

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Фізичний факультет
Кафедра фізики кристалів

«Допущено до захисту»
Зав. кафедри фізики кристалів
акад. Гриньов Б.В. _____
«_____» червня 2020 р.

Оцінка «_____»
Голова ЕК

«_____» червня 2020 р.

Ковтун Ілля Ігорович

**Дослідження та комп'ютерне моделювання побудови
дислокаційних структур при різних схемах деформації у
лужногалоїдних монокристалах із ґраткою типу NaCl**

Дипломна робота на
здобуття освітнього ступеня
«Бакалавр» за спеціальністю
104 – «фізика та астрономія»
освітньо-професійна
програма – «фізика»

Науковий керівник:
канд. фіз.-мат. наук,
доц. Пахомова І.М.

Харків 2020

Анотація

Досліджено структурні зміни у лужногалоїдних монокристалах із ґраткою NaCl при однорідному (одноосне стискання) і неоднорідному (трьохточковий вигин) розподілі напружень.

Виявлено особливості дислокаційної структури, що формується при зовнішніх навантаженнях і визначається видом напруженого стану.

У кристалах із ґраткою типу NaCl проведено комп'ютерне моделювання процесів взаємодії і перебудови дислокаційних ансамблів, утворених за різними схемами деформацій, а саме, трьохточкового вигину з подальшим вільним відпалом і одноосного стискання у процесі високотемпературної повзучості із урахуванням граничних умов.

Пояснено причини утворення «бочкоподібної» форми монокристалів зразків у процесі високотемпературної повзучості.

Проаналізовано і порівняно результати, що отримані експериментально і комп'ютерним моделюванням динаміки дислокаційних ансамблів. Результати моделювання якісно співпадають із результатами експериментальних досліджень.

Annotation

Structural changes research in alkali halide single crystals with a NaCl lattice with inhomogeneous (three-point bending) stress distribution have been studied.

The peculiarities of the dislocation structure formed under external loads and determined by the type of stress state are revealed.

Sliding and crawling of dislocations in single crystals leads to a radically new substructure of the single crystal.

Computer modeling of the processes of interaction and rearrangement of dislocation ensembles formed according to the scheme of non-uniform stress distribution, namely three-point bending in crystals with a NaCl lattice under conditions of high homologous temperatures taking into account the boundary conditions, is carried out.

The results obtained experimentally and by computer modeling of the dynamics of dislocation ensembles are analyzed.

Зміст

стор.

Вступ

1. Теоретична частина

1.1 Дислокації.

1.2 Використання ЛГ монокристалів.

1.3 Системи легкого ковзання дислокацій в кристалах з ґраткою типу NaCl

1.4. Вплив дислокацій на механічні властивості

1.5. Методи дослідження динаміки дислокацій

1.6 Взаємодія дислокаційних ансамблів при вільному високотемпературному відпалі (без зовнішнього навантаження)

1.7. Взаємодія дислокаційних ансамблів у процесі високотемпературної повзучості

2. Практична частина

Актуальність роботи

Мета роботи

2.1. Методика експерименту

2.1.1.Хімічне травлення

2.1.2. Комп'ютерне моделювання

2.2. Схема експерименту

2.3. Комп'ютерне моделювання полігонізації крайових дислокацій з векторами Бюргерса $\langle 110 \rangle$

2.4. Схема експерименту однорідного розподілу напружень

2.5. Комп'ютерне моделювання динаміки дислокацій під дією одноосного стискання в процесі високотемпературної повзучості

4. Висновки

5. Список використаних джерел

Вступ

Механічні властивості кристалів, такі як міцність і пластичність, залежать від внутрішньої будови кристалічних тіл. В кристалах не буває ідеального

розташування атомів. Стосовно реальних кристалів, кожен з них має свої «відхилення» від ідеального розташування атомів – дефекти. Одним із таких дефектів є дислокації, які суттєво впливають на властивості кристалів (в тому числі механічні).

Робота містить теоретичну частину, практичне дослідження дефектної структури методом хімічного травлення реального монокристалу KCl до та після прикладання до нього зовнішніх напружень і комп'ютерне моделювання взаємодії дислокаційних ансамблів на певній ділянці кристалу під дією зовнішніх напружень, аналогічних прикладеним експериментально. Робота виконувалась на базі кафедри фізики кристалів фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна.

Робота присвячена дослідженню субструктур монокристалів і комп'ютерному моделюванню взаємодії дислокаційних ансамблів в лужногалоїдних монокристалах при однорідному одноосного стискання у процесі високотемпературної повзучості, а також при неоднорідному розподілі зовнішніх напружень (трьохточковий вигин) і подальшому вільному відпалі зразків при високих гомологічних температурах.

Починаючи з перших експериментів фізики пластичності, було встановлено, що основні фундаментальні закономірності пластичної деформації, виявлені в лужногалоїдних кристалах - ЛГК (LiF, KCl, NaCl та ін.), є справедливими і для кристалів з іншим типом зв'язку. Недоліком цих кристалів є їх низька механічна міцність, що призводить до легкого розколювання кристалів, появи тріщин та їх руйнуванню за наявності термомеханічних напружень. Підвищити механічну міцність кристалів можна завдяки вивченню дислокаційних структур експериментально та методами математичного моделювання. Отримані результати фундаментальних досліджень можна застосовувати у прикладних задачах фізики твердого тіла. Питання підвищення механічної міцності монокристалів можна віднести до фундаментальних проблем сучасної фізики міцності і пластичності матеріалів.

1. Теоретична частина

1.1. Дислокації

Дислокації, що вперше були введені в науку як гіпотетичні недосконалості у структурі реальних кристалів, в даний час вивчаються як реально існуючі об'єкти, що впливають у значній мірі на механічні властивості матеріалів. Багато властивостей твердих тіл, такі, як міцність і пластичність є в першу чергу обумовленими дефектами кристалічної ґратки.

1.2. Використання ЛГ монокристалів

На основі ЛГК роблять сцинтиляційні детектори іонізуючого випромінювання та оптичні вікна. Маючи достатньо низький коефіцієнт поглинання в інфрачервоній (ІЧ) області спектру, ЛГК (зокрема КСІ) перспективні для виготовлення крупногабаритних оптичних елементів силових оптичних трактів.

Монокристали, які використовуються як елементи сучасних приладів, найчастіше в процесі експлуатації знаходяться під дією механічних напружень, що є причиною деформації. В результаті зміни розмірів і форми кристалів їх функціональні властивості можуть змінюватись. У міру протікання пластичної деформації, дислокації починають рухатись і взаємодіяти між собою, що призводить до зростання в кристалі далекодіючих внутрішніх напружень, концентрація яких в окремих межах кристалу може сприяти зародженню тріщин критичного розміру, подальше зростання яких призводить до руйнування матеріалу. У процесі високотемпературної деформації зростання внутрішніх напружень супроводжується релаксаційними процесами в дислокаційній підсистемі монокристалу, тому знання про процеси накопичення і релаксації внутрішніх напружень, (що безпосередньо залежать від розташування дислокацій у кристалі), необхідні для можливості прогнозування механічних властивостей кристалічних твердих тіл. Особливості деформації монокристалів під дією зовнішніх напружень за певною початковою дислокаційною структурою монокристалів визначаються їх кристалографічною

специфікою (числом можливих і активних площин легкого ковзання) і видом напруженого стану. Рух дислокацій (ковзання) у кристалах характеризується наявністю систем легкого ковзання.

1.3. Системи легкого ковзання дислокацій в кристалах з ґраткою типу NaCl

Системи легкого ковзання – це системи площин та векторів Бюргерса, в яких дислокації можуть ковзати при мінімальному значенні рівня зовнішніх напружень. Експериментально встановлено, що для багатьох кристалів із ґраткою типу NaCl системою легкого ковзання є $\{110\}\langle 110\rangle$ [1], але іноді можливо ковзання у системі $\{100\}\langle 110\rangle$. На рис. 1.1 зображено 6 площин легкого ковзання $\{110\}$.

1.4. Вплив дислокацій на механічні властивості

Дислокації значно впливають на механічні властивості кристалів. Цей вплив проявляється в тому, що внаслідок існування дислокацій реальні кристали здатні пластично деформуватися і руйнуватися під дією напружень, значення яких на декілька порядків менше, ніж межа міцності ідеальних кристалів. Більш того, виявляється, що структурна неоднорідність є однією з необхідних умов, що забезпечують здатність кристалів до пластичної деформації.

Однією з властивостей, що безпосередньо пов'язана з наявністю дислокацій, є міцність кристалічних тіл. При певному значенні енергії зв'язку між атомами та відомій структурі кристалічної ґратки, можливо розрахувати силу, необхідну для деформації і руйнування ідеального кристалу, тобто його теоретичну міцність. На практиці, в наслідок проведеного експерименту з'ясовується, що напруження необхідні для деформації та руйнування монокристалів, тобто їх реальна міцність, у 10^2 - 10^4 разів менше розрахованої теоретично.

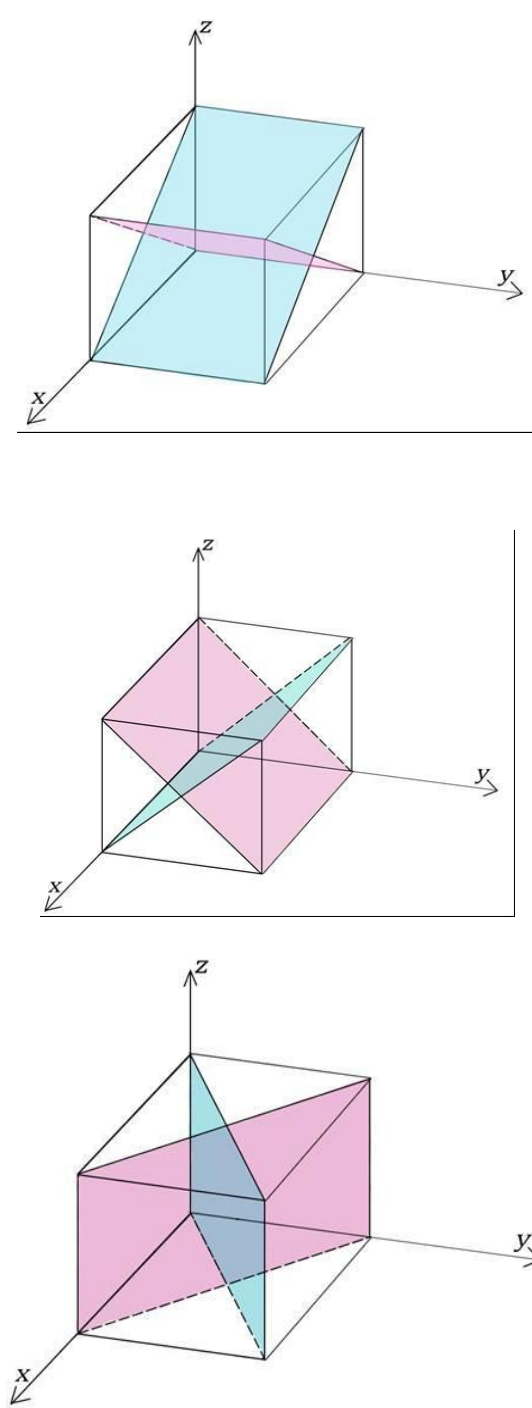


Рис. 1.1. Системи площин легкого ковзання для кристалів із ґраткою типу NaCl.

Щоб в ідеальному кристалі без дислокацій під впливом зовнішньої сили відбулася пластична деформація, тобто зміщення уздовж площині ковзання, необхідний одночасний розрив всіх атомних зв'язків по всій площині ковзання. Для цього необхідні великі зусилля, що підтверджує високу міцність ідеальних кристалів. Інший механізм пластичної деформації присутній в реальних

кристалах, що містять дислокації. Він обумовлений тим, що при наявності дислокації, зміщення однієї частини кристалу по відношенню до іншої відбувається не за рахунок одночасного розриву всіх атомних площин, а поступового, в ході руху крайової дислокації ковзанням, що не вимагає великих зусиль. Після того, як дислокації почнуть переміщуватися, цей рух сприяє пластичній деформації кристалу. Наслідком зазначеного механізму пластичної деформації є знижена міцність реальних кристалів в порівнянні з ідеальними.

1.5. Методи дослідження динаміки дислокацій

З метою розробки нових методів підвищення міцності моно- і полікристалічних матеріалів, довгий час проводяться дослідження динаміки дислокацій в кристалах методами комп'ютерного моделювання [2-5]. Процеси, в яких бере участь велика кількість дислокацій, недостатньо вивчені експериментально і описані теоретично. У багатьох випадках не можливо експериментально спостерігати динаміку процесів колективного руху дислокацій. Класичним методом такого спостереження є аналіз послідовних картин протравлених свіжих сколів поверхонь монокристалу. Експериментальна складність такого вивчення пов'язана з тим, що один з двох типів руху дислокацій - переповзання, носить дифузійний характер і, отже, може спостерігатися тільки при високих гомологічних температурах. Тому вивчати процес переповзання шляхом безперервного спостереження за ямками травлення (не охолоджуючи зразок) неможливо. Як правило, фіксується тільки початкова і кінцева стадії. Методи електронної мікроскопії допомагають вирішити цю проблему, але тільки для досить тонких (квазідвувимірних) кристалів. Складність теоретичного опису динаміки великих дислокаційних ансамблів пов'язана з тим, що при вирішенні цього завдання навіть в рамках теорії пружності ми маємо систему нелінійних алгебраїчних рівнянь, яка не має точного аналітичного рішення. Тому важливу роль відіграє комп'ютерне моделювання таких процесів [2-5].

1.6 Взаємодія дислокаційних ансамблів при вільному високотемпературному відпалі (без зовнішнього навантаження), що були введені у монокристал за схемою трьохточкового вигину

Зменшення кількості дислокацій у кристалі відбувається кількома способами: анігіляцією дислокацій з антипаралельними векторами Бюргерса, виходом на зовнішню поверхню кристала одиночних дислокацій (з утворенням поблизу поверхні зон зі зниженою густиною дислокацій) або дислокацій, які приймали участь у сформовані меж блоків. Останній процес супроводжується: а) скороченням довжини межі, якщо межа перетинає поверхню не під прямим кутом [6]; б) якщо межа складається з дислокацій з однаковими векторами Бюргерса, – макроскопічної деформацією – «самовільним» розгинанням попередньо зігнутою монокристалльної пластинки [7].

Перебудова ансамблю хаотично розташованих дислокацій з густиною ρ , яка веде до впорядкування і відповідно до зменшення внутрішньої енергії кристала, може призводити до полігонізації [11, 16-18].

1.7 Взаємодія дислокаційних ансамблів у процесі високотемпературної повзучості

Деформація монокристалів під дією зовнішніх напружень за певної початкової дислокаційної структури характеризується кристалографічною специфікою (а саме кількістю можливих і активних площин легкого ковзання) та схемою деформації (напрямок прикладення зовнішнього напруження по відношенню до зразка). Дослідити анізотропію пластичної деформації легше для зразків з мінімальною кількістю площин легкого ковзання (наприклад, кристали із гексагональною ґраткою). Для кристалів с більшою кількістю систем легкого ковзання (наприклад ЛГК із ґраткою типу NaCl) це зробити важче, тому що потрібно змінювати не тільки орієнтацію монокристалів по відношенню до зовнішнього навантаження, але й схему деформацій [8-10].

При наявності у процесі повзучості зовнішніх напружень, більших за напруження Пайєрлса-Набарро, у монокристалах із ґраткою типу NaCl,

відбувається зародження нових дислокації у площинах легкого ковзання (рис. 1.1.). Перерозподіл цих дислокацій у процесі ковзання, а також можливість дифузійним механізмом змінювати первинну площину легкого ковзання, приводять до протікання процесів зміцнення і знеміцнення у ході експерименту.

2. Практична частина

Актуальність роботи

Механічні властивості матеріалів дуже чуттєві до структурних дефектів кристалічної ґратки. Від густини та розташування дислокацій у кристалі буде суттєво залежати міцність і пластичність зразків.

Контролюючи густину дефектів і їх розташування, ми можемо отримувати матеріали з новими механічними властивостями кристалів, що є актуальною проблемою сучасного матеріалознавства.

Мета роботи:

- оволодіти методикою хімічного травлення, приготування свіжих сколів, роботою з оптичним металографічним мікроскопом МІМ-8, методикою деформації кристалів за різними схемами (одноосне стискання у процесі повзучості і трьохточковий вигин при кімнатних температурах);
- методом комп'ютерного моделювання дослідити взаємодію дислокаційних ансамблів за умов експериментів;
- встановити причини формування «бочкоподібної» форми зразків у процесі високотемпературної повзучості

Об'єкт дослідження

Лужногалоїдні монокристали KCl, NaCl із початковою густиною дислокацій $\rho \approx 5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$.

2.1. Методика експерименту

2.1.1. Хімічне травлення

Метод хімічного травлення успішно використовується для виявлення виходів дислокацій на площину спайності кристалів. Для цього підбирають розчини, які повільно й рівномірно стравлюють бездислокаційні ділянки

кристалу і утворюють ямки травлення на виходах дислокацій. Частини поверхні кристалу, що містять виходи дислокацій, розтравлюються швидше, ніж ділянки, які не мають виходу дислокацій, тому, що дислокації являють собою області кристалу, де кристалічна ґратка значно викривлена. Робота, яку треба виконати на відрив атома від кристала в ядрі дислокацій, нижча ніж на бездефектній ділянці поверхні. В зв'язку з цим швидкість травлення кристалу на таких ділянках поверхні більша. Це й призводить до утворення ямки травлення в місці виходу дислокації на поверхню. Картину, що утворюють ямки травлення, досліджують методами оптичної мікроскопії.

2.1.2. Комп'ютерне моделювання

Опис комп'ютерної моделі.

Для моделювання динаміки дислокацій було обрано наступну модель. Кожна дислокація створює навколо себе поле пружних напружень. Це поле діє на інші дислокації ансамблю. Зовнішнє напруження за принципом суперпозиції додається до внутрішніх напружень, наявність яких обумовлена дислокаціями, що є у кристалі. Ми нехтуємо інерційними властивостями дислокацій та вважаємо, що швидкість руху елемента дислокаційної лінії визначається лише сумарною силою, що діє на цей елемент [5].

Припустимо, що в кристал зовнішнім напруженням було введено кілька крайових дислокацій. Після того, як напруження було зняте, кристал відпалюють при високій температурі (для запуску дифузійних процесів). Хоч на кристал і не діють зовнішні напруження, вже сама наявність дислокацій у кристалі свідчить про наявність внутрішніх напружень.

Введемо осі координат: вісь Z - уздовж лінії дислокації, вісь Y - перпендикулярно площині ковзання, вісь X лежить в площині ковзання, причому осі координат утворюють праву трійку. Тоді в рамках теорії пружності, будуть справедливі формули для напружень, що створюються крайовою дислокацією [1]:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -bB \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{yy} &= bB \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{xy} &= bB \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}\end{aligned}\quad (1)$$

де $B = G/2\pi(1-\nu)$, G – модуль зсуву, ν – коефіцієнт Пуассона, b – вектор Бюргерса.

Знаючи напруження, за відомою формулою Піча-Келера [1] можна визначити силу, що діє на одиницю довжини дислокації

$$f_i = e_{ijk} l_j \sigma_{km} b_m$$

де τ_k – одиничний вектор, співпадає із напрямком лінії дислокації, який у правій трійці, направлений у протилежний бік вісі Z . Для дислокацій із вектором Бюргерса $\vec{b} = (b, 0, 0)$

$$f_x = \sigma_{xy} b \quad f_y = -\sigma_{xx} b$$

Для дислокацій з вектором Бюргерса $\vec{b} = (0, b, 0)$

$$f_x = -\sigma_{yy} b, \quad f_y = \sigma_{xy} b$$

Розглядається ситуація, коли в кристалі ядра дислокацій розташовані досить далеко одне від одного, і, отже, справедливий принцип суперпозиції, тобто на кожну дислокацію діє сумарне напруження (сила) від усіх інших дислокацій які знаходяться в кристалі. Дислокації можуть брати участь в трьох типах руху:

а) легке ковзання – рух дислокацій в результаті подолання бар'єру Пайерлса, тобто напруження, необхідного для того, щоб прямолінійна дислокація цілком перемістилася в сусіднє положення;

б) ковзання за допомогою дрейфу перегинів;

в) переповзання шляхом випускання або поглинання вакансій.

Для кількісного зіставлення результатів моделювання з експериментом у всіх випадках густини дислокацій і їх початковий розподіл бралися відповідними до умов експериментів. Вибір в якості модельних ЛГ кристалів саме KCl та NaCl обумовлений наявністю для цих об'єктів великої кількості експериментальних даних як про еволюцію дислокаційної структури, так і про залежність швидкості руху поодиноких дислокацій від напруження [12-14].

Така модель може бути використана, коли радіус кривизни дислокаційної лінії суттєво перевищує середню відстань між дислокаціями. Тоді дислокації можна вважати в основному прямолінійними, а повний дислокаційний ансамбль при дослідженні його еволюції можна розбити на підансамблі, кожен з яких так само є системою паралельних дислокаційних ліній. Якщо зсувні напруження в площині ковзання є більшими деякого напруження σ_p – бар'єру Пайерлса, то вважаємо, що швидкість ковзання $v \sim \sigma^n$, якщо $\sigma \leq \sigma_p$ то $v \sim \sigma$ [15]. Швидкість переповзання дислокацій прямо пропорційна напруженню у першому ступені. Вважаємо, що між часом t та Δt дислокації рухаються рівномірно зі швидкостями, які визначаються напруженнями, що діють в момент часу t . Відповідно, через час Δt отримуємо новий розподіл дислокацій. Параметр Δt вибраний так, щоб за цей проміжок часу зміщення дислокацій були не дуже великими, а саме: величина максимального зміщення x_{\max} не перевищувала 0.1 мінімальної відстані між дислокаціями [5].

2.2. Схема експерименту (трьохточковий вигин)

Монокристалні пластинки товщиною h , викоті по площинах спайності $\{100\}$, розміщені на нерухомій підставці, деформуються на повітрі за схемою

трьохточкового вигину.

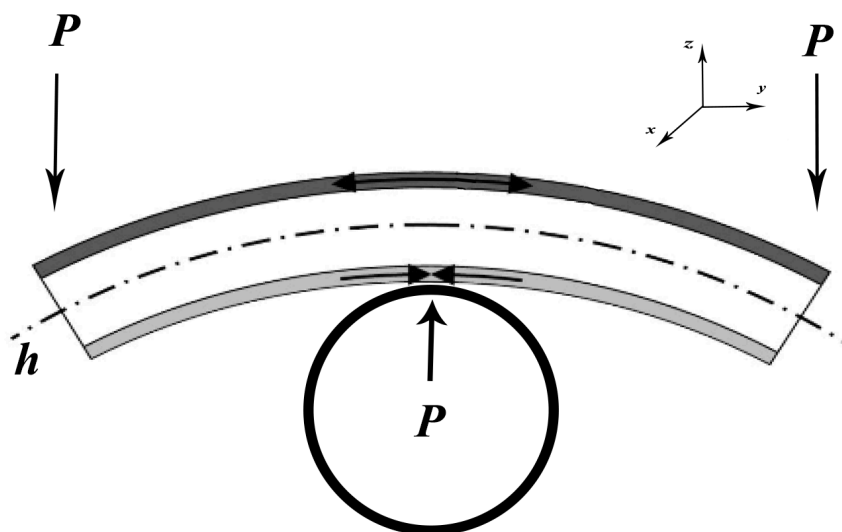
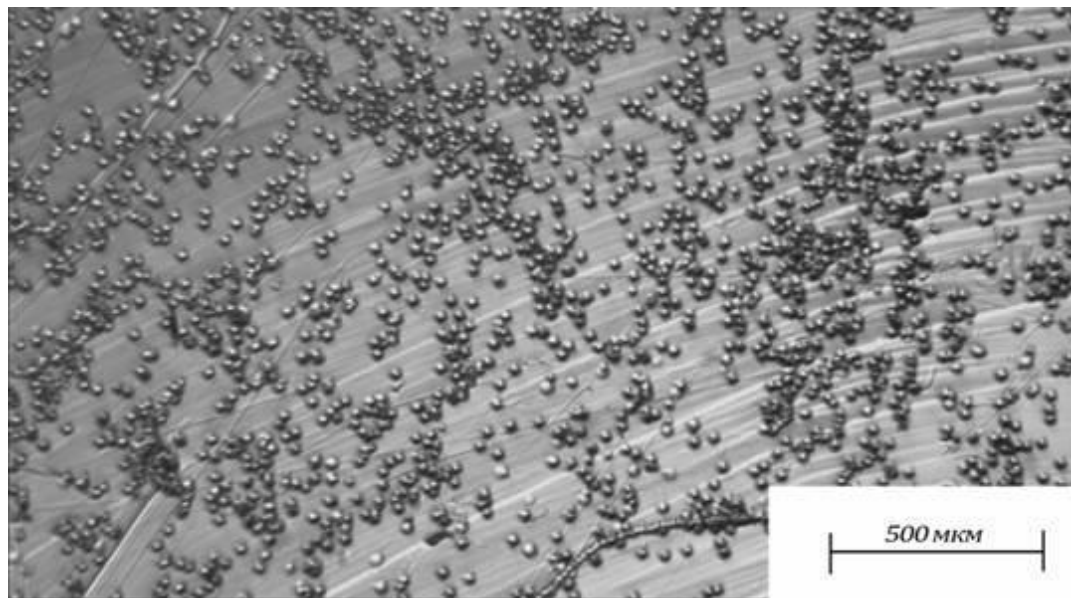


Рис. 2.1 Схема трьохточкового вигину: P – напрямки дії зовнішнього напруження, h – товщина пластинки.

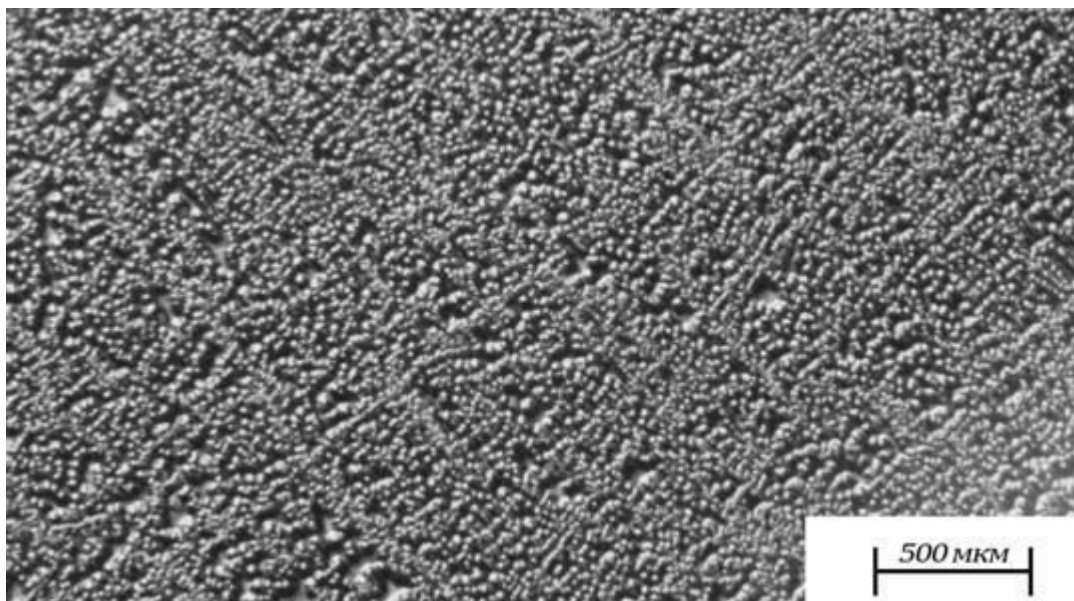
До виколотих по площинах спайності $\{100\}$ кристалів згинаюче навантаження P прикладалася до площини (001) так, що вісь вигину, що характеризується аксіальним вектором $\vec{\omega}^I$, була спрямована вздовж напрямку $\{100\}$.

Кристал клали на основу, змочували водою та легенько давили на його краї. Процедуру треба було повторювати кілька разів (протягом 5 – 10 хвилин) в залежності від товщини зразку та сили, з якою давили на кристал. Змочування водою проводилось з метою запобігання утворенню тріщин. Під час такого трьохточкового вигину народжуються нові дислокації у системах легкого ковзання (рис. 1.1 (а)).

Після вигину було досліджено субструктуру монокристалльної пластинки методом хімічного травлення. Травник для монокристалів NaCl – концентрована оцтова кислота.



а



б

Рис. 2.2. Фотографії дислокаційної структури монокристалів NaCl, а – до вигину, б – після вигину.

Вільний відпал – це відпал без дії зовнішніх напружень на зразок. Для аналізу динаміки дислокацій при двох типах руху: ковзання і переповзання, ми відпалили зразки монокристалів NaCl при $T = 550$, $t = 4$ год.

Хаотично розподілені дислокації почали будувати полігональні стінки із крайових дислокацій.

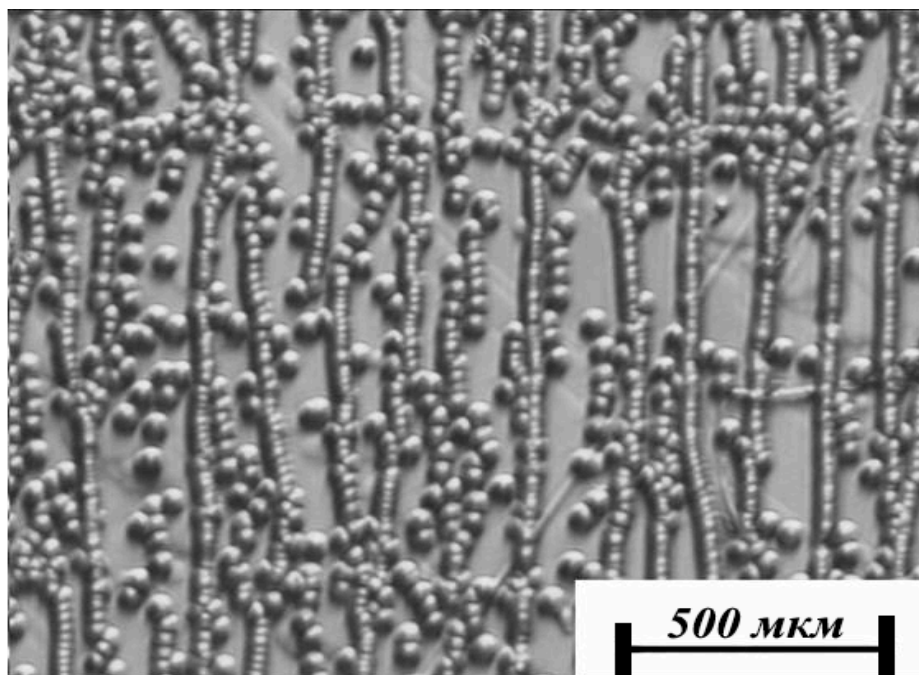


Рис. 2.3. Дислокаційна структура після вільного відпалу монокристалів NaCl при $T=550$, $t = 4$ год.

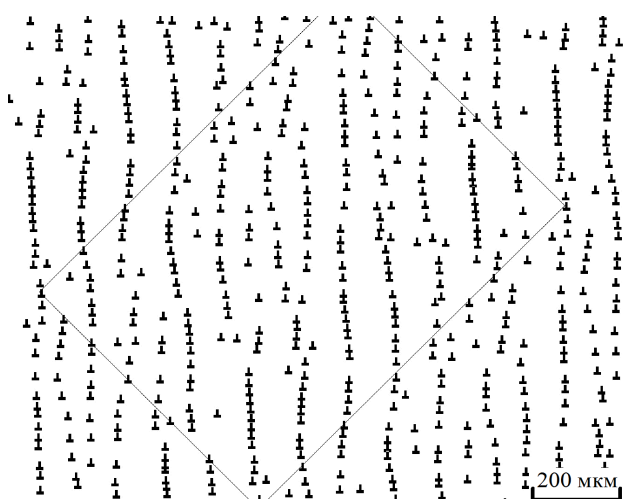
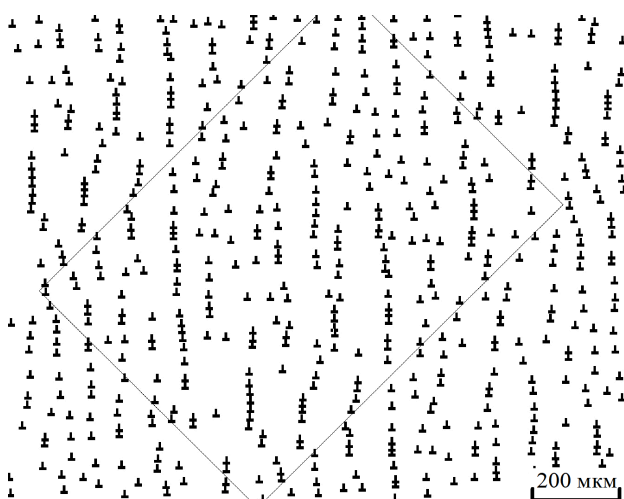
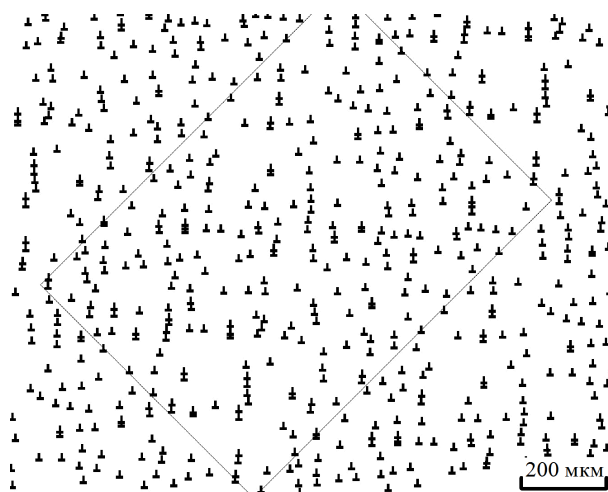
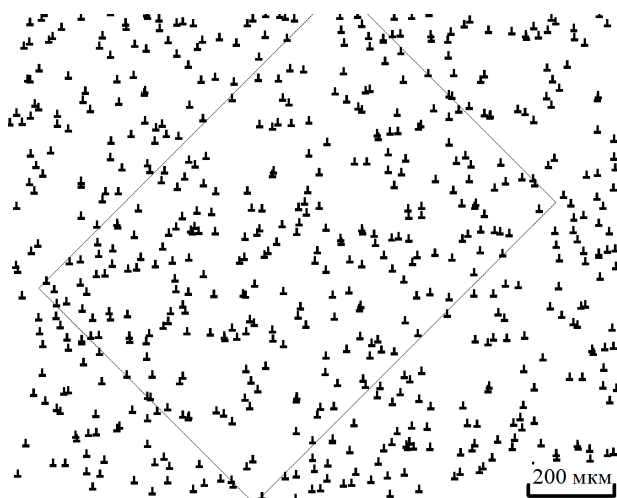
2.3. Комп'ютерне моделювання полігонізації крайових дислокацій з векторами Бюргера $\langle 110 \rangle$

Раніше математична модель [5] використовувалася для розрахунку та аналізу динаміки дислокаційних структур в нескінченному кристалі (не враховувалися граничні умови). В цій роботі промодельовано динаміку дислокаційних ансамблів у кристалі з періодичними граничними умовами.

Система координат обиралася так, що площина $\{110\}$ була базисною площиною (рис. 1.1 (в)), в якій розглядалося ковзання 200 прямолінійних крайових дислокацій з вектором Бюргера $\langle 110 \rangle$ при високих гомологічних температурах (з урахуванням переповзання дислокацій).

Обиралась прямокутна ділянка розміром приблизно 150×200 мкм, яка потім на кожному часовому кроці моделювання дублювалася у сусідні 8 таких саме ділянок. Якщо дислокація покидала центральну ділянку з одного боку, вона входила в неї з протилежного. В центральній ділянці розглядалась взаємодія кожної дислокації з усіма іншими, що були у цій ділянці, а також с

усіма дислокаціями у «клонуваних» ділянках.



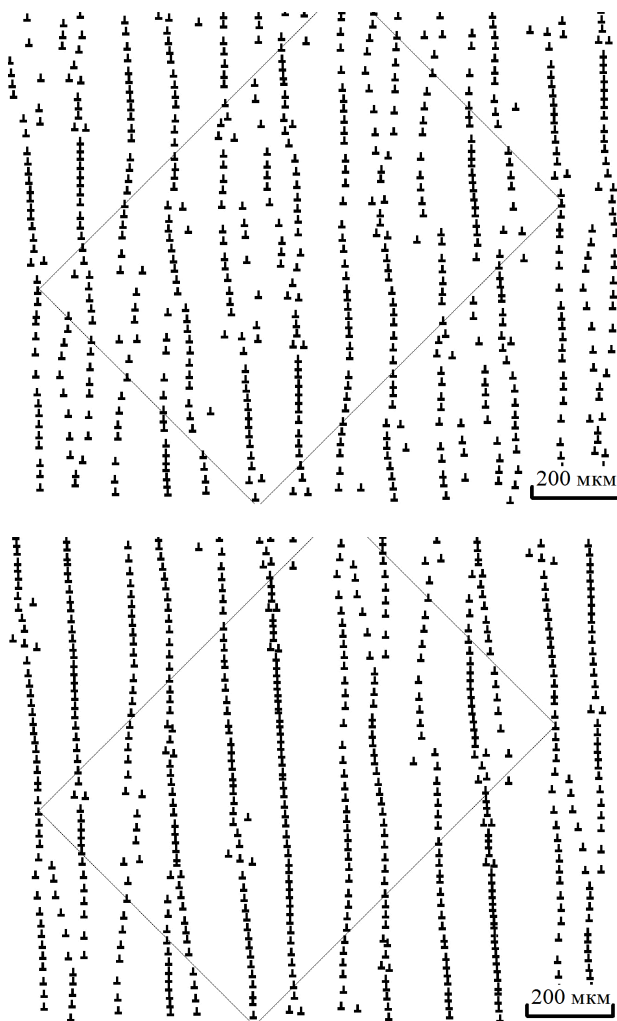


Рис. 2.4. Комп'ютерне моделювання послідовних стадій процесу полігонізації при вільному відпалі. Кожне зображення відображає положення дислокацій через 300 кроків роботи програми.

На останньому рисунку можна побачити фінальні результати роботи програми. Завдяки порівнянню усіх зображень можна помітити, що дислокації поступово змінювали своє положення і формували дислокаційні стінки. Це відбувається через те, що таке положення дислокацій є енергетично вигіднішим.

Якщо порівняти результати роботи програми з фотографіями відпалених кристалів NaCl (рис 2.3) можна побачити подібні зображення. Узгодження експериментальних результатів та результатів комп'ютерного моделювання дає підґрунтя стверджувати про адекватність роботи комп'ютерної програми. Таким чином, є можливість спостерігати у динаміці перебудову дислокаційної системи

та можливість оцінки часу побудови дислокаційних меж (полігонізації).

2.4. Схема експерименту однорідного розподілу напружень

Монокристали NaCl були викоті по площинах спайності $\{100\}$. Зразки були у формі прямокутних паралелепіпедів із висотою $8 \div 10$ мм та поперечними розмірами ($a \times c$): $3 \div 4$ мм \times $5 \div 6$ мм. Зразок вертикально поміщали у вертикальну трубчасту піч (рис. 2.5.). За такої орієнтації зразка на прикладеного навантаження орієнтаційний фактор (фактор Шміда) $\alpha = 0.5$ для усіх дислокацій, зображених на рис. 2.5.

Із швидкістю ≈ 3 К/хв температуру підіймали до 650 °С ($0.8 T_{пл}$), після чого до зразка було прикладено одноосне стискаюче напруження (зразок навантажували) $\sigma = 0.8$ МПа. Зразок тримали у печі 2 - 3 години при сталій температурі та сталому навантаженні (у режимі повзучості). Далі навантаження знімали та зразок охолоджували із швидкістю не більше 3 К/хв.

На рис. 2.5 стискаюче напруження діє у напрямку $[001]$ на площину xOy . При прямокутному перетині ($a \approx 2c$) дислокації переважно зароджуються та рухаються усього у двох взаємно перпендикулярних площинах. Якщо мінімальний розмір поперечного перерізу «с» є в напрямку вісі OY , то переважно в пластичній деформації приймають участь тільки 4 (з 8 можливих) дислокації b_1, b_2, b_3 та b_4 .

Цю обставину у роботі [8] було пояснено тим, що ефективно вносити вклад в деформацію будуть переважно ті дислокації в подібних площинах легкого ковзання з однаковим значенням величини приведених зсувних напружень, котрим потрібно здолати менше перешкод при своєму русі. Так при однорідному розподілі перешкод по об'єму кристала чим менше шлях, який повинні пройти дислокації до виходу на поверхню кристала, тим легше вони будуть рухатися ковзанням та вносити вклад у деформацію.

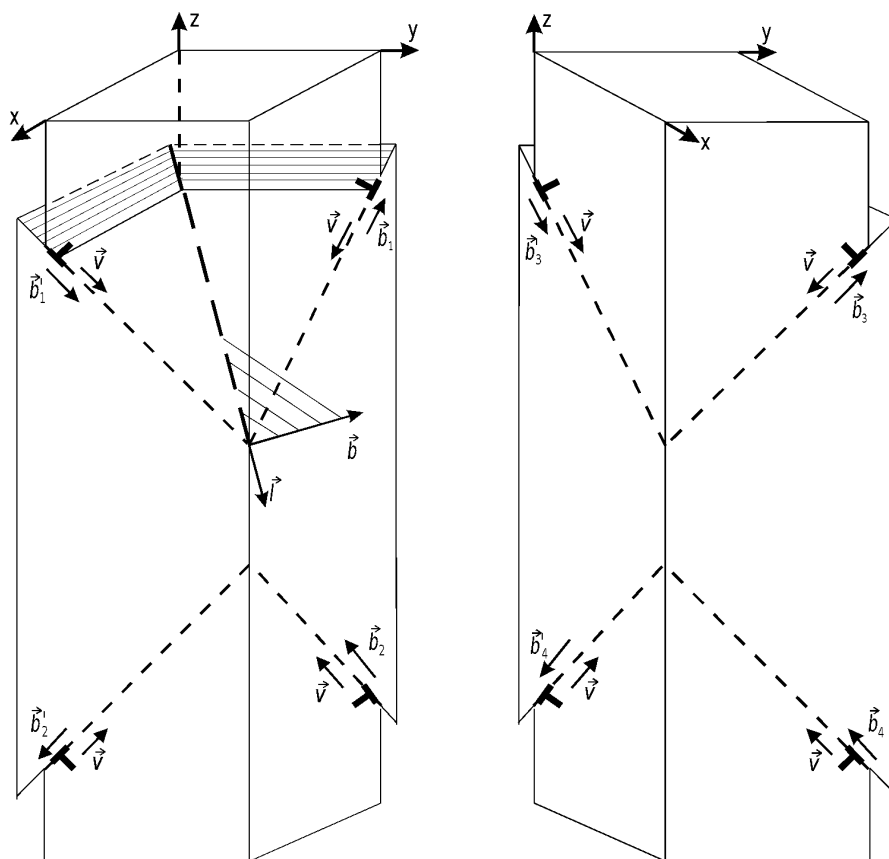
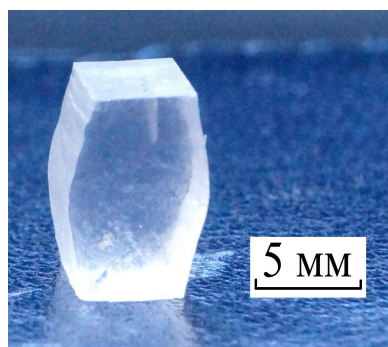
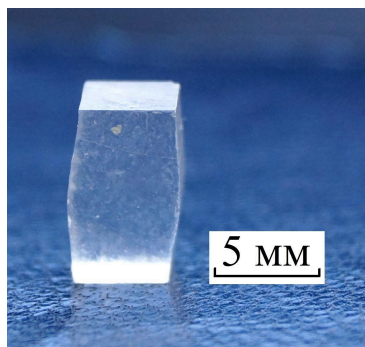


Рис. 2.5. Схема деформації кристалів при одноосному стисканні вздовж OZ [001].

В результаті експерименту зразок набував «бочкоподібної» форми (рис. 2.6). З метою встановлення причин саме такої форми було проведено моделювання динаміки дислокацій при вищезазначеній схемі навантаження.



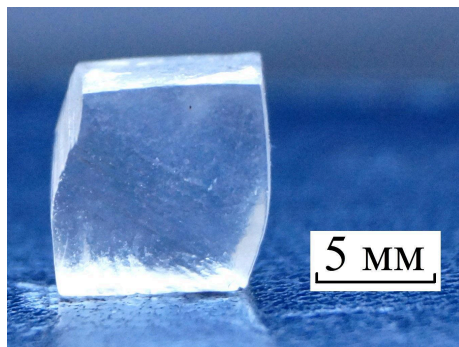


Рис. 2.6. Зовнішній вигляд монокристалів NaCl після експерименту.

2.5. Комп'ютерне моделювання динаміки дислокацій під дією одноосного стискання в процесі високотемпературної повзучості

При вказаній схемі навантаження та при таких розмірах зразків у кристалі зароджуються та активно рухаються дислокації у системах ковзання (рис. 1.1). Для зручності будемо називати дислокаціями «типу 1» дислокації з вектором

Бюргерса $\frac{b}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$; «тип 2» – $-\frac{b}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$; «тип 3» – $\frac{b}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$; «тип 4» – $\frac{b}{\sqrt{2}}(1, -1, 0)$ (рис. 2.7).

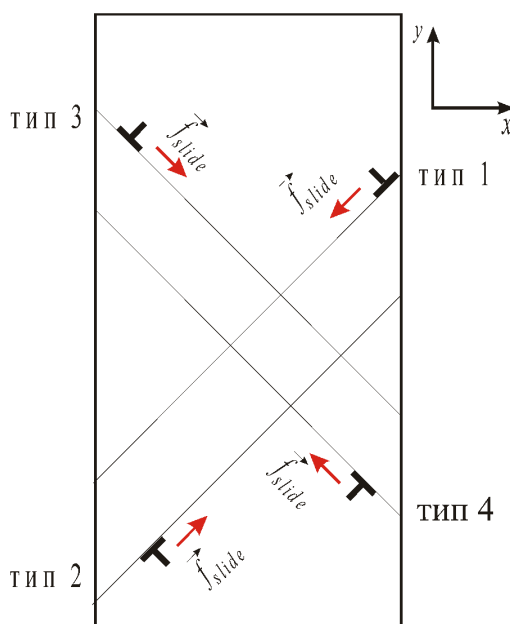


Рис. 2.7. Умовні позначення дислокацій із різними векторами Бюргерса.

Для того щоб встановити як дислокації, що виходять на поверхню або зароджуються на поверхні, змінюють форму цієї поверхні, розглянемо спочатку одну дислокацію.

Дислокація «типу 1», що рухається під дією сили f_{slide} та виходить на ліву поверхню зразка, утворює на поверхні сходинку розміром в величину вектора Бюргерса, зсуваючи верхню частину кристала вниз та ліворуч (рис. 2.8а). Дислокація «типу 2», що зароджується на лівій поверхні та уходить вглиб кристалу під дією сили f_{slide} , утворює таку ж сходинку на лівій поверхні (рис. 2.8 б). Дислокація «типу 1», що зароджується на правій поверхні і проходить крізь весь зразок, утворює одну сходинку на правій і одну на лівій поверхні. Аналогічна ситуація із дислокаціями типів 3 та 4. У подальшому будемо для простоти вважати, що кожного разу утворюється прямокутна сходинка розміром

$$\frac{b}{\sqrt{2}}$$

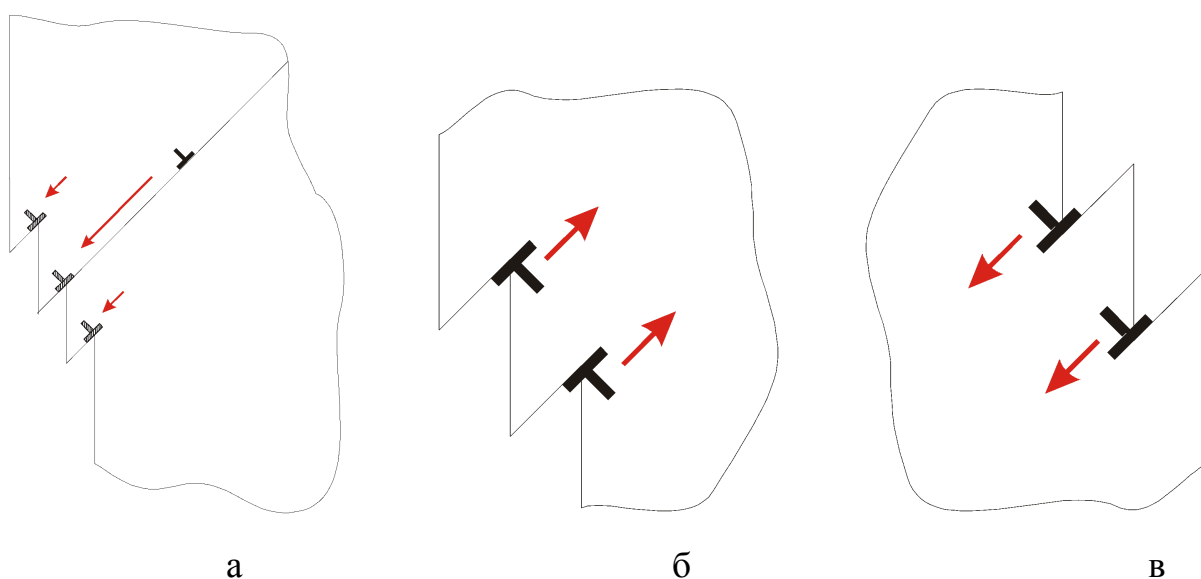


Рис. 2.8. Сходинки, що утворюються на поверхні кристалу при виході (а) та зародженні (б, в) дислокацій.

Візьмемо, наприклад, ліву поверхню і будемо цікавитись лише зміною її форми. Будемо слідкувати за усіма дислокаціями, що вийшли на цю поверхню або утворились на ній. Дислокації «типу 1» та «типу 2» дадуть нам наступну

форму (рис. 2.9). Аналогічно треба розглянути дислокації «типу 3» та «типу 4». Зафіксувавши усі зародження дислокацій та виходи їх на поверхні, ми можемо отримати приблизну форми поверхні, що утворюється.

Результати моделювання показують, що дислокації з антипаралельними векторами Бюргера («тип 1» та «тип 2») дають наступний внесок у зміну профілю поверхні (рис. 2.10). Слід звернути увагу на пологі ділянки графіку в нижній та верхній частинах зразка. Пояснити таку форму можна наступним чином.

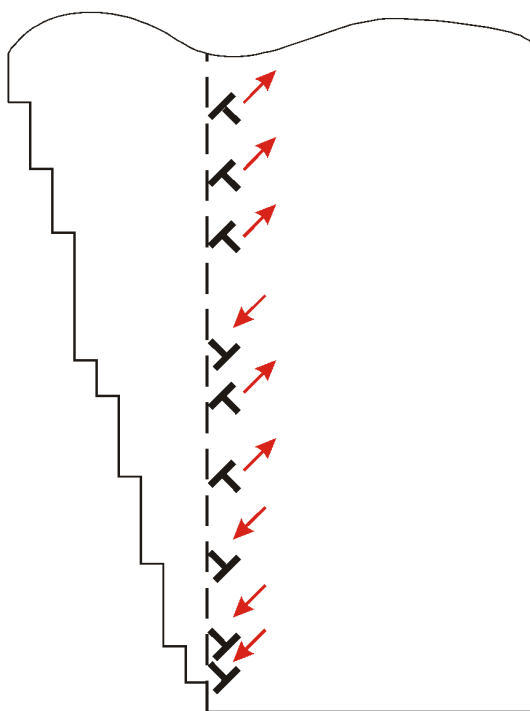


Рис. 2.9. Схематичне зображення зміни форми поверхні внаслідок руху дислокацій типу 1 і 2. Стрілками зображено напрямок руху індивідуальних дислокацій.

Для дислокацій типу 1, що зароджуються на правій поверхні, площиною ковзання буде площина (110). Під дією зовнішнього напруження вони не зможуть значно піднятися над своєю початковою площиною. Тому зона I (рис. 2.11) буде майже вільною від дислокацій «типу 1», що виходять на поверхню.

Оскільки експеримент проводився при гомологічно високих температурах,

коли активно може йти процес переповзання дислокацій, то паралельно з рухом дислокацій під дією зовнішнього напруження відбуваються також процеси самоорганізації дислокаційного ансамблю. Зокрема, процес полігонізації, елементи якого ми можемо бачити на рис. 2.12. Як відомо, дислокації, що є частиною симетричної дислокаційної межі, утримуються там досить потужною силою. Це приводить до того, що під дією зовнішнього напруження будуть рухатись межі (або їх частини) цілком, а не окремі дислокації. Якщо один з кінців дислокаційної межі буде чимось заблокований, то межа буде вигинатись, уповільнюючи або навіть зупиняючи свій рух. Тому біля нижнього краю зразка (в зоні II на рис. 2.11) кількість дислокацій «типу 1», що вийдуть на ліву поверхню, буде не дуже великою.

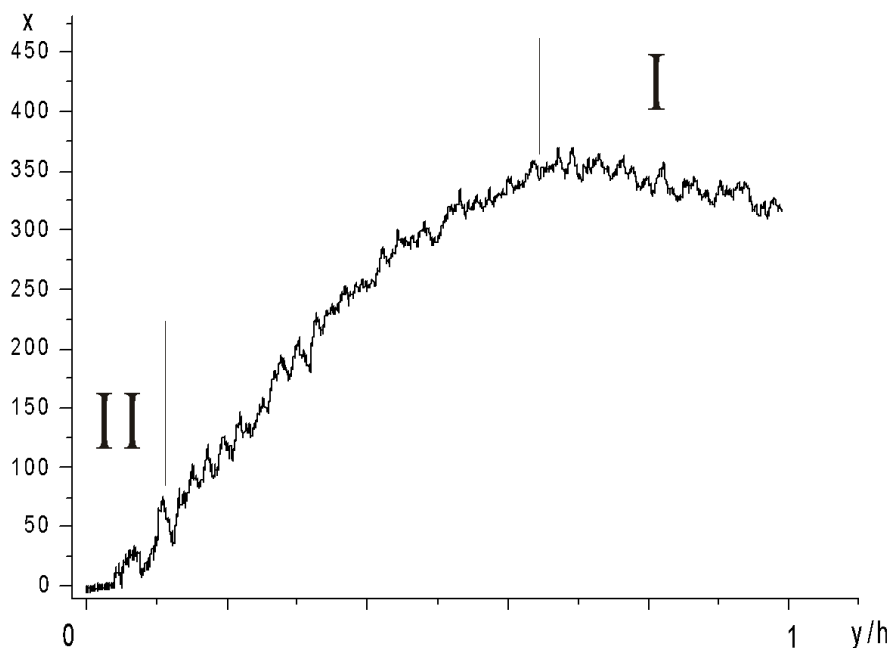


Рис. 2.10. Зміна профілю лівої поверхні, обумовлена дислокаціями типу 1 та 2.

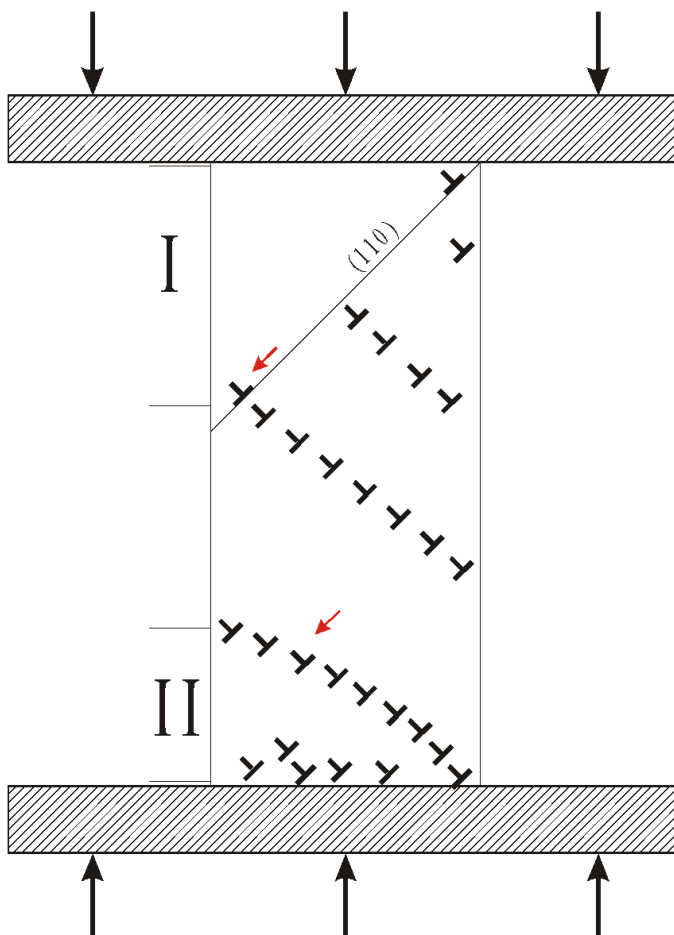


Рис. 2.11. Схематичне зображення ділянок руху дислокацій при одноосному стисканні в процесі високотемпературної повзучості.

Остаточний вид поверхні ми можемо отримати, додавши аналогічний внесок, що роблять дислокації «типу 3» та «типу 4».

Слід звернути увагу на несиметричність форми зразків після експерименту. В них усіх спостерігається діагональний перекис, що свідчить про нееквівалентний внесок дислокацій чотирьох типів у деформацію зразка. Пояснити це можна наступним чином. На початковій стадії експерименту, коли зразок є майже ідеальним прямокутним паралелепіпедом, до нього прикладається однорідне напруження. В цей момент на дислокації усіх типів (та на джерела дислокацій усіх типів) діють однакові напруження (рис. 2.7). Випадковим чином одне з джерел дислокацій виявиться таким, що працює більш активно, ніж інші. Це може бути обумовлене або особливостями

поверхні, або внутрішньою дислокаційною структурою. Наприклад, це буде джерело дислокацій типу 1, що розташоване на правій поверхні, або джерело дислокацій типу 2, що розташоване на лівій поверхні. Тоді через невеличкий час дислокації, утворені цим джерелом, вийдуть на протилежну поверхню (рис. 2.14). Після цього лише заштрихована (центральна) частина зразка, що містить це активне джерело, буде під дією однорідного напруження. Напруження в зовнішніх частинах (де розташована більшість поверхневих джерел дислокацій типів 3 та 4) буде меншим, спадаючи при віддаленні від центральної частини). Таким чином, одна з пари наборів площин ковзання стає домінуючою, обумовлюючи перекид зразка.

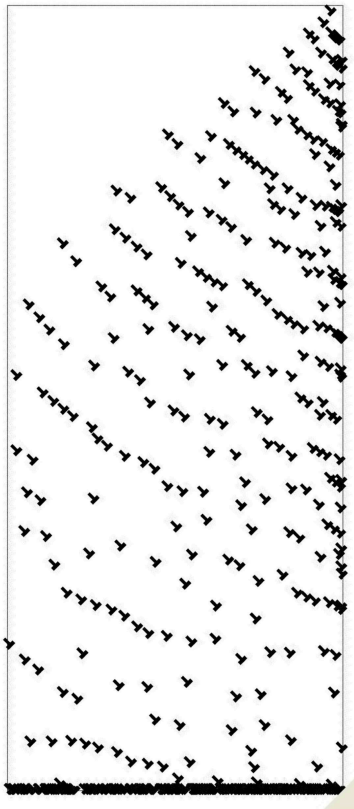


Рис. 2.12. Один з проміжних розподілів дислокацій в процесі моделювання. Показані лише дислокації «типу 1».

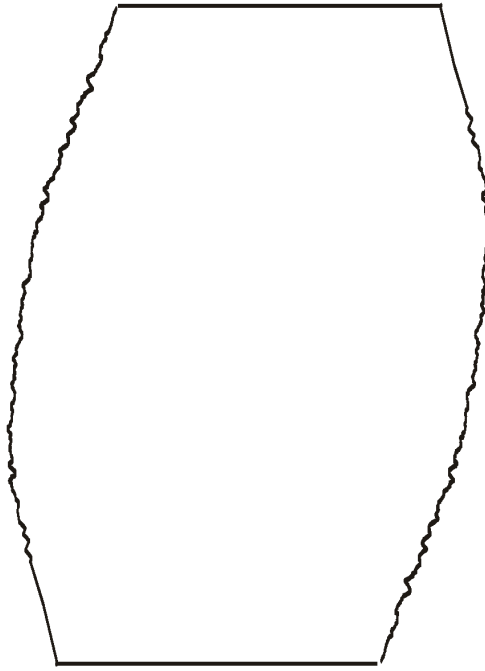


Рис. 2.13. Результат моделювання. Форма поверхні зразка

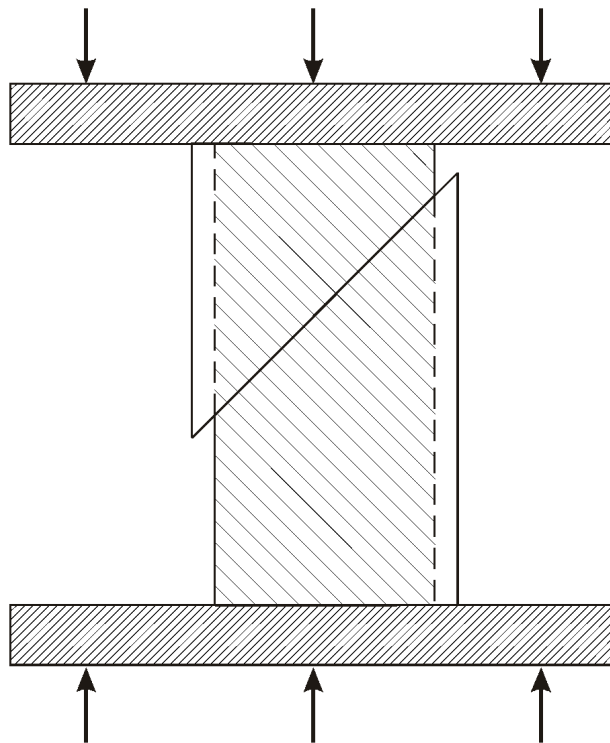


Рис. 2.14. Зони з однорідним (заштрихована частина) та неоднорідним розподілом механічних напружень.

Висновки

У дипломній роботі

- проведено експериментальні дослідження формування дислокаційної структури у зразках за різними схемами деформації (одноосне стискання у процесі повзучості і трьохточковий вигин при кімнатних температурах);
- методом комп'ютерного моделювання було досліджено взаємодію дислокаційних ансамблів за умов експериментів;
- отримано якісно подібні результати формування дислокаційних структур за умов експерименту і комп'ютерним моделюванням;
- встановлено можливі причини формування «бочкоподібної» форми зразків у процесі високотемпературної повзучості.

Список використаних джерел

1. Хирт Дж. Лоте И. Теория дислокаций [под ред. Э. М. Надгорнова, Ю. А. Осипьяна].-М.:Атомиздат.-1972.-599 с.
2. Предводителев А.А. Возможности моделирования процессов связанных с движением и размножением дислокаций в кристаллах [Текст] / А.А. Предводителев в кн.: динамика дислокаций.- К.: Наукова думка. – 1975.– С. 178-190.
3. Дегтярев В.Т. Моделирование движения дислокаций через лес колеблющихся дислокаций с учетом дальнедействующих полей напряжений в кристаллах с решеткой NaCl [Текст] / В.Т. Дегтярев, Б.М. Логинов, Н.А. Тяпунина // Кристаллография.- 1988.- Т.33, №1.- С.163-166.
4. Сарафанов Г.Ф. Модель аккомодационного зарождения оборванной субграницы с границы зерна [Текст] / Г.Ф.Сарафанов, В.Н. Перевезенцев // Письма в ЖТФ.- 2007.- Т.33, №9. С. 87-94.
5. Мацокин Д.В. Моделирование поведения дислокационных ансамблей в щелочно-галоидных монокристаллах [Текст] / Д.В. Мацокин, И.Н. Пахомова // Вісник ХНУ. Серія «Фізика».-2002.-№ 558,вип.6.-С. 85 – 91.
6. Лубенец С.В. Самопроизвольное движение дислокационных межблочных границ в приповерхностном слое щелочно-галоидных кристаллов. Дефекты и свойства кристаллической решетки / Лубенец С.В. Эйвазов Э.А., Гегузин Я.Е. – Киев: Наука, 1968. – 197 с.
7. Гегузин Я.Е. Об эффекте “самопроизвольного” диффузионного разгибания изогнутых кристаллов [Текст] / Я.Е. Гегузин, В.П. Мацокин // ФТТ –1969.–Т. 11, № 5.–С. 828–830.
8. Matsokin D.V. Peculiarities of high-temperature plastic straining anizotropy in with NaCl type single crystals in creep condition [Текст] / D.V. Matsokin, I.N. Pakhomova, V.P. Matsokin // Functional materials.–2005.–12, N 4.– С. 652 – 657.
9. Мацокин Д.В. Анализ дислокационных структур, образующихся при различных схемах деформации монокристаллов с решеткой типа NaCl

- [Текст] / Д.В. Мацокин, И.Н. Пахомова // 7-я Международная конференция «Физические явления в твердых телах». – Тез. докл. – Харьков. – 2005. – С. 77.
10. Matsokin V.P. Influence of single crystals orientation on their high-temperature stability at non-uniform stresses distribution [Текст] / V.P. Matsokin, M.V. Milyj, I.N. Pakhomova, D.V. Matsokin // International Conference on Sintering. – Abstracts – Ukraine, Kiev. – 2009. – P. 99 – 100.
11. Гегузин Я.Е. Исследование дислокационных эффектов при отжиге изогнутых щелочногалоидных монокристаллов по методу Фудживара [Текст] / Я.Е. Гегузин, В.П. Мацокин // ДАН СССР. – 1968. – Т.182, №5. – С.1055-1058.
12. Гутманас Э. Ю., Надгорный Э. М., Степанов А.В. Изучение движения дислокаций в кристаллах хлоридного натрия / ФТТ.-1963.-Т.5, №4.-С. 1021-1026.
13. Гутманас Э. Ю., Надгорный Э. М. Скорость движения дислокаций в кристаллах хлоридного натрия с двухвалентными примесями / ФТТ.-1968.-Т.10, №8.-С. 2284-2292.
14. Надгорный Э. М., Зайцев С. И. Движение дислокаций в полосах скольжения в кристаллах NaCl / ФТТ.-1970.-Т.12, №6.-С. 1846-1848.
15. Johnston W.G. Dislocation velocities, dislocation density and plastic flow in lithium fluoride crystals [Текст] / W.G. Johnston, J.J. Gilman // J. Appl. Phys. – 1959. – V. 30, №2. – P. 129-144.
16. Bauer C.L. Polygonization of rock salt [Текст] / Charles L. Bauer // Trans. Metallurg. Soc AIME. – 1965. – Vol.233, №4. – P. 846-848
17. Цинзерлинг Л.Г. Некоторые наблюдения процесса полигонизации в монокристаллах фтористого лития [Текст] / Л.Г. Цинзерлинг, М.П. Шаскольская // Кристаллография.-1964. – Т.9, №5. – С.701-704
18. Фридель Ж. Дислокации // М.: Мир.-1977.-с.644.