МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА

ФІЗИКО-ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізики нетрадиційних енерготехнологій та екології

Пояснювальна записка

до дипломної роботи

за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр

«Внутрішнє тертя у слабо дисипативних системах»

Виконала студентка 2 курсу, групи НФ-61
Терещенко В.М.

Спеціальність
105 Прикладна фізика та наноматеріали
Освітня програма : Прикладна фізика енергетичних систем.

Керівник: д-р ф.-м. наук, професор
Марченко І.Г. _____

Рецензент _____

Харків – 2018 рік

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Факультет __ФЕФ_____
Кафедра ___КФНЕЕ____
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) __магістр__
Напрям підготовки _105__
Спеціальність _Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ В. І. Ткаченко___
підпис ініціали, прізвище

"____"_____20___року

З А В Д А Н Н Я
НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ (ПРОЕКТ)

_____***Терещенко Вікторії Михайлівни***_____
прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи «Внутрішнє тертя у слабо дисипативних системах».

керівник роботи__д-р ф.-м. наук, професор Марченко Іван Григорович.__
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від "___"_____20__року №___

2. Строк подання студентом роботи_____

3. Перелік питань, які потрібно розробити
Побудувати комп'ютерну модель процесів внутрішнього тертя у слабо дисипативних системах.
Провести розрахунків рухливості дислокацій у слабо дисипативних системах.
Провести аналіз отриманих чисельних результатів.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Проведення літературного аналізу робіт по внутрішньому тертю та моделям руху дислокацій у кристалах.
2	Побудова комп'ютерної моделі процесів внутрішнього тертя у слабо дисипативних системах .
3	Вивчення методів вирішення стохастичних диференціальних рівнянь.
4	Проведення розрахунків залежності рухливості дислокацій від пружної напруги.
5	Побудова отриманих залежностей та проведення аналізу чисельних результатів.

5. Дата видачі завдання_____

Студент _____ __В.М. Терещенко____
підпис ініціали, прізвище

Керівник роботи _____ __І.Г.Марченко_____
підпис ініціали, прізвище

Реферат

Терещенко Вікторія Михайлівна «Внутрішнє тертя в слабо дисипативних системах» (випускна робота магістра). – Харків: ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2018. – 49с.

Робота присвячена вивченюю особливостей процесів внутрішнього тертя у слабо дисипативних системах. Вона складається з вступу, трьох розділів, висновків, містить 14 рисунків, список використаних джерел з 19 найменування.

У магістерській роботі проведено літературний огляд робіт по внутрішньому тертю та моделям руху дислокацій у матеріалах.

Побудовано математичну модель для вивчення руху дислокацій у кристалах під дією зовнішньої напруги та термічної активації. Використовуючи методи комп'ютерного моделювання досліджено особливості рухливості дислокацій у системах з різним ступенем дисипації енергії.

У роботі проведені розрахунки залежностей середньої швидкості руху дислокацій в системах як з малим так і великим тертям γ та побудовано графіки залежностей рухливості дислокацій від діючої напруги. Було показано що рух дислокацій у слабо дисапативних системах починається при напругах значно менших чим у систамах з великим значенням коефіцієнту тертя. Початок руху дислокацій у таких системах визначається величиною коефіцієнту тертя. При однаковій величині барьєру Пайерлса, значення напруги, при якій починається рух дислокацій, може, в залежності від коефіцієнту дисипації, відрізнятися на порядки. Побудовано графіки залежностей рухливості дислокацій від діючої напруги для систем із різним значенням тертям γ.

Отримані дані мають істотне значення для прогнозування поведінки конструкційних матеріалів.

Ключові слова: внутрішнє тертя, слабо дисипативні системи, дислокаційний рух, компьютерне моделювання.

Реферат

Терещенко Виктория Михайловна «Внутреннее трение в слабо дисипативних системах» (выпускная работа магистра). - Харьков: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2018. - 49с.

Работа посвящена вивченюю особенностей процессов внутреннего трения в слабо дисипативних системах. Она состоит из введения, трех глав, заключения, содержит 14 рисунков, список использованных источников из 19 наименования.

В магистерской работе проведен литературный обзор работ по внутреннему трению и моделям движения дислокаций в материалах.

Построена математическая модель для изучения движения дислокаций в кристаллах под действием внешнего напряжения и термической активации. Используя методы компьютерного моделирования исследованы особенности подвижности дислокаций в системах с разной степенью диссипации энергии.

В работе проведены расчеты зависимостей средней скорости движения дислокаций в системах как с малым так и большим трением γ и построены графики зависимостей подвижности дислокаций от действующего напряжения. Было показано, что движение дислокаций в слабодисапативних системах начинается при напряжениях значительно меньших чем в систамах с большим значением коэффициента трения. Начало движения дислокаций в таких системах определяется величиной коэффициента трения. При одинаковой величине барьер Пайерлсом, значение напряжения, при котором начинается движение дислокаций, может, в зависимости от коэффициента диссипации, отличаться на порядки. Построены графики зависимостей подвижности дислокаций от действующего напряжения для систем с различным значением трением γ.

Полученные данные имеют важное значение для прогнозирования поведения конструкционных материалов.

Ключевые слова: внутреннее трение, слабодисипативни системы, дислокационный движение, компьютерное моделирование.

Abstract

Tereshchenko Viktoriya Mihaylovna «Internal friction in weakly dyspilingual systems» (master graduation work). - Karazin Kharkiv National University, 2018. - 49s.

The work is devoted to studying the peculiarities of internal friction processes in weakly distributed systems. It consists of an introduction, three chapters, conclusions, contains 14 drawings, a list of used sources of 19 titles.

In the master's work a literary review of works on internal friction and models of motion of dislocations in materials was conducted.

A mathematical model was developed for studying the motion of dislocations in crystals under the influence of external stress and thermal activation. Using the methods of computer modeling, the features of the dislocation mobility in systems with different degrees of energy dissipation were investigated.

In the paper calculations of dependencies of the average speed of dislocation motion in systems with both small and large friction γ were made and graphs of dependences of dislocation mobility on active voltage were constructed. It was shown that the motion of dislocations in weakly disappointing systems begins at tensions much lower than in systomas with a large value of the coefficient of friction. The beginning of the motion of dislocations in such systems is determined by the value of the coefficient of friction. At the same value of the Peierls barrier, the value of the voltage at which the motion of dislocations begins, may vary, depending on the coefficient of dissipation, on the order. The graphs of the dependences of the dislocation mobility on the operating voltage for systems with different values of friction γ have been constructed.

The obtained data are essential for predicting the behavior of structural materials.

Keywords: internal friction, weakly dissipative systems, dislocation motion, molecular-dynamic modeling.

ЗМІСТ

Вступ 8

Розділ 1. Аналітичний огляд 10

1.1. Загальні характеристики рухливості дислокації 10

1.2. Дислокаційне внутрішнє тертя 15

1.3. Рух дислокацій в бар'єрах Пайєрлса 22

Розділ 2. Теоретичне дослідження 24

2.1. Математична модель задачі 24

2.2. Метод комп'ютерного моделювання 26

2.3. Рівняння руху 31

2.4. Чисельне рішення рівняння руху 34

2.5. Визначення середніх динамічних величин системи 46

2.6. Чисельне рішення рівняння Ланжевена 39

Розділ 3. Результати досліджень 42

Висновки 46

Список літератури 48

Вступ

У п'ятдесятих роках XX століття була створена електронна мікроскопія, і дослідження тонкої металевої фольги на просвічування блискуче підтвердили існування дислокацій. В даний час теорія дислокацій перетворилася в строгу фізичну теорію, що дозволяє описати пластичну деформацію, ефекти зміцнення, вплив нагрівання на деформовані метали і різноманітні інші процеси. Виявилося, що дислокації відіграють важливу роль у всіх фазових переходах, а перетворення мартенсітного типу, ймовірно, здійснюються ковзанням часткових дислокацій. У цих теоріях дислокації грають роль «елементарної частинки» зсуву, подібно до того, як електрон в електродинаміки виступає елементарним носієм заряду.[1]

Внутрішнє тертя (ВТ) - це здатність матеріалів розсіювати енергію механічних коливань, перетворюючи її в тепло. Такий процес відбувається за рахунок певних механізмів.

Першим термін «внутрішнього тертя» ввів в механіку коливань Кулон. В його дослідження було виділено два види - тертя зовнішнє та внутрішнє. Зовнішнє тертя вважалося тертя зразка, який контактував з повітрям (аеродинамічні втрати), а все інше було внутрішнім тертям.[1,С.5] Термін застосовувався до амплітудо-незалежним ефектам непружності, які виникли внаслідок релаксаційних або структурних процесах.

Демпфірування (загасання) коливань формально співпадає з терміном «внутрішнього тертя». Однак демпфуванням - це розсіювання енергії в матеріалі, викликане гістерезісними процесами, який залежить від величини амплітудних коливань. Демпфірування коливань грає важливу роль у вирішенні багатьох інженерних задач, його використовують в сплавах високого демпфірування (СВД), а внутрішнє тертя використовується при вивченні тонкої структури матеріалів в різних фізичних завданнях.[1, С. 198]

Дисипативними системами називають системи, в яких відбувається дисипація енергії. Слабо дисипативні системи – це системи з малим тертям.

Актуальність теми. В останні роки у світі стан розвитку виробничих технологій спрямований на оптимізацію вже існуючих приладів та пристроїв, або створенню нових. Для модернізації обладнання важливу роль грають функціональні матеріали та їх фізичні властивості.

Фізика твердого тіла допомагає змоделювати прогнозовану поведінку фізичних матеріалів у реальних умовах експлуатації, яка була створена на основі дислокаційної теорії реального кристалу.

Відхилення ідеальної моделі кристалу від реальної пояснюється дислокаційною теорією. В твердих тілах пластична деформація здійснюється за рахунок переміщення дислокацій.

Мета роботи: дослідити процеси внутрішнього тертя в слабо дисипативних системах та провести розрахунки рухливості дислокацій. Основною задачею магістерської роботи ознайомитися з методом комп'ютерного моделювання руху дислокації в кристалічній решітці, побудувати комп'ютерну модель процесів внутрішнього тертя у слабо дисипативних системах, вивчення методів вирішення стахостичних диференційних рівнянь, провести розрахунки залежності рухливості дислокацій від пружної напруги, провести аналіз результатів розрахунків, з отриманих даних побудувати графіки залежності середньої швидкості при малому терті від сили яка діє на систему та сформувати основні висновки.

Розділ 1. Аналітичний огляд

1.1. Загальні характеристики рухливості дислокації

Існують два види методи вивчення рухливості (динаміки) дислокацій: прямі та побічні. Прямі методи ґрунтуються на вивченні поведінки індивідуальних дислокацій. Швидкість дислокації визначається розрахунковою відстанню, на яку перемістилась дислокація під дією даного напруження за певний час. За методом вибіркового травлення здійснюють фіксацію початкового та кінцевого положення на траєкторії руху дислокації. [3]

Побічні методи вивчають різні фізичні властивості твердих тіл у процесі деформації, дослідження інтегрального ефекту від дії зовнішнього напруження всіх дислокацій в кристалі, та умови їх рухливості.

Пластичну деформацію кристалів (рис 1.1) забезпечують дислокації, які пересуваються під дією навантаження та взаємодіють із системою самого кристала, діють на весь його об’єм.

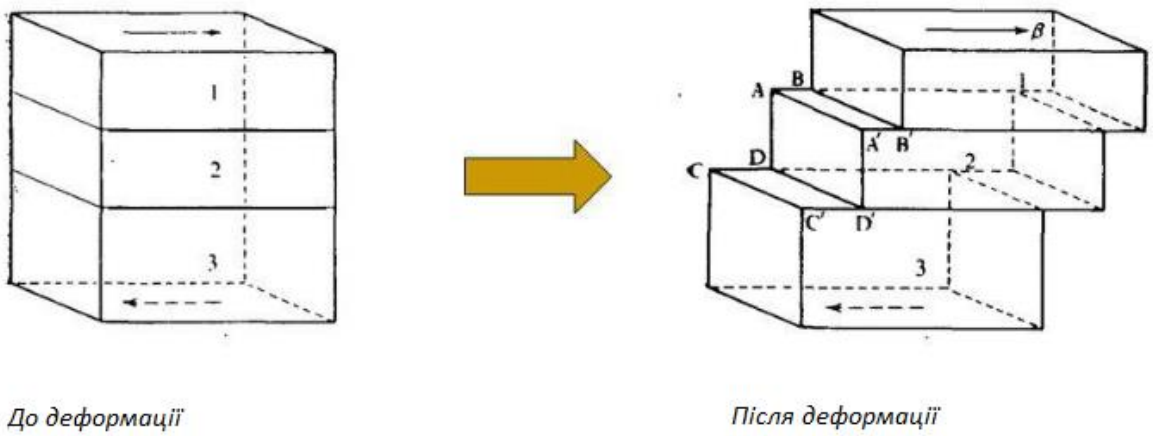


Рис 1.1 Пластична деформація кристалу

Дислокація - це лінійна недосконаліть решітки, що є межею зони зсуву. Рух дислокацій відбувається при ковзанні та подолання бар'єра Пайєрлса-Набарро, дислокаційна лінія робить це за рахунок утворення перегину (kink), коли малий сегмент долає бар'єр і викидається вперед. Перегини, поширюючись боком (гвинтові компоненти), витягають дислокацію і сприяють її подальшому просуванню (див. рис.1.1).

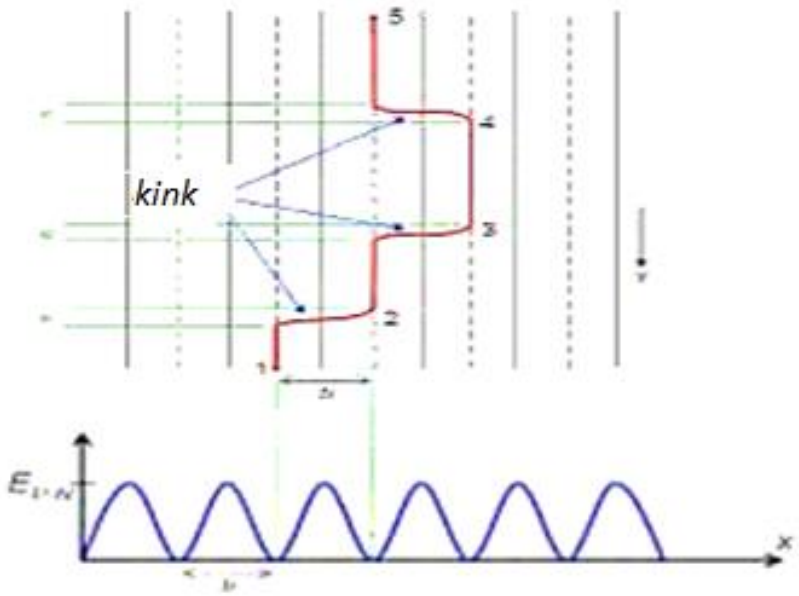


Рис.1.2 Рух дислокацій

Перешкоди, які обмежують рухливість дислокацій – всі відхилення від ідеальної будови кристала, а саме, домішки, об’ємні та радіаційні дефекти, збудження електронної підсистеми. Тобто, дослідження рухливості дислокацій із значливими перспективами подальшого розвитку є фундаментальним науковим напрямком.

Переміщення дислокацій в твердих тілах пояснюється пластичністю деформації в кристалі. Основним законом пластичної деформації являється деформація кристалу через одночасне переміщення дислокацій у кристалографічних площинах із різними індексами і його можна записати[3]:

$$\dot{\varepsilon} = \sum_{i=1}^{n} \Lambda \cdot b \cdot \vartheta \qquad (1.1)$$

де $\dot{\varepsilon}$ – швидкість процесу пластичної деформації,

n – кількість кристалографічних систем ковзання,

ϑ – середня швидкість пересування дислокацій по площині ковзання,

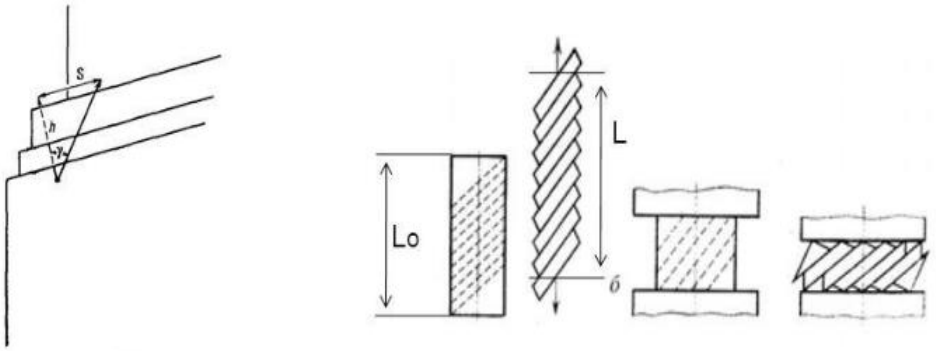
b – модуль вектора Бюргерса,

Λ – густина рухливих дислокацій у твердому тілі.

Процес пластичного деформування відбувається активніше за рахунок збільшення рухливих дислокацій, зсуву частин кристалу при переміщенні у площині ковзання дислокації та швидкому пересуванню в фізичному середовищі це випливає з співвідношення (1.2).

Площина зміщується щодо сусідньої не як єдине жорстке ціле, зсув зароджується на деяких ділянках площини ковзання, а потім послідовно поширюється на всю площину, і тому в кожен даний момент лише невелика частина атомів бере участь в роботі проти зовнішніх сил . Механізм такого зсуву пояснює теорія дислокацій.

Ковзання дислокацій - процес періодичного ослаблення і відновлення зв'язків у ядрі дислокації. Площина ковзання повинна містити лінію дислокації і вектор Бюргерса. Зміщення виконується по заданій площині (площина ковзання). Ковзання забезпечують незворотні деформацію зміщень, розтягнень та стиснення.



$$\gamma = \frac{S}{h} = tg\alpha \qquad \varepsilon = \frac{L - L_o}{L_o}$$

Рис.1.3 Деформація зміщення, розтягнення та стиснення.

Співвідношення показує, що процес пластичної деформації твердого тіла залежить від швидкості перезування дислокацій під дією зовнішньої сили.

Внутрішня напруга не може впливати на вільне тіло одною силою сили. Потрібні дві сили, спрямовані в протилежні ні боку, причому їх точки програми не повинні збігатися. Тому, для створення дотичних напружень сили повинні бути додатка дружини паралельно площині, по якій будуть діяти дотичні напруження. Вони зосереджені в просторі між точками докладання зусиль. Дію дотичних напружень можна уявити так, що вище площині ковзання напруга діє в одном, а нижче площини ковзання - в протилежному напрямку (рис. 1.4).

Відповідно дії напружень відбувається і зміщення атомів. У площині, де розташована лінія дислокації, атоми зсуваються вправо, в нижче площині - вліво. Тому край площини починає наближатися до краю нижньої половини сусідній повної площині. Нарешті, під дією зовнішніх напружень площини приєднає до себе відсутню частину сусідньої повної площині.

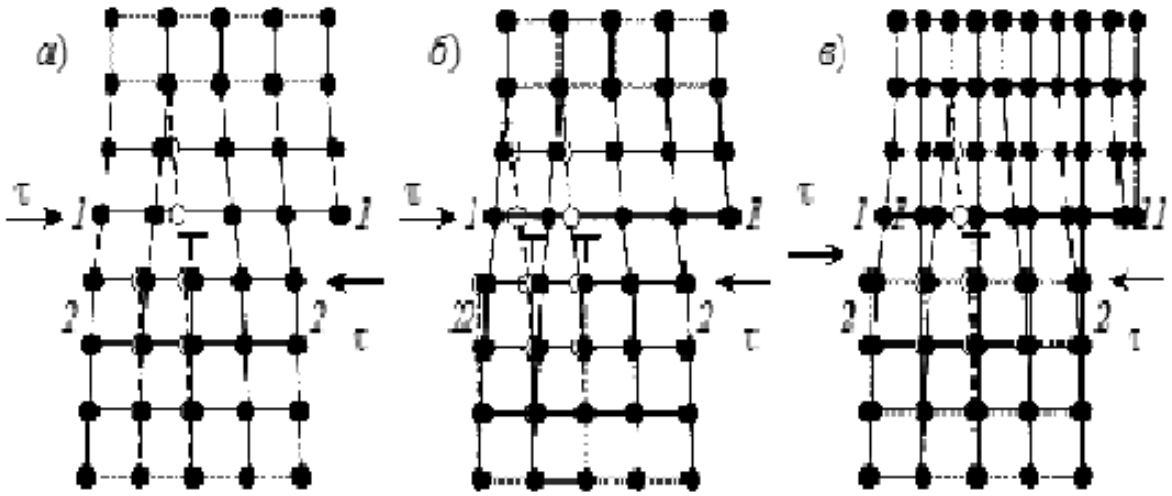


Рис. 1.4 Рух крайової дислокації. Коли дислокація проходить через весь кристал, дві його частини, розділені площиною ковзання, зміщуються один щодо одного на одне міжатомна відстань: а, б, в

Верхня ж частина повної площині виявляється обірваної, тобто нова площина з'являється поруч зі старою, і таким чином крайова дислокація зміститься на одне міжатомна відстань (рис. 1.4а). Багатократне повторення цього процесу призведе до того, що дислокація вийде з кристалу, і вся верхня його частина зрушиться щодо нижньої на міжатомна відстань (рис. 1.4 б, в).[1.с.109] .

Якщо дефект структури є дислокацією, то контур обов'язково виявиться незамкнутим. Для того, щоб зв'язати контур, тобто замкнути його, треба провести відрізок, який і називається вектором Бюргерса b (рис. 79, б). Дислокацію можна визначити не тільки як кордон незавершеного зсуву, але і як одновимірний дефект, для якого контур Бюргерса в ідеальній решітці розімкнути.

Вектор Бюргерса показує величину і напрямок зсуву, викликаний рухом дислокації. Вектор зсуву ідентичний вектору Бюргерса, однак треба враховувати, що не завжди освіту дислокації обумовлено зрушенням.

Якщо контур Бюргерса обійти в зворотному напрямку, то і напрямок b зміниться на протилежний. Тому прийнято знак b, який завжди з'єднує кінцеву точку контуру з початковою визначати, обходячи контур Бюргерса за правилом правого гвинта. Якщо прийняти позитивне напрямок лінії дислокації АВ йдуть уздовж осі на нас, то обхід контуру слід проводити проти годинникової стрілки (рис. 79). Вектор Бюргерса - вельми важлива кількісна характеристика дислокації. Він визначає енергію дислокації, є мірою створюваних нею пружних спотворень, служить параметром рухливості дислокації [1.с.125].

З уявлення про дислокацію як кордоні незавершеного зсуву слід, що вектор Бюргерса постійний по всій довжині дислокації, а лінія дислокації не може обриватися усередині кристала - вона або заступники- кається на себе, або сходиться з іншими дислокаціями.

Причина, по якій зовнішні напруги можуть викликають рух дислокацій - змушення атомів в ядрі дислокації завершити зміщення на вектор b, але тим самим призводять до зміщенню сусідів, а наступні, в свою чергу, своїх сусідів, що викликає безперервне переміщення дислокаційної лінії. Звідси випливає, що рух напруги має бути зсувним і спрямованим уздовж b, або хоча б мати не нульову компоненту вздовж b. Дислокації в такому випадку будуть переміщатися паралельно своєї вихідної лінії [1. с.144]. Механічний рух зазвичай відбувається під дією сил. Тому ми маємо право вважати, що зовнішні напруги можуть створювати силу на дислокацію.

1.2. Дислокаційне внутрішнє тертя

Результатом експериментальних праць з внутрішнього тертя є основний принцип – зовнішня енергія, яка підводиться до кристалу та через збудження середовища частково розсіюється. Реальне тіло містить недосконалості кристалічної гратки, тому можна спостерігати процес розсіювання зовнішньої енергії на дефектах. Зміни у кристалі за розмірами, хімічним складом, ступенем

деформації, розмірами зерна та температури змінює профіль механічного спектру поглинання кристала.

Внутрішнє тертя описується різними механізмами, залежно від частоти сканування зразка і кожен з частотних діапазонів має індивідуальне спрямування, для вивчення тих або інших процесів у твердих тілах. Як приклад, релаксаційні процеси переорієнтування, перерозподілу і дифузії атомів, і вакансій фіксуються максимумами внутрішнього тертя при низьких частотах внаслідок пластичного деформування. Завдяки внутрішньому тертю виникає можливість визначити термоактиваційні параметри різних процесів, а також, контролювати домішкові атоми, що введені у кристал. Висота максимуму внутрішнього тертя (пік Сноєка) [4] залежить від хімічної природи і концентрації цих домішкових атомів. За умови пониження T вказані піки зміщуються при варіації температури в бік більших частот.

Мегагерцовий частотний діапазон використовують для дослідження динамічних дислокаційних процесів. Чутливість, без руйнівний спосіб контролю та вибірковість – такі експериментальні переваги, що виникають під час вивчення рухливості дислокацій за поглинанням ультразвукової хвилі у цьому інтервалі частот. Струнна модель Гранато-Люкке використовується для описання дислокаційних втрат підведеної ззовні механічн ої енергії. Міра внутрішнього тертя може бути як безрозмірною характеристикою, так і величиною з певною розмірністю [4]. Розмірністю внутрішнього тертя може бути енергія, розсіяна у одиниці об’єму зразку за одну секунду, або відношення максимальної енергії, помножене на 2π, в період збереження у об’ємі енергії до розсіювання, тобто механічна добротність.

Внутрішнє тертя оцінюється за згасанням ультразвукових хвиль α, які діяли на досліджувані кристали, мірою яких є логарифмічний декремент згасання Δ (1.2). Це логарифм відношення n-ї до $(n+1)$-ї амплітуд, які

відбуваються у згасаючому коливальному процесі. Логарифмічний декремент пов'язаний з частотою ультразвукової хвилі та її поглинанням α середовищем за співвідношенням [3]:

$$\Delta = \frac{\alpha}{8{,}686 \cdot f}, \qquad (1.2)$$

де частота f у МГц.

Першою спробою визначення частки внутрішнього тертя була у праці Ешелбі (1949 р.) [5], спричинена дислокаційним розсіюванням. Проте модель була збудована для абсолютного нуля температур, дислокації, які були розташовані в енергетичних мінімумах та знаходились у низинах рельєфу Пайєрлса паралельно одна від одної. В роботах Ешелбі було розглянуто дію сил в'язкості та інерції на зупинку дислокації. За дослідженнями Мотта, наявність в кристалах дислокації, які утримують одна одну (сітка Мотта), зменшує модуль пружності. Тому сегменти дислокаційної сітки під дією навантаження кристала вигинаються у фазі. В теорії Гранато-Люкке, стопори – це вузли дислокаційної сітки, які не відкріпляються.

Фридель у своїх роботах розглянув, що домішкові атоми також можуть закріплювати дислокації, але вважаються слабшими стопорами, ніж стопори Мотта. Тому припускалось їх відкріплення.

Келєр першим ввів аналогію із струнною моделлю, припустивши, що відкріплення дислокації від домішкових атомів – це амплітудна залежність поглинання звукової хвилі. Він визначив коефіцієнт поглинання та пружний модуль для низьких частот, розглянув дію на дислокацію трьох сил: інерції, в'язкості та лінійного натягу, вивів рівняння руху дислокаційної лінії.

Пізніше Гранато і Люкке, з урахуванням всіх недоліків своїх попередників, змогли створити варіант струнної моделі – струнна модель Гранато-Люкке, яка має сильні стопори (стопори Мотта) та слабкі (стопори

Фриделя). Дислокаційні сегменти було позначено як L_N - стопори Мотта, L_C – стопори Фриделя. В моделі було припущено, що відрив можливий від стопорів Мотта та допускається відкріплення від стопорів Фриделя, тому одна дислокація взаємодіє з кристалічними гратками а інша є несуттєвою. Механізм моделі показано на рис 1.5.[6]

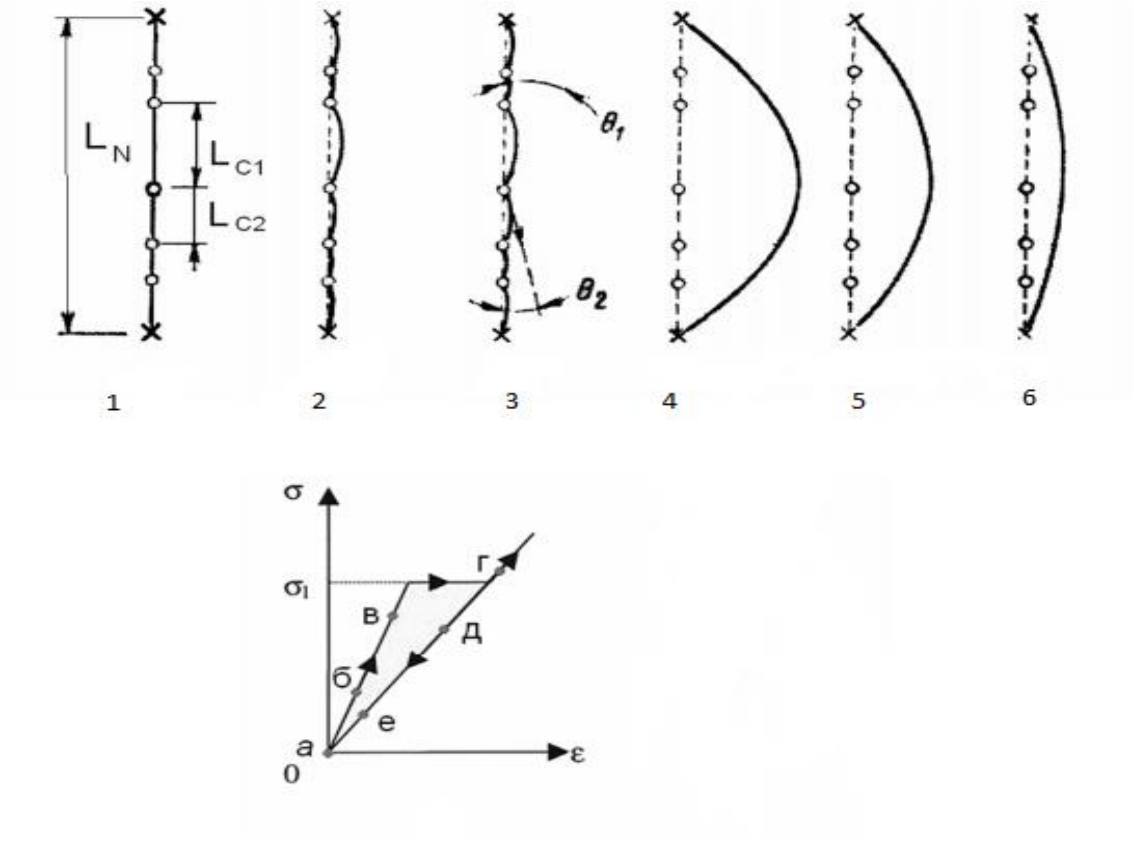


Рис. 1.5. Структурна модель Гранато-Люкке, схема відриву дислокації від точок закріплення (1-6), петля гістерезису в координатах «Напруга - деформація»

Дислокаційні петлі вигинаються при збільшенні навантаження на кристал (1-3), намагаючись знятись з фриделіських центрів закріплення. На певних етапах (3-4) збільшується довжина дислокаційного сегменту L_N та відбувається відрив від домішок, спостерігається деформація, яка зростає без дії навантаження. Після підвищення зовнішнього навантаження на дислокаційних

сегментах (5-6) виникає перегин, тому потім пісня підвищення навантаження кристал набуде пластичної деформації .

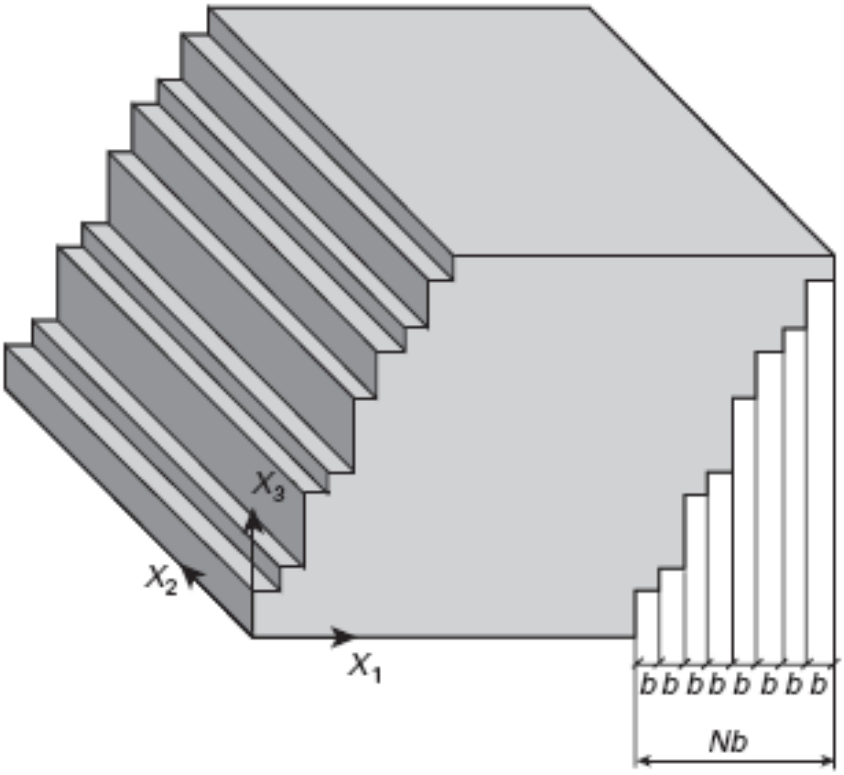


Рис 1.3 Пластична деформація кристалу

Швидкість пластичної деформації $\dot{\gamma}$ залежить від густини дислокацій, середньої швидкості руху дислокацій та орієнтованого фактору k. Рівняння для пластичної деформації в своїх працях вивів Орован:

$$\dot{\gamma} = k\rho b\bar{v}, \qquad (1.3)$$

де b – вектор Бюргерса.

В своїх роботах вчені Гранато і Люкке виділили два типи енергетичних витрат. Динамічними витратами або резонансними дислокаційними витратами був названий перший тип, який показаний на ділянках 1-3. Поява

дислокаційного поглинання (дефект модуля) відбувається у в’язкому середовищі при коливанні дислокаційних сегментів L_C.

Перший тип енергетичних витрат відбувається при невеликих амплітудах зовнішнього навантаження, тому відрив від стопорів Фриделя не відбувається та залежить від частоти зовнішнього навантаження. Якщо частоти зовнішнього коливання та власні частоти дислокаційних сегментів збігаються, то отримуємо максимальні втрати, при низьких та при високих частотах прямують до нуля, таку область реалізації називають амплітудно-незалежною.

Другий тип витрат називається гістерезисним або тип дислокаційних витрат відриву. Він характерний для великих амплітуд, дислокації, які відкріпились на ділянці 4 від фриделівських стопорів, повертаються на попереднє положення при розвантажені та закріпляються домішковою атмосферою. Амплітудно-залежною областю називається область положення гістерезисної петлі, чим більша петля, тим більші втрати.

Дислокаційний гістерезис визначається характером дислокаційної і домішкової взаємодії, яка залежить від величини прикладеної напруги по відношенню до напруги відриву дислокацій від домішок, температури і частоти коливань, які визначають рухливість закріплюють точок.[6]

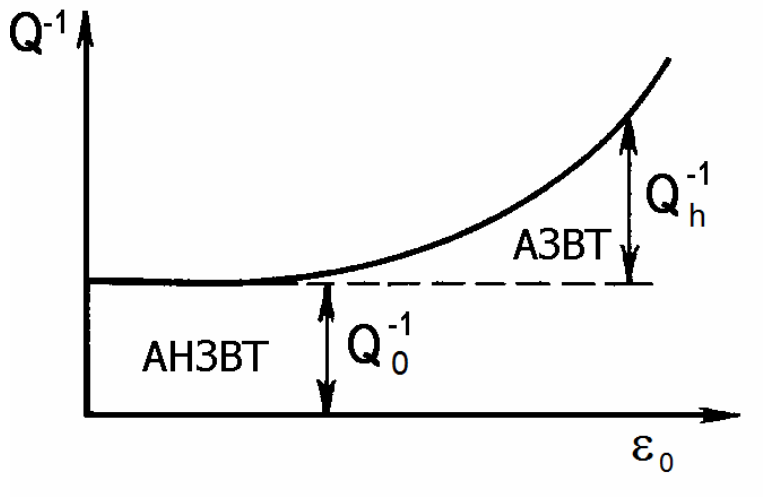


Рис 1.6 Схема амплітудо-незалежної і амплітудо-залежної ділянки внутрішнього тертя в залежності від амплітуди деформації ε_0

Критичне напруження, необхідне для руху дислокації. На одиничну дислокацію, розташовану симетрично щодо площини нижнього кристала, не діє результуючої сили. Але при невеликому зсуві лінії дислокації така сила з'являється і починає протидіяти спробі зміщення, причому це протидія виникає не тільки при переміщенні самої площини, а й інших паралельних їй площин.

Критична амплітуда деформації $\varepsilon_{кр1}$ відповідає переходу від амплітудо-незалежної ділянки до початку амплітудної залежності внутрішнього тертя (Рис.1.6) і характеризує енергію закріплення дислокаційного відрізка домішковими атомами.

Фізичний сенс другої критичної амплітуди - це початок мікропластичної деформації. З її допомогою можна оцінити розмір дислокаційного відрізка, внутрішнє тертя перестає носити оборотній характер. Поява осередків мікро-пластичної деформації в локальних обсягах металу при $\varepsilon > \varepsilon_{кр2}$ відповідає початку зростання фону внутрішнього тертя через збільшення щільності дислокацій і часто супроводжується відходом «нуля відліку» коливального процесу. Необоротне переміщення дислокацій відбувається при напрузі, більш ніж на два порядки менших умовної макроскопічної межі текучості.

Модель струни знайшла широке застосування у фізичному металознавство. Теорії відриву, в яких основа формування механічного гістерезіса є взаємодія одиничної дислокації з набором точкових дефектів, досить інформативні. З їх допомогою можна визначити не тільки число точок закріплення уздовж дислокації, середню довжину активних сегментів дислокації, а й силові і енергетичні параметри взаємодії «дислокація - стопір»[3].

1.3. Рух дислокації в бар'єрах Пайєрлса

Розглянемо рух по одиночної дислокації в кристалі.6Дислокація рухається в бар'єрах Пайєрлса.

Бар'єр Пайерлса - Набарро визначає опір кристалічної решітки ковзанню дислокації. Характер залежності потенційної енергії крайової дислокації E_n від зсуву з рівноважного положення визначається типом хімічного зв'язку та іншими факторами (див.рис.1.3.)

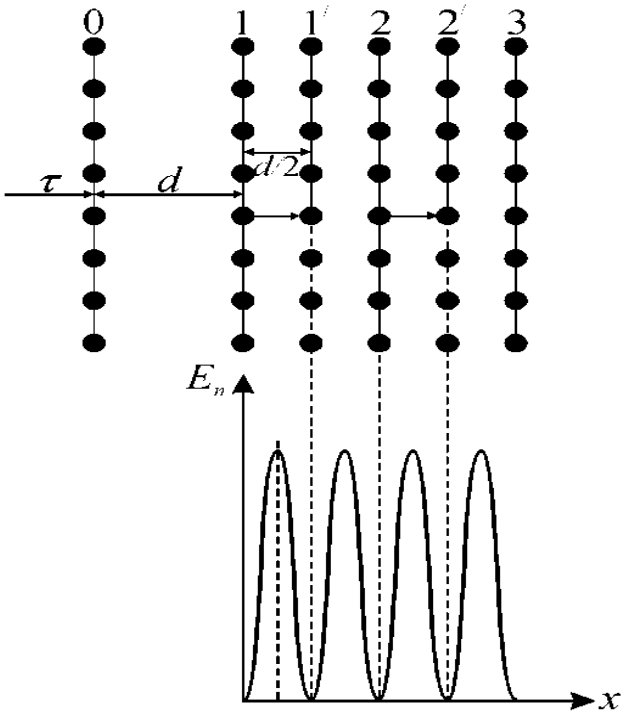


Рис. 1.3. Рух дислокації в бар'єрах Пайєрлса

У кристалі, вільному від інших дефектів, дислокація може ковзати і при напружених менше напруги Пайєрлса. Завдяки дії сил Пайєрлса потенційна енергія дислокації є періодичною функцією її положення в решітці. Мінімальні значення потенційної енергії (канавки потенційного рельєфу) відповідають положенням дислокації уздовж напрямків дуже ретельним упаковки. Приклавши напругу Пайєрлса, для переміщення дислокації з однієї канавки в сусідню, потрібно подолати потенційний бар'єр.

Інша картина передбачається в разі, коли одна дислокація розташована в сусідніх канавках потенційного рельєфу то вона має перегини. Рух перегину уздовж лінії дислокації може привести до послідовного (ділянка за ділянкою) переходу всієї дислокації в сусіднє положення з мінімумом енергії.

Напруга, необхідну для руху перегину паралельно напрямку дуже ретельним упаковки, дуже мало (менше напруги Пайєрлса). «Викидання» напівпетлі в сусідню канавку відбувається під дією термічної активації, а подальше розходження перегинів в різні боки-під дією дуже малих напруг.

В такому випадку наближення вважають синусоїдальною і визначають з формули:

$$E_n = \frac{G}{1-\mu}\exp\left(\frac{2\pi d}{1-\mu b}\right)\sin\left(2\pi\frac{x}{a}\right), \qquad (1.3)$$

Чим менший бар'єр Пайєрлса σ_n, тим менша енергія необхідна для руху дислокації. Для того щоб дислокація просувалася в своїй системі ковзання, фактично прикладена напруга $\sigma_{пр}$ має бути більше напруги Пайєрлса. При дії на кристал зміщенної напруги пластична деформація почнеться раніше в тій системі ковзання, в якій раніше прикладена напруга, ніж в інших виявиться вище напруги Пайерлса.

Розділ 2. Теоретичне дослідження

2.1. Математична модель задач

Розглянемо дислокацію, яка знаходиться в кристалічній решітці. Будемо її описувати як частинку, яка рухається в періодичному потенціалі. У роботі досліджувати будемо випадок одновимірної дислокації. Однак отримані результати можуть бути узагальнені.

Рух дислокації на одновимірній решітці під дією зовнішньої сили F_t було описане рівнянням Ланжевена [7]:

$$m\ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x}U(x) - \gamma\dot{x} + F_t(t) + \varphi(\mathrm{t}), \qquad (2.1)$$

де t – час,

x – координата дислокації в одномірній решітці,

m – маса,

γ – коефіцієнт тертя.

З рівняння $F_t(t)$ – сумарна сила, яка виникла за рахунок взаємодії частинок, $\varphi(\mathrm{t})$ – являє собою випадкову силу, яка діє на частинку за рахунок зіткнення з молекулами середовища, цей термін був названим білим шумом.

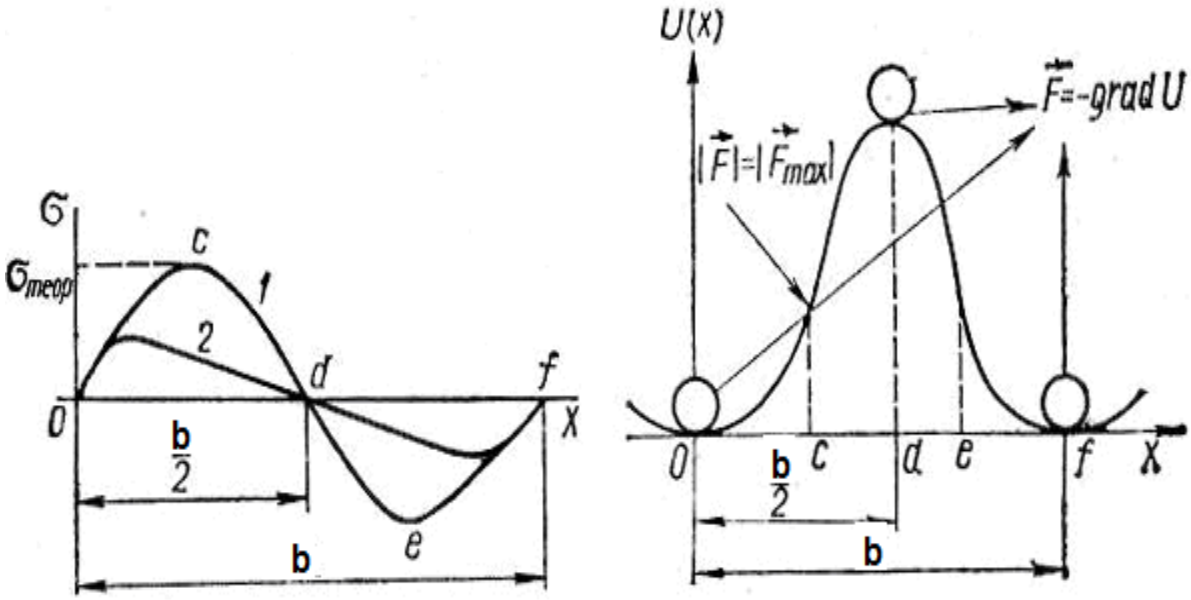
Білий (Гауссовий) шум – це стаціонарний шум, спектральні складові якого рівномірно розподілені по всьому діапазону задіяних частот. Назву отримав від білого світла, що містить електромагнітні хвилі частот всього видимого діапазону електромагнітного випромінювання. Білий шум в математиці описується дельта-функцією Дірака по всіх вимірах багатовимірного простору, в якому цей сигнал розглядається. Тому для нього виконується співвідношення:

$$\langle \varphi(t)\varphi(t') \rangle = 2m\gamma kT\delta(t-t'), \qquad (2.2)$$

де k – постійна Больцмана,

T – температура середовища,

$\delta(t-t')$ - дельта-функція Дирака.



а) б)

Рис. 2.1 Залежності напруження зсуву і потенціальної енергії

Розглянемо потенціальну енергію атома в кристалічній ґратці. Напруга дотична σ, яку необхідно, щоб створити зсув на величину *x,* пропорційна *dU/dx* (*U* – це енергія переміщення атому на одиницю довжини в даній площині).[8]

Коли атом має мінімальну потенціальну енергію, то він знаходиться в рівноважному положенні, а саме, у вузлах кристалічної гратки, максимальну ж потенціальну енергію атом буде мати в стані, що відповідатиме половині відстані між атомами 1 і 2 по осі x в нижньої половині кристала в точці d (див. рис.2.1).

У найпростішому випадку одноатомного матеріалу потенційна енергія в полі кристалічної решітки *U* записується:

$$U(x) = -{}^{U_0}/_{2}\cos({}^{2\pi}/_{a}\ x)\,, \tag{2.3}$$

де *a* – стала решітки,

U_0 – висота потенціальної енергій.

На рухому дислокацію з боку решітки діє сила, яка базується на потенціальну енергію поля кристалічної решітки, в якій знаходиться дислокація:

$$F = -\frac{\partial}{\partial x}\,U(x) = F_0 \sin(A\,x). \tag{2.4}$$

В випадку з дислокацією, використовуємо наступне рівняння для сили:

$$F = -\frac{\partial U}{\partial x} = F_{cr} \sin\left(\frac{2\pi}{a} r\right), \tag{2.5}$$

Величину $F_{cr} = {}^{\pi}/_{2} \cdot U_0$, як це прийнято [1], будемо надалі називати критичною силою, яка відповідає мінімальному значенню сили, яка потрібна для подолання часткою активаційного бар'єру.

2.2. Метод комп'ютерного моделювання

Комп'ютерне моделювання описує рух дислокації в кристалічній решітці, розрахункова модель виконується за допомогою різницевих схем 1-го порядку апроксимації методом класичної молекулярної динаміки, для такого моделювання було використано генератор випадкових чисел.

Особливості при комп'ютерному моделюванні повинні задовольняти їх умови. Значення на виході ідеального RNG повинні бути рівномірно розподілені, а кореляції повинні бути відсутніми, тобто все підпослідовності

фіксованої довжини повинні мати одну і ту ж ймовірність появи в послідовності, що згенерував генератор

Непередбачуваність важлива для криптографічних алгоритмів. Вимога складається в неможливості надійно передбачити значення $a_n + 1$ по $(a_0, ..., a_n)$ за допомогою будь-якого поліноміального алгоритму, a_n - значення на виході генератора.

Період генератора повинен бути досить великим, щоб не бути вичерпаним за місяці комп'ютерного часу. Чисельний експеримент на суперкомп'ютері може задіяти 109 випадкових чисел в секунду протягом багатьох годин (або місяців в разі, наприклад, обчислень КХД), тому 1013 - 1016 випадкових чисел можуть вносити вклад в результат обчислювального експерименту.

Для більшості генераторів використання невеликої частини періоду T краще з точки зору статистичних властивостей, ніж використання періоду цілком. Поширеним емпіричним правилом, хоча й не дуже універсальним, є використання не більше T чисел.

Повинна існувати ефективна реалізація RNG з точки зору швидкості обчислень і використання оперативної пам'яті.

Властивості генератора, такі як довжина періоду, часто можуть бути знайдені точно за допомогою аналітичних методів. Для RNG бажано розуміти властивості генерується псевдовипадкові послідовності, а не розраховувати тільки на емпіричні тести. З цієї причини хороший генератор повинен бути грунтовно проаналізовано теоретичне.

Часто корисно повторити ту ж саму послідовність псевдовипадкових чисел, яка була використана в попередньому запуску. Більшість генераторів псевдовипадкових чисел видає відтворювані послідовності, на відміну від послідовностей, генеруючих фізичними пристроями.

Можливість генерувати одну і ту ж послідовність псевдовипадкових чисел на різних програмно-апаратних платформах.

Для будь-якого великого r повинна бути можливість швидкого обчислення значення s_{n+r} безпосередньо з попереднього s_n, без генерації про-проміжних станів. Тут s_n - стан генератора. Це властивість особливо важливо для генерації паралельних потоків випадкових чисел.

Важливо, щоб короткі послідовності, ви-даються RNG, не мали кореляцій; це важливе завдання, яке необхідно спеціально вирішити. Для ряду генераторів домогтися цього непросто, особливо якщо стану генератора мають більший обсяг інформації.

Найбільш широко використовуються методи генерації випадкових чисел можуть бути поділені на два основні класи: лінійно-конгруентний метод і метод зсувних регістрів.

Лінійно-конгруентний метод. Лінійно-конгруентний метод (ЛФМ) був запропонований Лемером (Lemer, 1951). Послідовність псевдовипадкових чисел (x_0, x_1, ..., x_n, ...) обчислюється після завдання початкового значення x_0 за формулою:

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \, (mod \, M) \qquad (2.5)$$

де a - множник,

c - приріст,

M - модуль.

Очевидно, максимально можливий період такої послідовності не може перевершувати модуля М.

Число M необхідно, щоб задовольнити такі умови :

1) число M має бути досить великим, так як період не може мати більше M елементів;

2) значення числа M має бути таким, щоб рівність (2.5) обчислювалося швидко.

Приклад реалізації лінійно-конгруентного методу на мові програмування Pascal:

```
Const x :LongWord = 10;

Function LCM:LongWord;

Begin

x = (1664525*x+1013904223) mod exp(32*ln(2))

LCM = x

End;

Begin

writeln(LCM)

End.
```

Приклад реалізації лінійно – конгруентного методу в середовищі ANCI-C:

```
#define RAND_MAX 32767

 unsigned long next = l;

 int rand(void)

    { next=next*11035152 45+12345;

return((unsigned int)(next/65536)%32768);
```

```
}
void srand(unsigned int seed)
{ next=seed;
```

Лінійно-конгруентний метод має свої недоліки, такі як обмеження на максимальний період який не може бути більшим за машинну довжину цілого числа та недолік, який полягає в тому, що ЛФМ не слід використовувати в додатках, що мають справу з випадковими векторами в багатовимірному просторі, оскільки відповідні точки, одержувані з випадкових послідовностей на виході ЛФМ, будуть лежати в просторі меншої розмірності.

Генератори, засновані на зміщенном регістрі. Генератором на зміщенному регістрі називається генератор з вихідною послідовністю:

$$u_n = \sum_{i=1}^{L} x_{ns+i-1} 2^{-i}, \qquad (2.6)$$

де розмір кроку s і довжина слова L - цілі позитивні числа.

Розглянемо послідовність:

$$x_n = (a_1 x_{n-1} + \cdots + a_k x_{n-k}) (mod\ 2). \qquad (2.7)$$

Характеристичним поліномом цієї послідовності є:

$$\mathrm{P(z)} = \mathrm{z^k} - \mathrm{a_1 z^{k-1}} - \ldots - \mathrm{a_k}. \qquad (2.8)$$

Це лінійно-рекурентне співвідношення в поле Z^2, що складається з двох елементів, нуля і одиниці. Таке рекурентне співвідношення називається зсувними регістром і має період довжини $p = 2^k - 1$ тоді і тільки тоді, коли P є примітивним поліномом.

Генератори, засновані на зміщенному регістрі (ГУР), швидші і володіють гігантським періодом за умови правильного вибору примітивних тріномов, що лежать в основі таких генераторів. Тому вони особливо добре підходять для додатків, яким необхідна велика кількість випадкових чисел.

У даній роботі був використаний лінійно-конгруентний метод генерації випадкових чисел. Так як гаусів шум має нормальний розподіл амплітуди, а генератор випадкових чисел видає нам числа з рівномірним розподілом, то в програмі був також використаний метод Бокса-Мюллера для перетворення рівномірно-розподіленого величини в величину нормально-розподілену.

Метод Бокса-Мюллера. Нехай x і y - незалежні випадкові величини, рівномірно розподілені на відрізку [-1, 1]. Обчислимо $s = x^2 + y^2$. Якщо виявиться, що s > 1 або s = 0, то значення x і y слід «викинути» і згенерувати заново. Як тільки виконається умова 0 < s ≤1, за формулами:

$$z_0 = x * \sqrt{\frac{-2 \ln s}{s}}, \tag{2.9}$$

$$z_1 = y * \sqrt{\frac{-2 \ln s}{s}}. \tag{2.10}$$

слід розрахувати z_0 і z_1, які будуть незалежними величинами, що задовольняють стандартний нормальний розподіл.

2.3. Молекулярно-динамічне моделювання

Математичне моделювання та обчислювальний експеримент застосовуються в ситуаціях, коли постановка натурного експерименту неможлива, дуже складна або дуже дорога. Молекулярно-динамічний (МД)

підхід є одним з напрямків математичного моделювання і знайшов широке поширення в дослідженнях структурних, динамічних, термодинамічних і кінетичних властивостей молекулярних або атомарних систем. Суть методу молекулярної динаміки (МД) складається в прямому знаходженні траєкторій атомів (молекул) у відповідності з заданими властивостями міжмолекулярної взаємодії [1-21]. У даній роботі розглядається застосування цього методу для дослідження руху дислокації в кристалічній гратці [10].

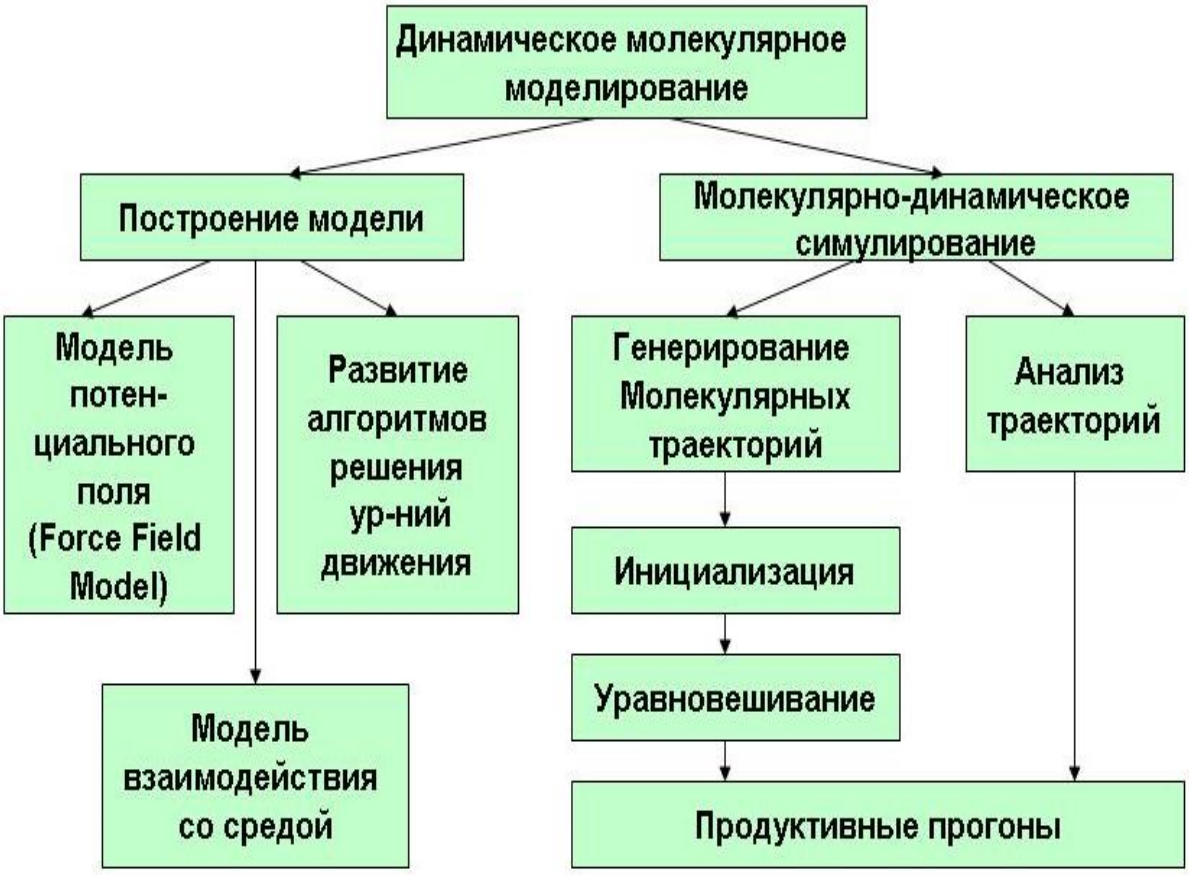


Рис 2.2 Основні задачі молекулярно-динамічного моделювання

Оскільки молекулярні системи складаються з великого числа частинок, неможливо знайти властивості таких складних систем аналітично. Моделювання обходить цю проблему при використанні чисельних методів. Це дозволяє з'єднати експериментальні дані з теорією.

Використання методів моделювання в сучасній науковій практиці відкриває нові можливості перед вченим. Методи моделювання дозволяють наочно уявити не тільки окремі частинки, але й цілі системи частинок, особливо це цікаво при моделюванні живих систем (мембрани клітини).

Будь-який процес з характеристичним часом $\tau > \tau_0 \sim 2$ *пс* може бути представлений за допомогою класичної теорії. Тому в методі молекулярно-динамічного моделювання атоми сприймають як кульки, які взаємодіють між собою за законами класичної механіки. Основною перевагою молекулярної динаміки є її здатність отримати "реальну" мікроскопічну динаміку, яка підпорядковується ландшафту вільної енергії системи і міжатомним взаємодій.

Метод класичної молекулярної динаміки являє собою збірна назва кількох чисельних методів розв'язання різних фізичних задач за допомогою моделювання (імітації) руху атомів, молекул, колоїдних і подібних частинок, складових досліджувану систему. Зазвичай припускають відомими закони взаємодії між частинками в рамках класичної механіки. Чисельно інтегруючи рівняння механіки, можна простежити за рухом частинок і, усереднення за часом і по всім часткам, спробувати вивести мікро- і макроскопічні характеристики системи, що вивчаються.

Рівняння руху вирішувалося чисельно з кроком по часу $\Delta t \approx 1$ фмтс. Статистичне усереднення проводилося по ансамблю з кількістю частинок $N = 4 \cdot 10^4$. Початкові умови задавалися таким чином, що частка містилася на початку координат і їй випадковим чином повідомлялася швидкість, має розподіл Максвела по температурі.

Потім проводилося термалізація системи протягом 10^4 тимчасових кроків. Після цього частка з придбаної швидкістю містилася в першу елементарну комірку.

Враховуючи всі результати моделювання руху дислокації переходимо до безрозмірних величин – часу t', відстані між частинками кристалу x' та температури T' [9]:

$$t' = t\frac{1}{a}\sqrt{\frac{U_0}{m}}; \qquad x' = \frac{x}{a}; \qquad T' = \frac{kT}{U_0} \tag{2.11}$$

Безрозмірний коефіцієнт тертя буде дорівнювати :

$$\gamma' = \frac{\gamma a}{\sqrt{mU_0}} \tag{2.12}$$

З знайденого чисельного рішення можна отримати рішення для частинок іншого сорту шляхом перетворень масштабування.

2.4. Рівняння руху

При виконанні розрахунків вирішуються рівняння Ньютона для системи частинок. Задавши початкові координати і швидкості для всіх частинок, чисельно знаходять значення нових швидкостей і координат через короткий проміжок часу. Таким чином, отримують траєкторію системи, тобто залежність координат і швидкостей всіх частинок від часу. Це дозволяє в рамках моделі МД описувати не тільки рівноважні стану, а й динамічні процеси і отримувати інформацію про кінетичних коефіцієнтах.

Часто для прискорення розрахунків обмежують ступеня свободи молекули, в залежності від мети розрахунків. Таким чином, можна в деяких моделях знехтувати зміною довжин зв'язків або валентних кутів, що дозволяє значно збільшити швидкість виконання розрахунків.

Проблемою для виконання моделювання є те, що моделювання, можливо, проводити для невеликих систем (в зв'язку з обмеженням по обчислювальної

потужності), що не порівняно з реальними системами за розмірами. Такі перешкоди обходять, задаючи граничні умови, тобто моделювання проводять для невеликої комірки, маючи на увазі, що вона оточена такими ж осередками. Наприклад, коли одна з частинок осередку залишає її межі, то в клітинку надходить інша частинка з протилежного боку.

Моделювання рівноважних систем проводять, обмежуючи параметри системи, скажімо NVE - фіксується число частинок, обсяг системи і її повна енергія, або NVT - фіксується число частинок, обсяг системи і температура, застосовується також NPT ансамбль.

МДМ передбачає чисельне рішення рівнянь руху Ньютона для системи з взаємодіючих атомів (часток). Рівняння руху наведені нижче:

$$\bar{v}_i(t) = \frac{d\bar{r}_i(t)}{dt}, \tag{2.13}$$

$$\bar{a}_i(t) = \frac{d\bar{v}_i(t)}{dt} = \frac{1}{m_i}\bar{F}_i(t)\,, \tag{2.14}$$

де $i = 1, 2, \dots, N$

$$\bar{F}_i(t) = -\frac{\partial V(\bar{r}_1\, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N)}{\partial \bar{r}_i} \tag{2.15}$$

Використовуючи часовий крок одночасно для всіх частинок рівняння руху вирішується чисельно.

Сукупність координат і швидкостей всіх частинок утворює траєкторію системи в фазовому просторі:

$$\Gamma = (\,\bar{r}_1\, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N, v_1\, v_2, \dots, \bar{v}_N) \tag{2.16}$$

Після ініціалізації система мимовільно приходить в стан термодинамічної рівноваги.

Усереднюванням мікроскопічних динамічних змінних вздовж фазової траєкторії отримують властивості системи (структурні, енергетичні, динамічні):

$$B^{exp} = \langle b \rangle_\tau = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau b[\bar{v}(t), \bar{r}(t)]dt \qquad (2.17)$$

Чисельне рішення системи рівнянь можна побудувати, якщо відомі координати і швидкості всіх частинок в початковий момент часу. Для цього достатньо написати розкладання координат і швидкостей в ряд Тейлора і використовувати рівняння (2.13) і (2.14):

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2} a_i(t)\Delta t^2 \qquad (2.18)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + a_i(t)\Delta t, \qquad (2.19)$$

$$a_i(t) = \frac{f_i(t)}{m}, \qquad (2.20)$$

Подібні формули можна використовувати, якщо все відкинуті члени ряду малі в порівнянні з залишеними.

Тобто, знаючи значення координат, швидкостей і прискорень частинок в момент часу t, ми спочатку знаходимо координати в момент часу $t + \Delta t$, використовуючи вираз (2.20), потім за допомогою виразу (2.19) розраховуємо прискорення в момент часу $t + \Delta t$ по знайденим вже координатам і, нарешті, за допомогою рівняння (2.18), ми знаходимо швидкості в момент часу $t + \Delta t$.

2.5. Визначення середніх динамічних величин системи

Метод молекулярної динаміки дозволяє знайти нам миттєві значення мікроскопічних величин системи, таких як координати і швидкості частинок. За допомогою мікроскопічних величин можна обчислити миттєві значення

макроскопічних величин системи, наприклад: енергії, повного імпульсу, моменту інерції.

Однак миттєві значення тільки іноді представляють собою практичний інтерес, оскільки в експериментах спостерігаються середні значення фізичних величин. У статистичній фізиці розрізняють два види середніх: середня по ансамблю і середнє за часом. Відповідно до ергодичної гіпотезою середнє за часом збігається із середнім по ансамблю.

Важливою характеристикою системи є температура. Вона може бути виражена через середню кінетичну енергію частинок системи за формулою:

$$\langle \sum_{i=1}^{N} \frac{m v_i^2}{2} \rangle = \frac{s}{2} k_b T, \tag{2.21}$$

де $-\langle ... \rangle$ позначає усереднення за часом або по ансамблю,

- s - число ступенів свободи системи.

У разі замкнутої системи $s = 3(N-1)$, а в разі систем з постійною температурою або тиском s = 3N.

У молекулярній динаміці ми вивчаємо еволюцію в часі однієї і тієї ж системи, тому для обчислення середніх значень фізичних величин скористаємося розподілених на часі.

Середнє фізичної величини φ за k-кроків моделювання будемо шукати так:

$$\langle \varphi \rangle_k = \frac{1}{k\Delta t} \int_0^{k\Delta t} \varphi(t) dt \approx \frac{1}{k} \sum_{j=0}^{k-1} \varphi(j\Delta t) = \frac{1}{k} \sum_{j=0}^{k-1} \varphi_j . \tag{2.22}$$

Необхідно задати координати і швидкості частинок в початковий момент часу. Будемо вважати, що в початковий момент часу частки розподілені по кубічної клітці рівномірно, і в центрі кожного кубики знаходиться частинка.

Швидкості частинок визначимо наступним чином. Нехай максимальне значення проекції швидкості частинок v_{max} в початковий момент часу. Визначимо спочатку проекції швидкостей всіх частинок випадковим чином на інтервалі $[-v_{max}, v_{max}]$. При цьому розподіл швидкостей в початковий момент часу буде рівномірним. Потім порахуємо повний імпульс системи за формулою:

$$p = \sum_{i=1}^{N} m v_i. \tag{2.23}$$

Оскільки сумарний імпульс системи в початковий момент часу повинен звертатися в 0, віднімемо з швидкості кожної частки в початковий момент часу p / N.

Отримані швидкості ми будемо використовувати в якості початкових значень величин швидкостей. Зауважимо, що в складних завданнях, коли, наприклад, система дуже повільно приходить в стан рівноваги, використовують "ступеневу" завдання початкових умов.

План розрахунків проводимо за такими принципами:

- ставлять початкові умови щодо довільно;
- запускають моделювання;
- вибирають момент, роблять знімок координат і швидкостей частинок системи.
- знімок беруть в якості початкових умов для наступного етапу моделювання.
- кроки виконуються кілька разів.

У задачах моделювання вкрай важливо попередньо провести процедуру обезрозмірення, тобто, переписати все рівняння, що описують еволюцію системи в безрозмірному вигляді. Крім того процедура обезрозмірення часто дозволяє виявити характерні масштаби в досліджуваних системах, визначити

межі застосування тих чи інших методів. Також це вкрай зручно з точки зору обчислень - годі й говорити замислюватися, з величиною якого порядку ми працюємо, що з чим порівнюємо, і хоч малий конкретний параметр або великий.

Обезрозмірювання переслідує дві мети:

1. Спростити рівняння, виключивши з них зайві константи і величини

2. Визначити фактичну кількість і набір параметрів, що визначають динаміку системи.

У нашій задачі розмірними величинами є параметри потенціалу: довжина σ і енергія E. Ще однією розмірної величиною є маса частинки m. Якщо всі величини, які мають розмірність довжини, поділити на σ, то ми отримаємо безрозмірні значення. З виразу для кінетичної енергії отримуємо:

$$\tau = \sigma\sqrt{\frac{m}{E}}, \tag{2.24}$$

З цього випливає, що безрозмірний час набуде вигляд $t^* = t/\tau$, а рівняння руху :

$$v_i^*(t) = \frac{dr_i^*(t)}{dt^*}, \tag{2.25}$$

$$a_i^*(t) = \frac{dv_i^*(t)}{dt^*}, \tag{2.26}$$

Після обезрозмірювання величин ці рівняння будемо використовувати для моделювання.

2.6 Чисельне рішення рівняння Ланжевена

При розгляді броунівського руху виваженої частки використовується метод Ланжевена, в якому рівняння Ланжевена має вигляд (1.3).

У рівнянні (1.3) - φ (t) - випадкова (стохастична) сила, що володіє рядом статистичних властивостей. У найпростішому випадку, а саме в разі, коли у вигляді випадкової сили береться білий гаус сов шум, повинні виконуватися наступні співвідношення:

$$\langle \varphi_\alpha(t) \rangle = 0 \tag{2.27}$$

$$\langle \varphi_\alpha(t_1)\varphi_\beta(t_2) \rangle = C\delta(t_1 - t_2)\delta_{\alpha\beta} \tag{2.28}$$

Тут кутовими дужками позначено усереднення по ансамблю реалізацій функції φ (t), індекси α і β нумерують проекції випадкової сили, $\delta(t_1 - t_2)$ дельта-функція Дірака, а $\delta_{\alpha\beta}$ символ Кронекера.

Функція $\langle \varphi_\alpha(t_1)\varphi_\beta(t_2) \rangle$ визначає ступінь статистичної незалежності величин $\varphi_\alpha(t_1)$ і $\varphi_\beta(t_2)$, і називається кореляційною функцією.

Кореляційна функція може бути представлена у вигляді:

$$\langle F_\alpha(t+\tau)F_\beta(t) \rangle = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t F_\alpha(t'+\tau)F_\beta(t')dt', \tag{2.29}$$

Повертаючись назад до співвідношень (2.22) і (2.23), бачимо, що вони описують ситуацію, коли дії випадкової сили в різні моменти часу статистично незалежні, а сама випадкова сила в середньому дорівнює нулю.

Чисельне рішення рівняння Ланжевена можна побудувати наступним чином. Введемо крок за часом Δt. У початковий момент часу покладемо t = 0. Також будемо вважати, що координати і проекції швидкості частки в початковий момент часу дорівнюють нулю.

Чисельна схема для знаходження координат і швидкостей броунівський частинки в задані моменти часу має вигляд:

$$r_{i+1} = r_i + v_i \Delta t, \tag{2.30}$$

$$v_{i+1} = v_i (1 - \frac{\Delta t}{mB}) \; + \; F_i \frac{\Delta t}{m}, \tag{2.31}$$

де - вектор F і є випадковою силу, діючу в момент часу t.

Ми будемо вважати, що кожна з компонент цієї сили є випадковою величину, розподілену по Гауса в діапазоні:

$$[-F_{max}, F_{max}].$$

Рекурентна схема (2.30) (2.31) дозволяє нам виконати один прохід моделювання і знайти координати і швидкості броунівський частинки для однієї реалізації випадкової сили. Однак, для вивчення статистичних параметрів руху броунівський частинки цього недостатньо, тому ми будемо повторювати обчислення за схемою (2.30) (2.31) багаторазово і накопичувати отримання результати.

РОЗДІЛ 3.

Отримані результати

Під дією постійної сили, в залежності від співвідношення між величинами F і F_{cr}, реалізуються різні режими руху частинок. Вони представлені на рис. 1а. Наведені результати корелюють з даними отриманими раніше іншими авторами [9]. На графіку по осі абсцис в логарифмічному масштабі знаходяться безрозмірні величини середньоквадратичних зміщень:

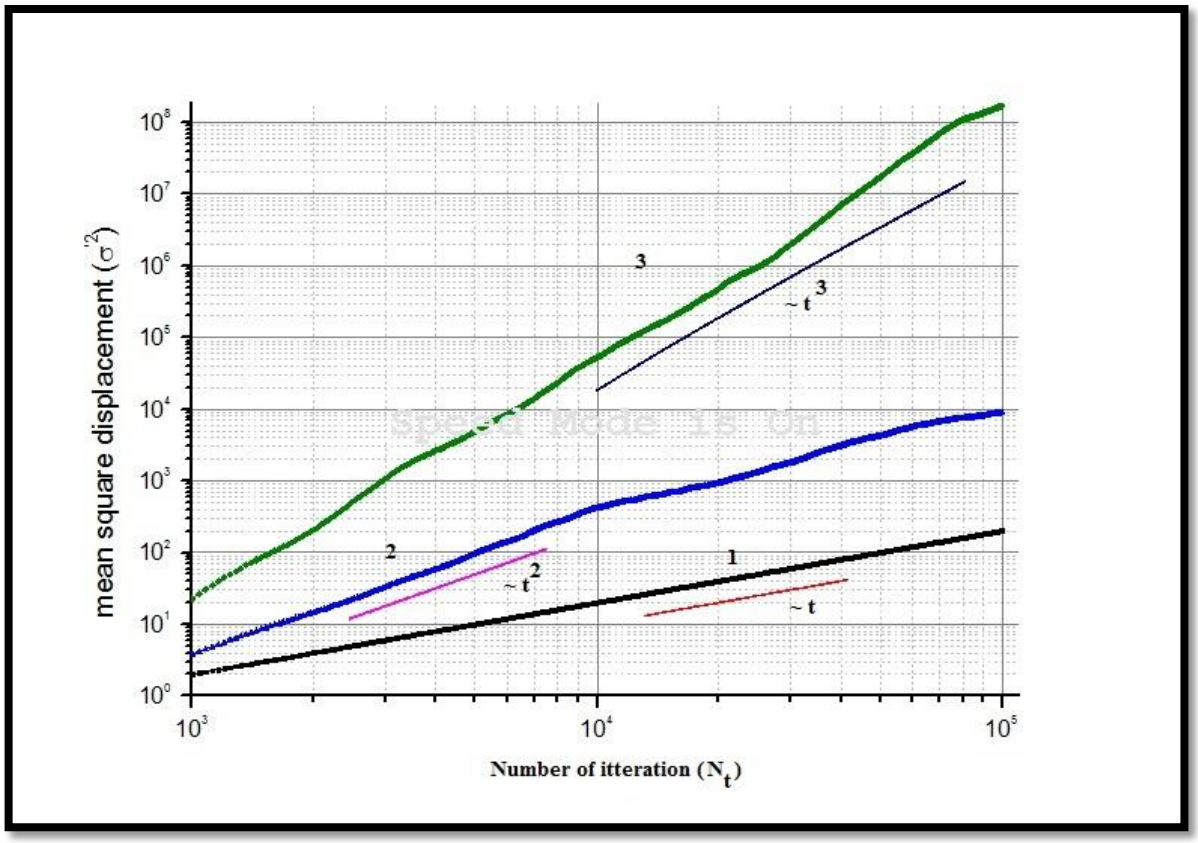


Рис 3.1. Залежність середньоквадратичного зміщення частинки від часу для різних величин постійно діючої сили F і постійної температури

T = 180 K:

1. F = 0, 2. F = 0.2F_{cr}, 3. F = 0.4F_{cr}.

Нами було проведено чисельне моделювання рівняння для різних значень коефіцієнтів тертя та температур.

Результатами досліджень комп'ютерного моделювання є три графіка, , які відповідають різним коефіцієнтам тертя та температурам.

На рис. 3.2 побудовано графік залежності середньої швидкості дислокацій в системах з малим тертям від сили зовнішнього поля, яке діє на кристалічну гратку.

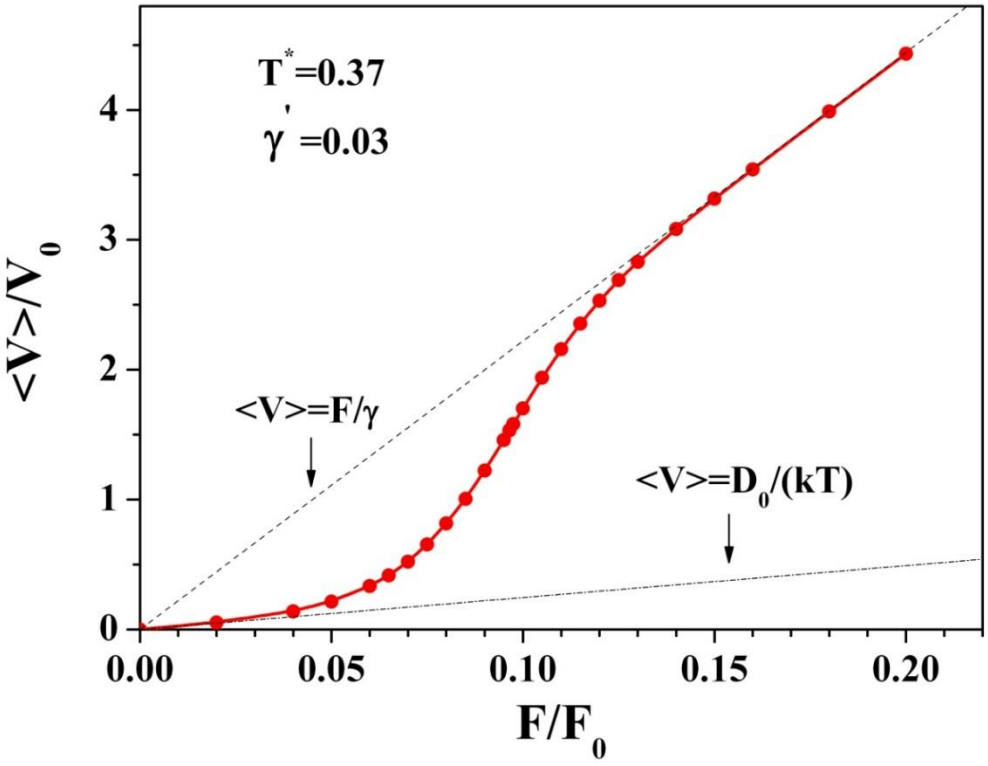


Рис.3.2 Графік залежності середньої швидкості від дії сили

Температура T= 0.37, коефіцієнт тертя $\gamma' = 0.03$

На рис. 3 визначено рухливість дислокацій μ в системах з великим тертям γ. Побудовано залежність рухливості дислокацій від діючої сили при різних температурах.

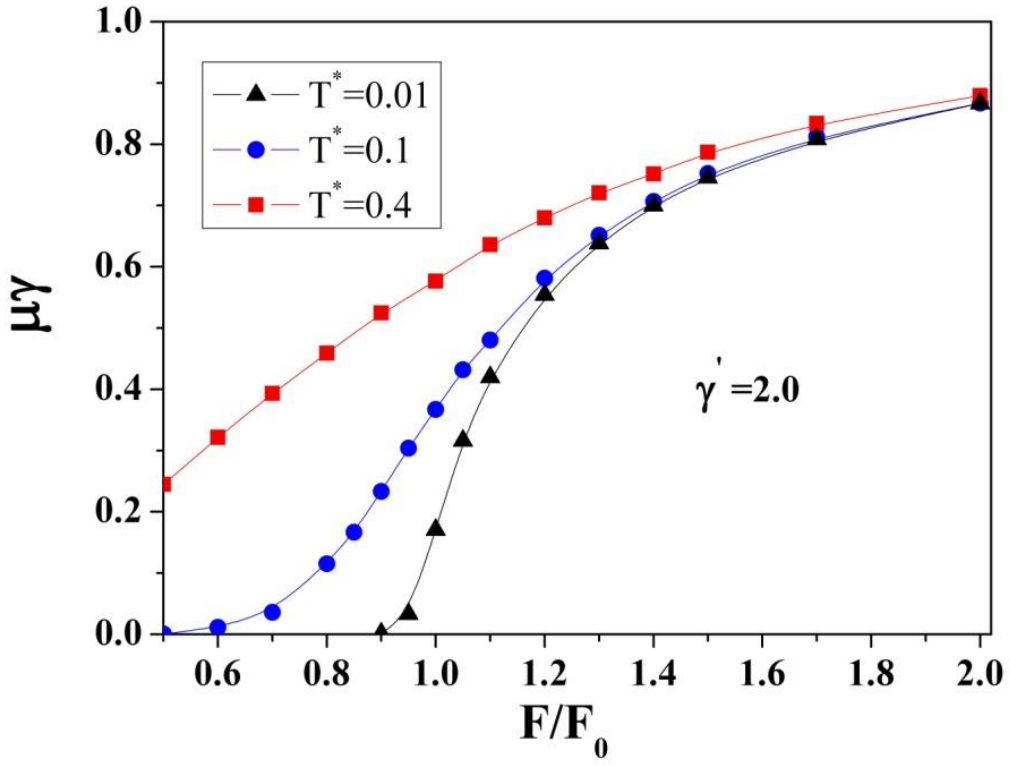


Рис 3.3. Графік залежності рухливості дислокацій з великим тертям при різних температурах

T_1= 0.01, T_2 = 0.1, T_3= 0.4

На рис. 3.4 визначено рухливість дислокацій μ в системах з малим тертям γ. Побудовано залежність рухливості дислокацій від діючої сили при різних температурах.

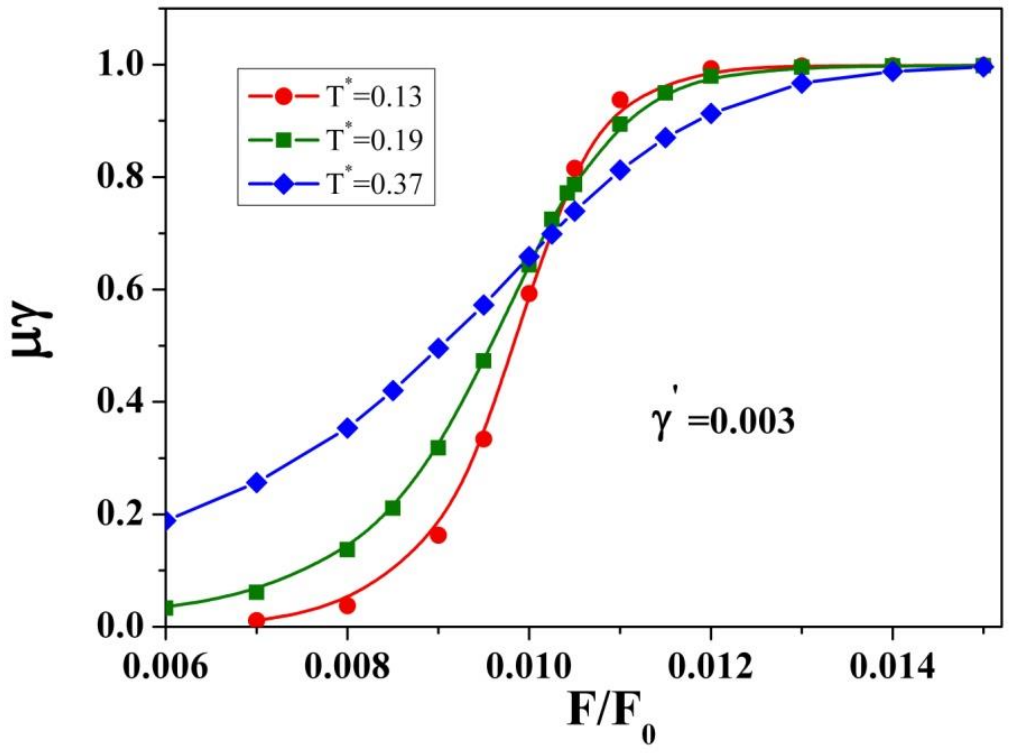


Рис 3.3. Графік залежності рухливості дислокацій з великим тертям при різних температурах

T_1= 0.13, T_2 = 0.19, T_3= 0.4

Висновок

Було проведено літературний аналіз робіт з внутрішнього тертя та моделі руху дислокацій у кристалах. Дослідили поведінку дислокації в кристалічній решітці під дією зовнішнього змінного періодичного поля, що має вигляд ступінчастої функції. З'ясували, що для дислокація, під час свого руху, втрачає енергію під дією зовнішнього поля, тому вона відрізняється від енергії в класичній теорії.

Зроблені розрахунки залежностей середньої швидкості дислокацій в системах з малим тертям від сили зовнішнього поля, отримані дані свідчать про те, що енергія залежить не від бар'єра, а від дисипативних властивостей системи. При низькій напрузі в багатьох матеріалах спостерігається необоротна деформація та при дії на кристал здійснюється ковзання дислокації.

Порівняли експериментальні дані з теоретичними оцінками та дійшли до висновку про дислокаційний механізм пластичності кристалічної гратки. Рух дислокацій здійснюється за допомогою ковзання та переповзання, тому існують кристалографичні площини в напрямку яких відбувається ковзання.

Побудували комп'ютерну модель процесів внутрішнього тертя у слабо дисипативних системах, за допомогою методів вирішення стохастичних дифереціальних рівнянь провели розрахунки залежності рухливості дислокацій від пружної напруги.

Описали залежність рухливості дислокацій μ в системах з великим і малим тертям γ. За допомогою, комп'ютерного моделювання визначили середню швидкість руху дислокацій в кристалічній решітці, та було побудовано графік залежності середньої швидкості дислокації з малим тертям від дії зовнішньої сили.

Підсумовуючи проведене дослідження, можна зазначити, що якщо система слабодисипативна , то рух дислокацій починається значно раніше , ніж дислокація подолає бар'єр Пайєрлса. Результати даної роботи можуть бути в подальшому використані для дослідження поведінки дислокації в кристалічній решітці.

Отримані дані мають істотне значення для прогнозування поведінки конструкційних матеріалів.

Список літератури

1. Основы теории дефектов, прочности и пластичности кристаллов: учебное пособие / Д.А. Мирзаев, К.Ю. Окишев. — Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. — 336 с.Хирт Дж. Теория дислоций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972.- 599с.
2. Старцев В.И. Пластичность и прочность металлови сплавов при низких температурах / Старцев В.И. Ильичев В.Я., Пустовалов В.В. – М: Металлургия, 1975. – 328с.
3. Постников В.С. Внутреннее трениее и структура металлов / В.С. Постников. – М. : Металлургия, 1969. 330с.
4. Eshelby J.D. Dislocation as a cause of mechanical damping in metals / J.D. Eshelby // Proc. Roy. Soc. – 1949. – Vol. A 197, № 1050. – P. 396 – 416.
5. Гранато А. Струнная модель дислокации и дислокационное поглощение ультразвука / А. Гранато, К. Люкке // Физическая акустика. – М.: Мир, 1969.
6. Coulomb, Charles Augustin. Recherches theoretiques et experimentales sur la force de torsion et sur l’elasticite des fils metals. Academie Royale des Sciences, Paris, 1784, P. 229–269.
7. Косевич А. М. Дислокации в теории упругости. Киев: Наукова думка, 1978. 219 с.
8. H. Risken, The Fokker-Planck Equation and Methods of Solution and Applications, Springer, 1989, 485с.
9. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Молекулярно-динамическое моделирование процессов нагрева и плавления металлов. II. Вычислительный эксперимент // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 32. 25 с.
10. Verlet L. Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. Phys. Rev., 1967, Vol. 159, pp. 98-103

11. Новиков, И.И. Кристаллография и дефекты кристаллической решётки: учеб- ник для вузов / И.И.Новиков, К.М.Розин. — М.: Металлургия, 1990. — 336 с
12. Утевский Л.М. Дифракционная электронная микроскопия в металловедении.–М.: Металлургия,1973.– 584с.
13. Окишев, К.Ю. Кристаллохимия и дефекты кристаллического строения: учебное пособие / К.Ю.Окишев. — Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. — 97 с.
14. «Фізика металів - 3. Дефекти в кристалах». Практикум з кредитного модулю. Для студентів напряму підготовки 6.050403 «Інженерне матеріалознавство», програми професійного спрямування «Фізичне матеріалознавство»./ Укладач Демченко Л.Д.- Київ, НТУУ"КПІ", 2015.- 78 с.
15. Косевич А. М. Дислокации в теории упругости. Киев: Наукова думка, 1978. 219 с.
16. Коттрелл А. Х. Дислокации и пластическое течение в кристаллах: Пер. с англ. М.: Металлургиздат, 1958. 267 с.
17. Фридель Ж. Дислокации: Пер. с англ. М,: Мир, 1967. 643 с.
18. Ермаков, С.С. Физика металлов и дефекты кристаллического строения: учебное пособие / С.С.Ермаков. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1989. — 272 с.
19. Орлов, А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах: учебное пособие для вузов / А.Н.Орлов. — М.: Металлургия, 1983. — 144 с.