

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 технічному вузі, також різні напрямки застосування математичних методів до розв'язання 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 технічних університетів.

**Редакційна колегія:** проф. Улітін Г.М. - редактор, проф. Петренко О.Д., проф. Лесіна М.Ю, проф. Косолапов Ю.Ф., проф. Скафа О.І., доц. Евсеєва О.Г. , ст. викл. Локтионов И.К.

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

© Донецький Національний технічний університет, 2011 р.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ  
ДИСЛОКАЦИОННОЙ ДИНАМИКИ В НАНОМАТЕРИАЛАХ И ТОНКИХ  
ПЛЕНКАХ

**Малашенко В.В., Малашенко Т.И.**

*Донецкий национальный технический университет  
Донецкий физико-технический институт НАН Украины*

*Досліджено вплив поверхні на ковзання крайових дислокацій у кристалі, що містить точкові дефекти як на поверхні, так і в об'ємі. Показано, що в приповерхневій нанометровій області сила гальмування дислокації цими дефектами може бути зменшена на декілька порядків завдяки дії сил зображення.*

Все реальные кристаллы ограничены, и взаимодействие атомов в приграничных областях существенно отличается от подобного взаимодействия в глубине кристалла. Свободные поверхности и границы раздела оказывают весьма значительное, а иногда и определяющее влияние на механические свойства кристаллов, и в частности, на динамическое скольжение дислокаций [1]. Особенно возрастает роль поверхности и межзеренных границ в наноматериалах, исследование которых является одним из наиболее перспективных и бурно развивающихся направлений современной физики [2, 3].

При движении дислокаций в приповерхностных слоях кристалла возрастает роль так называемых сил изображения, действующих на дислокацию со стороны свободной поверхности или межкуристаллитной границы. В большинстве работ по исследованию влияния сил изображения на поведение дислокаций, выполненных в последние годы, методами компьютерного моделирования решалась задача о выходе дислокации на поверхность либо анализировался процесс роста кристалла [4].

Поверхность, являясь структурным дефектом, может и сама содержать различные дефекты, например, точечные, и влиять не только на движение дислокаций, но и на их взаимодействие с точечными дефектами, содержащимися как на поверхности, так и в объеме кристалла. Однако влияние сил изображения на динамическое торможение дислокации точечными дефектами ранее не изучалось.

В приложениях динамической теории дислокаций широкое применение нашла так называемая модель струны [5]. В этой модели дислокация рассматривается как тяжелая струна, обладающая некоторым натяжением и лежащая на “гофрированной” поверхности. Рельеф этой поверхности описывается потенциалом Пайерлса. В дальнейшем при решении динамических задач мы будем в основном исследовать материалы с пренебрежимо низкими барьерами Пайерлса, в частности, ГЦК-металлы [6]. Этот позволит нам не учитывать слагаемое, описывающее данные барьеры.

Пусть бесконечная краевая дислокация движется под действием постоянного внешнего напряжения  $\sigma_0$  в положительном направлении оси  $OX$  с постоянной скоростью  $V$  параллельно поверхности кристалла, совпадающей с плоскостью  $XOZ$ . Линия дислокации параллельна оси  $OZ$ , а ее вектор Бюргерса параллелен оси  $OX$ . Точкам кристалла отвечают значения  $y \leq 0$ . Плоскость скольжения дислокации совпадает с плоскостью  $y = -L$ , а положение дислокации определяется функцией

$$X(y = -L, z, t) = vt + w(y = -L, z, t) \quad (1)$$

Здесь функция  $w(y = -L, z, t)$  является случайной величиной, описывающей колебания элементов краевой дислокации в плоскости скольжения относительно невозмущенной дислокационной линии. Уравнение движения дислокации имеет следующий вид

$$m \left\{ \frac{\partial X^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \right\} = b \left[ \sigma_0 + \sigma_{xy}^i(vt + w; z) + \sigma_{xy}^s \right] - B \frac{\partial X}{\partial t} \quad (2)$$

Здесь  $\sigma_{xy}^s$  – компонента тензора напряжений, создаваемых поверхностными точечными дефектами на линии дислокации,  $\sigma_{xy}^i$  – силы изображения, действующие на дислокацию благодаря наличию свободной поверхности.

Для вычисления силы изображения, действующей на дислокацию, воспользуемся стандартным методом изображений [7]. Суть его заключается в построении изображения дислокации таким образом, чтобы суммарные напряжения дислокации  $\sigma_{ik}^d$  и ее изображения  $\sigma_{ik}^i$  на свободной поверхности равнялись нулю. Если же при этом какие-либо суммарные компоненты все же оказываются не равными нулю на поверхности, к решению добавляется дополнительное слагаемое, вычисленное с помощью функции напряжений  $\psi$ , которое и обеспечивает выполнение граничного условия. Напряжения, создаваемые дислокацией с координатами  $(x = 0, y = -L)$ , имеют вид

$$\sigma_{xy}^d = D \frac{x(x^2 - (y+L)^2)}{(x^2 + (y+L)^2)^2}; \quad \sigma_{yy}^d = D \frac{(y+L)(x^2 - (y+L)^2)}{(x^2 + (y+L)^2)^2} \quad (3)$$

$$\sigma_{xx}^d = -D \frac{(y+L)(3x^2 + (y+L)^2)}{(x^2 + (y+L)^2)^2}; \quad D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\gamma)} \quad (4)$$

Здесь  $\gamma$  – коэффициент Пуассона.

Силу динамического торможения дислокации поверхностными точечными дефектами вычислим во втором порядке теории возмущений

$$F_S = \frac{n_s b^2}{4\pi m} \int dq_x dq_z |q_x| \cdot |\sigma_{xy}(q_x, q_z, y)|^2 \delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z)) \quad (5)$$

Здесь  $n_s$  – поверхностная концентрация точечных дефектов,  $\delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z))$  – это  $\delta$ -функция Дирака,  $\omega(q_z)$  – спектр дислокационных колебаний, который имеет вид

$$\omega^2 = c^2 q_z^2 + \Delta_S^2; \quad \Delta_S = \frac{b}{L} \sqrt{\frac{D}{2m}} \approx \frac{c}{L} \quad (6)$$

Выполним численные оценки. Возьмем типичные значения  $c = 3 \cdot 10^3$  м/с,  $b = 3 \cdot 10^{-10}$  м. Тогда для  $L \approx 10b$  получим  $\Delta_S \approx 10^{12} \text{ с}^{-1}$ , для  $L \approx 100b$  оценки дают  $\Delta_S \approx 10^{11} \text{ с}^{-1}$ . Выполняя интегрирование, получим выражение для силы торможения дислокации поверхностными дефектами

$$F_S = \frac{n_s b^2 \mu^2 \varepsilon^2 R^6}{mc} \left( \frac{\Delta_S^9 L^3}{v^{11}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{2L\Delta_S}{v}\right) \quad (7)$$

Значение предэкспоненциального множителя не превышает силу электронного торможения, т.е. само по себе весьма мало, а экспонента делает эту величину пренебрежимо малой. Следовательно, можно говорить о блокировке механизма торможения дислокации, связанного с возбуждением дислокационных колебаний поверхностными примесями. Таким образом, свободная поверхность не создает силу, действующую на дислокацию в плоскости скольжения, но она препятствует возникновению дислокационных колебаний в этой плоскости.

Рассмотрим теперь случай, когда краевая дислокация движется параллельно поверхности кристалла, содержащего точечные дефекты, случайным образом распределенные в его объеме.

Динамическое взаимодействие распределенных в объеме кристалла дефектов с дислокацией в зависимости от скорости дислокационного скольжения может иметь как коллективный характер, так и характер независимых столкновений [8–14]. Точечные дефекты тоже оказывают влияние на дислокационный спектр: они создают щель в области коллективного взаимодействия с дислокацией, то есть в области, где дислокация за время взаимодействия с дефектом успевает “почувствовать” влияние многих других дефектов. Эта щель, согласно [9], описывается выражением

$$\Delta_d = \frac{c}{b} (n_{0V} \varepsilon^2)^{1/3} = \frac{c}{l}; \quad b (n_{0V} \varepsilon^2)^{-1/3} = l \approx l_d \quad (8)$$

Здесь  $n_0$  – безразмерная концентрация точечных дефектов,  $n_0 = nR^3$ ,

$l_d$  – среднее расстояние между дефектами в кристалле. В области независимых столкновений щель в спектре дислокационных колебаний не возникает.

Таким образом, вид колебательного спектра определяется конкуренцией взаимодействия дислокации с поверхностью и с точечными дефектами. В зависимости от их соотношения сила динамического торможения дислокации точечными дефектами может характеризоваться различной зависимостью от параметров задачи (концентрации точечных дефектов, удаленности дислокации от свободной поверхности, упругих модулей кристалла и так далее). Указанные выше взаимодействия дают аддитивный вклад в формирование спектральной щели

$$\Delta^2 = \Delta_S^2 + \Delta_d^2 \quad (9)$$

Рассмотрим область, границы которой определяются неравенствами

$$(bc/v) \gg L; \quad l \gg L. \quad (10)$$

Поскольку влияние поверхности является доминирующим в данной области, сила торможения зависит от расстояния до этой поверхности

$$F_d = \mu b n_{ov} \varepsilon^2 \frac{v}{c} \left( \frac{L}{b} \right)^2. \quad (11)$$

В этой области главный вклад в формирование щели вносят силы изображения. Чтобы оценить степень влияния поверхности на движение дислокаций, возьмем отношение сил торможения  $F_{d2}$  в приповерхностном слое, где влияние поверхности доминирует, и  $F_{d1}$  в слое, где оно не существенно

$$\frac{F_{d2}}{F_{d1}} = \left( \frac{L}{l} \right)^2. \quad (12)$$

Выполним численные оценки. Для значений  $n_{ov} \approx 10^{-4}$ ,  $\varepsilon \approx 10^{-1}$ ,  $L \approx 10b$  получим  $(F_{d2}/F_{d1}) \approx 10^{-2}$ , то есть наличие поверхности приводит к уменьшению силы торможения на два порядка. Таким образом, наличие поверхности значительно снижает влияние точечных дефектов на скольжение дислокаций в приповерхностной области.

Оценим толщину приповерхностного слоя, в пределах которого поверхность оказывает существенное влияние на динамическое взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Для типичных значений  $c = 3 \cdot 10^3$  м/с,  $b = 3 \cdot 10^{-10}$  м,  $n_{ov} \approx 10^{-2} \div 10^{-6}$ ,  $v \approx 10^{-2} \div 10^{-1} c$  получим, что толщина оцениваемого слоя может составлять от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров.

Таким образом, можно сделать вывод, что силы изображения полностью блокируют влияние поверхностных точечных дефектов и значительно снижают влияние объемно распределенных точечных дефектов на динамическое скольжение дислокаций в наноматериалах, т.е. облегчают пластическое деформирование мягких металлов, имеющих нанометровые размеры и содержащих примеси высокой концентрации.

*Литература*

1. Kodambaka S., Khare S. V., Swich W., Ohmori K., Petrov I., Greene J. E. Dislocation-driven surface dynamics on solids // *Nature*. 2004. Vol. 429. P. 49–52.
2. Малыгин Г.А. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов // *ФТТ*. 2007. Т. 49. вып. 6. С. 961–982.
3. Малыгин Г.А. Размерные эффекты при пластической деформации микро- и нанокристаллов // *ФТТ*. 2010. Т. 52. вып. 1. С. 48–55.
4. Liu X. H., F. M. Ross, K. W. Schwarz. Dislocated Epitaxial Islands // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 85. № 19. P. 4088–4091.
5. Косевич А.М. Дислокации в теории упругости. Киев: Наук. думка, 1978. 220с.
6. Пустовалов В.В., Фоменко В.С. Влияние сверхпроводящего перехода на макроскопические характеристики пластичности металлов и сплавов: фундаментальные и прикладные аспекты // *ФНТ*. 2006. Т. 32. вып. 1. С. 3 – 52.
7. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600с.
8. Нацик В.Д., Миненко Е.В. Влияние дислокационной структуры кристалла на динамическое торможение подвижных дислокаций // *ФТТ*. – 1970. – Т. 12, № 7. – С. 2099–2104.
9. Фридель Ж. Дислокации. М.: Наука, 1967. С. 294-298.
10. 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.
11. Малашенко В.В. Возможный механизм динамического торможения дислокаций в металлах на стадии легкого скольжения // *Кристаллография*. – 2009. – Т. 54, № 2. – С. 312–315.
12. Малашенко В.В. Эффект динамической блокировки влияния поверхностных точечных дефектов на скольжение краевых дислокаций / В. В. Малашенко // *ФТТ*. – 2009. – Т. 51, № 4. – С. 703–705.
13. Malashenko V.V. Dynamic drag of edge dislocation by circular prismatic loops and point defects // *Physica B: Phys. Cond. Mat.* – 2009. – Vol. 404, № 21. – P. 3890–3893.
14. Malashenko V.V. Dynamic drag of dislocation by point defects in near-surface crystal layer // *Modern Phys. Lett. B*. – 2009. – Vol. 23, № 16. – P. 2041–2047.

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Улитин Г.М., Лесина М.Е., Косолапов Ю.Ф. История кафедры высшей математики им. В.В.Пака .....	3
2. Азарова Н.В., Азарова А.Э. Применение симплексного метода для решения оптимизационных задач строительства и архитектуры .....	13
3. Азарова Н.В., Маленко А.Н. Применение непараметрической статистики к исследованию рабочей поверхности шлифовального круга .....	18
4. Азарова Н.В., Маленко Андреас. Применение методов линейного программирования для оптимизации севооборотов.....	24
5. Азарова Н.В., Муравская А.В. Применение дифференциального и интегрального исчисления к решению задач электротехники.....	29
6. Александрова О. В. Применение группового анализа к вычислению первых интегралов стохастических систем .....	34
7. Алексеева І. В., Гайдей В. О., Диховичний О. О., Коновалова Н. Р., Федорова Л. Б. Досвід створення і використання навчально-методичних комплексів з вищої математики.....	40
8. Берьозкіна І. А. Шляхи удосконалення математичної підготовки майбутніх студентів технічних спеціальностей .....	46
9. Буркина Н.В. Реализация межпредметных связей как важный фактор повышения эффективности обучения математике студентов .....	53
10. Власенко К. В. Характеристика складових навчально-методичного комплексу з вищої математики для майбутніх інженерів .....	60
11. Гененко Ю.А., Лупаску Д. К. Математическое моделирование деградации в сегнетоэлектриках по механизму дрейфа заряженных дефектов в локальных деполяризонных полях .....	66
12. Герасимчук В.С. Професійно спрямоване викладання математики та методи його реалізації .....	72
13. Гребьонкіна О. С. Ділова гра як форма активного навчання .....	77
14. Гусак Л.П. Формування навичок самостійної роботи студентів в процесі вивчення вищої математики .....	84
15. Данильчук О.М. Самостійна робота студентів як умова їх професійного становлення .....	89
16. Дем'яненко А.Г. Стан, проблеми, деякі концепції та заходи підвищення якості інженерної освіти в Україні .....	93
17. Дремов В.В., Минакова О.А. Аналитический расчет нестационарных температур в жидкой и твердой фазах металла с определением скорости движения фронта затвердевания .....	99

18. Євсєєва О.Г. Поетапне освоєння предметних дій при навчанні математики у ВТНЗ .....	107
19. Євсєєва О.Г., Прокопенко Н.А. Знання та вміння з векторної алгебри, необхідні для розв'язання задач з аналітичної геометрії у просторі.....	114
20. Емельянова Т. В., Ярхо Т.А., Полтавская О.С., Гавриш И.П. Высшая математика в примерах и задачах для инженеров-экологов. Системы дифференциальных уравнений .....	121
21. Ехилевский С.Г., Гурьева Н.А., Голубева О.В. Группы и подгруппы в курсе геометрии и алгебры .....	129
22. Косолапов Ю.Ф. К практике условного экстремума .....	141
23. Косолапов Ю.Ф., Шупанова Е. К методике условного экстремума .....	134
24. Кухарева О.С. Програма-тест для перевірки знань учнів з початків аналізу в старшій школі в умовах модульного навчання .....	148
25. Лаврик І. В., Фортуна В. В. Дослідження залежності ціни за квадратний метр квартир міста Донецька від центру .....	155
26. Лебедева И.А., Гуржий Д. Доказательство числовых неравенств с помощью классических неравенств.....	160
27. Лебедева И.А., Рубцова О.А. Особенности преподавания курса высшей математики студентам технических специальностей .....	164
28. Левін В.М. Математичні спецкурси у інженерній освіті .....	170
29. Лесина М.Е, Зиновьева Я.В. Уравнения годографов в опорном базисе для задачи о движении по инерции системы двух гироскопов Лагранжа .....	179
30. Локтионов И.К., Гусар Г.А., Шевченко Т.С. Применение трёхпараметрического потенциала взаимодействия в статистической модели жидкого состояния .....	195
31. Локтионов И.К., Шевченко Т.С. Статистическая модель металлической жидкости с двухпараметрическими осциллирующими потенциалами взаимодействия .....	206
32. Лукашук Т.І., Москаленко А.С., Проценко Б.В. Особливості математичної підготовки випускників технікумів у вищих навчальних закладах.....	214
33. Маевская С.И., Журба В.В., Абдулин Р.Н. Сопровождающий трёхгранник локсодромы кругового цилиндра (винтовой линии) .....	223
34. Малашенко В.В. Использование теории возмущений для исследования специфических особенностей скольжения винтовых дислокаций в примесных кристаллах.....	227
35. Малашенко В.В., Малашенко Т.И. Математическое моделирование процессов дислокационной динамики в наноматериалах и тонких пленках.....	233
36. Малашенко В.В., Малашенко Т.И. Применение метода функций Грина при	

анализе динамического взаимодействия краевых дислокаций с дислокационными петлями .....	238
37. Мартиненко М.А., Мартиненко В.П., Ткачук А.М. Роль фундаментальных наук в сучасній інженерній освіті України.....	242
38. Мироненко Л.П., Кайда С.В. Теорема умножения определителей и правило Крамера .....	247
39. Мироненко Л.П., Рубцова О.А., Бреус С. Единый подход к методу обратной матрицы и правилу Крамера.....	251
40. Николайчук Т.И., Улицкая Н.Ю. Методические аспекты изучения темы «Неопределенный интеграл» в техническом ВУЗ.....	255
41. Николайчук Т. И., Улицкая Н.Ю., Ларина А. Использование математических моделей в биологических исследованиях .....	261
42. Паниотов Ю.Н. Приложение операционного исчисления в математической физике .....	267
43. Пелашенко А.В. Решение задач управления запасами при случайном спросе.....	271
44. Перегуда Ю. М. Організація контролю результатів навчальної діяльності студентів в умовах кредитно-модульної системи навчання .....	275
45. Перетолчина Г. Б., Глянецв П. Пример реализации профессиональной направленности курса «Теории вероятностей и математическая статистика».....	281
46. Петренко А.Д., Петренко Е.А. Экономико-математическая модель ценовой конкуренции монополий .....	287
47. Петренко А.Д., Петренко Е.А. Компетентностный подход в подготовке квалифицированных специалистов.....	294
48. Пуханова Л.С. Сучасні підходи до вдосконалення системи педагогічного контролю .....	298
49. Румянцев Н.В. Проблемы повышения качества преподавания математики для современного инженера .....	304
50. Торбіна Т.В. Взаємоз'язок спеціальних і математичних дисциплін в професійній підготовці фахівців електротехнічних систем.....	308
51. Улитин Г.М. Некоторые приёмы приведения линейных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами к известным уравнениям.....	314
52. Улитин Г.М., Савин А.И. Опыт проведения вузовских олимпиад по высшей математике в ДонНТУ .....	319

1. Абдулин Р.Н. Об одном примере стабилизации движения неголономной системы .....	324
2. Александрова О. В., Гордеев Г. Г., Ковалев И. Н. Моделирование движения системы связанных твердых тел – носителя и носимого тела .....	326
3. Александрова О. В., Ковалев И.Н. О методике организации самостоятельно работы студентов на занятиях по высшей математике .....	327
4. Вилкова И.В. Формула Ньютона-Лейбница и одно из условий ее применимости .....	329
5. Гончаров А.Н. О применении рядов в теории вероятностей .....	331
6. Гордеев Г.Г. Алгоритмы решения диофантовых уравнений и упаковка индексов степеней полиномов .....	334
7. Дегтярев В.С. О применении передаточной функции при решении линейных дифференциальных уравнений операционным способом .....	335
8. Кононыхин Г.А. Об условия существования прецессионных движений в задачах динамики твердых тел .....	337
9. Мироненко Л.П., Улитин Г.М. Формула Эйлера и некоторые следствия из неё .....	339
10. Паниотов Ю.Н., Перетолчина Г.Б. К изложению темы выпуклость и вогнутость кривой.....	341
11. Руссиян С.А. Математическая модель одного из известных случаев в истории .....	343
12. Чудина Е.Ю., Деханова В.В. Игры с точки зрения теории вероятностей...	346
13. V. Kochergin, L. Neely, I.N. Krivorotov, E.V. Kochergin, K.L. Wang Плазмонное усиление сверхбыстрого оптического перемагничивания .....	348