

Компьютерное моделирование формирования дислокационных стенок при работе источника Франка—Рида

Е. М. Борисовская

По результатам компьютерного моделирования были определены число дислокаций и угол разориентации дислокационных стенок, возникающих в результате работы источника Франка—Рида при взаимодействии с дислокацией леса. Рассчитаны параметры стенок в зависимости от приложенного касательного напряжения. Показано, что число дислокаций и угол разориентации линейно зависят от внешнего напряжения, однако при большом напряжении число дислокаций начинает резко уменьшаться, а угол разориентации расти.

Введение

В предыдущих работах [1—3] в рамках дислокационной динамики двумерной модели бесконечных краевых дислокаций изучено несколько режимов работы источника Франка—Рида в присутствии дислокации леса. Было показано, что существует три режима работы источника (рис. 1—3): *pile-up*, генерация стенок и “промежуточный режим”, когда источник работает то на создание стенок, то в режиме *pile-up*.



Рис. 1. Работа источника Франка—Рида в режиме *pile-up*.

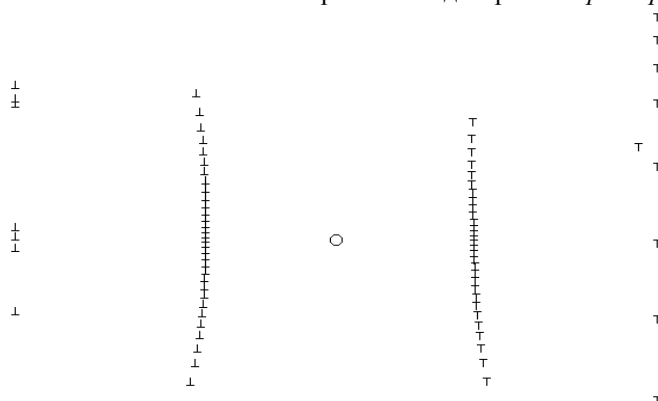


Рис. 2. Работа источника Франка—Рида в режиме генерации дислокационных стенок.



Рис. 3. Работа источника Франка—Рида в переменном режиме.

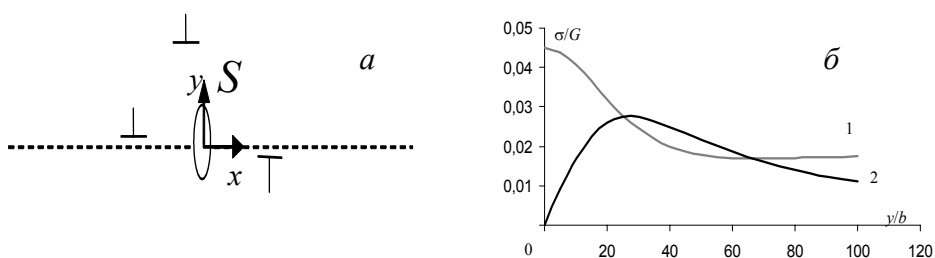


Рис. 4. Работа источника в присутствии дислокации леса (а) и напряжения на источнике в зависимости от координаты пробной дислокации (б): 1 — σ_{11} ; 2 — σ_{12} .

Среди исследованных режимов наибольший интерес вызывает режим генерации дислокационных стенок, поскольку образующиеся дислокационные конфигурации можно рассматривать как прообраз дисклинаций, которые теоретически предсказал и неоднократно наблюдал экспериментально В. В. Рыбин с сотр. [4—6].

Цель данной работы — изучение характеристик (числа дислокаций и угла разориентации) стенок, возникающих при работе источника Франка—Рида.

Результаты расчета и их обсуждение

В работе [3] рассмотрено взаимодействие источника Франка—Рида с пробной дислокацией. Было рассчитано поле напряжений, действующее на дислокации, выпущенные из источника (рис. 4, б). Как видно из рисунка, самые большие напряжения, вызывающие переползание дислокаций, возникают, когда пробная дислокация находится на расстоянии $40b$ от источника. В цитируемой работе обсуждалось влияние положения пробной дислокации на работу источника. Не менее важно рассмотреть влияние приложенного внешнего напряжения.

Моделирование проводили следующим образом: на каждом шаге рассчитывали напряжения (касательные σ_{12} и нормальные σ_{11}) на каждой дислокации, затем их скорость, предполагая ее линейную зависимость от напряжения: $v_i = c\sigma_i$, $c = D_s b^2 / kT$. Новые положения определяли как $x_{i+1} = x_i + v_i dt$ (dt — шаг по времени, который вычисляли как время, необходимое для прохождения дислокации с наибольшей скоростью двух векторов Бюргерса). Считали, что, если $\sigma_{12} > \sigma_{11}$, дислокация скользит, если $\sigma_{12} < \sigma_{11}$ — то переползает. В данной работе рассмотрен случай деформации железа ($c = 7 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2 \cdot \text{с} / \text{кг}$) под действием касательного внешнего напряжения.

Характеристики дислокационных стенок

На рис. 5 представлены результаты расчета количества дислокаций в стенке в зависимости от приложенного напряжения для случая, когда пробная дислокация расположена на расстоянии $40b$ от источника. Как показали предыдущие расчеты, это расстояние является оптимальным для образования стенки. Если дислокация находится ближе к источнику, она может вызывать скольжение рожденных дислокаций, если дальше, то ее влияние на образование стенок уменьшается.

Расчеты показали, что при напряжениях меньше 100 МПа источник не работает, при напряжениях 100—200 МПа — работает в режиме *pile-up*,

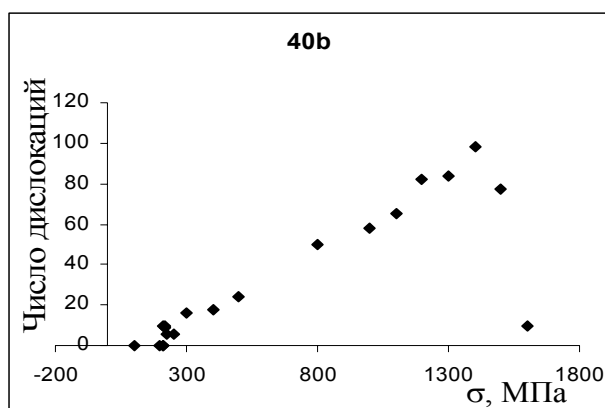


Рис. 5. Количество дислокаций в стенках в зависимости от приложенного напряжения.

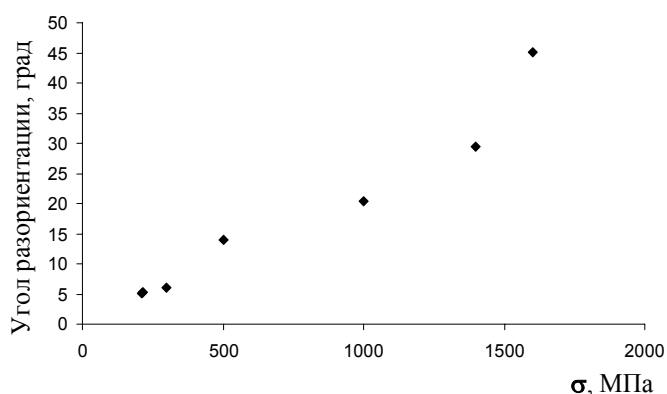


Рис. 6. Угол разориентации образовавшейся стенки в зависимости от приложенного напряжения.

при высоких напряжениях (более 200 МПа) источник начинает испускать дислокационные стенки, причем число дислокаций в них практически пропорционально напряжению. Однако, если напряжения продолжают увеличиваться более 1600 МПа, источник перестает работать в режиме генерации стенок и опять начинает работать в режиме *pile-up*. Это объясняется тем, что напряжение, вызывающее скольжение, становится больше напряжения, вызывающего переползание.

Известно, что дислокационная стенка приводит к разориентации кристаллографических плоскостей. Угол разориентации α связан с параметрами дислокационной стенки соотношением [7] $\sin \frac{\alpha}{2} = \frac{b}{2D}$, где

D — расстояния между дислокациями. Рассчитанная зависимость угла разориентации от внешнего напряжения, вызванная наличием стенок, приведена на рис. 6. Расчет показал, что угол разориентации в данном случае может составлять 40—50 град, то есть такая структура имеет признаки дисклинационного дефекта. Интересно отметить, что угол разориентации также практически пропорционален напряжению. Однако при очень больших напряжениях начинают появляться небольшие стенки из близко расположенных дислокаций, что приводит к резкому росту угла разориентации.

Необходимо заметить, что данный режим работы источника определяется соотношением скоростей скольжения и переползания дислокаций. Поскольку это соотношение сильно зависит от температуры и степени деформации, дальнейшее развитие этой работы предполагает исследование влияния этого фактора на закономерности формирования дислокационных стенок.

Выводы

В рамках дислокационной динамики двумерных краевых дислокаций проведено моделирование работы источника Франка—Рида в режиме генерации дислокационных стенок. Показано, что при малых напряжениях источник не генерирует дислокации. При повышении напряжения и в присутствии дислокаций леса источник начинает испускать дислокационные стенки, причем число дислокаций в стенке пропорционально приложенному касательному напряжению. При дальнейшем увеличении касательного напряжения источник начинает работать в режиме *pile-up*.

Показано, что угол разориентации такой стенки почти линейно зависит от приложенного напряжения, однако при больших напряжениях наблюдается резкий рост угла разориентации, что обусловлено уменьшением расстояния между дислокациями в стенке в этом случае.

1. Борисовская Е. М., Подрезов Ю. Н. Анализ процесса аннигиляции дислокаций в случае их хаотического расположения // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2006. — Вып. 8. — С. 116.
2. Борисовская Е. М., Подрезов Ю. Н. Анализ условий аннигиляции дислокационных скоплений // Там же. — 2005. — Вып. 7. — С. 99.
3. Борисовская Е. М., Подрезов Ю. Н., Фирстов С. А. Динамика структурных перестроек с учетом процесса зарождения дислокаций // Электронная микроскопия и прочность материалов. — 2007. — Вып. 14. — С. 3—11.
4. Рыбин В. В. Принципы формирования микроструктуры в процессе пластического нагружения // Проблемы материаловедения. — 2002. — 1 (29). — С. 11—33.
5. Рыбин В. В. Закономерности формирования мезоструктур в ходе развитой пластической деформации // Вопросы материаловедения. — 2002. — № 1 (29).
6. Орлов А. Н., Переверзевцев В. Н., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах. — М.: Металлургия, 1980. — 156 с.
7. Gay P., Hirsch P. B., Kelly A. // Acta Met. — 1953. — 1. — P. 315.