

МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Ю.А. Баимова

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа, Россия

Введение

В связи с выходом многих современных технологий на наномасштабный уровень существенно возрастает роль дефектов кристаллической структуры в формировании механических свойств материалов. Одним из наиболее важных и интересных типов дефектов являются дислокации. Выявление механизмов и описание процесса формирования дислокационной субструктуры является открытой проблемой теории дислокаций. Особенно актуальной становится эта задача в последние годы в связи с развитием деформационных методов наноструктурирования материалов. На данный момент нет общепризнанной теории образования дислокационной субструктуры, и главная трудность здесь состоит в понимании наиболее важных факторов, играющих роль в процессе ее формирования.

Моделирование с помощью дискретной дислокационной динамики (ДДД) – это мощный инструмент изучения влияния различных типов взаимодействия и разных микроскопических дислокационных явлений на образование дислокационной субструктуры. Во многих работах по ДДД рассматривается движение краевых дислокаций в трех системах скольжения в двумерной изотропной упругой среде. Взаимодействие между дислокациями описывается классическими решениями теории упругости. Метод молекулярной динамики (МД) позволяет моделировать системы, содержащие небольшое количество дислокаций, но дает возможность описать движение дислокаций с учетом атомарного строения их ядер. Это позволяет с микроскопических позиций и с учетом влияния температуры детально изучить дислокационные реакции, такие как аннигиляцию и зарождение дислокаций, создание дислокационных диполей, взаимодействие дислокаций с препятствиями, и другие вопросы. Метод МД позволяет определить феноменологические соотношения, которые затем могут быть использованы в методе ДДД для более точного описания микроскопических дислокационных явлений.

Описание модели

Задачей первого этапа нашего исследования является определение данных феноменологических соотношений. С этой целью методом молекулярной динамики (МД) исследо-

валась подвижность дислокаций при их скольжении и переползании в двумерной модели кристалла с гексагональной решеткой, обладающей свойством изотропии и имеющей три системы скольжения. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом Леннарда-Джонса. Расчетная область имела форму правильного ромба с наложенными периодическими граничными условиями. Пара краевых дислокаций вводилась в расчетную область путем относительного сдвига атомных плоскостей. Для компенсации этого сдвига к системе прикладывалось внешнее сдвиговое напряжение. Затем осуществлялась релаксация системы к равновесному состоянию методом молекулярной квазистатики. После релаксации системы, исследовалась динамика дислокаций при заданной температуре. При этом рассматривались различные факторы, влияющие на скольжение и переползание дислокаций: расстояние между дислокациями в направлениях скольжения и переползания, температура, а так же внешнее напряжение. Вторым этапом работы являлось моделирование поведения дислокаций в рамках ДДД с использованием феноменологических соотношений, полученных на первом этапе. Была отработана методика нахождения коэффициентов феноменологического уравнения, описывающего скольжение дислокации испытывающей вязкое торможение за счет взаимодействия с фононами.

Результаты моделирования

На рис.1, в качестве примера, показаны типичные траектории движения двух дислокаций, находящихся в одной ячейке периодичности, при разных (безразмерных) температурах. Как видно из рисунка, с увеличением температуры, время, необходимое для аннигиляции дислокаций, увеличивается, а движение дислокаций становится более хаотическим за счет взаимодействия с фононами.

Из сопоставления времени аннигиляции пары разноименных дислокаций полученных из МД и ДДД расчетов, нами были оценены масса дислокации и температурная зависимость коэффициента фононной вязкости для низких температур, представленная на рис.2. Так же была установлена температурная зависимость упругих констант, что позволило оценить влияние температуры на силу взаимодействия дислокаций.

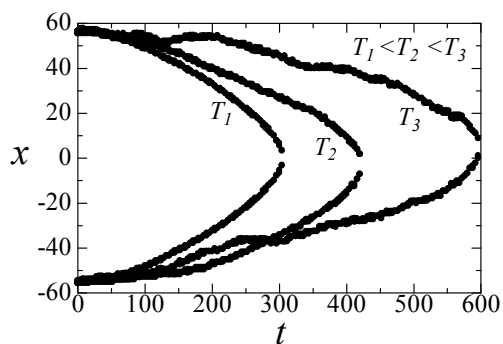


Рисунок 1 - Зависимости x -координат для рассматриваемой пары разноименных дислокаций от времени, при различных температурах: $T_1 = 3 \times 10^{-4}$, $T_2 = 0.0096$, $T_3 = 0.015$

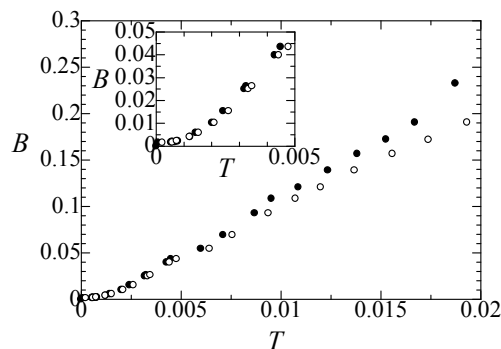


Рисунок 2 - Коэффициент фононной вязкости как функция температуры без учета (темные точки) и с учетом (светлые точки) температурной зависимости упругих констант

Заключение

Согласно теоретическим оценкам, $B \sim T^3$ при малых T и $B \sim T$ при высоких T . Наши данные (см. рис.2) согласуются с теоретическими. Кубическая зависимость $B(T)$ отмечается при $T < 0.004$, а линейная при $T > 0.006$. Учет температурной зависимости

упругих констант привел к снижению коэффициента фононной вязкости.

Результаты исследования являются первым шагом к пониманию процессов самоорганизации дислокационных субструктур при пластической деформации кристаллических материалов.