

© 1993

СОВМЕСТНОЕ ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИИ ЛЕСА И ТОЧЕЧНЫХ ПРЕПЯТСТВИЙ НА СОПРОТИВЛЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ ДЕФОРМИРОВАНИЮ (РЕЗУЛЬТАТЫ МАШИННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ)

Б. М. Логинов, С. В. Толстых

Методами моделирования на ЭВМ применительно к кристаллам NaCl проведено исследование процессов движения скользящих дислокаций через композиционные ансамбли дислокаций леса и точечных препятствий с критическим углом огибания $\varphi_{кр} = 2.7925$ рад в интервале значений относительной концентрации дислокаций леса в композиционном ансамбле $\gamma = (10 \div 0.17)\%$. Обсуждается влияние относительной концентрации компонент композиционных ансамблей на особенности процессов. Установлено, что квадрату величины суммарного напряжения прохождения скользящих дислокаций через композиционные ансамбли наилучшим образом отвечает сумма квадратов величины напряжения прохождения скользящих дислокаций через соответствующие однокомпонентные ансамбли, входящие в состав композиционных.

При изучении механических свойств кристаллов важным представляется анализ влияния композиционных ансамблей препятствий на сопротивление кристаллов деформированию и закона, по которому происходит сложение различных механизмов упрочнения. К числу наиболее типичных композиционных ансамблей относятся ансамбли, состоящие из дислокаций леса и точечных дефектов. В [1, 2] обсуждается возможность расчета суммарного упрочнения для данного класса композиционных ансамблей — величины критического сдвигового напряжения $\tau_{кр}^{\Sigma}$ на основании аддитивного (1) и квадратического (2) законов сложения соответствующих критических сдвиговых напряжений для однокомпонентных ансамблей дислокаций леса $\tau_{кр}^L$ и точечных препятствий $\tau_{кр}^T$, входящих в состав композиционных ансамблей

$$(\tau_{кр}^{\Sigma})_1 = \tau_{кр}^L + \tau_{кр}^T, \quad (1)$$

$$(\tau_{кр}^{\Sigma})_2 = \sqrt{(\tau_{кр}^L)^2 + (\tau_{кр}^T)^2}. \quad (2)$$

В [2] представлены также результаты экспериментальных исследований данного вопроса, в которых для ГЦК кристаллов с различным содержанием примеси посредством методики одиночного скольжения [3] контролируемым образом формировался дислокационный лес и на основании соотношений (1), (2) в результате вторичной деформации производился анализ значений величин $\tau_{кр}^L$. Результаты, представленные в [2], убедительно свидетельствуют о правомочности квадратического закона сложения (2), однако остается открытым вопрос о возможном перераспределении вкладов точечных дефектов в значения $\tau_{кр}^T$, $\tau_{кр}^L$ за счет свойств гибкости дислокаций леса [4, 5], поскольку, согласно [6, 7], осаждение примеси на лесных дислокациях приводит к увеличению их жесткости, что соответственно должно приводить к возрастанию $\tau_{кр}^L$ и уменьшению $\tau_{кр}^T$. Для выяснения особенностей указанного эффекта и с целью анализа применимости законов сложения (1), (2) в настоящей работе проведено моделирование движения

скользящей дислокации через композиционные ансамбли, составленные из дислокаций леса и точечных препятствий различной плотности.

Моделирование проводилось при строгом учете тонкой структуры дальнедействующих полей внутренних напряжений, создаваемых дислокациями леса и ориентирующего действия, которое дислокации леса оказывают на скользящую дислокацию в окрестностях сингулярных точек их пересечения. При этом структура леса дислокаций и принятые предположения были такими же, как и в [8, 9]. Методика моделирования представляла собой модификацию метода поиска равновесной формы скользящей дислокации при ее движении через однокомпонентный ансамбль дислокаций леса [8, 9] с учетом двух особенностей 1) в отличие от дислокаций леса точечные препятствия не производят ориентирующего воздействия на скользящую дислокацию, поэтому при моделировании принималось произвольное «ориентирующее воздействие» точечных препятствий; 2) в процессе нахождения равновесной формы скользящей дислокации при ее движении через композиционные ансамбли препятствий осуществлялся контроль за углами огибания скользящей дислокацией точечных препятствий, которые должны быть больше своего критического значения.

Анализ движения скользящей дислокации проводился при следующих значениях параметров: $b_{\text{ск}} = 3.98 \cdot 10^{-10}$ м, $G = 1.86 \cdot 10^7$ кПа, $\rho_{\tau} = 3.75 \cdot 10^{13}$ м⁻², $\rho_n = \gamma \rho_{\tau}$, $\gamma = (10 \div 0.17)\%$, $\varphi_{\text{кр}} = 2.7925$ рад, что соответствует кристаллам NaCl [8, 9]. Следует отметить, что в соответствии с принятыми предположениями в системе скользящая дислокация—композиционный ансамбль препятствий выполняются условия подобия, в силу которых полученные при моделировании результаты могут быть распространены как в неограниченном диапазоне значений плотностей ρ_{τ} , ρ_n , так и для всего класса щелочно-галогенидных кристаллов, имеющих рассматриваемую структуру композиционных ансамблей препятствий.

С целью наиболее четкого выявления индивидуального вклада компонент композиционного ансамбля в суммарное упрочнение задача рассматривалась в следующих трех вариантах: 1) ансамбль дислокаций леса, 2) ансамбль точечных препятствий, 3) композиционный ансамбль, составленный из дислокаций леса и точечных препятствий. При этом для каждой серии реализаций пространственное размещение дислокаций леса и точечных препятствий в композиционных ансамблях выбиралось таким же, как и в соответствующих однокомпонентных ансамблях.

На рисунке представлены зависимости от относительной концентрации дислокаций леса в композиционном ансамбле величины критического напряжения прохождения $\tau_{\text{кр}}^{\Sigma}$, полученные в результате моделирования $(\tau_{\text{кр}}^{\Sigma})_M$ (кривая 2) и на основании расчета по формулам (1), (2) (кривые 1, 3 соответственно). Там же приведены зависимости от γ величины относительной ошибки

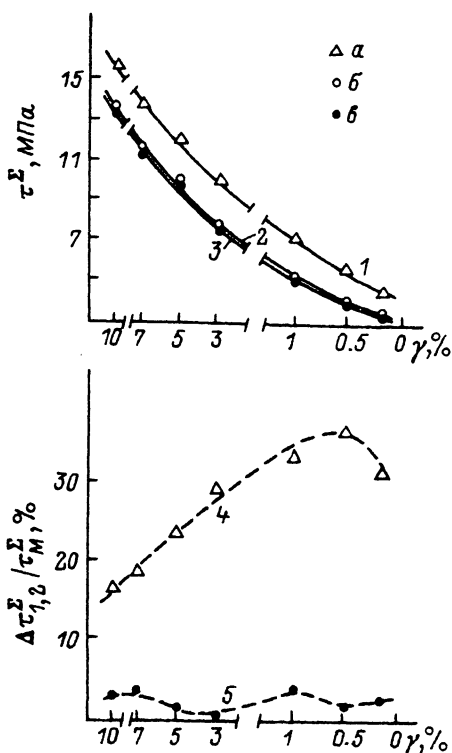
$$\frac{\Delta \tau_{1,2}^{\Sigma}}{\tau_M^{\Sigma}} = \frac{|(\tau_{\text{кр}}^{\Sigma})_M - (\tau_{\text{кр}}^{\Sigma})_{1,2}|}{\tau_M^{\Sigma}},$$

полученные при расчете $\tau_{\text{кр}}^{\Sigma}$ по формулам (1), (2) (кривые 4, 5 соответственно). Полученные результаты подтверждают высокую эффективность формулы (2) для расчета суммарного упрочнения и позволяют утверждать, что доля осаждаемых примесей на лесных дислокациях и связанные с этим возможные перераспределения вкладов точечных дефектов в значения величин $\tau_{\text{кр}}^{\Sigma}$, $\tau_{\text{кр}}^{\text{л}}$ пренебрежимо малы.

Интересно также отметить, что независимо от относительной концентрации дислокаций леса в композиционных ансамблях значения относительной ошибки $\Delta \tau_2^{\Sigma} / \tau_M^{\Sigma}$ (кривая 5) не превышают 4—5%, а значения $\Delta \tau_1^{\Sigma} / \tau_M^{\Sigma}$ (кривая 4) находятся в интервале 15—35%. Оказалось, что наибольшие значения относительной

Зависимости от относительной концентрации дислокаций леса в композиционном ансамбле (1, 2, 3) величины критического напряжения прохождения $\tau_{кр}^{\Sigma}$, полученной в результате моделирования (б) и на основании расчета по формулам (1) и (2) (в).

4, 5 — величины относительной ошибки $\Delta\tau_{1,2}^{\Sigma}/\tau_{кр}^{\Sigma}$.



ошибки $\Delta\tau_{кр}^{\Sigma}$ соответствуют таким значениям γ , при которых величины критического напряжения прохождения скользящих дислокаций через соответствующие однокомпонентные ансамбли $\tau_{кр}^{\Sigma}$, $\tau_{кр}^{\Gamma}$ оказываются близкими. В свою очередь изменения концентрации, приводящие к увеличению различия величин $\tau_{кр}^{\Sigma}$, $\tau_{кр}^{\Gamma}$ в большую или меньшую сторону, сопровождаются уменьшением относительной ошибки $\Delta\tau_{кр}^{\Sigma}$.

В таблице представлены полученные при моделировании значения относительного дополнительного упрочнения $\Delta\tau = \tau_{кр}^{\Sigma} - \tau_{кр}^{\Gamma}$, обусловленные наличием в композиционном ансамбле точечных препятствий. Можно видеть, что, когда относительная концентрация дислокаций леса в композиционном ансамбле оказывается не менее 3%, величина относительного дополнительного упрочнения $\Delta\tau/\tau_{кр}^{\Gamma}$ не превышает 10%. Следует думать, что именно в силу данных обстоятельств для композиционных ансамблей в предельных случаях, когда $\tau_{кр}^{\Gamma} \ll \tau_{кр}^{\Sigma}$ (или $\tau_{кр}^{\Gamma} \gg \tau_{кр}^{\Sigma}$), расчет суммарного упрочнения по формуле (1) может в пределах ошибки измерения соответствовать реальной ситуации.

Значения величины $\Delta\tau = (\tau_{кр}^{\Sigma} - \tau_{кр}^{\Gamma})$ при различных значениях относительной концентрации дислокаций леса в композиционном ансамбле (γ)

	γ [%]						
	10.0	7.0	5.0	3.0	1.0	0.5	0.17
$\Delta\tau$, [МПа]	0.62 ± 0.02	0.76 ± 0.02	0.61 ± 0.02	0.63 ± 0.02	1.16 ± 0.03	1.34 ± 0.04	1.81 ± 0.05
$\frac{\Delta\tau}{\tau_{кр}^{\Gamma}}$, [%]	5.21 ± 0.25	7.01 ± 0.32	7.38 ± 0.36	9.27 ± 0.46	28.21 ± 1.28	46.14 ± 2.29	110.80 ± 5.14

Список литературы

- [1] Kocks U. F. Physics of Strength and Plasticity. Cambridge, 1969. 463 p.
- [2] Зимкин И. Н., Самойлова Т. В., Смирнов Б. И. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 6. С. 1841—1844.
- [3] Смирнов Б. И. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 7. С. 2689—2696.
- [4] Логинов Б. М., Предводителев А. А. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 1. С. 112—116.
- [5] Предводителев А. А., Логинов Б. М. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 10. С. 3181—3183.
- [6] Зимкин И. Н., Самойлова Т. В., Смирнов Б. И. // Проблемы прочности твердых тел. Л.: Наука, 1979. С. 72—78.

- [7] Зимкин И. Н., Самойлова Т. В., Смирнов Б. И. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 12. С. 3703—3705.
[8] Предводителев А. А., Ничуговский Г. И. // Кристаллография. 1972. Т. 17. № 1. С. 166—171.
[9] Логинов Б. М., Ничуговский Г. И., Предводителев А. А. // Изв. вузов. Физика. 1979. В. 11. С. 97—103.

Поступило в Редакцию
8 октября 1992 г.

Московский государственный
технический университет им. Н. Э. Баумана
Калужский филиал
