

Построение динамической модели дислокационного источника Франка—Рида

В. В. БЛАГОВЕЩЕНСКИЙ, И. Г. ПАНИН

Костромской государственной технологической университет, Россия

e-mail: igpanin@list.ru

A mathematical model for evolution of the Frank—Read's dislocation source in a dynamic regime is considered. An equation for the evolution of a source is presented in the PDE form. Numerical solutions of the obtained equation are given resulting in a representation of several successive configurations of the source evolution.

Введение

Прочность, пластичность и другие механические свойства кристаллических материалов в основном определяются движением и размножением дислокационных линий (ДЛ). Эти движения ДЛ в кристалле происходят в плоскостях скольжения под действием прикладываемой к нему нагрузки и могут быть видны в электронный микроскоп (рис. 1). ДЛ состоит из отдельных участков дислокаций, которые будем называть дислокационными сегментами (ДС). ДС своими концами опирается на две фиксированные точки, называемые точками закрепления, или стопорами. Точками закрепления, как правило, являются точечные дефекты структуры, преципитаты, дислокации других систем скольжения и т. д. Движение ДЛ происходит благодаря росту ДС, из которых она состоит (рис. 1, б). ДС, развиваясь и увеличиваясь в размерах, могут на своем пути наталкиваться на другие стопоры и на другие ДС, тем самым они изменяют свою конфигурацию и конфигурацию ДЛ и заставляют ее двигаться вдоль плоскости скольжения кристалла. Начальное количество ДЛ не может обеспечить необходимую величину пластической деформации, но под действием прикладываемой нагрузки дислокации начинают размножаться. Один из способов размножения был гипотетически предложен Франком и Ридом (Ф—Р) в 1950 году [1], а затем неоднократно наблюдался в опытах (рис. 1, а). Этот способ впоследствии был назван источником Франка—Рида.

1. Модель развития дислокационного сегмента

В данной работе представлена математическая модель развития ДС, которая приводит к образованию петель по Ф—Р. В [2–5] предлагались модели эволюции источника Ф—Р, но все они были квазистатическими. Начало для динамической модели, которая и рассматривается в данной работе, было положено в работах [6, 7]. В этой модели для

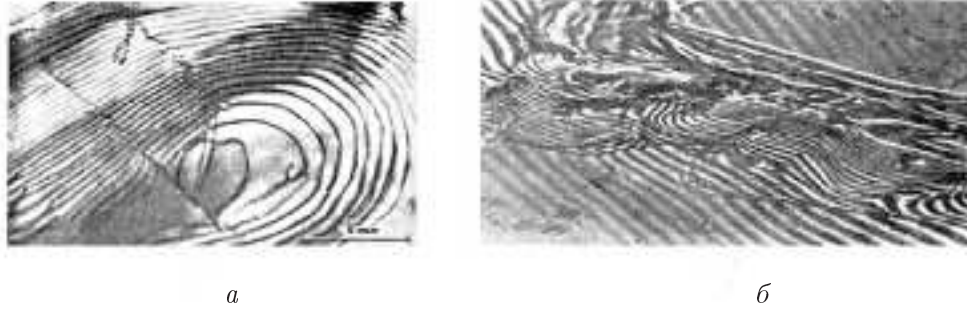


Рис. 1. Электронные фотографии дислокаций: *a* — источник Франка—Рида, *б* — фронт дислокационных линий

малых перемещений U при переходе из одной конфигурации (1) в соседнюю с ней (2) (рис. 2) получено в континуальном приближении и используется уравнение

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

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

Здесь $a = B/Gb^2$, $S = \sigma/Gb$, t — время, G — модуль сдвига, b — модуль вектора Бюргера, B — коэффициент динамической вязкости, $R(\lambda, t)$ — радиус кривизны ДС, σ — величина внешнего напряжения, λ — криволинейная координата вдоль ДС, L — длина сегмента в криволинейных координатах. Среда считается неограниченной, однородной и изотропной, силы инерции не учитываются. Уравнение (1) справедливо для таких смещений сегмента U , что $U \ll L$.

Это уравнение является уравнением в частных производных параболического типа. Оно допускает решение в виде ряда Фурье [8, 9], при этом фурье-образ сил, стоящих в правой части уравнения, выражается через интегралы, которые могут быть рассчитаны только численно, поскольку численно задается функция $R(\lambda, t)$. В [7, 10] такое решение использовалось для построения математической модели эволюции сегмента. Однако при реализации этой модели проявилось явление Гиббса [9], которое даже при использовании сглаживающих множителей не позволило выполнить расчеты для всей области значений физических постоянных.

В данной работе предлагается алгоритмическое решение уравнения (1), при котором каждая итерация позволяет перейти из положения 1 кривой AB в соседнее положение 2 (рис. 2) на основе численного решения уравнения (1) в виде конечных разностей (метод сеток). Для каждого шага итерации решение строится в криволинейной системе координат, где одна ось совпадает с кривой AB , а вторая ось — перпендикулярна к первой оси, точка A — начало координат. Рассматриваемый непрерывный сегмент AB

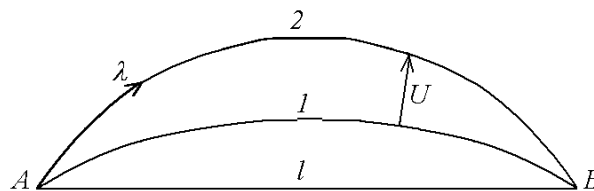


Рис. 2. Последовательные конфигурации дислокационного сегмента

заменяется N точками, которые на первоначальном этапе расположены на прямой линии на равном расстоянии друг от друга, а уравнение (1) с использованием неявного шеститочечного шаблона преобразуется в уравнения

$$\begin{aligned} & K_i U_{i+1,j+1} - (2K_i + 1)U_{i,j+1} + K_i U_{i-1,j+1} = \\ & = K_i U_{i+1,j} + (2K_i - 1)U_{i,j} - K_i U_{i-1,j} + \Delta t/a(S - 1/R_{i,j}), \\ & \forall i = 2, N - 2, \\ & U_{1,j} = U_{N,j} = 0 \quad \forall j, \quad U_{i,0} = 0 \quad \forall i. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь i — номер точки на кривой AB ($i = 1, N$), j — номер временного слоя ($j = 1, \infty$), Δt — величина временного шага, $K_i = \Delta t/2ah_{i-1}h_i$ — коэффициент при i -й точке, $h_i = \lambda_{i+1} - \lambda_i$ — переменный шаг по λ (рис. 3), $R_{i,j}$ — радиус кривизны в точке i кривой AB слоя j . Таким образом, составляется система $N - 2$ линейных уравнений относительно $N - 2$ величин $U_{i,j+1}$, решая которую получаем величины смещения каждой i -й точки для ее перехода с j -го временного слоя на $(j + 1)$ -й слой, причем эта система имеет трехдиагональный ленточный вид и может решаться методом прогонки. Необходимо заметить, что в уравнениях (2) существуют две отличительные особенности, которые не дают возможности решить уравнения стандартными методами. Во-первых, направление смещения $U_{i,j+1}$ точки i должно быть по нормали к кривой AB временного слоя j , а, во-вторых, при составлении уравнений системы необходимо знать радиус кривизны $R_{i,j}$ для каждой точки i . Оба эти вопроса решаются одновременно следующим образом (рис. 3). По любым трем точкам $i - 1$, i , $i + 1$ временного слоя j кривой AB строится окружность с центром в точке O_i . За радиус кривизны $R_{i,j}$ принимается радиус этой окружности, а за направление смещения точки i принимается направление от центра O_i к точке i . Таким образом, в результате имеем для каждой точки i величину и направление ее смещения и, следовательно, новую конфигурацию расположения $N - 2$ точек ДС на следующем временном слое.

При таком решении задачи возникает вопрос о сходимости, точности и устойчивости процесса. Это касается, во-первых, самого численного метода и, во-вторых, решения на каждой итерации системы линейных уравнений методом прогонки.

Для метода сеток используется неявная шеститочечная схема Кранка—Никольсона, поэтому для малых величин h и Δt существует единственное решение, которое сходится, и имеет место оценка погрешности $O(h^2 + (\Delta t)^2)$, причем решение абсолютно устойчиво и по начальным данным, и по правой части [11].

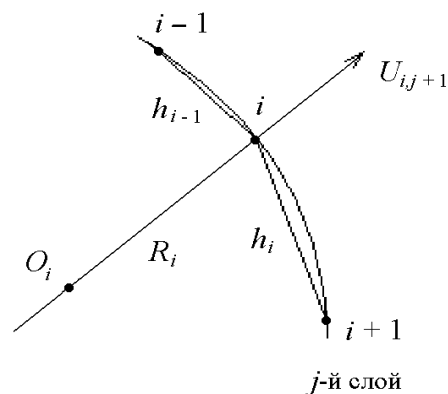


Рис. 3. Нахождение радиуса кривизны и направления смещения

Для метода прогонки существуют условия диагонального преобладания [12]. При выполнении этих условий есть единственное решение системы, которое сходится и устойчиво по входным данным. Применительно к системе (2) названные условия будут выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} |1 + 2K_i| &\geq |2K_i|, \\ |1 + 2K_i| &\geq |K_i| \quad \forall i = 1, N, \end{aligned}$$

поэтому выполняются всегда. Точность решения метода прогонки определяется мерой обусловленности v исходной матрицы C , составленной по уравнениям (2):

$$v = \text{cond}(C) = \|C\| \|C^{-1}\|.$$

Поскольку процесс вычисления матрицы C^{-1} в общем виде очень трудоемкий, для приближенной оценки точности предполагаем, что все величины шагов h_i одинаковы и равны среднему значению h . Тогда все коэффициенты K_i матрицы C будут равны одному значению:

$$K = \Delta t / (2ah^2),$$

и ее обусловленность будет зависеть только от этой величины. Установлено, что при $K \leq 0.025$ мера обусловленности матрицы $v \simeq 1.1$, а при уменьшении значения K величина $v \rightarrow 1$. Таким образом, при выполнении условия

$$K \leq 0.025 \tag{3}$$

матрица C хорошо обусловлена, причем ее можно улучшить, уменьшая величину Δt . Необходимо заметить, что в знаменателе левой части неравенства (3) присутствует коэффициент $a = B/Gb^2$, отвечающий за свойства изучаемого материала, от которых также зависит обусловленность матрицы C . Например, с увеличением вязкости B обусловленность матрицы C улучшается.

Условие (3) учитывается в построенной модели эволюции ДС. На каждом шаге итерации проверяется, не происходит ли критического уменьшения расстояния h между какими-либо соседними узлами одного уровня. Если это происходит, то расстояние корректируется. Но такие случаи возникают очень редко, в основном при переходе от одного ДС к другому при моделировании движения ДЛ. После таких переходов первоначальное расположение узлов непредсказуемо, и поэтому их расположение приходится корректировать согласно условию (3).

2. Результаты моделирования на ЭВМ эволюции дислокационного сегмента

На основе этого алгоритмического итерационного процесса написана и испытана программа, моделирующая движение точек кривой и позволяющая наблюдать развитие ДС, закрепленного между двумя стопорами.

При работе программы движение ДС начинается из положения (рис. 4, *a*), которое имеет вид отрезка прямой между двумя точками закрепления. Развитие ДС определяется соотношением между приложенной нагрузкой σ и некоторой критической нагрузкой $\sigma_{cr} = Gb/l$, которая зависит от свойств материала и длины выбранного отрезка. Здесь l — расстояние между точками закрепления ДС (см. рис. 2). При $\sigma = \sigma_{cr}$ ДС

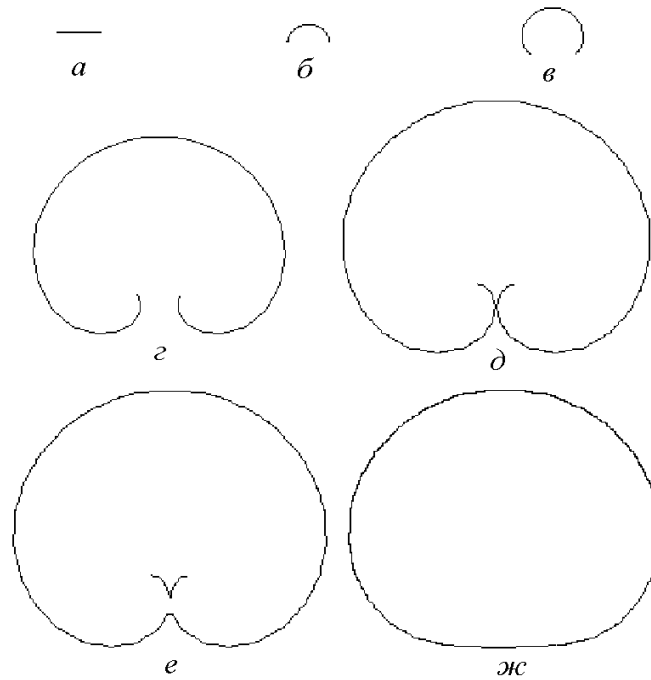


Рис. 4. Этапы работы программы: *a* — начальное положение сегмента, *б* — развитие сегмента до критического положения, *в* — преодоление критического положения, *г* — развитие сегмента после критического положения, *д* — самопересечение дислокационного сегмента, *е* — разбиение сегмента на две части, *ж* — развитие свободной петли

занимает некоторое критическое положение, представляющее собой дугу полуокружности, проходящей через точки *A* и *B*. Если $\sigma < \sigma_{cr}$, то развитие ДС останавливается, не достигнув критического положения (рис. 4, б). Если же нагрузка σ достаточна ($\sigma > \sigma_{cr}$), то ДС преодолевает критическое положение (рис. 4, в) и начинает стремительно развиваться (рис. 4, г). Скорость движения ДС на этом участке значительно выше. Наконеч ДС в своем развитии достигает положения, когда происходит ее самопересечение (“отшнуровывание” дислокации) (рис. 4, д) и она разбивается на две части (рис. 4, е). Первая, внутренняя, часть за незначительное число шагов возвращается в исходное положение (рис. 4, а), и начинается образование нового ДС. Вторая, внешняя, часть имеет форму, близкую к окружности, отрывается от точек закрепления и продолжает свое движение до выхода на границу рассматриваемой области (рис. 4, ж). Таким образом, процесс образования свободных петель ДС происходит циклически и представляет собой концентрические окружности, которые увеличиваются в размерах и двигаются последовательно друг за другом.

Заключение

Приведенная выше модель может быть использована самостоятельно для исследования поведения источника Ф—Р. Причем возможны добавления в правой части уравнения различных составляющих нагрузки (знакопеременные нагрузки, тепловые воздействия и т. д.). А также возможно использование модели как составляющей части при моделировании движения ДЛ, состоящей из отдельных ДС.

Список литературы

- [1] ХИРТ Дж., ЛОТЕ И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
- [2] ИГОНИН С.И. Исследование процесса расширения полос скольжения в кристаллах типа NaCl с помощью моделирования: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: МГУ, 1978.
- [3] ЧЕРНОВ В.М., ИДЕНБОМ В.Л. Преодоление дислокацией упругого поля точечных дефектов как механизм внутреннего трения // Внутреннее трение в механических материалах. М.: Наука, 1970. С. 26–32.
- [4] СТРАТАН И.В., ПРЕДВОДИТЕЛЕВ А.А. Моделирование процесса движения дислокации в дислокационном ансамбле // ФТТ. 1970. Т. 12. С. 1729.
- [5] ГОРЯЧЕВ С.Б., ПАШНИН В.Г. Образование и распад скопления дислокационных диполей // Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах. Л.: ФТИ АН СССР, 1979. С. 148.
- [6] НАЦИК В.Д., ЧИШКО К.А. Динамика и звуковое излучение дислокационного источника Франка—Рида // ФТТ. 1975. Т. 17. С. 342.
- [7] БЛАГОВЕЩЕНСКИЙ В.В. Особенности размножения дислокаций и образование полос скольжения под действием ультразвука: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: МГУ, 1982.
- [8] ХЕММИНГ Р.В. Численные методы. М.: Наука, 1968.
- [9] БОГЛАЕВ Ю.П. Вычислительная математика и программирование. М.: Высшая школа, 1990.
- [10] ТЯПУНИНА Н.А., БЛАГОВЕЩЕНСКИЙ В.В. Особенности работы источника Франка—Рида под действием ультразвука // Докл. АН СССР. 1980. Т. 254, № 4. С. 869.
- [11] САМАРСКИЙ А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983.
- [12] АМОСОВ А.А., ДУБИНСКИЙ Ю.А., КОПЧЕНОВА Н.В. Вычислительные методы для инженеров. М.: Высшая школа, 1994.

*Поступила в редакцию 11 июля 2007 г.,
в переработанном виде — 30 октября 2007 г.*