Міністерство освіти і науки України
Донецький національний технічний університет

Кафедра "Вища математика"

Збірник науково-методичних робіт

Випуск 3

Донецьк -2005

УДК 512.643, 517. 944(09), 517.926, 519.61/.64, 531.38, 535.36, 539.238, 622.831.

Рекомендовано до друку Радою Донецького Національного технічного Університету
Протокол № 4 від 30. 05. 2003 р.

Збірник науково-методичних робіт. - Вип. 3. - Донецьк: ДонНТУ, 2005. - 198 с.

Процеси гуманізації й гуманітаризації освітньої системи в Україні передбачають виконання значної кількісті суттєвих вимог щодо організації навчального процесу у вищих навчальних закладах. Відповідно до цього виникає нагальна потреба в особистісній зорієнтованості навчання, а саме - в створенні потенцій кожного студента.

В збірнику представлено результати науково-методичних досліджень, в яких обгрунтовуються нові підходи до певних питань методики викладання вищої математики, досліджено окремі історичні аспекти розвитку матетематики, розглянуто низку цікавих задач затосування математики в різних галузях науки і техніки.

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

УДК 539.5

Учет размеров примесных атомов при динамическом взаимодействии с дислокациями в рамках континуальной теории

В. В. Малашенко

Донецкий национальный технический университет

Досліджено вплив реальних розмірів точкових дефектів типу центра дилатації на характер гальмування дислокацій. Вказано область швидкостей та концентрацій дефектів, у яких неврахування кінцевих розмірів домішок неприпустиме.

На формирование свойств реальных кристаллов существенное влияние оказывает наличие в них различных несовершенств - дефектов кристаллической структуры, как линейных (дислокации), так и точечных (вакансии, примеси, междоузельные атомы) [1,2]. В частности, взаимодействие дислокаций с точечными дефектами является одним из важных факторов, определяющих особенности пластической деформации кристалла. Огромное количество задач в этой области решается методами континуальной теории, в рамках которой мы пренебрегаем как дискретной структурой реальных кристаллов, так и конечными размерами исследуемых дефектов, в частности, размерами дислокационных ядер и примесей. Однако такое пренебрежение не всегда допустимо и может привести к грубым физическим ошибкам, поэтому в каждой конкретной задаче требует серьезного обоснования. В частности, в работе [2] было показано, что при исследовании фононного ветра, который является одним из основных механизмов торможения дислокации при комнатных температурах, учет конечности размеров дислокационного ядра не только снижает на порядок величину константы демпфирования, но и приводит к существенному изменению ее температурной зависимости, что позволило устранить имевшееся расхождение между теорией и экспериментом. В работе [3] был оценен вклад дислокационных ядер в рассеяние рентгеновских лучей кристаллами с дислокациями. И хотя основной вклад в экспериментально определенную интенсивность рассеяния рентгеновских лучей вносят области, удаленные от дислокаций, однако в деформационных процессах при упрочнении существенную роль играют искаженные области кристалла, расположенные вблизи дислокационных линий. Эти области вносят основной вклад в силы контактного взаимодействия дислокаций как между собой, так и с точечными дефектами[1,4,5,6]. Поэтому исследование роли реальных размеров дефектов в подобных процессах является важной и пока что недостаточно изученной задачей теории пластичности.

Целью настоящей работы является учет влияния конечных размеров точечных дефектов на их динамическое взаимодействие с краевыми и винтовыми дислокациями.

Действие точечного дефекта на окружающую его сплошную среду в рамках континуальной теории упругости может быть описано плотностью сил следующего вида (дефект помещен в начале координат) [7]:

$$f(\vec{r}) = -\mu R^3 \varepsilon \nabla \delta(\vec{r}). \qquad (1)$$

Здесь R - величина порядка атомного радиуса дефекта, ε - параметр несоответствия, характеризующий мощность дефекта, μ - модуль сдвига, $\delta(\vec{r})$ - δ-функция Дирака. По классификации упругих полей в изотропной среде, дефект, описываемый плотностью (1), является центром дилатации. Создаваемые им напряжения определяются следующим выражением:

$$\sigma_{ik} = \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \frac{1}{r}, \qquad (2)$$

т. е. убывают с ростом расстояния как r^{-3}. В формулах (1), (2) игнорируются конечные размеры дефекта, что приводит к неограниченному росту напряжений в области малых расстояний и расходимости возникающих в задачах интегралов, которая обычно устраняется обрезанием нижнего предела интеграла величиной порядка R в координатном пространстве или верхнего предела величиной порядка R^{-1} в пространстве импульсов [8]. Как будет показано ниже, такое обрезание допустимо не всегда и при определенных условиях приводит к неверным физическим результатам.

Рассмотрим задачу о скольжении бесконечной краевой дислокации под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в поле точечных дефектов, случайным образом распределенных в объеме кристалла. Линия дислокации параллельна оси OZ, ее вектор Бюргерса параллелен оси OX, в положительном направлении которой дислокация движется с постоянной скоростью υ. Взаимодействие дислокации с точечными дефектами приводит к возбуждению дислокационных колебаний в плоскости XOZ .

Уравнение движения дислокации имеет вид:

$$m\left\{\frac{\partial X(z,t)}{\partial t^2}+\delta\frac{\partial X(z,t)}{\partial t}-c^2\frac{\partial^2 X(z,t)}{\partial z^2}\right\}=b\left[\sigma_0+\sigma_{xy}^{d}(vt+w;z)\right] \qquad (3)$$

Здесь $\sigma_{xy}^{(d)}$ - компонента тензора напряжений, создаваемых дефектами на линии дислокации, $\sigma_{xy}^{(d)}=\sum_{i=1}^{N}\sigma_{xy,i}^{(d)}$, m - масса единицы длины дислокации, N - число дефектов в кристалле, $X(z,t)=vt+w(z,t)$, где $w(z,t)$ – случайная величина, среднее значение которой по ансамблю дефектов и расположению элементов дислокации равно нулю. Производя расчеты, аналогичные выполненным ранее в работе [4], получим выражение для силы торможения краевой дислокации точечными дефектами в виде

$$F=\frac{nb^2}{4\pi^2 mcv}\int_{-\infty}^{\infty}dp_y\int_{\Delta/v}^{\infty}dp_x\,\frac{p_x\left|\sigma_{xy}(p_x,p_y,0)\right|^2}{\sqrt{p_x^2-(\Delta/v)^2}}. \qquad (4)$$

Здесь Δ - активация в спектре дислокационных колебаний, которая возникает в области коллективного взаимодействия дефектов с дислокацией и определяется из уравнения:

$$\Delta^2=\frac{nb^2}{8\pi^3 m^2}\iiint \mathrm{d}^3p\,\frac{p_x^2\left|\sigma_{xy}(p)\right|^2}{\Delta^2+c^2p_z^2-p_x^2v^2} \qquad (5)$$

Интегрирование выполняется по всему импульсному пространству от $-\infty$ до ∞. В области независимых столкновений активация не возникает, поэтому выражение (4) можно преобразовать к виду

$$F=\frac{nb^2}{4\pi^2 mcv}\int_{-\infty}^{\infty}dp_y\int_{0}^{\infty}dp_x\left|\sigma_{xy}(p_x,p_y,0)\right|^2. \qquad (6)$$

Фурье-образ тензора напряжений центра дилатации (2) описывается следующим выражением

$$\sigma_{xy}(\vec{p}) = 4\pi\mu R^3 \varepsilon \frac{p_x p_y}{p^2}. \tag{7}$$

Полученный несобственный интеграл (6) является расходящимся. Но, поскольку стоящее под интегралом выражение не зависит ни от скорости скольжения дислокации, ни от концентрации дефектов, в данном случае обрезание пределов интегрирования величиной порядка R^{-1} не изменит качественную зависимость силы торможения от перечисленных выше величин. Ситуация изменяется коренным образом в области коллективного взаимодействия, т.е. при скоростях $v < R\Delta$. Здесь подобное обрезание недопустимо, т.к. в этом случае нижний предел $(\Delta / v) > R^{-1}$, под корнем возникает отрицательная величина и интеграл становится мнимым. Чтобы правильно вычислить этот интеграл, необходимо устранить расходимость, связанную с пренебрежением конечными размерами точечных дефектов, т.е. ввести плавное обрезание создаваемых дефектом напряжений на расстояниях порядка его радиуса:

$$\sigma_{ik} = \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \frac{1 - e^{-r/R}}{r}. \tag{8}$$

Фурье–образ такого тензора имеет вид:

$$\sigma_{xy}(\vec{p}) = 4\pi\mu R^3 \varepsilon \frac{p_x p_y}{p^2} \frac{R^{-2}}{p^2 + R^{-2}}. \tag{9}$$

Вычисленная таким образом сила торможения в области коллективного взаимодействия оказывается линейной функцией скорости, что согласуется как с экспериментальными данными, так и с выводами феноменологической теории Косевича и Нацика[9]

$$F = \frac{\pi}{3} \mu b \frac{v}{c} \sqrt[3]{n R^3 \varepsilon^2}. \tag{10}$$

В случае винтовой дислокации взаимодействие с дефектами определяется компонентой $\sigma_{zy}(\vec{p})$. Симметрия подынтегральной функции в этом случае будет иной, что приводит к изменению зависимости силы торможения от концентрации и скорости дислокационного скольжения. Однако и в этом случае в области независимых столкновений пренебрежение конечными размерами точечных дефектов не влияет на характер торможения:

$$F = \frac{nb^2 v}{4\pi^2 mc^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{0}^{\infty} dp_x \left|\sigma_{xy}(p_x, p_y, 0)\right|^2 . \tag{11}$$

В области коллективного взаимодействия, как и в случае краевой дислокации, пренебрежение конечными размерами дефектов приводит к тому, что полученный интеграл утрачивает смысл. И лишь вводя плавное обрезание (8), можно получить выражение для силы торможения в этой области (см.[5]):

$$F = \frac{\pi}{3} \mu b \frac{v^3}{c^3}. \tag{12}$$

Воспользовавшись выражениями для активации в спектре краевой и винтовой дислокаций (см. [4,5]), окончательно получим, что учет конечных размеров точечных дефектов необходим при скоростях скольжения $v < c\varepsilon\sqrt{nR^3}$ в случае винтовой дислокации и $v < cR \cdot \sqrt[3]{n\varepsilon^2}$ в случае краевой.

Рассмотрим задачу о динамическом торможении с учетом дислокационного взаимодействия на примере двух краевых дислокаций, равномерно движущихся в параллельных плоскостях скольжения, расстояние между которыми обозначим a. Для этого в правую часть уравнения движения (3) необходимо добавить силу взаимодействия дислокаций (см [10]). Повторяя предыдущие рассуждения, приходим к выводу, что и в этом случае в области независимых столкновений сила торможения описывается формулой (6), т.е. обрезание верхнего предела интегрирования влияет лишь на величину численного коэффициента, а не на характер торможения. Но в области коллективных эффектов, в которой взаимодействие дислокаций оказывает доминирующее влияние на формирование спектра дислокационных колебаний, силу торможения можно получить, лишь вводя плавное обрезание тензора напряжений по формуле [8]. Воспользовавшись результатами работы [10], получим выражение для этой силы в виде:

$$F = \ln\left(\frac{L}{r_0}\right)\frac{\pi n b^5 \mu^2 \varepsilon^2 a^2}{3mc^3 R} v. \qquad (13)$$

Здесь L - величина порядка размеров кристалла, r_0 - длина дислокации. Область скоростей, в которой необходимо учитывать реальные размеры дефектов, в этом случае задается неравенством

$$v < c\frac{R}{a}\sqrt{\frac{2}{\ln(L/r_0)}}. \qquad (14)$$

Особый интерес представляет движение дислокации в магнитоупорядоченном кристалле, которое мы рассмотрим на примере ферромагнетика с анизотропией типа ”легкая ось’’ [11]. Здесь формула (6) также справедлива для независимых столкновений, а в области коллективного взаимодействия пренебрежение конечными размерами дефектов недопустимо. В случае, когда главный вклад в формирование спектральной щели вносит магнитоупругое взаимодействие, получим следующее выражение для силы торможения

$$F = \frac{16\pi^2 n R^3 \mu^2 \varepsilon^2 c_S^2}{3B^2 b c \omega_M \ln(\theta_C/\varepsilon_0)} v. \qquad (15)$$

Здесь B – константа магнитоупругого взаимодействия; $\omega_M = gM_0$; g – гидромагнитное отношение; M_0 – намагниченность; θ_c – температура Кюри. Параметры ε_0 и c_s определяют спектр магнонов в ферромагнетике с анизотропией типа легкая ось, когда магнитное поле направлено вдоль оси анизотропии: $\varepsilon_k = \varepsilon_0 + c_s^2 k^2$ (k – волновой вектор). В этом случае нельзя пренебрегать конечными размерами дефектов при скоростях

$$v < \frac{RBb}{4c_S}\sqrt{\frac{\omega_M}{\pi m}\ln\frac{\theta_C}{\varepsilon_0}}. \qquad (16)$$

Таким образом, коллективное взаимодействие дефектов с дислокацией в динамической области не может быть описано без учета конечных размеров дефектов, т.е. в данном случае характер торможения определяется именно их контактным взаимодействием с дислокациями.

Полученные результаты могут использоваться как при анализе взаимодействия одиночных дислокаций с дефектами, так и при изучении динамики дислокационных скоплений.

Литература

1. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций.-М: Атомиздат.-1972.-572с.
2.Альшиц В.И.,Инденбом В.Л..//УФН.-1975.-№ 1**.-С.**3-37.
3. Дехтяр А.И.// ФТТ.-2001.-Т. 43,№5.-С.818-821.
4. Малашенко В.В., Соболев В.Л., Худик Б.И.// ФТТ.-1987.-Т.29**.-С**1614-1616.
5. Малашенко В.В.// ФТТ.-1997.-Т39**.-С.**493-495.
6. Малашенко В.В., Малашенко Т.И.// ФТВД.-1999.-Т. 9.-С. 30-33.
7. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки.- М:Наука.-1972.-362с.
8. Ookawa A., Jazu K.// J. Phys. Soc. Jpn. –1968.-V.18.-P. 36-44.
9. Косевич А.М.,Нацик В.Д.//ЖЭТФ.-1966.-Т.51.-С.1207-1212.
10. Малашенко В.В., Малашенко Т.И.// ФТВД.-2002.-Т. 12.-С. 58-63.
11. Малашенко В.В.// ФТВД.-2003.-Т. 13.-С. 108-115.

СОДЕРЖАНИЕ