

УДК 539.3

РАЗЛИЧНЫЕ ПОДХОДЫ К МАТЕМАТИЧЕСКОМУ И КОМПЬЮТЕРНОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ЭВОЛЮЦИИ ИСТОЧНИКА ФРАНКА–РИДА В УЛЬТРАЗВУКОВОМ ПОЛЕ

© А.Ю. Лосев, Д.В. Манухина, А.Е. Потапов, Т.Н. Плужникова

Ключевые слова: источник Франка–Рида; акустопластический эффект; моделирование; сегмент дислокации. Рассмотрены возможные подходы к моделированию эволюции источника Франка–Рида, подвергающегося ультразвуковому воздействию, достоинства и недостатки квазистатического и динамического подходов. Приведено решение уравнения движения дислокации методом конечных разностей.

В современных технологиях обработки конструкционных материалов все более широкое применение находит ультразвук, причем как для создания материалов с наперед заданными свойствами, так и в процессе технологической эксплуатации. Поэтому исследование механизмов пластической деформации материалов, подвергающихся высокочастотной вибрации, является актуальным и может быть применено для прогнозирования процесса разрушения материалов в зависимости от условий эксплуатации.

В ходе пластической деформации твердых тел происходит интенсивное размножение и движений дислокаций сквозь образец. Одним из основных источников дислокаций в ходе пластической деформации кристаллических твердых тел является источник Франка–Рида.

При исследовании и оптимизации задач физики твердого тела компьютерное моделирование находит все большее применение, что обусловлено не только его эффективностью, но и возможностью использования современных мощных методов математического анализа, вычислительной математики и программирования. Такие методы получили широкое применение, в т. ч. для моделирования и исследования работы источника Франка–Рида, подвергающегося как постоянной, так и ультразвуковой нагрузке, и, как следствие, связанного с этим *акустопластического эффекта* (АПЭ).

АПЭ – снижение напряжений течения при деформации с постоянной скоростью или увеличение скорости пластической деформации в условиях действия постоянного напряжения и приложения к кристаллу осциллирующих напряжений звуковой или ультразвуковой частоты [1]. Эффект впервые был использован при протяжке проволоки из относительно хрупких металлов и описан в работе Шмида [2].

При изучении акустопластического эффекта и его влияния на работу источника Франка–Рида выделяют два подхода: *квазистатический* и *динамический*. В первом решается уравнение равновесия закрепленного дислокационного сегмента, т. е. находятся равновесные дислокационные конфигурации при заданных параметрах [3]. Динамический подход подразумевает соответственно решение уравнения движения дислокации.

В рамках квазистатической модели для каждой точки скользящей дислокации (x_i, y_i) в каждый момент времени должно выполняться условие:

$$0,5Gb^2\phi(x_i; y_i; t) = b[\tau^{\text{вн}} + \sum_{(x_j; y_j) \in D} \hat{\tau}_j(x_i; y_i; x_j; y_j; t)],$$

где ϕ – локальная кривизна скользящей дислокации; $\hat{\tau}_j$ – напряжение, обусловленное j -й дислокацией леса; D – область суммирования, удовлетворяющая критерию А.А. Предводителя, И.В. Стратана:

$$\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \leq (5 \div 7)\lambda.$$

Сложность данной задачи обусловлена рядом причин. Во-первых, необходимо учитывать действие большого количества дислокаций леса. При решении задачи о движении пробной дислокации сквозь дислокационный лес в каждой точке плоскости скольжения пробной дислокации рассматривалось действие примерно только 10^3 дислокаций леса. Во-вторых, поле, создаваемое колеблющимся лесом дислокаций, изменяется в течение всего периода колебаний. Поэтому при нахождении устойчивого состояния скользящей дислокации при данном уровне внешнего напряжения сдвига необходимо осуществлять контроль над выполнением рассмотренного выше соотношения в каждый момент времени в течение всего периода колебаний дислокаций леса.

Кроме того, квазистатический подход при рассмотрении вопросов, связанных с влиянием ультразвука на процесс прохождения пробной дислокацией модельной площадки, может дать только качественный результат.

Поэтому для исследования влияния ультразвука на процесс движения скользящей дислокации предпочтительнее подход, использующий уравнение движения.

В.Д. Нацк и К.А. Чишко получили уравнения движения дислокации для исследования акустической эмиссии [4]. Если же внешнее нагружение состоит из постоянной и ультразвуковой компоненты, то следует использовать уравнение движения, модифицированное

В.В. Благовещенским [5]. В качестве источника Франк-Рида будем рассматривать *дислокационный сегмент* (ДС), закрепленный на дислокациях леса, находящихся в перпендикулярной плоскости. Для начала движения ДС необходимо преодолеть силу трения кристаллической решетки, обусловленную рельефом Пайерлса-Набаро. При составлении и решении уравнения будем считать среду, в которой движется дислокация, изотропной, обладающей свойством вязкости. Моделирование исследуется применительно к кристаллам типа NaCl.

В общем случае уравнение движения ДС при неподвижных точках закрепления запишем в виде:

$$ma = F_s + F_v + F_{ex} + F_{in} + F_{st}, \quad (1)$$

где $F_s = -\frac{Gb^2}{2R}$ – сила самодействия в приближении линейного натяжения; $F_v = Bv = B\partial u/\partial t$ – сила вязкого трения; $F_{ex} = \begin{cases} b\sigma \\ b\sigma^0 \sin \omega t \end{cases}$ – сила, обусловленная внешней нагрузкой; $F_{in}(x, y) = \frac{Gb^2}{4\pi} y \times \left(\frac{x+l/2}{((x+l/2)^2 + y^2)^{3/2}} - \frac{x-l/2}{((x-l/2)^2 + y^2)^{3/2}} \right)$ – сила, обусловленная действием дислокаций леса, x, y – координаты точки сегмента, в которой рассчитывается значение силы; $F_{st} = b\sigma_{st} \text{sign}(F_{it} + F_{ex} + F_{in})$ – сила, обусловленная стартовым напряжением; ma – инерционный член, которым можно пренебречь в силу его малости.

Тогда уравнение (1) примет вид:

$$Bv = -\frac{Gb^2}{2R(\lambda, \tau_0)} + \left(\frac{Gb^2}{4\pi} y \left(\frac{x+l/2}{((x+l/2)^2 + y^2)^{3/2}} - \frac{x-l/2}{((x-l/2)^2 + y^2)^{3/2}} \right) \right) + b\sigma^0 \sin \omega t - b\sigma_{st} \text{sign}(F_{it} + F_{ex} + F_{in}). \quad (2)$$

При переходе к безразмерным координатам получим:

$$\frac{\partial u(\lambda, \delta\tau)}{\partial(\delta\tau)} - \frac{\partial^2 u(\lambda, \delta\tau)}{\partial \lambda^2} = \tilde{\sigma}_s(\lambda) + \tilde{\sigma}^0 \sin \omega(\tau_0 + \delta\tau) + \tilde{\sigma}_{in} - \tilde{\sigma}_{cr} \text{sign} \left(\sum_i \tilde{\sigma}_i \right), \quad (3)$$

где $\tilde{\sigma}^0 = \sigma^0 / \sigma_{cr}$, $\tilde{\sigma}_s(\lambda) = F_s(\lambda) / b\sigma_{cr}$, $\tilde{\sigma}_{in} = \sigma_{in} / \sigma_{cr}$; $\tau = \frac{lGb^2}{Bl^2}$ – безразмерное время; λ – безразмерная координата по дуге сегмента.

Решение данного уравнения позволяет по конфигурации дислокационного сегмента в момент времени τ_0 вычислить конфигурацию в следующий момент времени $\tau_0 + \delta\tau$; таким образом, для некоторой начальной конфигурации сегмента находится следующая и т. д. (рис. 1).

В [5] приводится решение уравнения (3) разложением правой части в ряд Фурье. С помощью метода компьютерного моделирования исследуется поведение закрепленного ДС в ультразвуковом поле, но без учета колебаний дислокаций леса, служащих точками закрепления. Автор моделирует только половину дислокационного сегмента, получая другую отзеркаливанием, из-за недостаточности вычислительной мощности ЭВМ.

А.Ю. Лосев [6] за основу компьютерной модели взял решение уравнения (3), полученное в [5]. В отличие от [5], разработанная компьютерная модель позволяет получать координаты целого дислокационного сегмента. Кроме того, автор предложил алгоритмы моделирования, учитывающие колебание точек закрепления ДС софазно и в противофазе.

Однако моделирование при колеблющихся дислокациях леса возможно с применением только поправочных коэффициентов и соответственно сходится в ограниченной области, что и повышает ресурсоемкость решения и дает слишком большие погрешности вычислений. Для устранения этих недостатков можно применить метод конечных разностей. В этом случае для уравнения (3) аппроксимация первой производной будет иметь вид:

$$\frac{\partial u(\lambda, \delta\tau)}{\partial(\delta\tau)} = \frac{u(\lambda, \delta\tau + h_1) - u(\lambda, \delta\tau)}{h_1}.$$

Аппроксимация второй производной:

$$\frac{\partial^2 u(\lambda, \delta\tau)}{\partial \lambda^2} = \frac{u(\lambda + h_2, \delta\tau) - 2u(\lambda, \delta\tau) + u(\lambda - h_2, \delta\tau)}{h_2^2}.$$

Таким образом, можно получить явную разностную схему для решения дифференциального уравнения (3):

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{h_1} - \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h_2^2} = f(n, m), \quad (4)$$

где $f(n, m) = \tilde{\sigma}_s(\lambda) + \tilde{\sigma}^0 \sin \omega(\tau_0 + \delta\tau) + \tilde{\sigma}_{in} - \tilde{\sigma}_{cr} \text{sign} \left(\sum_i \tilde{\sigma}_i \right) -$

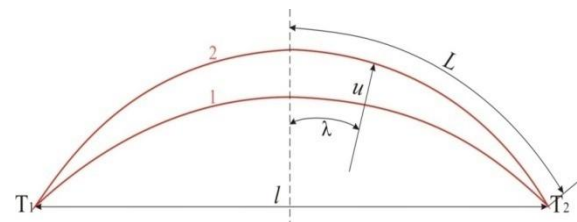


Рис. 1. Последовательные конфигурации закрепленного дислокационного сегмента

правая часть исходного уравнения, вычисленная на шаге (n, m) .

В последнем уравнении на каждом конкретном шаге известны все составляющие, кроме u_m^{n+1} , которое и требуется найти. Таким образом, перебирая все значения m в заданном диапазоне, мы найдем значения сечной функции для $n + 1$.

В итоге получаем следующую схему поиска решения:

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \left(\frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n + f(n, m)}{h_2^2} \right) h_1.$$

Полученное решение является более простым по отношению к решению, предложенному в [5], т. к. здесь на каждом шаге не приходится вычислять сумму ряда.

Разработанный программный комплекс позволяет моделировать поведение ДС в условиях комплексного нагружения при различных параметрах ультразвука. Однако проводимые тестовые эксперименты выявили ряд недостатков разработанного комплекса: высокая сложность моделирования других материалов; достаточная сложность алгоритма, что порождает как сложность программирования, так и большие затраты на отладку и тестирование программы.

Для устранения всех вышеперечисленных недостатков был разработан программный комплекс, основанный на [6], позволяющий исследовать эволюцию источника Франка–Рида, закрепленного на дислокациях леса, в условиях комплексного нагружения. Величина смещения ДС рассчитывалась для каждой точки. Для обеспечения высокой точности моделирования сегмент разбивался на 300 точек, что в конечном итоге привело к высоким требованиям аппаратной части. Поэтому для оптимальной загрузки вычислительных ресурсов ЭВМ следует обеспечить равномерную за-

грузку всех процессоров системы. Полученный алгоритм позволяет решать уравнение движения (3) для каждой точки дислокационного сегмента в отдельном вычислительном потоке. Разработанная распределенная среда моделирования позволяет задействовать ресурсы нескольких рабочих станций, объединенных в вычислительную сеть.

Разработанная программная среда позволяет с высокой степенью точности моделировать эволюцию источника Франка–Рида в условиях комплексного нагружения в щелочно-галоидных кристаллах (рис. 2).

Для того чтобы продемонстрировать влияние ультразвука на кристаллы, была поставлена серия экспериментов. Все эксперименты проводились применительно к NaCl при воздействии постоянного напряжения, равного 1 МПа, первоначальная длина дислокационного сегмента – 2 мкм.

На первом этапе исследовалось поведение источника Франка–Рида только под действием постоянной нагрузки. В этом случае дислокационный сегмент под действием постоянного напряжения прогибается и, достигая положения равновесия, прекращает развитие ($R_{\max} = 0,14$ мкм). На рис. 3а показаны стадии развития дислокационного сегмента, на рис. 3б – изменение стрелы прогиба дислокационного сегмента во времени. Таким образом, при данных условиях источник Франка–Рида не срабатывает.

В следующей серии экспериментов было добавлено ультразвуковое воздействие в 1 МПа. В этом случае дислокационный сегмент прогибается уже на значительно большее расстояние ($R_{\max} = 0,56$ мкм) (рис. 4), причем наблюдаются как прямой, так и обратные прогибы, т. е. источник начинает совершать вынужденные периодические колебания. Один из периодов таких колебаний показан на рис. 4б, где первый максимум соответствует прямому, а второй – обратному прогибу.

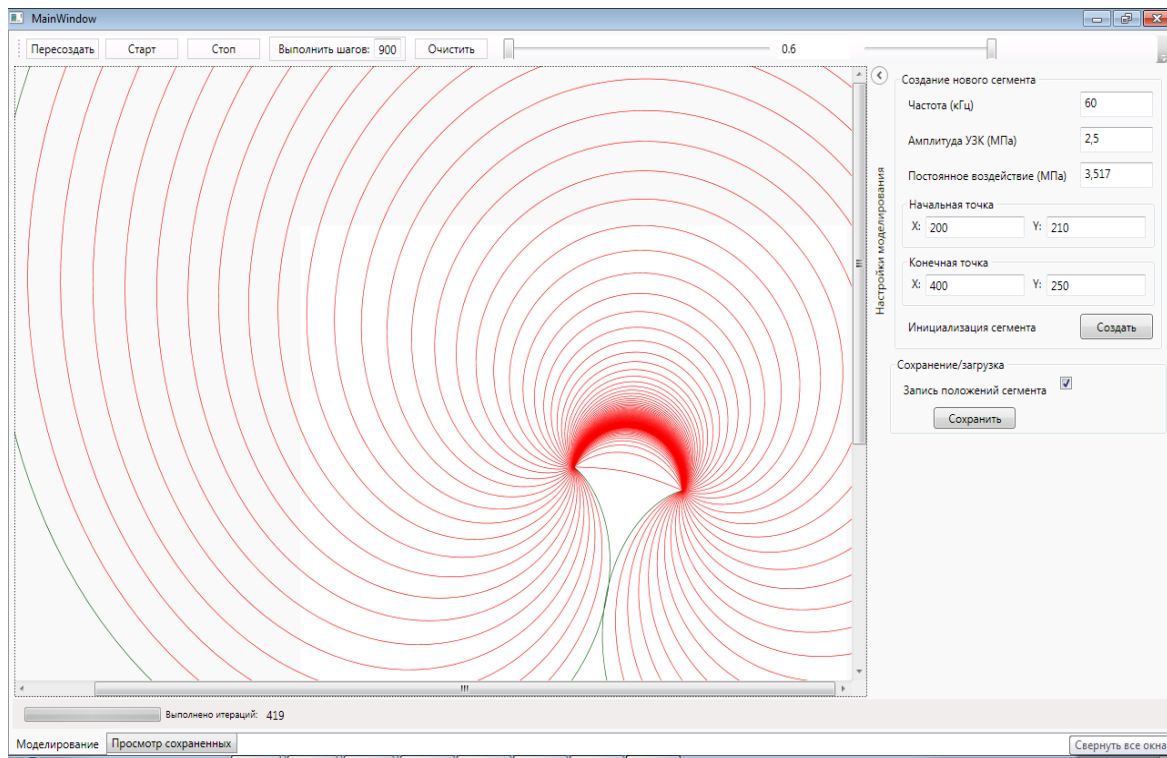


Рис. 2. Интерфейс программы моделирования эволюции источника Франка–Рида

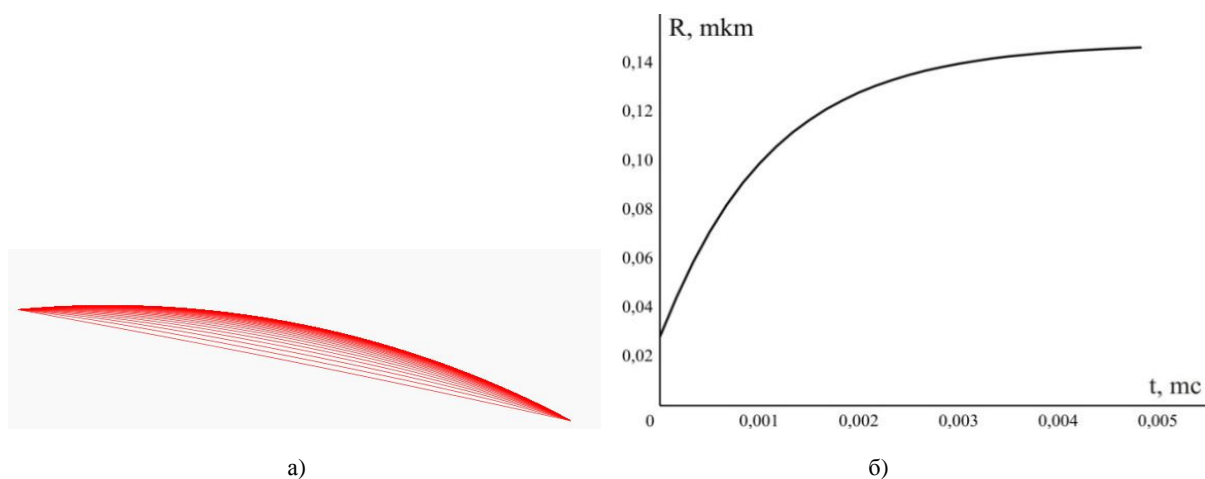


Рис. 3. Эволюция дислокационного сегмента при постоянном напряжении в 1 МПа

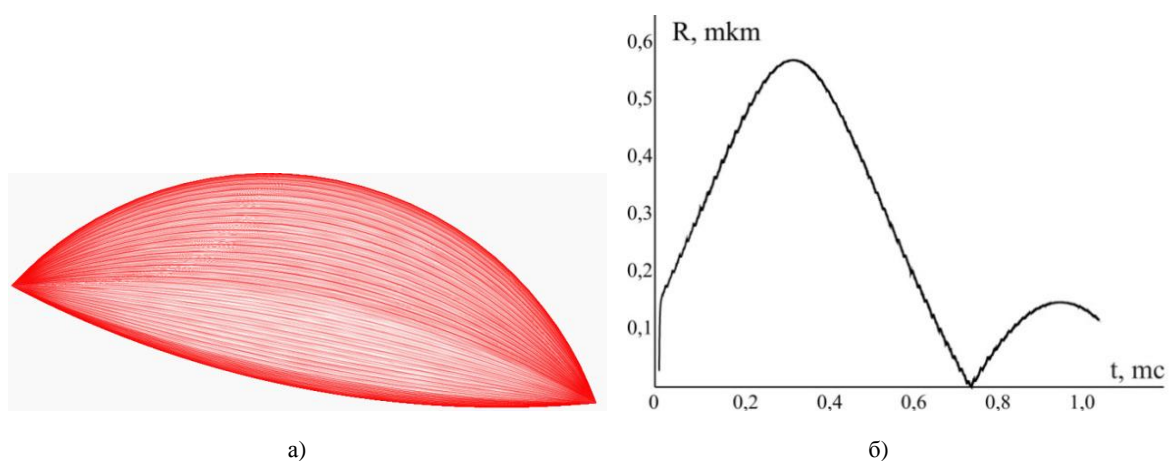


Рис. 4. Эволюция дислокационного сегмента при постоянном напряжении в 1 МПа и УЗК 1 МПа

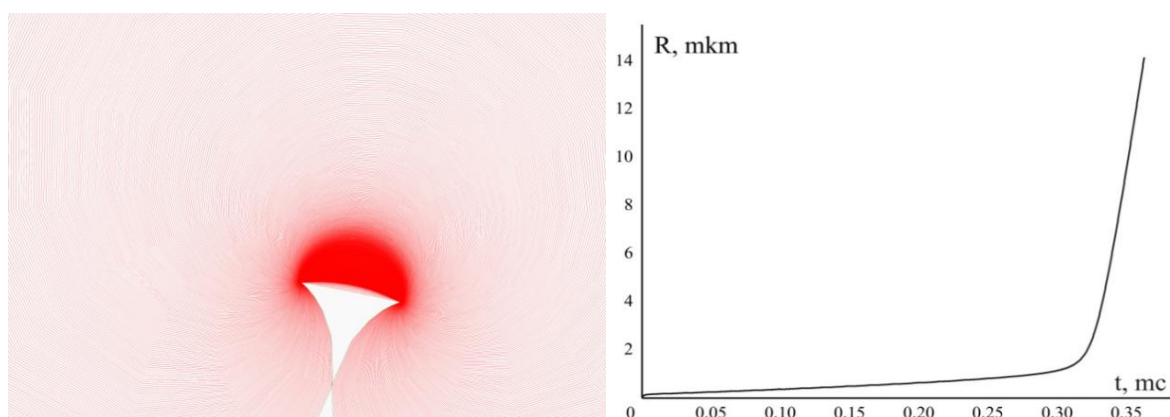


Рис. 5. Эволюция дислокационного сегмента при постоянном напряжении в 1 МПа и УЗК 2,6 МПа

При дальнейшем увеличении величины воздействия ультразвука (УЗК) закрепленный дислокационный сегмент перестает совершать вынужденные колебания, раскрывается и образует замкнутую петлю (рис. 5), что показала последняя серия экспериментов. В этом случае величина УЗК равна 2,6 МПа. Таким образом, благодаря ульт-

развуковой компоненте происходит срабатывание дислокационного источника по механизму Франка-Рида.

Основными направлениями использования разработанного программного комплекса являются:

1) моделирование работы источника Франка-Рида в кристаллах типа NaCl при одновременном воздейст-

вии постоянной и ультразвуковой компонент, при неподвижных и колеблющихся точках закрепления;

2) исследование поведения дислокационных петель в ультразвуковом поле для различных кристаллов, анализ полученных результатов моделирования;

3) изучение акустопластического эффекта: моделирование процесса прохождения скользящей краевой дислокации сквозь дислокационный лес, совершающий вынужденные колебания под действием ультразвука;

4) расчет электрических полей, формирующихся при работе источника Франка–Рида.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Малыгин Г.А.* Акустопластический эффект и механизм суперпозиции напряжений // ФТТ. 2000. Т. 42. Вып. 1. С. 69-75.
2. *Schmid E.* Plasticity of insonated metals // Japan Inst. Metals. 1968. № 9. P. 797.
3. *Логинов Б.М., Дегтярев В.Т., Тяпунина Н.А.* Моделирование скольжения дислокаций через дислокационный лес колеблющихся дислокаций в кристаллах с ГПУ структурой // Кристаллография. 1987. Т. 32. Вып. 4. С. 967-971.

4. *Нацик В.Д., Чижко К.А.* Динамика и звуковое излучение дислокационного источника Франка–Рида: препринт / ФТИНТ АН УССР. Харьков, 1976.
5. *Благовецкий В.В.* Особенности размножения дислокаций и образования полос скольжения под действием ультразвука: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М., 1982.
6. *Лосев А.Ю.* Исследование акустопластического эффекта и факторов, его вызывающих, методом ЭВМ моделирования: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М., 2005.

Поступила в редакцию 24 августа 2012 г.

Lossev A.Y., Manukhina D.V., Potapov A.E., Pluzhnikova T.N. DIFFERENT APPROACHES TO MATHEMATICAL AND COMPUTER MODELING OF FRANK–READ SOURCE EVOLUTION IN ULTRASONIC FIELD

The article discusses the possible approaches to the evolution modeling of the Frank–Read source, undergoing ultrasonic exposure. Advantages and disadvantages of quasistatic and dynamic approaches are considered. The solution of the motion equations of the dislocation by finite difference method is considered.

Key words: Frank–Read source; acoustoplastic effect; modeling; dislocation segment.