в расплаве.

Ключевые слова: кристаллизация неорганического расплава, активация расплава, ассоциаты в расплаве, кластеры в расплаве, низкочастотные вибрации.

Введение

Эффективное управление тепломассопереносом при выращивании кристаллов из расплава посредством низкоэнергетических воздействий, в частности низкочастотными вибрациями, было продемонстрировано как для конфигурации метода Бриджмена [1—4], так и метода Чохральского [5, 6].

Использование различных вариантов вибрационных воздействий на расплав при выращивании

кристаллов позволяет улучшить структурное качество, снизить плотность дислокаций, увеличить скорость роста при сохранении качества кристаллов, выровнять концентрацию легирующих примесей, собственных точечных дефектов по длине и диаметру кристаллов [7, 9]. Математическое моделирование тепломассопереноса в методах вращения тигля с ускорением (ACRT) [7, 8] и аксиальных низкочастотных вибраций (AVC) [9] позволило описать наблюдаемое в ростовых экспери-