

УДК 593.3

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АКУСТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

© Д.В. Манухина, Ф.А. Плотников, А.Ю. Лосев,
И.В. Супрун, М.В. Бойцова*Ключевые слова:* дислокации; источник Франка–Рида; ультразвук; метод конечных разностей.

Приводится вывод и решение уравнения движения дислокационного сегмента, находящегося под воздействием ультразвука и постоянной нагрузки, закрепленного на дислокациях леса, методом конечных разностей в кристаллах типа NaCl, что позволит определить величину акустопластического эффекта и спрогнозировать упрочнение или разупрочнение материала. При выводе и решении уравнения учтен тот факт, что дислокации несут электрический заряд, однако не учитывалось влияние слабого магнитного поля Земли на перемещение дислокаций. В результате было получено решение, позволяющее вычислять конфигурацию дислокационного сегмента в последующие моменты времени по конфигурации предыдущего шага.

Исследованию влияния ультразвуковых колебаний (УЗК) на структурные дефекты реальных кристаллов посвящен целый ряд многолетних исследований, что обусловлено широким применением ультразвука для технологической обработки материалов. Начало таких исследований было положено в работах школы Шмида [1], где было установлено, что воздействие УЗК приводит к понижению напряжения, необходимого для волочения проволоки в случае одновременного воздействия УЗК и постоянной нагрузки, и к его увеличению, если воздействие ультразвука предшествовало приложению внешней постоянной нагрузки. В работе [2] авторы установили, что вибрация частотой 20 кГц является причиной размножения дислокаций в кристаллах каменной соли, что характеризовалось необратимыми изменениями величины напряжения внутреннего трения, начинавшимися с некоторой критической амплитуды. Такой эффект получил название *акустопластического эффекта*: уменьшение уровня напряжения течения под воздействием УЗК определенной интенсивности. Позднее особенности этого явления широко исследовались многими авторами, однако до сих пор остается открытым вопрос о механизмах, приводящих к таким изменениям. Нельзя дать точного ответа на вопрос: что будет происходить с материалом при воздействии ультразвука – упрочнение или разупрочнение. Согласно [3] акустопластический эффект объясняется тем, что ультразвук активизирует преодоление дислокациями барьеров, препятствующих их движению во время пластической деформации. Таким образом, в результате движения и размножения дислокаций в ультразвуковом поле будет значительно увеличиваться плотность дислокаций и концентрация точечных дефектов [4]. Немаловажную роль в изучении акустопластического эффекта играет компьютерное моделирование [4], которое позволило установить особенности прохождения дислокаций через различные виды дефектов.

Целью данной работы является изучение акустопластического эффекта посредством моделирования

процесса прохождения скользящей дислокации сквозь дислокационный лес, совершающий вынужденные колебания под действием ультразвука.

Для достижения поставленной цели необходимо составить и решить уравнение движения скользящей дислокации. В качестве объекта исследования была выбрана математическая модель работы источника Франка–Рида, находящегося под воздействием ультразвукового поля и постоянной внешней нагрузки с учетом электромагнитной составляющей.

Рассматриваемая модель источника Франка–Рида применительно к кристаллам типа NaCl приведена в [5]. Необходимо отметить, что в ЦГК все дефекты не являются электрически нейтральными, а несут определенный электрический заряд, в т. ч. и дислокации. В рамках рассматриваемой модели считалось, что заряд распределен по дислокации дискретно, поэтому при составлении уравнения она разбивалась на конечное число зарядов, взаимодействующих между собой и с точечными зарядами других дефектов.

Запишем уравнение движения скользящей дислокации под воздействием ультразвука и постоянной нагрузки в виде:

$$ma = F_s + F_v + F_{ex} + F_{in} + F_{st} + F_{el} + F_{mag},$$

где $F_s = -\frac{Gb^2}{2R}$ – сила самодействия в приближении линейного натяжения, обусловленная появлением в краевой дислокации винтовых сегментов при ее движении; G – модуль сдвига; b – вектор Бюргерса; R – радиус кривизны дислокационного сегмента в текущей точке (x, y) ;

$F_v = Bv = B\frac{du}{dt}$ – сила вязкого трения; B – коэффициент вязкости; u – перемещение сегмента во времени;

$F_{ex} = \begin{cases} b\sigma \\ b\sigma^0 \sin(\omega t) \end{cases}$ – сила, определяющая внешнюю нагрузку: постоянную и ультразвуковую компоненту;

$F_{in}(x, y) = \frac{Gb^2}{4\pi} \cdot y \left[\frac{x+l/2}{(x+l/2)^2+y^2} - \frac{x-l/2}{(x-l/2)^2+y^2} \right]$ – сила, обусловленная действием дислокаций леса, которые

являются точками закрепления, на дислокационный сегмент; l – длина дислокации по дуге;

$F_{st} = b\sigma_{st}\text{sign}(F_{it} + F_{ex} + F_{in})$ – сила, характеризующая стартовое напряжение; F_{el} – суперпозиция электрических сил в текущей точке дислокационного сегмента:

$$F_{el} = \sum_{i=0}^{i=n} \vec{F}_{ij} = \sum_{i=0}^{i=n} k \frac{q_i q_j}{r_{ij}^2} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} = k q_j \sum_{i=0}^{i=n} \frac{q_i}{r_{ij}^2} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}};$$

F_{mag} – магнитная составляющая силы. Известно, что постоянное магнитное поле влияет на перемещение дислокаций в немагнитных кристаллах [6], в т. ч. и слабое магнитное поле Земли оказывает такое влияние [7]. Природа такого объясняется преобразованием структуры примесных центров, лимитирующих подвижность дислокаций в кристалле. Кроме того, изменение дефектной структуры материала дает постоянное магнитное поле, но и скрещенные магнитные поля – постоянное и переменное [8]. Однако в рамках данной работы влияние магнитного поля Земли на эволюцию дефектной структуры не учитывалось;

m – инерционный член. В рамках рассматриваемой модели можно им пренебречь.

Таким образом, первоначальное уравнение движения дислокационного сегмента примет вид:

$$B \cdot \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{Gb^2}{2R(\lambda, \tau_0)} - b\sigma^0 \sin(\omega t) - \frac{Gb^2}{4\pi} y \left[\frac{x + \frac{l}{2}}{\left(x + \frac{l}{2}\right)^2 + y^2} - \frac{x - \frac{l}{2}}{\left(x - \frac{l}{2}\right)^2 + y^2} \right] - b\sigma_{st}\text{sign}(F_{it} + F_{ex} + F_{in}) - k q_j \sum_{i=0}^{i=n} \frac{q_i}{r_{ij}^2} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}.$$

Это уравнение является неоднородным линейным уравнением в частных производных параболического типа. Для его решения будем использовать метод конечных разностей. Этот метод подразумевает использование явной или неявной конечной разностной схемы.

Для решения дифференциального уравнения аппроксимируем дифференциальный оператор:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{n+1} = \frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau}, j = \overline{1, N-1}, k = \overline{0, K-1}$$

$$u_0^k = \varphi_0(t^k), u_N^k = \varphi_l(t^k), k = \overline{0, K}; u_j^0 = \psi(x_j), j = \overline{0, N}$$

Сделаем следующую замену: $v = \frac{du}{dt} = \frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau}$, тогда уравнение принимает вид:

$$B \cdot \frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \frac{Gb^2}{2R(\lambda, \tau_0)} - b\sigma^0 \sin(\omega t) - \frac{Gb^2}{4\pi} \cdot y \left[\frac{x + \frac{l}{2}}{\left(x + \frac{l}{2}\right)^2 + y^2} - \frac{x - \frac{l}{2}}{\left(x - \frac{l}{2}\right)^2 + y^2} \right] - b\sigma_{st}\text{sign}(F_{it} + F_{ex} + F_{in}) - k q_j \sum_{i=0}^{i=n} \frac{q_i}{r_{ij}^2} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}},$$

где для каждого j -го уравнения все значения сеточной функции известны, за исключением одного – u_j^{k+1} ,

которое может быть определено явно из данных соотношений.

Выражаем значение функции на $k+1$ слое и получаем решение:

$$u_j^{k+1} = u_j^k + \left[\frac{Gb^2}{2R(\lambda, \tau_0)} - \frac{Gb^2}{4\pi} \times \right. \\ \cdot y \left[\frac{x + \frac{l}{2}}{\left(x + \frac{l}{2}\right)^2 + y^2} - \frac{x - \frac{l}{2}}{\left(x - \frac{l}{2}\right)^2 + y^2} \right] - b\sigma^0 \sin(\omega t) - b\sigma_{st}\text{sign}(F_{it} + F_{ex} + F_{in}) - \left. k q_j \sum_{i=0}^{i=n} \frac{q_i}{r_{ij}^2} \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \right] \cdot \frac{\tau}{B}$$

Таким образом, в рамках данной работы получено решение уравнения движения закрепленного дислокационного сегмента на дислокациях леса, позволяющее вычислять его конфигурацию в последующие моменты времени $n \cdot \tau$ по конфигурации предыдущего шага, где n – номер шага. В настоящее время проводятся работы по написанию программного комплекса, позволяющего отслеживать перемещение дислокации в реальном времени и выгружать числовые значения, характеризующее процесс, для определения закономерностей акустопластического эффекта.

ЛИТЕРАТУРА

1. Schmid G.E. Plasticity of insonated metals // Japan Inst. Metals. 1968. № 9. P. 797.
2. Whitworth R.W. Some effects of vibration on the internal friction of sodium chloride // Phil. Mag. 1960. V. 5. P. 425-440.
3. Лебедев А.Б., Кустов С.Б., Кардашев Б.К. Амплитуднозависимое поглощение ультразвука и акустопластический эффект в процессе активной деформации монокристаллов хлористого натрия // ФТТ. 1982. Т. 24. С. 3169.
4. Тяпунина Н.А., Наими Е.К., Зиненкова Г.М. Действие ультразвука на кристаллы с дефектами. М.: Изд-во МГУ, 1999. 238 с.
5. Манухина Д.В., Потапов А.Е., Лосев А.Ю., Супрун И.В. Математическое моделирование процесса движения скользящей дислокации сквозь дислокационный лес, находящийся в ультразвуковом поле // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2013. Т. 18. Вып. 4. С. 1879-1881.
6. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Перекалина Т.М., Урусовская А.А. О движении дислокаций в кристаллах NaCl под действием постоянного магнитного поля // ФТТ. 1987. Т. 29. Вып. 2. С. 467-471.
7. Головин Ю.И., Моргунов Р.Б., Иванов В.Е., Жуликов С.Е., Дмитриевский А.А. Электронный парамагнитный резонанс в подсистеме структурных дефектов как фактор пластификации кристаллов NaCl // Письма в ЖЭТФ. 1998. Т. 68. № 5. С. 400-405.
8. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Морозов В.А., Кац В.М., Лукин А.А. Резонансные перемещения дислокаций в кристаллах NaCl в условиях ЭПР в магнитном поле Земли с радиочастотным полем накачки // ФТТ. 2011. Т. 53. Вып. 10. С. 2010-2017.

Поступила в редакцию 13 апреля 2015 г.

Manukhina D.V., Plotnikov F.A., Losev A.Y., Suprun I.V., Boitsova M.V. THE MOTION OF SLIDING DISLOCATION THROUGH DISLOCATION FOREST IN THE INTEGRATED LOADING CONDITION

We present the conclusion and decision of the motion equations of a dislocation segment, under the ultrasound and a constant load influence, fixed on forest dislocations, by the finite difference method in crystals such as NaCl. What will allow us to define the value acoustoplastic effect and predict strengthening or softening of the material. In solving the equation takes

into account the fact that the dislocations are electric charge, but does not consider the effect of the Earth's magnetic field on the dislocations motion. As a result, we receive a solution that al-

lows us to calculate the dislocation segment configuration in subsequent times by the previous configuration step.

Key words: dislocation; Frank–Read source; ultrasound; finite difference method.

Манухина Дарья Владимировна, Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры систем автоматизированного проектирования, e-mail: dmanuhina@gmail.com

Manukhina Darya Vladimirovna, Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of Systems of Automatic Design Department, e-mail: dmanuhina@gmail.com

Плотников Федор Алексеевич, Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры систем автоматизированного проектирования, e-mail: blackdef@bk.ru

Plotnikov Fedor Alekseevich, Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of Systems of Automatic Design Department, e-mail: blackdef@bk.ru

Лосев Алексей Юрьевич, ЗАО «Калуга Астрал», г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, заместитель начальника отдела программирования, e-mail: losev-al@yandex.ru

Losev Alexey Yrievich, JSC "Kaluga Astral", Kaluga, Russian Federation, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, the Deputy Chief of Software Department, e-mail: losev-al@yandex.ru

Супрун Ирина Валерьевна, Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры систем автоматизированного проектирования, e-mail: irina-kaluga_88@mail.ru

Suprun Irina Valerievna, Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch, Russian Federation, Candidate of Physics and Mathematics, Assistant of Systems of Automatic Design Department, e-mail: irina-kaluga_88@mail.ru

Бойцова Маргарита Викторовна, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, г. Тамбов, Российская Федерация, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики, e-mail: mvboitsova@mail.ru

Boitsova Margarita Viktorovna, Tambov State University named after G.R. Derzhavin, Tambov, Russian Federation, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of General Physics Department, e-mail: mvboitsova@mail.ru