

На правах рукописи



ТИХОНОВА ТАТЬЯНА АЛЕКСАНДРОВНА

**ИССЛЕДОВАНИЕ КООПЕРАТИВНЫХ ЯВЛЕНИЙ,
СВЯЗАННЫХ С НАЛИЧИЕМ НОСИТЕЛЕЙ
ЛОКАЛИЗОВАННОГО СВОБОДНОГО ОБЪЕМА,
НА ПРИМЕРЕ КРИСТАЛЛА ЧИСТОГО АЛЮМИНИЯ**

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Барнаул - 2010

Работа выполнена в ГОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова и ГОУ ВПО «Кузбасская государственная педагогическая академия»

Научные руководители: доктор физико-математических наук, профессор, Неверов Валерий Владимирович Заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор Старостенков Михаил Дмитриевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор Плотников Владимир Александрович

доктор физико-математических наук, профессор Кашченко Михаил Петрович

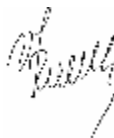
Ведущая организация: Кемеровский государственный университет, г. Кемерово

Защита состоится “23” ноября 2010 года в 14.00 час. на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Автореферат разослан «22» октября 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета, кандидат
физико-математических наук



Романенко
В.В.

Примечание: Отзывы на автореферат, заверенный гербовой печатью организации, просим посылать в 2-х экземплярах на адрес университета.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Теория дефектов кристаллической решетки объясняет механические свойства твердых тел, составляя основу физических и технических теорий пластичности, прочности, разрушения. К простейшим точечным дефектам кристаллической решетки относятся вакансии и межузельные атомы.

При образовании комплексов вакансий и межузельных атомов в материале, структура кристаллической решетки вблизи них искажается за счет смещений атомов в упругих полях дефектов, что вызывает локальное нарушение плотности. Области, окружающие межузельный атом или комплексы межузельных атомов, обладают повышенной локальной плотностью; вакансию или комплексы вакансий – пониженной локальной плотностью.

В процессе структурной релаксации внутри кристалла происходит перераспределение локальной плотности, завершающееся образованием областей «идеальной» плотности и новых дефектов кристаллической решетки. Подобные процессы, связанные с перемещением вещества внутри некой системы, принято называть массопереносом. Локальная перестройка внутренней структуры материала сопровождается излучением материалом механических волн, это явление получило название акустической эмиссии. Несмотря на значительный объем теоретических и экспериментальных исследований, связанных с явлением акустической эмиссии, вопрос о природе акустической эмиссии, сопровождающей пластическую деформацию, остается открытым. Основная сложность при экспериментальных исследованиях заключается в том, что релаксация кристаллической решетки происходит с высокой скоростью. Поэтому в данном случае актуальным является использование метода компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование являющееся в настоящее время таким же признанным методом исследования как экспериментальный и теоретический метод, начало применяться в физике твердого тела с конца 50х годов 20 века. С его помощью на атомном уровне возможно исследование не только быстротекающих процессов, как например, аннигиляция точечных дефектов, но и процессов более длительных по времени.

В первой части работы исследован процесс бездиффузионного массопереноса в кристалле алюминия, содержащем комплексы межузельных атомов и вакансий, с помощью компьютерного моделирования по методу молекулярной динамики. Показано, что процесс сопровождается генерацией упругих волн. Во второй части работы решена задача об излучении упругих волн при аннигиляции двух краевых дислокаций, исходя из предположения, что движущие дислокации перемещают массу.

Цель настоящей работы заключается в исследовании методом компьютерного моделирования релаксационных процессов и механизмов массопереноса в кристалле алюминия, содержащем такие носители свободного объема, как межузельные атомы, вакансии и их комплексы; построении аналитического решения для пластического сдвига в бесконечной среде с использованием представлений о сдвиговом переносе массы.

Для достижения поставленной в работе цели были сформулированы следующие задачи:

1. Построить дву- и трехмерную молекулярно-динамическую модель для исследования на атомном уровне релаксационных процессов в кристалле алюминия, содержащем точечные дефекты.
2. Изучить картины атомных смещений вблизи комплексов точечных дефектов на начальной стадии процесса релаксации и итоговые конфигурации кристаллической решетки после релаксации.
3. Исследовать процессы релаксации кристалла алюминия при различных стартовых расстояниях между парами внедренных точечных дефектов, а также влияние деформации сжатия/растяжения расчетного блока, нагревания расчетного блока и влияние стартовых конфигураций комплексов точечных дефектов на процесс релаксации.
4. Выявить механизмы массопереноса, оценить скорости данного процесса, энергетические характеристики.
5. Построить аналитическое решение для пластического сдвига в бесконечной среде, пользуясь представлениями о переносе массы.
6. Решить задачу о разделении упругого поля краевой дислокации на бездилатационную и дилатационную составляющие.

Научная новизна работы заключается в том, что:

- 1) при помощи метода молекулярной динамики впервые обнаружена стадийность процесса релаксации кристаллической структуры: на начальной стадии зафиксированы максимальные смещения атомов величиной в 0,8 параметра решетки; на последующей стадии наблюдалось увеличения числа направлений кооперативных смещений атомов;
- 2) показано, что при релаксации атомной структуры кристалла происходит перераспределение локальной избыточной (недостающей) плотности, что приводит к формированию новых комплексов точечных дефектов;
- 3) замечено, что этот процесс сопровождается генерированием ударной волны и ее последующей трансформацией в продольную волну; показано, что время массопереноса совпадает со временем распространения ударной волны, а трансформация ударной волны в продольную представляет собой эффект акустической эмиссии;
- 4) надделение структурного дефекта массовой характеристикой позволяет идентифицировать его как механический объект, который обладает

импульсом и энергией, зависящих от стартовых условий, таких как радиус обрезания, расстояние до свободной поверхности, расстояние между дефектами.

5) Установлено, что внешний импульс трансформируется в упругие моды разной частоты, по которым распределяется его энергия.

Научная и практическая ценность диссертационной работы заключается в возможности использования развитых представлений в радиационном материаловедении с целью создания новых материалов с заданными свойствами, а также с усовершенствованием свойств уже известных материалов подвергающихся различным экстремальным воздействиям в процессе эксплуатации. Кроме этого, результаты компьютерного моделирования могут быть использованы как демонстрационный материал, отображающий процессы, протекающие в кристаллических структурах, полезный для студентов, осваивающих курс физики.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Процесс релаксации кристаллической структуры, содержащей такие носители свободного объема, как межузельные атомы, вакансии и их комплексы, состоит из нескольких стадий: образование ударной волны, ее последующая трансформация в продольную волну.

2. Зависимость интенсивности процесса релаксации от типа комплексов дефектов .

3. Структурная релаксация при наличии таких носителей свободного объема, как межузельные атомы, вакансии и их комплексы в кристалле сопровождается выделением энергии в виде акустической эмиссии.

4. Зависимость параметров упругих волн от вида переносы массы: конвективного или кондуктивного.

Апробация работы. Результаты работы были доложены и обсуждены на следующих научных конференциях:

- 11 Всероссийская конференция студентов-физиков и молодых учёных, Екатеринбург, 2005.

- 12 Всероссийская конференция студентов-физиков и молодых ученых, Новосибирск, 2006.

- Всероссийская научно-практическая конференция «Наука в ВУЗе», Новокузнецк, 2007.

- XVII Петербургские чтения по проблемам прочности, Санкт-Петербург, 2007.

- 13 Всероссийская конференция студентов-физиков и молодых ученых, Ростов-на-Дону, 2007.

- IV Международная конференция «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (MPFP – 2007), Тамбов, 2007.

- Международная научная школа-конференция «Фундаментальное и прикладное материаловедение», Барнаул, 2007.
- 14 Всероссийская конференции студентов-физиков и молодых ученых, Уфа, 2008.
- X Международная школа-семинар "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах" (ЭДС – 2008), Бийск, 2008.
- V Международная научно-техническая школа-конференция «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию в электронике», Москва, 2008.
- Вторая Всероссийская конференция с международным интернет - участием «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к Наноиндустрии», Ижевск, 2009.
- XV Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, Томск, 2009.
- Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии», Витебск, 2009.
- I региональная научно-практическая конференция «Наноиндустрия Алтая 2009», Бийск, 2009.
- XVII Международная конференции «Физика прочности и пластичности материалов», Самара, 2009.
- Всероссийская конференция с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы. Создание, структура, свойства - 2009», Томск, 2009.
- Научно-техническая конференция с международным участием «Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы: получение, свойства, применение. V Ставеровские чтения», Красноярск, 2009.
- International Conference «Fundamental Aspects of External Fields Action on Materials», Novokuznetsk, 2010.
- V (XXXVII) Международная научно-практическая конференция «Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей», Кемерово, 2010.
- Всероссийская конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, Владивосток, 2010.
- XI Международная школа-семинар "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах" (ЭДС – 2010), Бийск, 2010.

Публикации. Результаты работы отражены в 30 публикациях, пять из которых в журналах, включенных в список ВАК для публикации диссертационных работ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 131 наименования. Работа изложена на 145 страницах машинописного текста, содержит 1 таблицу и 86 рисунка.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность и практическая ценность выбранного направления исследований. Сформулирована цель диссертационной работы, описана научная новизна, практическая значимость. Приведены основные защищаемые положения и краткое содержание работы по главам.

В первой главе дан обзор современных представлений о природе акустической эмиссии, приведены результаты экспериментальных исследований пластической деформации в металлах, сопровождающейся излучением упругих волн.

Во втором разделе уделено внимание работам, в которых проведено решение задач с учетом массопереноса.

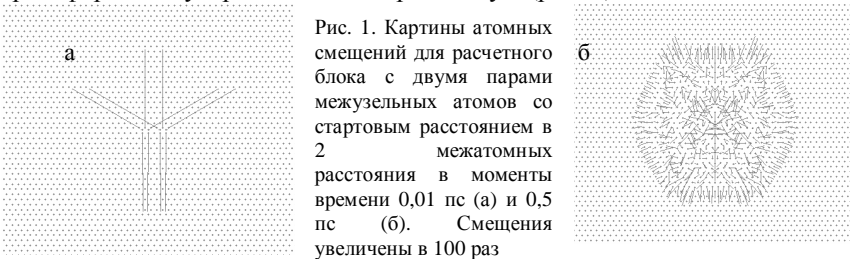
Третий раздел главы посвящен описанию современных методов компьютерного моделирования и основных этапов построения компьютерной модели. Отмечено, что значительная часть исследований проблемы образования и последующей эволюции дефектной кристаллической структуры проведена при помощи компьютерного моделирования.

Во второй главе описывается построение компьютерной модели по методу молекулярной динамики. Сущность метода молекулярной динамики заключается в том, что поведение заданной совокупности атомов описывается в рамках классической механики системой обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона. Система уравнений решается с помощью численных методов интегрирования дифференциальных уравнений. Температура расчетной ячейки задается через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. При этом начальные скорости атомов задаются равными по абсолютной величине, но со случайными направлениями. Полная кинетическая энергия соответствует заданной температуре, а суммарный импульс расчетной ячейки должен быть равен нулю.

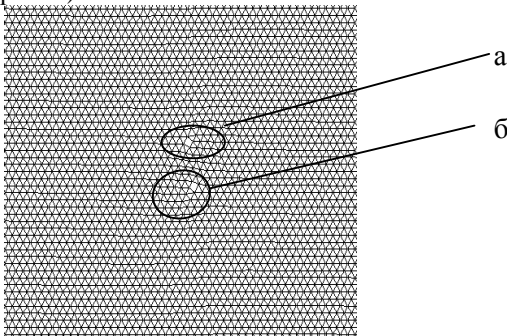
Определение потенциальной функции, которая бы наиболее корректно описывала межатомное взаимодействие, является важнейшей задачей компьютерного моделирования в физике конденсированных сред. Обычно приходится выбирать между точностью потенциальной функции и ее простотой, так как от этих условий зависит скорость выполнения расчетов и их достоверность. В настоящей работе межатомное взаимодействие задавалось парным центральным потенциалом Морза.

Затем приводится описание результатов компьютерного эксперимента. Вначале в расчетный блок 50 на 50 атомов алюминия импульсно внедрялись две пары межузельных атомов или две пары вакансий на стартовых расстояниях от одного до 12 атомов. После включения процедуры релаксации в каждом из случаев наблюдалось возникновение ударных

стартовых смещений величиной порядка 0,034 нм, затем через 0,5 пс времени эксперимента с помощью визуализатора атомных смещений фиксировалась трансформация ударной волны в продольную (рис. 1).



Для различных расстояний скорости распространения смещений (или скорости массопереноса) были различными, однако в каждом из случаев превышали скорость звука в алюминии от 1,1 до 1,3 раза. После проведения процедуры релаксации расчетный блок подвергался охлаждению, и с помощью визуализатора атомных рядов фиксировались итоговые картины (рис. 2).



Наблюдалось образование дефектов: дислокационных диполей и дислокационных петель. При стартовом расстоянии в 12 межузельных расстояний между парами в итоге полученная структура имеет в одном из направлений (а) две дислокационные петли, разделенных тремя атомными плоскостями. Одна дислокационная петля образована цепочкой из 23 вакансий (рис. 3а) и определяет область с недостаточной локальной плоскостью; вторая дислокационная петля образована цепочкой из 23 межузельных атома и определяет область с избыточной локальной плоскостью (рис. 3б). Дислокационные петли образовались в верхней центральной части расчетного блока. В двух других направлениях имеем по одному дислокационному диполю (рис.3).

а

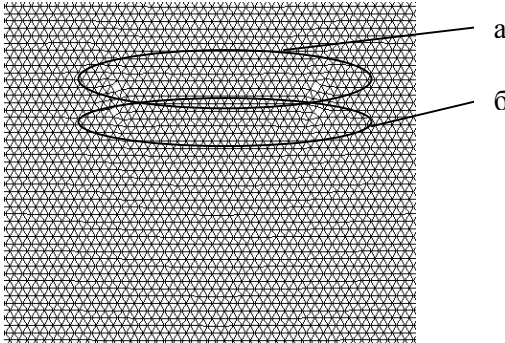


Рис. 3. Итоговые структуры после релаксации двух пар межузельных атомов со стартовым расстоянием в двенадцать межатомных и последующего охлаждения (наложение атомных рядов). Выделены области: а) дислокационная петля из 23 вакансий б) дислокационная петля из 23 межузельных атома

Для исключения влияния свободных границ на внутренние процессы блока были проведены аналогичные эксперименты в блоке с большим числом атомов (80×80). Увеличение числа атомов не повлияло на итоговые конфигурации структуры блока, однако внесло изменения в скорость протекания процесса релаксации: процесс проходил менее интенсивно, итоговые конфигурации образовались лишь спустя 20 пс. О меньшей интенсивности свидетельствовала и более низкая средняя температура в блоке.

Следующий блок аналогичных экспериментов проводился для случая пар из 4 межузельных атомов. Рост избыточной массы со знаком «+» привел к увеличению скоростей массопереноса, появлению иных итоговых картин.

В каждом из аналогичных экспериментов для пар вакансий на старте наблюдалось незначительное увеличение температуры до 1-2 К. В области, содержащей вакансии, возникают незначительные смещения группы из 50 атомов вдоль различных направлений кристаллографических плоскостей. В дальнейшем возникают вторичные смещения соседних атомов, и к моменту времени 0,5 пс эксперимента возникает кооперативное движение атомов с небольшими амплитудами, трансформирующееся в продольную волну, что фиксируется по возникновению кооперативных атомных смещений. Оценки скоростей распространения смещений дают значение меньше скорости звука. После проведения процедуры релаксации объединение пар вакансий в единый комплекс не наблюдалось.

Далее приведены результаты компьютерного эксперимента при подвержении расчетного блока различным воздействиям. Наличие в материале внедренных дефектов создает повышенную локальную плотность, деформация растяжения блока способствовала снижению локальной плотности. Блок размером 50 на 50 атомов, содержащий пары межузельных атомов подвергался деформации растяжения с $\varepsilon = 3\%$ и 5% . Аналогично блок с вакансиями подвергался деформации сжатия в 3 и 5% для увеличения локальной плотности.

В случае, когда расчетный блок с межузельными атомами подвергался деформации сжатия, процесс полной релаксации проходил менее интенсивно, и итоговые картины получались через 22 пс времени эксперимента. В каждом из случаев наблюдался массоперенос с образованием дефектов: дислокационных диполей и петель. Интересно, что схожие структуры получились при различных стартовых условиях. При релаксации блока с парами межузельных атомов на расстоянии 12 межатомных и при релаксации блока с парами межузельных атомов на расстоянии 2 межатомных с дополнительной деформацией сжатия. В обоих случаях конечный дефект – ДП из 23 межузельных атомов и ДП из 23 вакансий в одном из направлений – образовался в верхней части блока.

В отличие от процесса релаксации блока, содержащего пары вакансий, в котором было замечена устойчивость вакансионного комплекса, дополнительное воздействие в виде деформации сжатия оказало влияние на процесс. Процесс релаксации в случае относительной деформации 3% занял 20 пс, 5% - 30 пс, в итоге получены схожие картины.

Далее исследовалось поведение атомов блока размером 50×50 , содержащего две пары межузельных атомов, и после процедуры релаксации подвергающегося нагреванию при температуре 500 К в течение 100 пс.

Область, содержащая дефекты, переместилась к правой границе блока, что свидетельствует о том, что сообщение дополнительной энергии способствует переносу массы внутри блока.

В случае, когда в блоке находились две пары вакансий, не удалось проследить влияние нагревания на структурную перестройку материала.

Третья глава посвящена описанию экспериментов, когда в двумерный и трехмерный расчетный блок внедрялись комплексы из 3 и 10 дефектов, расположенных в виде равностороннего треугольника; из 7 и 13 – в виде шестиугольника.

Как и в случае меньшего числа межузельных атомов на старте эксперимента возникают смещения атомов, дискретные по направлению, и их амплитуды большие, поэтому по таким характеристикам подобные смещения можно отнести к смещениям, возникающим при ударной волне.

Со временем число направлений начинает возрастать, и увеличиваются амплитуды смещений. Уже через 0,5 пс в блоке, содержащем три межузельных атома на старте (рис. 4а) можно наблюдать возникновение коллективных смещений атомов, которые образуют продольную волну со сферическим фронтом (рис. 4б).

В течение эксперимента динамическая температура колеблется в пределах от 70 К до 80 К. Итоговая конфигурация образуется спустя 5 пс от начала эксперимента, и в дальнейшем не меняется.

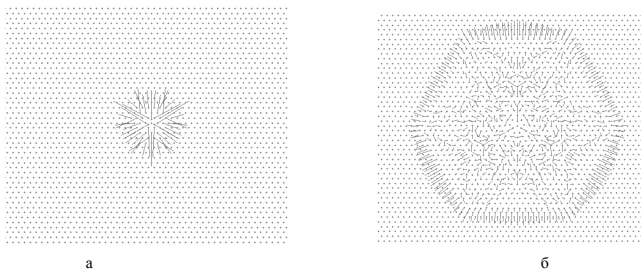


Рис. 4. Картины атомных смещений для расчетного блока, содержащего комплекс из трех межузельных атомов в моменты времени 0,1 пс (а) и 0,65 пс (б) после начала процедуры релаксации. Смещения увеличены в 10 раз

Как видно из рис. 5, происходит изменение стартовой конфигурации: заданный на старте треугольник межузельных атомов трансформируется в дислокационный диполь. Диполь расположен в двух из плотноупакованных направлений типа $\langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$. Таким образом, данная конфигурация не является устойчивой.

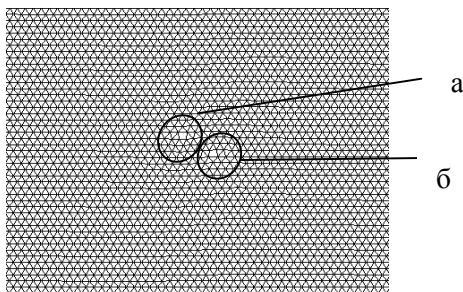


Рис. 5. Итоговая конфигурация, полученная в результате процесса релаксации расчетного блока, содержащего комплекс межузельных атомов в виде равностороннего треугольника. Выделенные области (а) и (б) содержат ядра дислокаций, образующие дислокационный диполь

Заданный на старте треугольник вакансий трансформируется в дислокационную петлю, ядро которой состоит цепочки трех вакансий. Петля расположена в одном из плотноупакованных направлений типа $\langle 110 \rangle$. Таким образом, данная конфигурация не является устойчивой, в процессе релаксации трансформируется в одномерную цепочку. Остальные конфигурации оказались устойчивыми к деформации, например комплекс из семи вакансий, образующий шестиугольник. Данный комплекс может считаться как дислокационный диск, лежащий в плоскости $\langle 111 \rangle$ или микропора. Сравнивая начальную и конечную конфигурации комплекса, можно отметить, что в результате релаксации происходит деформация всестороннего сжатия поверхности, ограничивающей комплекс вакансий. В результате этого объем (площадь), занимаемая комплексом, становится равной 0,97 от площади (объема) первоначального комплекса.

В четвертой главе приведены результаты эксперимента, который проводился на расчетном блоке, имитирующем трехмерный кристалл

чистого алюминия. Взаимодействие между атомами ограничивалось пятью первыми координационными сферами. В центр расчетного блока внедрялись точечные дефекты. Продольная волна создавалась путем сообщения трем центральным атомам крайней плоскости некоторой скорости вдоль направления $\langle 111 \rangle$. После конструирования расчетного блока включалась процедура релаксации путем разогрева кристалла вблизи 0 К. Затем при помощи визуализатора распределения потенциальной энергии рассматривались образующиеся после релаксации конфигурации точечных дефектов.

Кроме этого, в работе также использовался визуализатор атомных смещений, представляющий собой линии, соединяющие начальное и конечное положение атомов. При конструировании расчетного блока, дефекты располагались в плоскости $\{111\}$ так, как показано на рисунке.

Вначале был рассмотрен процесс релаксации кристаллической структуры, содержащей комплекс вакансий, без какого либо воздействия на нее. Так на рис.6а показано распределение энергии атомов в расчетном блоке после процедуры релаксации. Конфигурация атомов в данном случае представляет собой практически идеальный октаэдр, вершины которого ориентированы вдоль направлений $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$. При увеличении обрезки энергетических значений атомов, видно, что данный комплекс представляет собой объемную тривакансию (рис.6б).

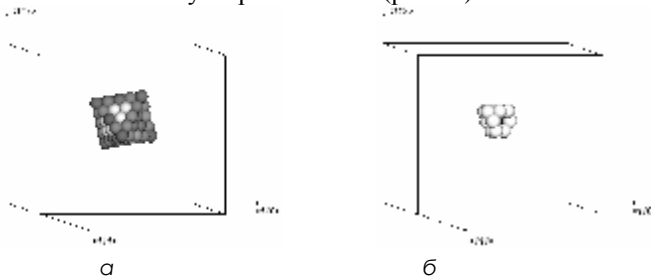


Рис.6. Распределение энергии атомов в расчетном блоке (фрагмент) содержащем комплекс из трех вакансий. Не показаны атомы с энергией связи в интервалах $-3.84 \dots -3.28$ эВ (а) и $-3.39 \dots -3.12$ эВ (б) (энергия связи атома в идеальном кристалле -3.34 эВ).

Затем был исследован процесс релаксации структуры, содержащей межузельные атомы. Так при внедрении дефектов в октаэдрическую пустоту, в процессе релаксации межузельные атомы образуют объемный комплекс из трех краудионов, ориентированных вдоль направления $\langle 011 \rangle$.

При внедрении межузельных атомов в энергетически менее выгодное положение – тетраэдрическую пустоту – все трое начинают равномерно удаляться друг от друга, и в результате наблюдается следующая картина.

Продольная волна, возбужденная в кристаллической структуре, вносит изменения в процесс релаксации. Исследование показало, что фронт волны, проходящий через комплекс вакансий, не оказывает на них никакого

влияния. Волна возбуждалась как в начале эксперимента, так и после трансформации вакансионного комплекса.

Совсем иная картина наблюдается в эксперименте с межузельными атомами. Прохождения фронта продольной волны через агрегат межузельных атомов приводит к тому, что в случае расположения их в октаэдрической пустоте образуется комплекс, представленный на рис.7а, а при внедрении их в тетраэдрическую пустоту – объемный краудинный комплекс, ориентированный вдоль направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (рис.7б).

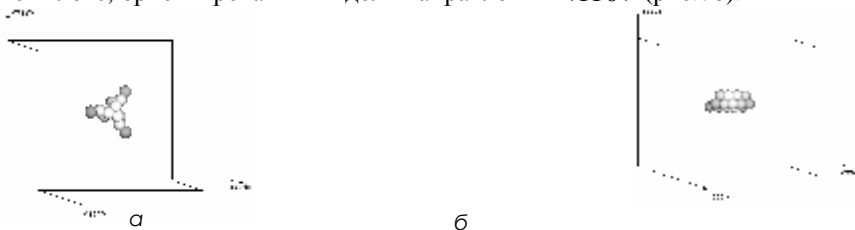


Рис.7. Распределение энергии атомов в расчетном блоке (фрагмент) содержащем комплекс из трех межузельных атомов, внедренных в октаэдрическую (а) и тетраэдрическую (б) пустоты после прохождения продольной волны. Не показаны атомы с энергией связи в интервалах $-3.82 \dots -2.59$ эВ (а) и $-3.82 \dots -2.64$ эВ (б) (энергия связи атома в идеальном кристалле -3.34 эВ).

В четвертой главе описаны теоретические представления о приписывании движущимся дефектам массы, развитые В.В. Неверовым, и на основе решения плоской задачи теории упругости для области с разрезом показано разделение поля дислокации на дилатационную и бездилатационную части.

Пластические сдвиги и трещины перераспределяют массу среды, в которой они развиваются. Распределение массы определяется полями напряжений, связанными с названными объектами. Участки сдвига или трещины представляются линейными разрезами. Решения показывают, что плоскость с разрезом разбивается на области (далее м-области), знак дилатации в которых одинаков (рис. 8). Материал м-областей с отрицательной дилатацией сжат, массовая плотность в этих областях повышена, и, следовательно, они содержат избыточную массу. В областях с положительной дилатацией масса снижена. Масса этих областей частично переместилась в области с отрицательной дилатацией. Движение фронта области пластического сдвига или трещины сопровождается изменением распределения дилатации, а, следовательно, и перемещением массы.

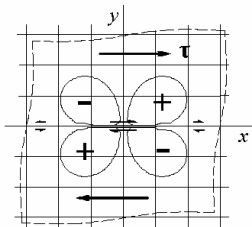


Рис. 8. Линии уровней распределения массовой плотности в поле напряжений пластического незавершенного сдвига. Линии нулевого уровня проходят по осям координат. Области повышенной плотности помечены знаком плюс. Пунктиром показаны границы исходно квадратной части тела после деформации. Смещения границ увеличены.

В микроскопическом описании дефекты, участвующие в сдвиговой пластической деформации, представляют собой дислокации, плоские скопления дислокаций, дисклинации, двойники, прослойки мартенситных фаз, а при мезо- и макроскопическом описании – полосы, пачки, пакеты, стопы скольжения, сдвига или деформации. Во всех этих случаях процесс можно свести к движению дислокаций. Учет переноса массы позволяет присвоить массу дефектам, вызывающим движения. Массу удобно присваивать, например, краю участка сдвига или краю трещины. Разделение полей позволяет установить массу движения.

В общем случае, м-области образуются на неоднородностях функции распределения сдвиговых смещений по плоскости сдвига. У каждой неоднородности формируются две м-области. Они расположены симметрично по разные стороны от плоскости сдвига и имеют разные знаки отклонения массовой плотности (м-диполь). М-диполь сопровождает движение неоднородности, в частности, дислокации и переносит массу. С разных сторон от плоскости сдвига масса перемещается в противоположных направлениях. Масса, которая присваивается дислокации или фронту участка сдвига, равная избыточной (недостающей) массе м-областей, является массой покоя. Поля напряжений описываются вектором смещений $\dot{\mathbf{u}}(x, y, z)$. Известно, что вектор всегда можно представить суммой двух частей:

$$\dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{u}}_i + \dot{\mathbf{u}}_l, \quad (1)$$

одна из которых удовлетворяет условию $\text{div} \dot{\mathbf{u}}_i = 0$ (2), а другая – условию $\text{rot} \dot{\mathbf{u}}_l = 0$ (3). Из (2) следует, что поле $\dot{\mathbf{u}}_i$ описывает движения в несжимаемом материале. В этом случае масса перемещается вместе с объемом, и такой перенос является конвективным. Поле $\dot{\mathbf{u}}_l$ (3) связано с дилатацией. В этом поле масса перемещается за счет образования и движения м-областей. Масса переносится сквозь объем, поэтому перенос является кондуктивным.

Возможность представления поля деформации в виде двух полей – без дилатации и с дилатацией – следует из функции напряжений Эри. В плоской теории упругости при отсутствии объемных сил напряжения и смещения могут быть выражены через одну вспомогательную функцию

$$U(z) = xp(z) + yq(z) + p_1(z), \quad (4)$$

где p_1 – гармоническая функция, и $z = x + iy$. Первые два слагаемые в (4) представляют гармоническую функцию, обусловленную величиной пропорциональной гидростатическому давлению или дилатации:

$$p(z) + ig(z) = (1/4) \int [P(z) + iQ(z)] dz, \quad P(z) = s_{xx}(z) + s_{yy}(z), \quad (5)$$

здесь $Q(z)$ – функция комплексно-сопряженная с $P(z)$. Сумма этих двух слагаемых

$$U_1 = xp(z) + yq(z) \quad (6)$$

является функцией Эри дилатационной части поля деформации. Тогда $p_1(z)$ – является функцией Эри бездилатационного поля.

Так как функции U_1 , и p_1 гармонические, то каждая из них удовлетворяет условию равновесия и описывает реально возможное поле деформаций в упругой среде. В сумме эти функции удовлетворяют граничным условиям.

Дилатационное и бездилатационное поля найдены для ряда сдвиговых дефектов (рис. 9), а так же для трещины отрыва (рис. 10). Отметим, что бездилатационное поле петли краевой дислокации так же состоит из трех вихрей. Сравнение модулей векторов смещений по размеру точек на рисунке показывает, что у двустороннего скопления дислокаций преобладают движения, обусловленные дилатационной частью. У трещины отрыва движения того и другого поля соизмеримы.

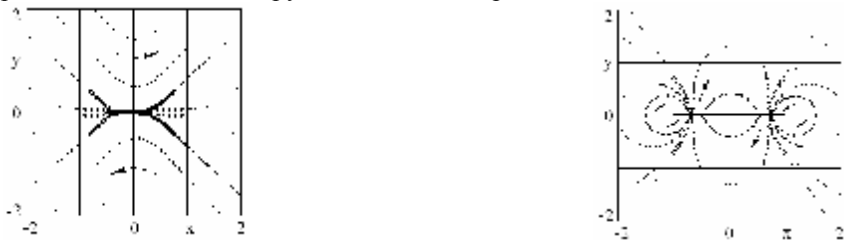


Рис. 9. Линии вектора смещения дилатационной части поля двустороннего скопления краевых дислокаций – слева (для малых точек $|\mathbf{r}_{U_1}| < 0.2$, для самых больших $|\mathbf{r}_{U_1}| > 0.4$) и для бездилатационной части – справа (для малых точек $|\mathbf{r}_{U_1}| < 0.03$). Участок сдвига показан утолщенной линией на правом рисунке

Формула (7) записана для конвективного переноса и применима для бездилатационного поля. С дилатационным полем дислокации связаны два движения: первое описывает перемещения элементов объема, а второе – перемещение м-диполя как целого. Массу переносит второе движение. Процесс является кондуктивным. Масса кондуктивного движения, близкая по величине массе экстралоскостей, для грубых оценок принимается на шесть порядков меньше массы деформируемого блока. Тогда при одинаковых энергетических затратах на движение скорость перемещения м-областей

должна быть на три порядка больше, чем при конвективном движении. В соответствии с этим при прочих равных условиях частота волн, порождаемых кондуктивным переносом, примерно, на три порядка выше, чем при конвективном. Так как у трещин отрыва модули векторов смещения бездилатационного и дилатационного движений близки, то, если дислокационный сдвиг порождает волны высокой частоты, то в спектре трещин отрыва, кроме того, имеется еще и значительная низкочастотная часть.

Кондуктивное движение перемещает массу на длину всего деформируемого блока, что создает большие скорости в правой части второго уравнения (7). В результате масса движения краевой дислокации превосходит массу покоя.

Вид переноса определяет: величину и скорость перемещаемой массы; места, в которые перемещается масса, а, следовательно, высвобождаемая энергия и импульс. Такие места являются источниками упругих волн. Перенос массы определяет развитие динамических процессов пластической деформации: изменение формы зерен, а, следовательно, их взаимодействие при деформации поликристаллов, образование трещин, параметры генерируемых упругих волн и т. д.

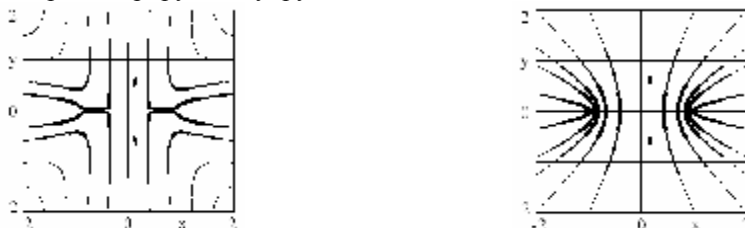


Рис. 10. Линии вектора смещения дилатационной части поля трещины отрыва – слева и бездилатационной части – справа (для тонких линий $|u_x| < 0.15$, для самых толстых $|u_x| > 0.25$)

В пятой главе, исходя из представления о сдвиговом переносе массы, описан процесс аннигиляции двух краевых дислокаций противоположного знака, расположенных в бесконечной изотропной среде. В среде выделяется квадратный блок, внутри которого находится пара краевых дислокаций противоположного знака, расположенных антисимметрично. Под действием сил взаимного притяжения происходит сближение дислокаций, и затем – их аннигиляция. Дислокации оказывают влияние на упругие поля друг друга, поэтому при их сближении масса, переносимая каждой из них, уменьшается. Однако, увеличивается масса, выходящая на границу раздела дислокаций. Для блока, состоящего из материала единичной плотности размером $2000b \cdot 2000b$, длина экстраплоскости для каждой из дислокаций составляет $1000b$. Вектор Бюргера принят равным единице ($b=1$). Масса, выносимая на границу аннигиляции, рассчитывается как произведение величины вектора

Бюргерса на длину экстраплоскости. Будем следить за потоками массы ($J_{гориз}$ – через горизонтальные стороны блока и $J_{вертик}$ – через вертикальные), величиной массы m -области M и массой, выходящей на границу аннигиляции $M_{гран}$ (8):

$$M_{гран}(L) = \int_0^H u_x(0, y, L) dy \quad (8)$$

Формулы для смещений взяты из решения второй плоской задачи теории упругости. Каждая из этих масс рассчитывается для четверти блока, а затем увеличивается в 4 раза, поскольку массы в соответствующих четвертях имеют разные знаки, и их алгебраическая сумма равна нулю.

График изменения суммарных масс в зависимости от расстояния дислокаций (в векторах Бюргерса) от границы аннигиляции приведен на рис. 11.

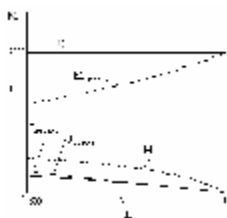


Рис. 11. Графики зависимости суммарных потоков через горизонтальные стороны блока $J_{гориз}$, через вертикальные стороны $J_{вертик}$, масса m -области M и масса, выходящая на границу аннигиляции $M_{гран}$ от L (расстояния краевых дислокаций от границы аннигиляции). Сумма этих масс Σ в точности равна массе экстраплоскостей КД, вводимых в материал.

По мере сближения дислокаций вынесенная на границы блока масса, а также масса m -областей перемещается на границу аннигиляции, следовательно, $M_{гран}$ возрастает. В момент аннигиляции вся масса вынесена на границу. Как видно из рисунка, сумма Σ всех масс величина постоянная и в точности равна 2000 (в отн.ед.), т.е. массе экстраплоскостей КД, вводимых в материал.

Полагаем, движение дислокаций ускоренным. Считаем, что внешние силы работы не совершают (релаксационный процесс). Уменьшающаяся упругая энергия полностью расходуется на увеличение относительной скорости дислокаций. Затем в теле выбирается поверхность Σ так, чтобы источник S лежал внутри этой поверхности, а источник T – вне её. Выбор поверхности Σ произволен, если она разделяет системы внутренних напряжений и лежит в области одновременного существования смещений u_i^S и u_i^T . Тогда энергия взаимодействия определяется следующим поверхностным интегралом:

$$E_{вз}(S, T) = \frac{1}{2} \int_{\Sigma} (s_{ij}^S u_i^T - s_{ij}^T u_i^S) dS_j \quad (9)$$

Энергия взаимодействия систем напряжений или работа, которую совершают напряжения одной системы напряжений над перемещениями другой, вычисляется для границы, которая разделяет источники систем напряжений. В рассматриваемой модели такой границей является плоскость

аннигиляции ($x = 0$), а системы напряжений обусловлены наличием поля сдвига (поля напряжений, создаваемого аннигилирующими дислокациями) и полем упругих волн. Эти поля сосуществуют во время аннигиляции и сменяют друг друга.

Слагаемые в подынтегральном выражении формулы (9) равны (работа источника S над перемещениями T равна работе источника T над перемещениями S), то можем записать формулу для работы:

$$A = \int_{x_1}^{x_2} s_{xy} u_y(0, y) dy \quad (10),$$

где σ_{xy} – касательные напряжения, создаваемые дислокациями, u_y – смещения точек плоскости аннигиляции.

Тогда для работы, которую совершает этот импульс (S) над генерируемыми волнами (T), запишем:

$$A = \int dA = \int F^S du = \int F^S v^T dt = \int v^T dJ^S \quad (11)$$

По мере возбуждения волна будет распространяться вдоль оси Oy и отводить энергию от места генерации. На время аннигиляции (время сосуществования полей двух источников) будем пренебрегать отводом энергии, тогда за смещения T можем принять уравнение стоячей волны. Стоячие волны всех частот имеют в точке привязки нулевую амплитуду – узел, это условие учтено использованием функции \sin . Тогда выражение для смещений T имеет вид:

$$u^T(y, t) = u_0^T \sin wt \sin ky \quad (12)$$

и для скорости:

$$v^T(y, t) = w u_0^T \cos wt \sin ky \quad (13)$$

Составим выражение для работы:

$$A(w, k) = \int_{x_1}^{x_2} \int_0^t w u_0^T \cos wt \sin ky \cdot \frac{\partial F(y, t)}{\partial y} dt dy \quad (14)$$

Связь между периодом и частотой, периодом и длиной волны, длиной волны и волновым числом определяются формулами:

$$w = \frac{2\pi}{T}, \quad l = c_l T, \quad k = \frac{2\pi}{l}, \quad (15),$$

где c_l – скорость продольных упругих волн.

Выбирая период, мы задаем через соотношения (15) все волновые характеристики. Волны максимальной частоты, генерируемые при аннигиляции, лежат в пределах дебаевских частот. На генерацию каждой гармоники тратится определенное количество работы, и, исходя из принципа максимальной работы, можно предсказать, волна какой частоты (длины волны) генерируется (табл. 1). Таким образом, работа, совершаемая над

волнами, и параметры генерируемых волн при аннигиляции дислокаций зависят от геометрических свойств образца.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Процесс релаксации кристаллической структуры, содержащей такие носители свободного объема, как межузельные атомы, вакансии и их комплексы, протекает с формированием ударной волны и ее последующей трансформацией в продольную.

2. Стадия перехода от ударных смещений атомов к возникновению продольных волн увеличивается по времени с ростом числа межузельных атомов в комплексе, т.е. с ростом избыточной локальной массы со знаком «+».

3. Для каждого из комплексов стадия перехода от ударных смещений атомов к возникновению продольных волн уменьшается по времени с ростом числа вакансий в комплексе, т.е. с ростом локальной массы со знаком «-».

4. Время массопереноса совпадает со временем распространения ударной волны, а трансформация ударной волны в продольную представляет собой эффект акустической эмиссии.

5. Даже при низкоэнергетическом воздействии на материал, когда не образуются точечные дефекты, образующаяся при этом продольная волна способна оказывать влияние как на процесс формирования комплекса дефектов, так и на уже сформировавшийся комплекс.

6. Процесс релаксации кристалла завершается формированием устойчивых структур атомов блока, свидетельствующих о завершении массопереноса.

7. Разработан метод расчета параметров акустических волн, генерируемых при аннигиляции краевых дислокаций.

8. Предложенный способ разделения упругого поля на дилатационную и бездилатационную часть делает возможность выделить в процессе деформации чисто конвективный и кондуктивный перенос.

Таблица 1. Расчет параметров волн, генерируемых при аннигиляции дислокаций в алюминии

Вещество	Значения констант материала и множителей для частных случаев (р, б) в ед. СИ			
	Алюминий, 2700, $4 \cdot 10^{10}$, $4,2 \cdot 10^{-10}$		Алюминий, 2700, $4 \cdot 10^{10}$, $4,2 \cdot 10^{-8}$	
Радиус зерна	Частота, ν , с^{-1}	Длина волны, λ , м	Частота, ν , с^{-1}	Длина волны, λ , м
0,3 мкм	$2,96 \cdot 10^9$	$1,93 \cdot 10^{-6}$	–	–
0,6 мкм	$2,02 \cdot 10^9$	$3,18 \cdot 10^{-6}$	–	–
1 мкм	$1,34 \cdot 10^9$	$4,46 \cdot 10^{-6}$	–	–
3 мкм	$4,70 \cdot 10^8$	$1,27 \cdot 10^{-5}$	–	–
6 мкм	$2,29 \cdot 10^8$	$2,48 \cdot 10^{-5}$	$7,80 \cdot 10^7$	$7,68 \cdot 10^{-5}$
10 мкм	$1,34 \cdot 10^8$	$4,46 \cdot 10^{-5}$	$4,30 \cdot 10^7$	$1,39 \cdot 10^{-4}$
30 мкм	$4,70 \cdot 10^7$	$1,27 \cdot 10^{-4}$	$2,96 \cdot 10^7$	$2,02 \cdot 10^{-4}$

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Тихонова Т.А. Зависимость массы, переносимой краевой дислокацией, от расстояния до свободной поверхности // *Материалы научно-практической конференции студентов / Сборник статей под редакцией М.С. Можарова.* – Новокузнецк: Изд-во КузГПА, 2004. – С.125-128; Тихонова Т.А. Модель выпрыгивания краевой дислокации на свободную поверхность // *Сборник тезисов 11 Всероссийской конференции студентов физиков и молодых учёных.* – Екатеринбург, 2005. – С. 118-121; Тихонова Т.А. Модель аннигиляции краевых дислокаций // *Сборник тезисов 12 Всероссийской конференции студентов-физиков и молодых ученых.* – Новосибирск, 2006. – С. 112-114; Тихонова Т.А. Метод расчета параметров упругих волн, генерируемых при аннигиляции краевых дислокаций // *Наука в вузе: современные тенденции. Материалы Всероссийской научно-практической конференции. Часть I.* – Новокузнецк: Изд-во КузГПА, 2007. – С. 24-29; Тихонова Т.А., Неверов В.В. Модель излучения упругих волн при аннигиляции краевых дислокаций // *XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. Санкт-Петербург, 10-12 апреля 2007 г.: сборник материалов.* – Ч. 2. – СПб., 2007. – С. 94-96; Тихонова Т.А. Генерация упругих волн при аннигиляции краевых дислокаций // *Сборник тезисов 13 Всероссийской конференции студентов-физиков и молодых ученых.* – Ростов-на-Дону, 2007. – С. 143-144; Тихонова Т.А., Неверов В.В., Маркидонов А.В. Приведенная масса как мера инертности волновых движений // *«Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений».* Материалы IV Международной школы-конференции. Тамбов, 2007. С.196-197; Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Неверов В.В. Перемещение массы пластическими сдвигами // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* 2007. т.4. №2. С.41-46; Тихонова Т.А., Маркидонов А.В., Неверов В.В. Особенности кондуктивного переноса массы при деформации твердых тел // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* 2007. т.4. №4. С.79-82; Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. Свойства массы движения пластических сдвигов // *«Молодые ученые - 2008».* Материалы V Международной научно-технической школы-конференции. Москва, 2008. ч.1. С.64-67; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. Нелинейный высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле при наличии локальных областей с различной плотностью // *Ползуновский альманах.* 2008. № 3. С.226-228; Тихонова Т.А. Разделение полей сдвиговых дефектов // *Электроника Сибири.* – 2008. – №3. – С. 141-143 ; Маркидонов .В., Тихонова Т.А., Старостенков М.Д. Влияние начальной температуры на скорость кооперативных атомных смещений // *«От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к Наноиндустрии».* Тезисы докладов второй всероссийской конференции с международным интернет - участием. Ижевск, 2009. С. 75; Маркидонов А.В., Тихонова Т.А.,

Старостенков М.Д. Исследование массопереноса в двумерном нанокристалле чистого Al // «Современные техника и технологии». Труды XV Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск, 2009. т.3. С.510-512; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной перенос массы посредством краудсионных столкновений // «Перспективные материалы и технологии». Сборник тезисов международного симпозиума. Витебск, 2009. С.55; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Примеры высокоскоростного переноса массы в идеальных монокристаллах без разрушения его структуры // «Наноиндустрия Алтая 2009». Тезисы докладов I региональной научно-практической конференции. Бийск, 2009. С.33-35; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Медведев Н.Н., Тихонова Т.А. Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов // «Физика прочности и пластичности материалов». Тезисы докладов XVII международной конференции. Самара, 2009. С.37; Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Старостенков М.Д. Моделирование массопереноса на примере объемного ГЦК кристалла // «Новые материалы. Создание, структура, свойства - 2009». Труды Всероссийской конференции с элементами научной школы для молодежи. Томск, 2009. С.268-272; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. Высокоскоростной массоперенос в кристалле при наличии различных конфигураций точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2009. т.6. №1. С.12-16; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле никеля при наличии дислокационных петель различной локальной плотности // Изв. вузов. Черная металлургия. 2009. №6. С.57-60; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Потеев А.И., Кулагина В.В. Высокоскоростной массоперенос в кристаллическом алюминии, содержащем цепочки вакансий и межузельных атомов // Изв. вузов. Физика. 2009. т.52. №9/2. С.139-145; Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Неверова Т.И., Старостенков М.Д. Моделирование незавершенного массопереноса на примере двумерного нанокристалла // «Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы: получение, свойства, применение. V Ставеровские чтения». Труды научно-технической конференции с международным участием / Под ред. В. Е. Редькина. Красноярск, 2009. С.13-15; Starostenkov M.D., Pozidaeva O.V., Tikhonova T.A., Poletaev G.M., Medvedev N.N. The mechanisms of interaction and annihilation of the aggregates of vacancies and interstitial atoms in a two-dimensional lattice of an ordered alloy of L12 superstructure // Fundamental Aspects of External Fields Action on Materials (Book of the International conference articles), 26-28 may, 2010, Advanced Materials Institute Graduate School at Schezhen Tsingua University, Ed. By V. Gromov, Novokuznetsk. – С. 125-135; Неверов В.В., Т.А. Тихонова,

Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Масса, переносимая при скольжении краевых дислокаций // Известия Алтайского государственного университета. – 2010. - № 1(65). – С. 146-150; Старостенков М.Д., Пожидаева О.В., Тихонова Т.А., Полетаев Г.М., Медведев Н.Н. Механизмы взаимодействия и аннигиляции агрегатов вакансий и межузельных атомов в двумерной решетке упорядоченного сплава сверхструктуры L12 // Известия Алтайского государственного университета. – 2010. – № 1(65). – С. 173-176; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Медведев Н.Н., Тихонова Т.А. Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов на примере двумерного кристалла // Вестник Самарского гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2010. – вып. 1(20). – С. 249-252; Тихонова Т.А., Маркидонов А.В. Наблюдение релаксации комплексов межузельных атомов в металлах с ГЦК-решеткой // Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей: материалы V (XXXVII) Международной научно-практической конференции / Кемеровский госуниверситет. – Кемерово: ООО «ИНТ», 2010. – Вып. 11. – Т. 2. – С. 625-627; Тихонова Т.А., Маркидонов А.В. Релаксационные процессы в кристалле, содержащем различные комплексы вакансий // Тезисы докладов Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике. Владивосток, 2010. – С. 107-108; Старостенков М.Д., Тихонова Т.А. Исследование механизмов структурной перестройки двумерного кристалла алюминия, содержащего комплексы межузельных атомов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2010. т.7. №2. С.55-60; Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. Влияние низкоэнергетических воздействий на релаксационные процессы в ГЦК кристалле (в печати).

Подписано в печать 21.10.2010.

Печать - цифровая. Усл.п.л. 1,39.

Тираж 100 экз. Заказ 2010 - 132

Отпечатано в типографии АлтГТУ,

656038, г. Барнаул, пр-т Ленина, 46

тел.: (8-3852) 36-84-61

Лицензия на полиграфическую деятельность ПЛД №28-35 от 15.07.97 г.