

05.1

© 1991

СКОЛЬЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИОННЫХ АНСАМБЛЕЙ ЧЕРЕЗ ЛОКАЛЬНЫЕ ПРЕПЯТСТВИЯ

О.Г. Т ю п к и н а

В настоящей работе предложена модель, позволяющая рассматривать движение дислокационных ансамблей по плоскости скольжения в ЭВМ эксперименте. В качестве апробации модели исследовался процесс формирования дислокационных скоплений, застопоренных с одной стороны, на площадках, содержащих хаотически расположенные локальные препятствия одного и двух типов (мощностей) при различных напряжениях сдвига τ_{ex} .

Предполагалось, что дефекты – это жестко закрепленные точечные барьеры, взаимодействующие со скользящими дислокациями в приближении сосредоточенной силы, а дислокации представляют собой гибкие линии постоянного натяжения. В рамках принятых приближений моделирование согласованного движения взаимодействующих дислокаций возможно, если известно, как движется отдельная дислокация, при наличии в этой же плоскости скольжения других, и каким образом происходит передача движения между дислокациями.

Движение отдельной дислокации рассматривалось по классической схеме [1, 2] последовательного перехода ее из одной конфигурации в другую. Напряжения τ_N^K , действующие на сегменты N дислокации K , заставляют последнюю прогибаться между точечными барьерами и преодолевать их, если соответствующие углы прогибания φ^N меньше некоторого порогового значения φ_{cr}^N , характеризующего мощность препятствий. Дислокация движется до тех пор, пока не достигнет устойчивой конфигурации (все $\varphi^N > \varphi_{cr}^N$) или не выйдет на верхнюю границу площадки моделирования. Наличие других дислокаций влияет на движение, рассматриваемое через τ_N^K .

Напряжения τ_N^K , действующие в центре сегментов N , вычислялись с учетом дальнедействующих взаимодействий между дислокациями по формуле

$$\tau_N^K = \sum_n (\tau_{xy}^{(n)} \cdot \cos(\theta_2^{(n)})) + \tau_{ex} \cdot \cos(\theta_1). \quad (1)$$

Суммирование проводится по всем сегментам дислокаций n , находящихся на площадке моделирования, за исключением рассматриваемого N . θ_1 – угол между хордой сегмента N и осью перпендикулярной τ_{ex} , θ_2 – угол между хордами n и N .

Сдвиговые компоненты $\tau_{xy}^{(n)}$, обусловленные дальнедействующими взаимодействиями между сегментами n и N , рассчиты-

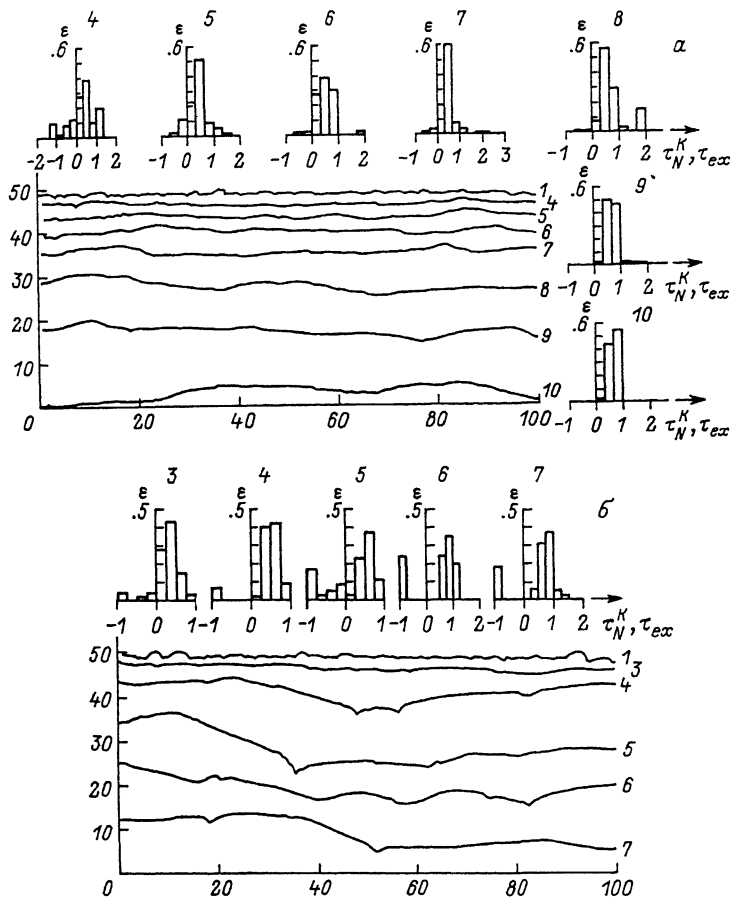


Рис. 1. Гистограммы по напряжениям τ_N^K и устойчивые конфигурации дислокаций, образующих скопления на массивах препятствий: а - одной мощности $\varphi_{ст} = 2.6$ рад, $\tau_{ex} = 0.15\tau_0$; б - двух типов: „слабых“ $\varphi_{ст} = 2.6$ рад и 1% „сильных“ $\varphi_{ст}^2 = 1$ рад, $\tau_{ex} = 0.2\tau_0$. Нумерация гистограмм соответствует нумерации дислокаций в скоплениях. m - доля сегментов (относительно их общего числа на дислокации) в заданном интервале τ_N^K .

вались в точке центра сегмента N согласно [3] (обозначим эту точку как L_c, X_c). Для этого дислокационные конфигурации аппроксимировались последовательностью прямолинейных отрезков примерно равной длины вдоль линии дислокации. Подчеркнем, что такая аппроксимация дислокационной линии использовалась только для вычислений τ_N^K . При анализе процесса прохождения дислокациями точечных барьеров дислокационные линии представляли собой сегмен-

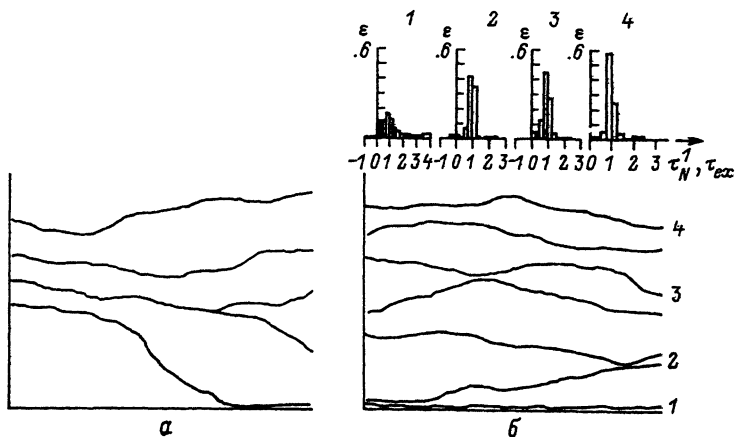


Рис. 2. Последовательности дислокационных конфигураций, наблюдающиеся при прохождении одиночной дислокацией препятствий одной мощности. $\varphi_{cr} = 2.6$ рад, $\tau_{ex} = 0.2 \tau_0$.

а – в приближении невзаимодействующих сегментов, б – с учетом далекодействующих взаимодействий между дислокациями. Нумерация гистограмм соответствует нумерации дислокационных конфигураций.

ты, выгибающиеся с радиусами $R_N^K = 1/(2 \cdot \tau_N^K)$, если τ_N^K и R_N^K выражены в относительных единицах $\tau_0 = \mu b / l_0$ и среднего расстояния между препятствиями l_0 соответственно (μ – модуль сдвига, b – величина вектора Бюргера).

Для краевых дислокаций с вектором Бюргера δ , направленным по τ_{ex} , сдвиговая компонента $\tau_{xy}^{(n)}$ будет иметь вид [3]:

$$\tau_{xy}^{(n)} = \left\{ \cos(\theta) / (4\pi \cdot (1-\nu) \cdot \chi_c) \right\} \cdot (\lambda_2 / r_2 - \lambda_1 / r_1). \quad (2)$$

Здесь θ – угол между отрезком n и осью, перпендикулярной направлению τ_{ex} , ν – коэффициент Пуассона, χ_c – кратчайшее расстояние между точкой (L_c, χ_c) сегмента N и отрезком n , r_1 , r_2 и λ_1 , λ_2 – расстояния между концами отрезка n и точкой (L_c, χ_c) и проекция этих расстояний на отрезок n соответственно.

В ЭВМ экспериментах на площадке моделирования размером $100 l_0 \times 50 l_0$ беспорядочным образом располагались 5000 точечных барьеров заданной мощности φ_{cr} . Считалось, что верхняя граница непроницаема для дислокаций, а на нижней работает источник. Он испускает краевые дислокации, если напряжение на старте больше нуля. На дислокации действует постоянное внешнее напряжение τ_{ex} , температура равна нулю. Не вдаваясь в подробности, сформулируем основные принципы, позволяющие реализовать согласованное движение нескольких дислокаций в ЭВМ эксперименте.

Движение отдельной дислокации рассматривается при фиксированных положениях всех остальных. Так как локальные напряжения τ_N^K

могут приниматься как положительными, так и отрицательными значениями, перемещение соответствующих участков дислокации происходит как по, так и против τ_{ex} . После каждого элементарного акта перемещения для сегментов, участвующих в нем, пересчитываются τ_N^A .

После подвижки одной (любой) из дислокаций ансамбля анализируется возможность движения головной дислокации.

Переход к анализу движения дислокации, лежащей ниже рассматриваемой, происходит, если верхняя неподвижна.

Эксперимент считается законченным, если соответствующие „стартовые“ напряжения меньше или равны нулю.

При проведении ЭВМ эксперимента используются „зеркальные“ граничные условия.

В результате проведения подобных экспериментов на площадке моделирования образуются скопления краевых дислокаций, запирающих источник. На рис. 1, а, б приведены примеры скоплений, полученных на площадках, содержащих один и два типа препятствий соответственно. Следует отметить, что взаимное расположение дислокаций в ансамблях, образованных на площадках с одним сортом препятствий, отвечает качественным оценкам, проведенным по соотношениям [4], справедливым для прямых параллельных дислокаций одного знака:

$$d = \alpha \cdot \left\{ 1 / (2\pi \cdot (1-\nu) \cdot \tau_{ex}) \right\}; \quad L_c = \alpha \cdot n_0^2 \cdot d. \quad (3)$$

Здесь L_c — длина скопления, d — расстояние между 1-й и 2-й дислокациями, n_0 — число дислокаций в скоплении, α — коэффициент пропорциональности, близкий к единице. Результаты, полученные на препятствиях, подпадающих под разряд „слабых“ или „средних“, показали, что с изменением мощности препятствий одного типа картина расположения дислокаций в ансамблях сохраняла качественное подобие, изменялся лишь коэффициент α . Это позволяет надеяться на возможность восстановления свойств барьеродефектов из наблюдений за скоплениями дислокаций.

Совершенно иная картина наблюдалась в ансамблях, образовавшихся на препятствиях разной мощности, см. рис. 1, б. Дислокации в таких ансамблях (за исключением верхних) располагались практически равномерно. Об этом же свидетельствуют и гистограммы по τ_N^K .

Таким образом, пространственное расположение дислокаций в скоплениях зависит от свойств дефектов, таких, как средняя мощность и распределение по мощности.

Поддаем также, что учет дальнедействующих взаимодействий между дислокациями позволит уточнить ряд параметров, характеризующих скольжение одиночных дислокаций. В частности, из рис. 2 видно, что одиночная дислокация движется более ровно, если действующие на нее напряжения рассчитывать согласно (1–2). Следует ожидать, что это внесет коррективы в распределения по длинам сегментов и силам, действующим на дислокации со стороны препятствий.

Автор надеется, что предложенная модель может быть использована для изучения деформационного упрочнения, формирования и скольжения дислокационных ансамблей в ходе активного деформирования материалов, релаксационных процессов, вызванных возвратно-поступательным движением дислокаций.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] F o r e m a n J.E., M a k i n M.J. // Phil. Mag. 1966. V. 14. P. 911-924.
- [2] A l t i n t a s S., M o r r i s J.W. // Acta Met. 1986. V. 34. N 5. P. 801-816.
- [3] Дж. Х и р т, И. Л о т е. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972, 600 с.
- [4] В л а д и м и р о в В.И. Физическая природа разрушения металлов. М.: Металлургия, 1984. 280 с.

Институт ядерной физики АН КазССР, Поступило в Редакцию
Алма-Ата 20 ноября 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 17, вып. 1 12 января 1991 г.

05.2; 05.3; 06.2

© 1991

ОСОБЕННОСТИ ГАЛЬВАНИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ С ЭЛЕКТРОДАМИ ИЗ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ

М.А. К о р ж у е в

Одним из путей улучшения эксплуатационных характеристик химических источников тока (гальванических элементов (ГЭ), аккумуляторов) является использование суперионных проводников (СИП) либо как твердых электролитов, либо в качестве материалов электродов [1, 2].

Последнее позволяет повысить удельную электрическую емкость элемента за счет включения в токообразующие реакции не только поверхностной, но и объемной концентрации активных ионов. Особенности использования СИП в качестве материалов электродов ГЭ в настоящее время исследованы недостаточно подробно.

В настоящей работе изучены особенности ГЭ $Cu/Ag-CuSO_4/Cu_{2-x}Se$, один из электродов которого изготовлен из суперионного проводника $Cu_{2-x}Se$ [3].

Селенид меди $Cu_{2-x}Se$ ($x = 0.0001-0.3$) представляет собой нестехиометрическое соединение переменного состава, обладающее смешанной электронной (по „дыркам“) и ионной (по меди) проводимостью ($\sigma_p = 10^2-10^3$; $\sigma_i = 10-10^4$ См/см) [4].