

УДК 548.4

## РАССТОЯНИЯ, ПРОХОДИМЫЕ ДИСЛОКАЦИЕЙ ПО ПЛОСКОСТИ ПОПЕРЕЧНОГО СКОЛЬЖЕНИЯ ПРИ ЕЕ ДВИЖЕНИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА В НЕОДНОРОДНОМ ПО ПРОСТРАНСТВУ ПОЛЕ НАПРЯЖЕНИЙ

В. Ю. Богуненко, Г. В. Бушуева, М. И. Силис, Н. А. Тяпунина

(кафедра молекулярной физики)

E-mail: mol223@phys.msu.ru

**Методом компьютерного моделирования определены характеристики процесса поперечного скольжения винтовой дислокации, движущейся под действием ультразвука в неоднородном по пространству поле напряжений, создаваемом одноименной неподвижной дислокацией. Показано, что расстояния, проходимые дислокацией по плоскости поперечного скольжения, зависят от параметров ультразвука, кристаллографической ориентации образца и стартовых координат дислокации в поле задающей.**

Известно, что при ультразвуковом воздействии на кристалл происходит увеличение плотности дислокаций на 3–4 порядка [1]. Экспериментальное исследование элементарных актов размножения дислокаций, происходящих в объеме кристалла за относительно малые времена ( $10^{-5}$ – $10^{-6}$  с), в настоящее время не представляется возможным. Это можно сделать только методом ЭВМ моделирования. Проведенное в работе [2] моделирование процесса генерации дислокаций источником Франка–Рида под действием ультразвука (УЗ) показало, что источник, генерирующий петли в одной плоскости скольжения, создает лишь ансамбль виртуальных дислокаций, которые возникают и исчезают в течение одного периода УЗ. Для накопления испущенных источником дислокаций необходимо, чтобы реализовывалось поперечное скольжение (ПС) [3]. В этом случае важно расстояние, часто называемое высотой выброса, проходимое дислокацией по плоскости ПС до ее возврата в плоскость скольжения, параллельную первичной. Попытка учесть ПС при движении дислокации в ультразвуковом поле была сделана в работе [3], где точка выхода и высота выброса дислокации в плоскость ПС задавались как параметры задачи.

Физически наиболее обоснованной причиной ПС являются поля напряжений, имеющие скалывающие компоненты в плоскости ПС. Кроме внешней нагрузки источниками таких полей в кристаллах являются структурные дефекты, в том числе дислокации и их ансамбли.

Учет влияния реально существующих полей напряжений на движение дислокации под действием УЗ был проведен в наших работах [4–6], где методом компьютерного моделирования исследовался процесс движения винтовой дислокации под действием УЗ с учетом ее ПС в неоднородном по

пространству поле напряжений. Источником последнего служила неподвижная винтовая дислокация, одноименная со скользящей. Были определены типы траекторий и закон движения дислокации при различных параметрах УЗ и кристаллографических ориентациях образца. Расчеты проводились применительно к щелочногалоидным кристаллам NaCl для случая, когда плоскостями скольжения дислокации являлись плоскости (011) и (100).

Цель настоящей работы — методом ЭВМ моделирования в рамках модели, использованной в [4–6], рассчитать высоты выброса дислокации в плоскости ПС и проанализировать зависимости этих величин от параметров УЗ, кристаллографической ориентации образца и стартовых координат дислокации.

Основные положения модели состоят в следующем. Дислокации считаются прямолинейными бесконечными параллельными направлению  $[01\bar{1}]$  (ось  $z$  на рис. 1, а). На рис. 1, б представлено взаимное расположение винтовых дислокаций в проекции на плоскость  $(01\bar{1})$ , перпендикулярную линиям дислокаций (плоскость  $xy$ ). Положение задающей жестко закрепленной дислокации 1 характеризуется точкой  $(0, 0)$ , а подвижной (пробной) дислокации 2 — точкой  $(x, y)$ . Пробная дислокация, одноименная с задающей, может перемещаться в плоскостях скольжения  $xy$  (плоскости (011)) и ортогональных им плоскостях скольжения  $yz$  (плоскости (100)), следы которых показаны на рис. 1, б пунктирными линиями. В ультразвуковом поле деформация растяжения–сжатия происходит вдоль направления  $dd$ , которое лежит в плоскости (001) под углом  $\theta$  к оси четвертого порядка  $[010]$  (см. рис. 1, а).

Закон движения дислокации 2 определяется из уравнения вязкого движения

$$B\mathbf{V} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_3, \quad (1)$$

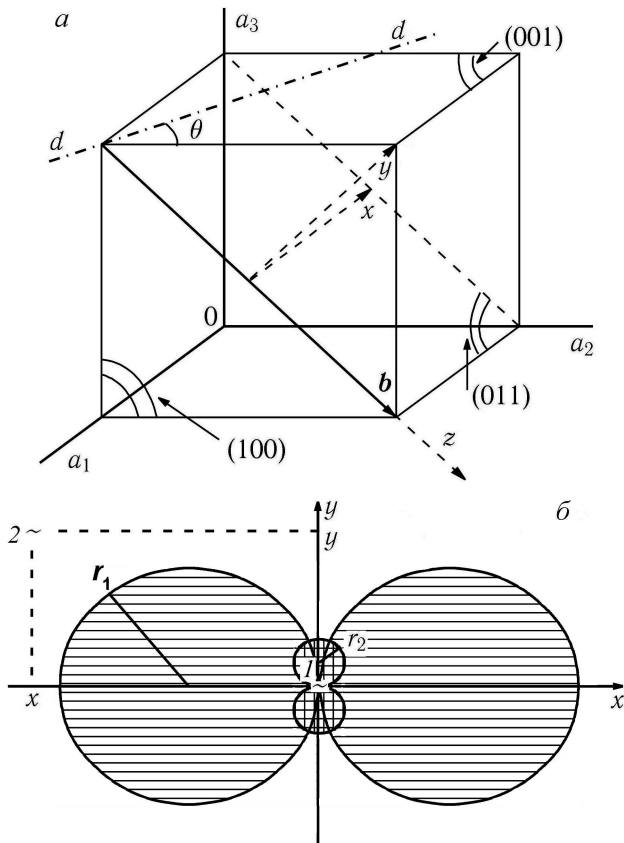


Рис. 1. Схема расположения дислокации и плоскостей скольжения в кристаллографической ячейке (а) и дислокаций в проекции на плоскость (011) (б). Дислокации отмечены символом ~. Заштрихованы области, в которых дислокация в начальный момент находиться не может

где  $V$  — скорость дислокации;  $B$  — коэффициент динамической вязкости;  $F_1 = m\sigma b$  — сила, действующая на дислокацию и обусловленная внешней нагрузкой ( $b$  — модуль вектора Бюргера;  $\sigma = \sigma^0 \sin(2\pi ft)$  — напряжение, изменяющееся во времени по гармоническому закону;  $\sigma^0$  и  $f$  — амплитуда и частота УЗ;  $t$  — время;  $m$  — соответствующий фактор Шмида;  $F_2 = b\tau^{st}$  — сила типа максимальной силы сухого трения ( $\tau^{st}$  — пороговое напряжение, при достижении которого дислокация начинает двигаться);  $F_3 = b\tau(x, y)$  — сила, обусловленная неоднородным по пространству полем напряжений  $\tau(x, y)$  задающей дислокации.

Считается, что дислокация движется по той плоскости скольжения, в которой в данный момент больше эффективное скальвающее напряжение  $\tau_i^{eff}$ . Дислокация движется по плоскости (011), если одновременно выполняются неравенства

$$|m_1\sigma + \tau_1| - \tau_1^{st} > 0 \text{ и } |\tau_1^{eff}| > |\tau_2^{eff}|, \quad (2)$$

и по плоскости (100) при одновременном выполнении неравенств

$$|m_2\sigma + \tau_2| - \tau_2^{st} > 0 \text{ и } |\tau_2^{eff}| > |\tau_1^{eff}|, \quad (3)$$

где  $\tau_i^{eff}$  — эффективное скальвающее напряжение, действующее в  $i$ -й плоскости скольжения и равное  $\tau_i^{eff} = (m_i\sigma + \tau_i) - \text{sign}(m_i\sigma + \tau_i)\tau_i^{st}$ ,  $\tau_1 = kx/(x^2 + y^2)$ ,  $\tau_2 = ky/(x^2 + y^2)$ ,  $m_1 = (\cos^2 \theta)/2$ ,  $k = Gb/(2\pi)$ ,  $m_2 = -\sin 2\theta / (2\sqrt{2})$ ,  $G$  — модуль сдвига.

Начальное положение дислокации задается в той области значений  $(x, y)$ , где в отсутствие внешней нагрузки дислокация из-за наличия сил трения остается неподвижной в поле задающей, т. е. в области, где  $|\tau_1| \leq \tau_1^{st}$  и  $|\tau_2| \leq \tau_2^{st}$ , что отвечает области вне кругов с радиусами  $r_1 = k/(2\tau_1^{st})$  и  $r_2 = k/(2\tau_2^{st})$ , отмеченных горизонтальной и вертикальной штриховкой на рис. 1, б.

Рассмотрение процесса движения пробной дислокации начиналось с положительного полупериода УЗ. Расчеты проводились при значениях параметров  $b = 3.99 \cdot 10^{-10}$  м,  $\tau_1^{st} = 0.3$  МПа,  $\tau_2^{st} = 1.5$  МПа,  $G = 1.8 \cdot 10^{10}$  Па, отвечающих кристаллу NaCl [7].

Было установлено, что в отсутствие задающей дислокации при ультразвуковом нагружении траектории движения дислокации будут различными в зависимости от  $\sigma^0$  и  $\theta$  и не зависят от стартовых координат дислокации. Согласно [6], по типам траекторий пространство  $\sigma^0 - \theta$  можно разделить на четыре зоны, приведенные на диаграмме  $\sigma^0 - \theta$  (рис. 2). Границы между зонами определяются функциями  $\sigma_{K1}(\theta) = (\tau_2^{st} - \tau_1^{st}) / (|m_2(\theta)| - m_1(\theta))$ ,  $\sigma_{H1}(\theta) = \tau_1^{st} / m_1(\theta)$ ,  $\sigma_{H2} = \tau_2^{st} / |m_2(\theta)|$  и вертикальной линией  $AA'$ , начинающейся в точке  $A$ , в которой выполняется условие  $\sigma_{H1}(\theta) = \sigma_{H2}(\theta) = \sigma_{K1}(\theta)$ . При  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зоны I дислокация под действием УЗ движется по плоскости (011); при  $\sigma^0$  и  $\theta$ , при-

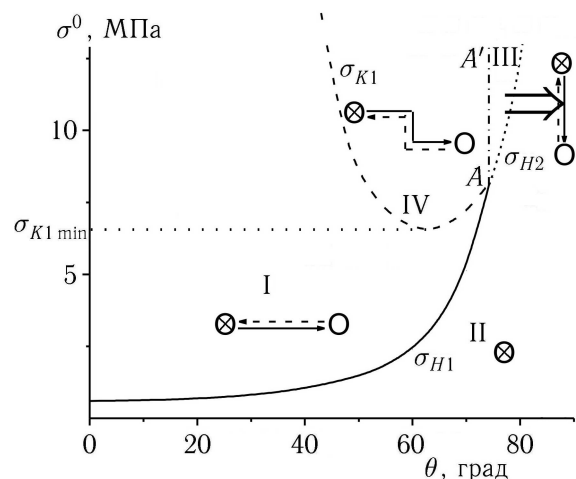


Рис. 2. Диаграмма  $\sigma^0 - \theta$ . На диаграмме схематически изображены типы траекторий дислокации за один период УЗ, характерные для каждой зоны диаграммы. Сплошными стрелками отмечены траектории дислокации в положительный полупериод, пунктирными — в отрицательный полупериод УЗ. Крестик отвечает положению дислокации в начале и конце периода УЗ, кружок — в середине периода

надлежащих зоне II, она покоится; при  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зоны III дислокация движется по плоскости (100); при  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зоны IV она движется попеременно по обеим плоскостям, как это схематически показано на рис. 2. То есть в отсутствие поля задающей под действием УЗ дислокация может испытывать ПС только при  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зоны IV.

При совместном воздействии УЗ и поля задающей дислокации тип траектории пробной дислокации зависит и от ее стартовых координат. В работах [4–6] было показано, что на плоскости  $xy$  можно выделить области, стартуя из которых дислокация будет в первый период УЗ иметь одинаковый тип траекторий. Они были названы стартовыми областями. Было установлено, что форма и размеры стартовых областей зависят от параметров задачи  $f, \sigma^0, B$  и  $\theta$ . Были построены карты стартовых областей и показано, что, зная карту стартовых областей и начальное положение дислокации, можно определить поведение дислокации при длительном ультразвуковом воздействии.

Проведенное в данной работе моделирование позволило определить основные характеристики процесса ПС: моменты времени и координаты точки выхода дислокации в плоскость ПС, время ее движения по этой плоскости и высоты выброса дислокации в плоскости ПС. Процесс, при котором дислокация переходит из одной плоскости скольжения в другую, назовем однократным актом ПС. В этом случае возврата дислокации в плоскость, параллельную первичной, не происходит, т.е. высота выброса равна нулю. Двойным ПС будем называть процесс, при котором дислокация стартует по одной плоскости скольжения, затем переходит в другую плоскость скольжения, а через некоторое время возвращается в плоскость, параллельную первоначальной. Если с течением времени такие процессы повторяются, то такую ситуацию назовем многократным ПС. Высота выброса в результате многократного ПС равна  $H = \sum_{i=1}^n H_i$ , где  $H_i$  — величина выброса при двойном ПС.

Найдено, что в отсутствие поля задающей дислокации под действием УЗ при  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зоны IV (см. рис. 2) дислокация, испытывающая двойное ПС в каждый полупериод УЗ, в конце любого периода возвращается в точку, в которой она находилась первоначально, т.е. высоты выбросов как за один период, так и по истечении целого числа периодов УЗ равны нулю. Моменты времени выхода дислокации в плоскости ПС и время движения ее в этих плоскостях зависят от  $\sigma^0, \theta, f$ , а высоты выбросов дислокации в каждый полупериод УЗ зависят еще и от  $B$ .

При совместном воздействии УЗ и поля задающей пробная дислокация может испытать ПС при значениях  $\sigma^0$  и  $\theta$  (кроме  $\theta = 90^\circ$ ), принадлежащих любой зоне диаграммы  $\sigma^0 - \theta$  рис. 2; при этом возможны однократный акт ПС, двойное и мно-

гократное ПС. Дислокация по истечении каждого периода УЗ не возвращается в исходное положение. Моменты времени выхода дислокации в плоскости ПС и время нахождения ее в этих плоскостях зависят как от  $\sigma^0, \theta, f$ , так и от стартовых координат  $(x_0, y_0)$  дислокации, а координаты выхода дислокации в плоскости ПС и высоты выбросов дислокации зависят еще и от  $B$ . При  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зоны IV (рис. 2) дислокация может выйти в плоскость ПС практически при любых значениях стартовых координат, а для  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зон I, II, и III области значений  $(x_0, y_0)$  ограничены. Двойное ПС может произойти как в течение одного периода УЗ, так и за время, большее периода, а многократное ПС — как за один период, так и за несколько периодов УЗ.

При углах  $\theta < 50^\circ$  (зоны I и IV диаграммы  $\sigma^0 - \theta$  рис. 2) вне зависимости от стартовых координат плоскостью ПС при двойном и многократном ПС дислокации является плоскость (100). При  $\theta > 50^\circ$  (зоны I–IV диаграммы  $\sigma^0 - \theta$ ) из ряда стартовых областей движение дислокации начинается по плоскости (100), а ПС происходит по плоскости (011). Обозначим высоту выброса за один период УЗ в плоскость (100) через  $h_y$ , а в плоскость (011) через  $h_x$ . Найдено, что выбросы в плоскость (100) возможны как в сторону увеличения, так и в сторону уменьшения  $y$  ( $h_{+y}$  и  $h_{-y}$  соответственно), а выбросы в плоскость (011) — только в сторону убывания  $x$  ( $h_{-x}$ ).

Были построены диаграммы зависимостей высот выброса дислокации от ее стартовых координат при различных  $\sigma^0, \theta, f$  и  $B$ . В качестве примера на рис. 3 приведена диаграмма зависимостей  $|h_{\pm y}|$

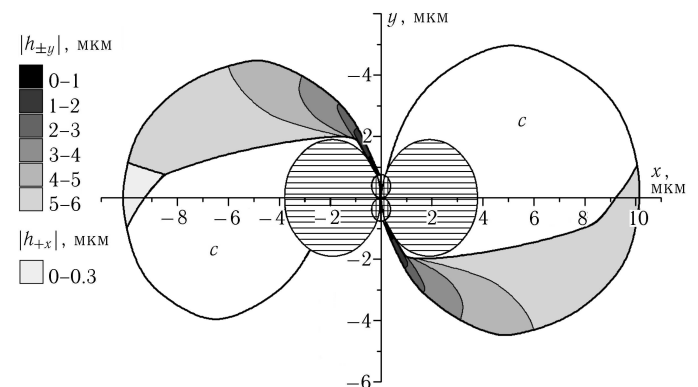


Рис. 3. Диаграмма зависимостей высот выброса  $|h_{+y}|$ ,  $|h_{-y}|$  и  $|h_{-x}|$  от стартовых координат дислокации для  $\sigma^0 = 12.5$  МПа,  $\theta = 80^\circ$ ,  $f = 60$  кГц,  $B = 0.06$  мПа·с. Разными градациями серого цвета отмечены области стартовых координат, отвечающие значениям высот выбросов  $|h_{-x}|$ ,  $|h_{+y}|$  и  $|h_{-y}|$  в определенных диапазонах. Тонированные области при  $x < 0$  соответствуют выбросам  $|h_{-x}|$  и  $|h_{+y}|$ , а при  $x > 0$  —  $|h_{-y}|$ . При старте дислокации из области C выбросы отсутствуют. Заштрихована область, в которой дислокация в начальный момент времени находиться не может

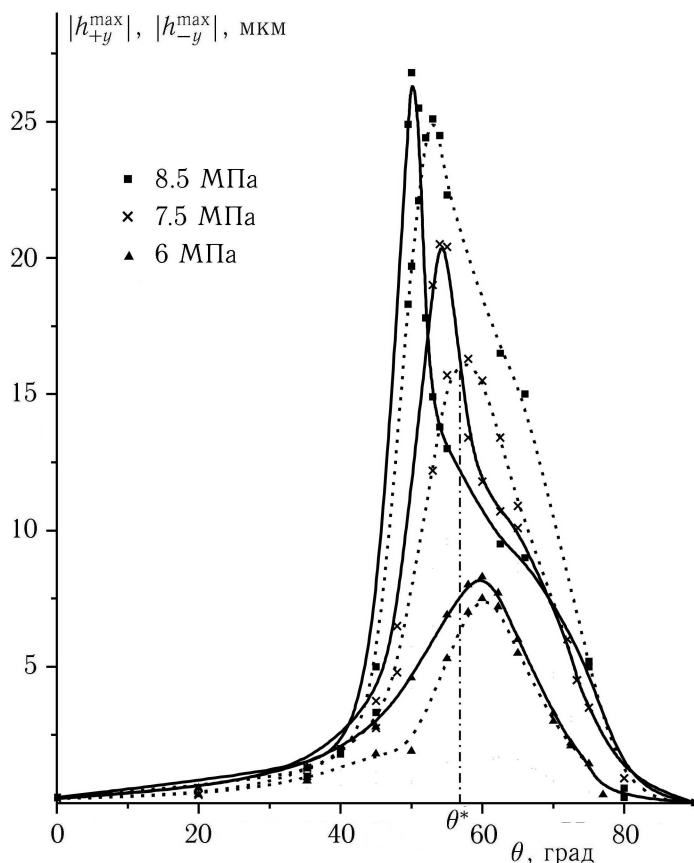


Рис. 4. Зависимости  $|h_{+y}^{\max}(\theta)|$  (пунктирные кривые) и  $|h_{-y}^{\max}(\theta)|$  (сплошные) для различных значений  $\sigma^0$  при  $f = 60$  кГц,  $B = 0.06$  мПа·с

и  $|h_{-x}|$  от стартовых координат дислокации для  $\sigma^0 = 12.5$  МПа,  $\theta = 80^\circ$  (зона IV на рис. 2) при  $f = 60$  кГц,  $B = 0.06$  мПа·с. Различными градациями серого цвета на ней отмечены участки, при старте из которых дислокация за один период УЗ испытывает двойное ПС с высотой выброса  $|h_{-x}|$  или  $|h_{\pm y}|$  в определенном диапазоне значений.

Анализ рисунков, подобных рис. 3, позволил определить наибольшее значение высот выбросов  $|h_{-x}^{\max}|$  и  $|h_{\pm y}^{\max}|$  за один период УЗ для каждой пары  $\sigma^0$  и  $\theta$  при  $f = \text{const}$  и  $B = \text{const}$ . Графики зависимостей  $|h_{\pm y}^{\max}(\theta)|$  для различных значений  $\sigma^0$  при  $f = 60$  кГц,  $B = 0.06$  мПа·с представлены на рис. 4. Видно, что они имеют максимумы, высота которых возрастает с ростом  $\sigma^0$ . При этом для  $\sigma^0 < \sigma_{K1 \min} \cong 6.56$  МПа (см. рис. 2) значения

$|h_{-y}^{\max}(\theta)| > h_{+y}^{\max}(\theta)$ . При  $\sigma^0 > \sigma_{K1 \min}$  неравенство  $|h_{-y}^{\max}(\theta)| > h_{+y}^{\max}(\theta)$  имеет место в интервале углов  $\theta$  от 0 до некоторого значения  $\theta^*$ , а для  $\theta > \theta^*$  знак неравенства меняется на обратный. Например, при  $\sigma^0 = 7.5$  МПа значение  $\theta^* = 58^\circ$ . Анализ показал также, что для одних и тех же  $\sigma^0$  и  $\theta$  высоты выбросов  $|h_{-x}^{\max}|$  на порядок меньше, чем  $|h_{\pm y}^{\max}(\theta)|$ .

## Выводы

В отсутствие неоднородного по пространству поля напряжений под действием УЗ выбросы дислокации в плоскость ПС происходят только при определенных значениях амплитуды УЗ и ориентации образца, а именно при  $\sigma^0$  и  $\theta$  из зоны IV (рис. 2). Высоты выбросов не зависят от стартовых координат дислокации и за время, кратное периоду УЗ, всегда равны нулю.

Наличие при ультразвуковом воздействии неоднородного по пространству поля напряжений приводит к тому, что ПС имеет место при  $\sigma^0$  и  $\theta$  (кроме  $\theta = 90^\circ$ ) из всех четырех зон (рис. 2).

Высоты выбросов за один период зависят от параметров УЗ, кристаллографической ориентации образца относительно направления внешней нагрузки, коэффициента динамической вязкости и стартовых координат дислокации.

## Литература

1. Тяпунина Н.А., Наими Е.К., Зиненкова Г.М. Действие ультразвука на кристаллы с дефектами. М., 1999.
2. Тяпунина Н.А., Благовещенский В.В. // ДАН СССР. 1980. **254**, № 4. С. 869.
3. Благовещенский В.В., Леготин Д.Л., Тяпунина Н.А. // Материаловедение. 2002. № 2(59). С. 2.
4. Тяпунина Н.А., Бушуева Г.В., Силис М.И. и др. // ФТТ. 2003. **45**, № 5. С. 836.
5. Тяпунина Н.А., Силис М.И., Подсобляев Д.С. и др. // Материаловедение. 2003. № 11. С. 2.
6. Тяпунина Н.А., Силис М.И., Бушуева Г.В., Богуненко В.Ю. // Материаловедение. 2004. № 7. С. 2.
7. Ничуговский Г.И., Веселов В.И., Бушуева Г.В. // Изв. вузов. Физика. 1988. № 12. С. 68.

Поступила в редакцию  
04.07.05