Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України
Донецький національний технічний університет

Кафедра "Вища математика"

Збірник науково-методичних робіт

Випуск 7

Донецьк -2011

УДК 5:371.214.114, 621.923, 517.95(09), 531.18, 915.77.54, 531.38, 517.9,
517, 518, 531, 517.8, 539.5, 517.926.

Рекомендовано до друку Радою Донецького Національного технічного університету
Протокол № 5 від 20.05.2011 р.

Збірник науково-методичних робіт. - Вип. 7. - Донецьк: ДонНТУ, 2011. –353 с.

В збірнику представлено деякі проблеми та аспекти викладання вищої математики у техничному вузі, також різні напрямки застосування математичних методів до розв’зання інженерних задач, а саме, задач механіки твердого тіла, фізики магнітних явищ, статистичної фізики та інших.

Науково-методичні роботи є узагальненням досвіду викладачів кафедри по удосконалюванню математичної підготовки спеціалістів.

Видання розраховано на широке коло наукових робітників, а також аспірантів та студентів старших курсів техничніх університетів.

Адреса редакційної колегії : Україна, 83050, м. Донецьк, вул. Артема, 96, ДонНТУ, 3-й учбовий корпус, кафедра "Вища математика", тел. (062) 3010901.

УДК 539.5

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕЦИФИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ СКОЛЬЖЕНИЯ ВИНТОВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В ПРИМЕСНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Малашенко В.В.
Донецкий национальный технический университет

Досліджено динамічне гальмування гвинтової дислокації точковими дефектами з урахуванням збудження поперечних коливань елементів дислокації як у площині ковзання, так і в перпендикулярній їй площині. Показано, що облік коливань у площині перпендикулярній площині ковзання не змінює залежності сили гальмування від швидкості ковзання і концентрації дефектів, проте значно збільшує величину цієї сили, зокрема, у випадку ізотропної моделі сила гальмування зростає в два рази.

Точечные дефекты (примеси, вакансии, междоузельные атомы) способны оказывать существенное влияние на движение дислокаций в динамической области, т.е. в той области скоростей, в которой кинетическая энергия дислокации превосходит энергию ее взаимодействия с точечными дефектами [1]. В работах [2-8] исследовалась сила динамического торможения дислокаций точечными дефектами, возникающая в результате необратимого перехода кинетической энергии поступательного движения дислокации в энергию поперечных колебаний ее элементов в плоскости скольжения. Оказалось, что этот механизм диссипации приводит к различному динамическому поведению винтовых и краевых дислокаций. В частности, в работе [5] было показано, что в области независимых столкновений сила торможения винтовой дислокации F_{SCR} линейно зависит от скорости дислокационного скольжения v, в то время, как сила торможения краевой F_{ED} обратно пропорциональна этой скорости, и, кроме того, выполняется соотношение

$$\frac{F_{SCR}}{F_{ED}} = \frac{v^2}{c^2},$$

где c - скорость распространения поперечных звуковых волн.

Но винтовая дислокация, в отличие от краевой, способна совершать колебания в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения и даже совершать двойное поперечное скольжение [1,9]. Движение винтовой дислокации, совершающей двойное поперечное скольжение, нельзя описать динамическими уравнениями типа тех, которые использовались в работах [3-8]. Однако существуют системы скольжения, допускающие малые поперечные колебания элементов винтовой дислокации перпендикулярно плоскости скольжения под влиянием упругих полей точечных дефектов, однако исключающие поперечное скольжение винтовых дислокаций. Такая ситуация реализуется, например, в цинке для дислокаций, ориентированных вдоль $<11\bar{2}0>$, а при низких температурах и в натрии для системы скольжения $<111>\{112\}$. Системы такого типа и являются объектом исследования настоящей работы.

Пусть винтовая дислокация параллельная оси OZ с вектором Бюргерса $(0,0,b)$ под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 движется в положительном направлении оси OX с постоянной скоростью v в плоскости $y=0$ в поле хаотически распределенных дефектов. Т.к. элементы дислокации способны совершать колебания относительно невозмущенной линии дислокации и в плоскости $y=0$, и в плоскости $X=vt$, движение дислокационного элемента может быть описано системой двух скалярных уравнений

$$m\left\{\frac{\partial X(z,t)}{\partial t^2}+\beta\frac{\partial X(z,t)}{\partial t}-c^2\frac{\partial^2 X(z,t)}{\partial z^2}\right\}=b\left[\sigma_0+\sigma_{yz}^d\right] \quad (1)$$

$$m\left\{\frac{\partial^2 w_y(z,t)}{\partial t^2}+\beta\frac{\partial w_y(z,t)}{\partial t}-c^2\frac{\partial^2 w_y(z,t)}{\partial z^2}\right\}=b\left[\sigma_0+\sigma_{xz}^d\right] \quad (2)$$

где m – масса единицы длины дислокации, величина коэффициента β определяется выражением $\beta=B/m$, где B - коэффициент динамического торможения дислокации, обусловленного фононными, магнонными или электронными механизмами диссипации. Величина $X(z,t)$ определяет положение дислокационного элемента в плоскости скольжения

$$X(z,t)=vt+w_x(z,t) \quad (3)$$

где функция $w_x(z,t)$ - случайная величина, описывающая поперечные колебания элемента дислокации в плоскости скольжения, ее среднее значение по хаотическому распределению дефектов и по длине дислокации равно нулю. Это усреднение в дальнейшем будет обозначаться символом <…>. Если перейти в систему координат, связанную с центром масс дислокации, получим дифференциальное уравнение для определения $w_x(z,t)$

$$m\left\{\frac{\partial^2 w_x(z,t)}{\partial t^2}+\beta\frac{\partial w_x(z,t)}{\partial t}-c^2\frac{\partial^2 w_x(z,t)}{\partial z^2}\right\}=b\left[\sigma_0+\sigma_{yz}^d\right] \quad (4)$$

Поскольку поставленная задача решается в рамках изотропной модели, все коэффициенты левой части уравнения (4) совпадают с коэффициентами левой части уравнения (2) для функции $w_y(z,t)$, описывающей колебания элементов дислокации в плоскости перпендикулярной плоскости скольжения, при этом $< w_y(z,t) >= 0$. В правых же частях этих уравнений стоят различные компоненты тензора напряжений, создаваемых дефектами на линии дислокации, а именно: в уравнении (2) - компонента $\sigma_{xz} = \sum_{i=1}^{N} \sigma_{xz,i}$, (N - число дефектов в кристалле, $\sigma_{xz,i}$ - компонента тензора напряжений, создаваемых i -м дефектом), в уравнении (4) – компонента $\sigma_{yz} = \sum_{m=1}^{N} \sigma_{yz,m}$. Как и в работах [3-8], константа β обеспечивает сходимость интегралов, возникающих в процессе вычислений, однако ее влиянием на величину силы торможения мы пренебрегаем в меру малости параметра $\alpha = \beta b v / c^2$.

Считая колебания дислокационных элементов малыми, во втором порядке теории возмущений получаем

$$F_d = b < \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial x} w_x > + b < \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} w_y > \tag{5}$$

Вычисления удобно производить в импульсном пространстве, в котором

$$w_x(q,\omega) = G(q,\omega)\sigma_{yz}(q,\omega);$$

$$w_y(q,\omega) = G(q,\omega)\sigma_{xz}(q,\omega) \tag{6}$$

Здесь $G(q,\omega)$ - Фурье-образ функции Грина уравнений (2) и (4) (вследствие изотропности используемой модели функции Грина этих уравнений одинаковы). Как и в работах [3-5], точечные дефекты будем считать центрами дилатации. Необходимые нам компоненты тензоров напряжений имеют вид

$$\sigma_{yz} = \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \frac{1}{r}; \qquad \sigma_{xz} = \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \frac{1}{r}. \tag{7}$$

где μ - модуль сдвига, ε - параметр несоответствия дефекта, R - его радиус.

Первое слагаемое в выражении (5) представляет собой силу торможения винтовой дислокации, обусловленную возбуждением дислокационных колебаний в плоскости скольжения. Воспользовавшись результатами работы [5], его можно представить в виде

$$F_1 = \frac{nb^2}{4\pi^2 m} \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \int_{0}^{\infty} dq_x q_x \left|\sigma_{yz}(q)\right|^2 \delta\left[q_x^2 v^2 - c^2 q_z^2\right] \qquad (8)$$

где $\delta\left[q_x^2 v^2 - c^2 q_z^2\right]$ - дельта-функция Дирака, *n* - объемная концентрация точечных дефектов. Фурье-образы необходимых нам компонент тензора деформаций имеют вид

$$\sigma_{yz}(q) = \mu R^3 \varepsilon \frac{q_y q_z}{q^2}; \qquad \sigma_{xz}(q) = \mu R^3 \varepsilon \frac{q_x q_z}{q^2} \qquad (9)$$

Следовательно, выражение для силы торможения дислокации дефектами типа центра дилатации можно представить в виде

$$F_1 = \frac{nb^2 \mu^2 R^6 \varepsilon^2}{4\pi^2 m} \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \int_{0}^{\infty} dq_x q_x \frac{q_y^2 q_z^2}{q^4} \delta\left[q_x^2 v^2 - c^2 q_z^2\right] \qquad (10)$$

Этот интеграл расходится на верхнем пределе. Для устранения такой расходимости обычно применяется стандартная процедура обрезания верхнего предела интегрирования величиной порядка R^{-1}. Выполняя вычисления и используя явное выражение для массы дислокации [1], получим окончательное выражение для силы торможения, обусловленной колебаниями дислокации в плоскости скольжения, согласующееся с результатами работы [5]

$$F_1 = n_0 \varepsilon^2 \mu b \frac{v}{c} \qquad (11)$$

Здесь $n_0 = nR^3$ - безразмерная концентрация дефектов. Рассмотрим теперь второе слагаемое в выражении (5). Оно определяет силу торможения дислокации, возникающую благодаря колебаниям элементов дислокации в плоскости перпендикулярной плоскости скольжения. Выполняя вычисления, аналогичные проделанным ранее, получим выражение для этого слагаемого в виде

$$F_2 = \frac{nb^2}{8\pi^2 m} \int_{-\infty}^{\infty} dq_y \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \int_{-\infty}^{\infty} dq_x q_y \sigma_{yz}(q) \sigma_{xz}(-q) \delta\left[q_x^2 v^2 - c^2 q_z^2\right] \qquad (12)$$

Заметим, что для центра дилатации $\sigma_{ik}(-q) = \sigma_{ik}(q)$. Подставляя в (12) Фурье-образы необходимых компонент тензора деформаций (9), получим окончательное выражение для F_2, в точности совпадающее с выражением (10) для F_1. Таким образом, в изотропном случае возбуждение дислокационных колебаний как в плоскости скольжения, так и в перпендикулярной ей плоскости дают в точности одинаковый вклад в силу торможения винтовой дислокации, а полная сила торможения, определяемая данным механизмом диссипации, равна

$$F = F_1 + F_2 = 2n_0\varepsilon^2\mu b\frac{v}{c} \tag{13}$$

Следовательно, учет дислокационных колебаний в плоскости перпендикулярной плоскости скольжения приводит к тому, что сила торможения винтовой дислокации, обусловленная данным механизмом диссипации, возрастает по величине в два раза, а ее зависимость от скорости скольжения дислокации и концентрации точечных дефектов остается прежней. Данный результат получен для дефектов типа центра дилатации. Однако нетрудно убедиться, что он справедлив для всех дефектов, тензор деформации которых может быть представлен в следующем виде

$$\sigma_{ik} = \eta\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} f(r) \tag{14}$$

Здесь $f(r)$- произвольная функция расстояния от точечного дефекта до исследуемой точки, η - коэффициент, зависящий от упругих модулей кристалла и мощности дефекта. В этом случае также имеет место равенство $F_1 = F_2$, т.е. сила торможения также возрастает в два раза и будет пропорциональна концентрации точечных дефектов и скорости скольжения дислокации, однако коэффициент пропорциональности будет, естественно, другим. Такая же зависимость от концентрации и скорости должна сохраниться для исследуемых дефектов и в анизотропном случае, однако равенство $F_1 = F_2$ выполняться не будет и численный коэффициент в формуле (13) будет зависеть от соотношения значений соответствующих модулей упругости.

Учет исследованных особенностей динамического поведения винтовых дислокаций особенно важен при низких температурах и высоких концентрациях примеси.

Литература

1. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций // УФН. – 1975. – Т. 115, № 1. – С. 3– 39.
2. Natsik V.D., Chishko K.A. Crystal Res. and Technol. **19**, *6*, 763(1984).
3. Malashenko V.V., Sobolev V.L., Khudik B.I. Dynamical Deceleration of a Dislocation by Surface Defects // Phys. Stat. Sol. (b). – 1987. – Vol. 144, № 2. – P. 463–470.
4. Малашенко В.В., Соболев В.Л., Худик Б.И. Спектр колебаний и динамическое торможение дислокаций в кристаллах с дефектами // ФТТ. – 1987. – Т. 29, № 5. – С. 1614–1616.

5. Малашенко В. В. Динамическое торможение винтовой дислокации точечными дефектами // ФТТ. – 1990. – Т. 32, № 2. – С. 645–647.
6. Малашенко В. В. Коллективное взаимодействие точечных дефектов с движущейся винтовой дислокацией // ФТТ. – 1997. – Т. 39, № 3. – С. 493– 494.
7. Малашенко В. В. Динамическое торможение краевых дислокаций точечными дефектами в гидростатически сжатом кристалле // ЖТФ. – 2006. – Т. 76, № 6. – С. 127–129.
8. Малашенко В. В. Влияние фононной вязкости и дислокационного взаимодействия на скольжение пары краевых дислокаций в кристалле с точечными дефектами // ФТТ. – 2006. – Т. 48, № 3. – С. 433–435.
9. Р.П. Житару, Н.А. Палистрант. ФТТ **41**, *6*, 1041(1999).

СОДЕРЖАНИЕ

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ