

На правах рукописи

Королев Игорь Константинович

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ,  
МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ И ФРОНТОВ ХИМИЧЕСКИХ  
ПРЕВРАЩЕНИЙ В УПРУГИХ ТЕЛАХ**

Специальность 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2011

Работа выполнена в Учреждении Российской Академии наук Институте проблем машиноведения РАН.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук  
Фрейдин Александр Борисович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Кукушкин Сергей Арсеньевич  
кандидат физико-математических наук  
Семенов Борис Николаевич

Ведущая организация: Учреждение Российской Академии наук  
Институт механики сплошных сред  
Уральского отделения РАН

Защита состоится 15 декабря 2011 года в 16 часов на заседании диссертационного совета Д 002.075.01 при Учреждении Российской Академии наук Институте Проблем Машиноведения РАН по адресу: 199178, г. Санкт-Петербург, В.О. Большой пр., д.61

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ ИПМаш РАН

Автореферат разослан 15 ноября 2011 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор технических наук, профессор

В.В. Дубаренко

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы.

Межфазные границы и/или фронты химических превращений порождают в теле внутренние напряжения и поэтому могут существенно влиять на его деформационно-прочностные свойства. В свою очередь внутренние напряжения в сочетании с внешним воздействием могут приводить к изменению положения и формы межфазных границ и скорости фронтов химических превращений. Этим обосновывается актуальность темы диссертации.

В работе рассматриваются три модельные задачи, в которых важны взаимосвязи напряжений и положения межфазных границ или фронтов химических превращений. Первая задача – моделирование взаимного влияния трещины и включения, материал которого может претерпевать фазовые превращения мартенситного типа. Такими включениями, например, являются зерна диоксида циркония в трансформационно-упрочняющихся керамиках. При охлаждении керамики эти зерна остаются в метастабильном (высокотемпературном) состоянии. Напряжения в окрестности вершины трещины инициируют переход зерен в энергетически более выгодное мартенситное состояние. Фазовое превращение зерна сопровождается собственной деформацией превращения, что в свою очередь приводит к перераспределению напряжений и блокировке роста трещины. В целом актуальность этого исследования связана с разработкой композитных материалов, в которых происходит целенаправленное изменение свойств включений за счет структурных/фазовых превращений, в том числе композитных материалов с эффектами памяти формы.

Вторая рассматриваемая в работе задача – исследование взаимосвязи напряжений и кинетики фронта химической реакции. Актуальность этого исследования состоит в установлении взаимосвязей между механическим состоянием тела и скоростью протекающей в нем химической реакции. Задачи механохимии приобретают особое значение в связи с миниатюризацией элементов конструкций. Например, в MEMS (microelectronic mechanical systems) используются детали микронных размеров из поликристаллических кремниевых пленок. В областях концентраторов напряжений в таких деталях возникает и растет тонкий слой диоксида кремния. Затем в оксиде зарождается и растет усталостная трещина, впереди которой развивается фронт окисления. Главные события, определяющие разрушение детали происходят именно в оксиде, рост которого определяется механическими напряжениями. В свою очередь образование оксида сопровождается деформациями превращения, что влияет на напряжения. Другим примером является образование гидридов (соединений водорода с металлами) применительно к водородной энергетике, когда гидриды используются в качестве водород-аккумулирующих материалов. Как и в случае диоксида кремния из-за деформации превращения в системе

гидрид – металл могут возникать внутренние напряжения, влияющие на протекание химической реакции.

Третья задача – исследование напряжений и деформаций в системе «квантовая точка – подложка». Определение возникающих в квантовой точке деформаций, вызванных несовместностью кристаллических решеток квантовой точки и подложки, может быть использовано для оценки степени однородности материала квантовой точки.

**Цель работы** – разработка и реализация моделей для описания взаимосвязей напряжений, межфазных границ и фронтов химических превращений в деформируемых телах с использованием программных средств численного анализа и исследование этих взаимосвязей с помощью вычислительных экспериментов.

**Задачи работы.** В соответствии с целью исследования были поставлены следующие задачи:

- развитие теоретической модели для описания взаимодействия трещины и включения, претерпевающего фазовое превращение. Разработка методики определения текущего фазового состояния включения и ее конечно-элементная реализация. Исследование влияния фазового превращения во включении на траекторию распространения трещины;
- численная реализация модели распространения фронта химических реакций в упругом теле. Исследование влияния напряжений на кинетику фронта химической реакции;
- исследование напряженно-деформированного состояния системы «квантовая точка – подложка». Разработка методики оценки степени однородности материала квантовой точки на основе рассчитанных полей деформаций.

**Научную новизну** диссертации составляют следующие **результаты, выносимые на защиту:**

- 1) Разработана новая модель, позволяющая описать взаимное влияние трещины и включения, претерпевающего фазовое превращение. Разработан алгоритм определения текущего фазового состояния включения в поле трещины и проведена его конечно-элементная реализация. На основе вычислительного эксперимента установлено как изменение фазового состояния включения влияет на траекторию распространения трещины.
- 2) Проведена численная реализация модели, описывающей кинетику фронта химической реакции с учетом напряжений с точки зрения механики конфигурационных сил. Исследовано влияние напряжений на кинетику роста плоского слоя превращенного материала. Показано существование «запирающего» начального слоя превращенного материала, порождающего внутренние напряжения, блокирующие химическую реакцию. Исследована кинетика фронта химических реакций в пластине с выточкой. Объяснен экспериментальный факт увеличения скорости фронта реакции в области концентрации напряжений.

3) Исследованы напряжения и деформации в системе «квантовая точка – подложка». На основе найденного поля перемещений построен псевдомуар этой системы. Предложена новая методика оценки однородности материала квантовой точки на основе сравнения расчетного и экспериментально определенного расстояний между полосами псевдомуара.

4) Разработана и апробирована на примере усталостной трещины новая структура построения сетки конечных элементов, которая позволяет реализовать численное моделирование зарождения и развития трещин с сохранением информации о накопленных изменениях в структуре материала без перестройки сетки.

**Научная и практическая значимость** работы заключается в постановке и решении задач механики деформируемого тела, учитывающих взаимное влияние напряжений, межфазных границ и фронтов химических реакций и использовании результатов для описания конкретных явлений. Результаты исследования могут быть использованы при разработке новых материалов, в которых при деформировании и разрушении происходит целенаправленное перераспределение напряжений в результате фазовых превращений структурных элементов; в задачах механохимии; для оценки степени однородности материала квантовой точки.

**Обоснованность и достоверность** результатов подтверждается применением строгих математических методов и апробированных физических теорий; тестированием разработанных моделей и их численной реализации на модельных задачах; сравнением полученных результатов численного моделирования с экспериментальными данными.

**Апробация работы.** Основные результаты исследований, представленные в диссертационной работе, докладывались и обсуждались на конференциях: Всероссийская школа-конференция молодых ученых «Математическое моделирование в естественных науках», Пермь (2005); Международная молодежная научная конференция «Гагаринские чтения», Москва (2006); Международная конференция пользователей ANSYS, Москва (2008); Международная конференция RELMAS, Санкт-Петербург (2008), Международная конференция «Траектории трещин (Crack Paths)», Виченца, Италия (2009); Всероссийская конференция «Прикладные аспекты механики сплошной среды в кораблестроении», Санкт-Петербург (2010); Международная школа-конференция «Актуальные проблемы механики» (APM), Санкт-Петербург (2007, 2008, 2009, 2010).

Результаты работы обсуждались на семинарах в Институте проблем машиноведения РАН и в Санкт-Петербургском государственном политехническом университете.

Исследования автора на различных этапах работы поддерживались грантами РФФИ (07-01-00525-а, 10-01-00670-а), программой фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН №13 (рук. акад. РАН И.Г.Горячева), программой

фундаментальных исследований госакадемий РФ №23 ((рук. акад. РАН Н.Ф. Морозов), грантов Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации НШ-3776.2010.1 (рук. акад. Н.Ф.Морозов), Министерством образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0353), грантами Правительства Санкт-Петербурга (2008, 2009, 2010г.).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 17 научных работ, в том числе 4 в изданиях, входящих в перечень ВАК.

**Структура и объем работы.** Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованной литературы и одного приложения. Объем работы составляет 109 страниц, в том числе 59 рисунков, 2 таблицы. Список литературы содержит 107 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность исследований, дана общая характеристика работы, сформулированы цели, задачи и новизна работы, приводится обзор публикаций, связанных с темой диссертации, излагается краткое описание диссертации по главам.

**В первой главе** ставится и исследуется задача о взаимном влиянии трещины и включения, претерпевающего фазовое превращение мартенситного типа. В первой части главы рассматривается плоская деформация линейно-упругого тела  $V$  с прямолинейной трещиной и цилиндрическим включением диаметра  $D$  из материала, претерпевающего фазовое превращение мартенситного типа (рис. 1).

Плотность свободной энергии материала включения описывается двумя квадратичными зависимостями:

$$f(\varepsilon, \theta) = \min_{-,+} \{f^-(\varepsilon, \theta), f^+(\varepsilon, \theta)\}, \quad f^\pm(\varepsilon, \theta) = f_0^\pm(\theta) + \frac{1}{2}(\varepsilon - \varepsilon_\pm^p) : C_\pm : (\varepsilon - \varepsilon_\pm^p), \quad (1)$$

где тензоры  $C_\pm$  – тензоры модулей упругости фаз «+» и «-» соответственно,  $\theta$  – температура,  $f_0^\pm$  и  $\varepsilon_\pm^p$  имеют смысл плотностей свободной энергии и тензоров деформации фаз в ненапряженном состоянии. Полагаем, что  $\varepsilon_-^p = 0$ .

Предполагается, что включение находится в метастабильном состоянии, а фазовый переход определяется исходя из принципа энергетической предпочтительности. Условие переключения фазового состояния имеет вид:

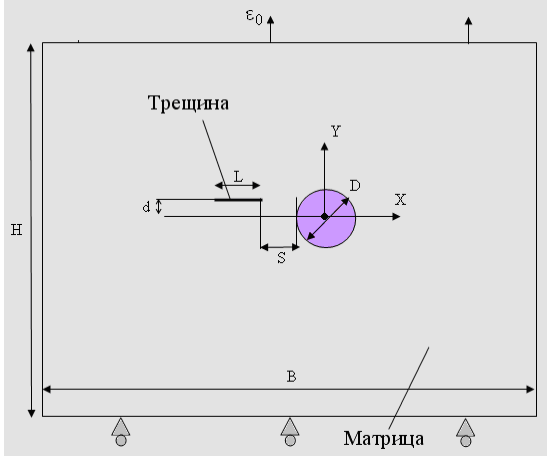


Рис. 1. Геометрическая модель

$$F \equiv \Pi_+ - \Pi_- = (\Pi_+ - \Pi_0) - (\Pi_- - \Pi_0) \leq -\delta \quad (2)$$

где  $\Pi_0$  – свободная энергия Гиббса тела без включения,  $\Pi_+$  – свободная энергия Гиббса тела с включением в фазе «+»,  $\Pi_-$  – свободная энергия Гиббса тела с включением в фазе «-»,  $\delta$  – энергетический барьер, характеризующий степень метастабильности исходного состояния включения.

Для рассматриваемого случая плоской деформации с включением в форме кругового цилиндра:

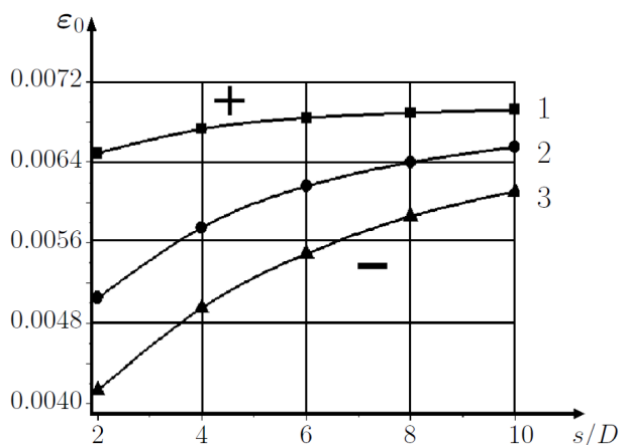
$$\begin{aligned} \Pi_- - \Pi_0 &= \frac{1}{2} \frac{\pi D^2}{4} \left[ \left( \tilde{k}_1^- - \mu_1^- \right) tr(\boldsymbol{\varepsilon}^-) tr(\boldsymbol{\varepsilon}^0) + 2\mu_1^- \boldsymbol{\varepsilon}^- : \boldsymbol{\varepsilon}^0 \right] \\ \Pi_+ - \Pi_0 &= \frac{1}{2} \frac{\pi D^2}{4} \left[ 2\gamma_*^+ + \frac{(\tilde{k}^+ \mathcal{G}^p)^2 - \tilde{k}_1^+ \tilde{k}^+ \mathcal{G}^p (tr(\boldsymbol{\varepsilon}^+) + tr(\boldsymbol{\varepsilon}^0))}{\tilde{k}_1^+} + \right. \\ &\left. + \left( \tilde{k}_1^+ - \mu_1^+ \right) tr(\boldsymbol{\varepsilon}^+) tr(\boldsymbol{\varepsilon}^0) + 2\mu_1^+ \boldsymbol{\varepsilon}^+ : \boldsymbol{\varepsilon}^0 \right], \gamma_*^+ = f_0^+ - f_0^- + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_+^p : (\mathbf{C}_+^{-1} - \mathbf{C}_-^{-1}) : \boldsymbol{\varepsilon}_+^p, \\ \mathbf{C}_+^{-1} &= \mathbf{C}_+ - \mathbf{C}_0, \mathbf{C}_-^{-1} = \mathbf{C}_- - \mathbf{C}_0, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\mathbf{C}_0$  – модуль упругости матрицы,  $\tilde{k}_1^\pm = k^\pm - k^0$ ,  $\mu_1^\pm = \mu^\pm - \mu^0$ .  $\tilde{k}_0, \mu_0, \tilde{k}^\pm, \mu^\pm$  – модули сдвига и плоского сжатия для соответствующих фаз. Достоинство формулы (3) состоит в том, что для определения фазового состояния включения необходимо вычислить деформации только внутри включения. Вычисление деформаций осуществлялось с помощью метода конечных элементов.

Алгоритм определения текущего фазового состояния состоит в следующем. Рассматриваются три отдельные задачи с одними и теми же силовыми факторами и граничными условиями: среда без включения, среда с включением до фазового перехода, среда с включением после фазового перехода. В результате решения каждой из указанных задач находятся поля деформаций. Далее по формуле (3), модифицированной для использования в численных процедурах, рассчитываются значения  $\Pi_+ - \Pi_0$  и  $\Pi_- - \Pi_0$ . Затем, используя формулу (2), определяется текущее фазовое состояние включения. При  $F \leq -\delta$  включение переходит из фазы «-» в фазу «+». Разработанный алгоритм был верифицирован на тестовой задаче о цилиндрическом включении в бесконечной среде под действием внешних напряжений, которая имеет аналитическое решение.

В данной задаче разность энергий  $\Pi_+ - \Pi_0$  и  $\Pi_- - \Pi_0$  зависит от величины  $\varepsilon_0$  и от геометрических параметров  $L, s, d$ , характеризующих длину трещины и

взаимное расположение трещины и включения. Построенные линии переключения фазового состояния при одноосном деформировании в координатах  $s/D$  и  $\varepsilon_0$  для разных длин трещин приведены на рис.2.



1 –  $L/D=2$ , 2 –  $L/D=6$ , 3 –  $L/D=10$

Рис. 2. Линии переключения фаз

Из данных, представленных на рисунке, следует, что как увеличение длины трещины, так и приближение трещины неизменной длины к включению способно инициировать фазовый переход во включении.

Во второй части главы исследуется траектория роста трещины с учетом фазового превращения во включении. Рассматривается пластина с включением и растущей трещиной, начальная геометрия показана на рис. 1. К верхней грани пластины приложена циклическая нагрузка с коэффициентом асимметрии цикла  $R=0$  (нагрузка – разгрузка). Принимается, что трещина растет в соответствии с уравнением Пэриса из вершины в направлении перпендикулярном действию максимальных растягивающих напряжений. Тогда с учетом того, что в рассматриваемой задаче оба коэффициента интенсивности напряжений  $K_I$  и  $K_{II}$  отличны от нуля, формула для определения угла поворота трещины имеет вид:

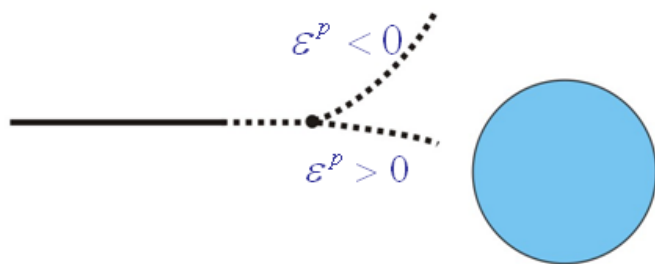
$$\theta_0 = \arcsin \frac{n}{\sqrt{9n^2 + 1}} - \arcsin \frac{3n}{\sqrt{9n^2 + 1}}, \quad \text{где } n = \frac{K_{II}}{K_I} \quad (4)$$

Предлагается следующий алгоритм моделирования распространения трещины: для фазы цикла «нагрузка» определяются поля напряжений и коэффициенты интенсивности напряжений  $K_I$  и  $K_{II}$ , и по формуле (4) рассчитывается угол поворота трещины  $\theta_0$ . Далее по формуле Пэриса рассчитывается приращение трещины за один цикл  $\delta L$ , затем в направлении угла  $\theta_0$  дается приращение  $\Delta L = \delta L \cdot \Delta N$ , где  $\Delta N$  – некоторое фиксированное число циклов. Далее процесс повторяется для новой геометрии трещины.

На рис. 3 схематически представлено изменение траектории распространения трещины в зависимости от знака собственной деформации фазового превращения включения.

Обнаружено, что при положительной собственной деформации фазового превращения материала включения траектория распространения трещины отклоняется в сторону центра включения, при отрицательной – в сторону от центра включения.

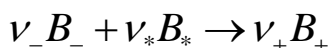




По мере увеличения внешнего поля обнаруженные эффекты пропадают, и, начиная с некоторого значения, фазовое превращение материала включения не оказывает существенного эффекта на траекторию распространения трещины.

Рис. 3. Изменение траектории распространения трещины из-за фазового перехода во включении

**Во второй главе** исследуется задача о влиянии напряжений на кинетику фронта химической реакции. Рассматриваются реакции следующего типа:



где  $B_-$ ,  $B_+$  и  $B_*$  химические формулы в уравнении реакции,  $\nu_-$ ,  $\nu_+$  и  $\nu_*$  – стехимические коэффициенты. Предполагаем, что  $B_-$  и  $B_+$  – твердые тела, а  $B_*$  – газ. Пример такой реакции – образование оксида кремния:  $\text{Si} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SiO}_2$  ( $\nu_- = \nu_* = \nu_+ = 1$ ).

Предполагается также, что:

- химическая реакция поддерживается диффузией газа сквозь твердую фазу,
- диффузия газа не создает дополнительных деформаций, а деформации не влияют на процесс диффузии,
- реакция локализуется на фронте химической реакции.

При сделанных предположениях выражение для производства энтропии вследствие движения фронта химической реакции имеет вид<sup>1</sup>:

$$P[S] = -\frac{\rho_0}{\nu_- M_-} \int_{\Gamma} A_N V_* d\Gamma, \quad V_* = \mathbf{v}^\Gamma \cdot \mathbf{N}, \quad A_N = \mathbf{N} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{N}$$

$$\mathbf{A} = \nu_+ M_+ \tilde{\mathbf{M}}_+ - \nu_- M_- \tilde{\mathbf{M}}_- - \nu_* M_* \tilde{\mathbf{M}}_*$$

где  $\mathbf{N}$  – нормаль к фронту химической реакции,  $\mathbf{v}^\Gamma$  – скорость фронта химической реакции,  $M_+$ ,  $M_-$ ,  $M_*$  – молярные массы компонентов реакции  $B_-$ ,  $B_+$  и  $B_*$ ,

$\tilde{\mathbf{M}}_+$ ,  $\tilde{\mathbf{M}}_-$ ,  $\tilde{\mathbf{M}}_*$  – тензоры энергии импульса Эшелби (тензор напряжений Эшелби), в которые входят величины напряжений. Величина  $A_N$  выступает в роли термодинамической силы, изменяющей конфигурацию тела. Такие обобщенные силы в современной механике деформируемых тел называют конфигурационными. По аналогии с классической термодинамикой свертка

<sup>1</sup> Freidin A.B. On chemical reaction fronts in non-linear elastic solids. Proceedings of XXXVI International Summer School-Conference APM2009. Eds: D. A. Indeitsev, A. M. Krivtsov. St.Petersburg. Institute for problems in mechanical Engineering. 2009. P.231-237.

тензора  $\mathbf{A}$  с нормальными может быть названа химическим сродством на площадке с нормалью  $\mathbf{N}$ .

В приближении малых деформаций выражение для  $A_N$  принимает вид <sup>2</sup>:

$$A_N = [f] - \boldsymbol{\sigma} \cdot [\boldsymbol{\varepsilon}] - hM_*\mu_*, \quad (5)$$

где  $M_*\mu_* = \eta(T) + RT \ln(c)$ ,  $f_{\pm} = f_{\pm}^0 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm}^{ch}) \cdot C_{\pm} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\pm}^{ch})$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\pm}^{ch} = 0$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\pm}^{ch} = \frac{g^p}{3} E$ ,  $c$  – концентрация газа,

Введем понятие равновесной концентрации газа  $c_{eq}$  на фронте химической реакции. Этой концентрации соответствует химическое равновесие, когда скорость прямой реакции равна скорости обратной, при этом скорость фронта реакции равна нулю. Равновесной концентрации соответствует условие:

$$A_N(c_{eq}) = 0 \quad (6)$$

Как следует из (5), величина равновесной концентрации зависит от напряжений и свойств материала. Напряжения в свою очередь зависят от положения фронта химической реакции. В рамках линейной термодинамики, рассматривая реакцию вблизи химического равновесия и учитывая, что  $A_N(c_{eq}) = 0$ , получим:

$$A_N = hRT(\ln c - \ln c_{eq}) \approx hRT \frac{c - c_{eq}}{c_{eq}} \quad (7)$$

Скорость фронта химической реакции зависит от термодинамической силы  $A_N$ :  $v_N^r = \Phi(A_N)$ . Аналогично выражению для скорости реакции в классической химии вблизи химического равновесия имеем:

$$v_N^r = -\kappa c_{eq} A_N, \quad \kappa > 0 \quad (8)$$

где  $\kappa$  – кинетический коэффициент химической реакции

Рассмотрим установившийся диффузионный процесс газовой компоненты реакции. Пространственное распределение концентрации  $c$  диффундирующей компоненты получим, решив уравнение диффузии

$$\Delta c = 0 \quad (9)$$

со следующими граничными условиями:

$c = c_0$  – на внешней границе ( $c_0$  – внешняя концентрация газа)

$D\nabla c + \kappa v_*(c - c_{eq}) = 0$  – на фронте химической реакции. Это условие получено из условия баланса массы в химической реакции.

Таким образом, постановка и алгоритм решения задачи о моделировании влияния напряжений на кинетику химической реакции включает следующие шаги:

- определение напряженно-деформированного состояния в теле, состоящей из материалов  $B_-$  и  $B_+$ , с учетом внешнего воздействия и внутренних

<sup>2</sup> E.N. Vilchevskaya, A.B. Freidin, Modeling mechanochemistry of the diffusion controlled chemical reaction front propagation in elastic solids // Proceedings of XXXVIII Summer School-Conference Advanced problems in mechanics. APM 2010. St. Petersburg (Repino) P. 741-749

напряжений, вызванных различием модулей упругости материалов  $B_-$  и  $B_+$  и наличием собственной деформации химических превращений у материала  $B_+$ ;

- вычисление  $A_N$  с учетом найденных напряжений на фронте химической реакции по формуле (5),

- определение  $c_{eq}$  в результате решения уравнения (6)

- определение концентрации газа  $B_*$  на фронте химической реакции в результате решения задачи диффузии (9);

- с помощью (7) и (8) нахождение скорости в каждой точке фронта химической реакции. Выбор фиксированного интервала времени  $t^*$  и построение нового фронта путем приращения положения каждой точки фронта на величину:  $\Delta l = v_n^r \cdot t^*$ .

Рассмотренная выше аналитическая модель учета влияния напряжений на кинетику фронта химической реакции была реализована в конечно-элементном пакете с помощью внутреннего языка программирования.

Исследована задача о движении плоского фронта химической реакции в пластине, находящейся под действием внешних напряжений (рис. 4).

Рассматривается рост слоя вдали от боковых краев пластины, чтобы избежать влияния краевых эффектов напряжений на кинетику фронта химической реакции. При нулевой внешней нагрузке и при заданной внешней концентрации  $c_0$  обнаружено, что внутренние напряжения могут блокировать развитие реакции, если толщина начального слоя оксида меньше критического «запирающего» значения. Блокировка реакции выражается в условии  $c_{eq} > c_0$ , где равновесная концентрация зависит от напряжений. При таком соотношении концентраций на границе тела и фронте реакции невозможен диффузионный процесс, питающий реакцию. Тонкий оксидный слой может играть защитную роль, что подтверждается экспериментально, а его повреждение ведет к дальнейшему развитию реакции окисления. На рис. 5 представлено влияние знака напряжений (отрицательное значение соответствует сжатию, положительное – растяжению) на величину «запирающего слоя».



Рис.4 – Пластина под действием внешних напряжений, начальный слой обозначен серым цветом

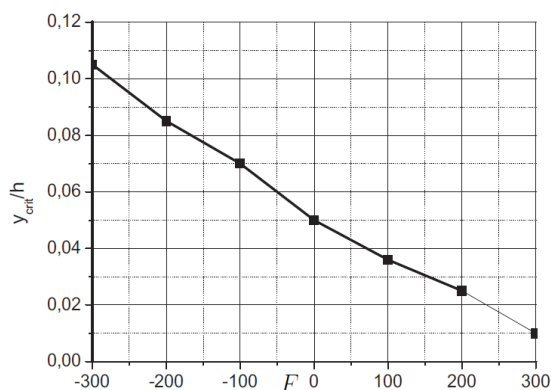


Рис.5 – Зависимость «запирающего» слоя от приложенной нагрузки

Из представленного графика следует, что толщина «запирающего» слоя уменьшается при растяжении и увеличивается при сжатии. Это означает, что при фиксированной начальной толщине слоя растяжение способно ускорить процесс химической реакции, а приложенное сжатие замедлить или даже вовсе заблокировать развитие реакции.

Следующая рассмотренная задача – процесс роста оксидного слоя в пластине с полукруглой выточкой под действием внешних сил. Радиус выточки много меньше линейных размеров пластины. Обнаружено сильное влияние концентрации напряжений вблизи выточки на развитие фронта химических реакций. Установлено, что концентрация напряжений способствует появлению новых областей развития фронта реакции, а также увеличению скорости реакции в области концентрации напряжений по сравнению с ненапряженным состоянием.

Один из рассмотренных примеров развития фронта химической реакции при действии растягивающих напряжений в горизонтальном направлении представлен на рис.6.

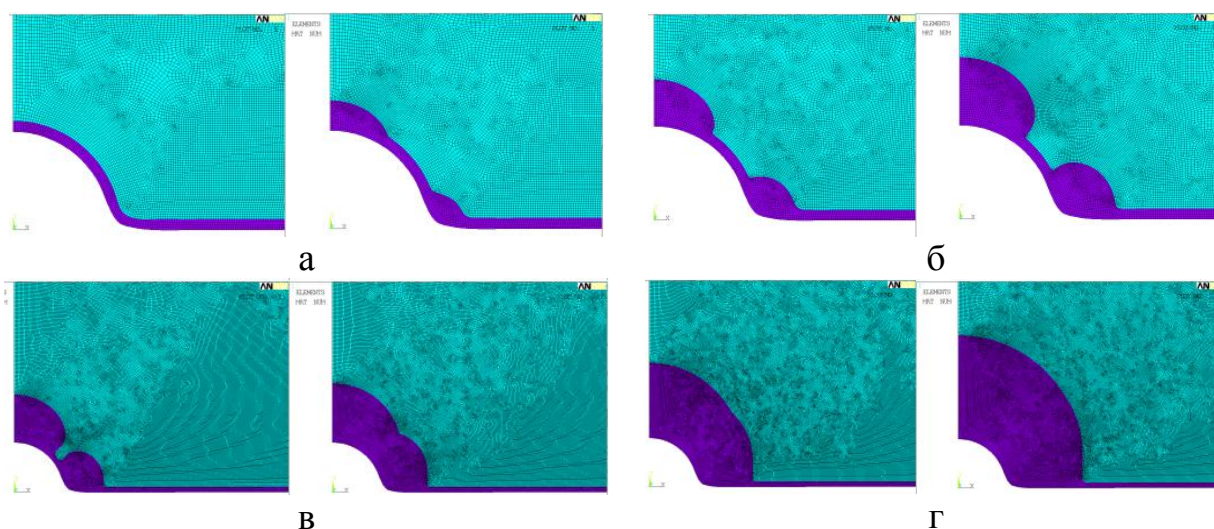


Рис. 6. Развитие фронта химической реакции при воздействии растягивающих напряжений вблизи выточки

Из данных, представленных на рис. 6, следует, что при выбранных величинах начального слоя и приложенного растягивающего напряжения фронт химической реакции блокируется по всей длине пластины, за исключением зон концентрации напряжений (у основания выточки и у вершины выточки).

В этих областях происходит увеличение оксидного слоя вплоть до объединения двух очагов в единый фронт, который дальше растет как единое целое.

**В третьей главе** рассматривается система «квантовая точка – подложка». Квантовая точка (КТ) моделируется осесимметричным островком, помещенным на подложку, размеры которой много больше высоты островка  $h$  и его максимального латерального диаметра  $2d$  (рис. 7). Характеристическое

отношение размеров островка определено величиной  $\delta = h/2d$ . Материалы КТ и подложки – соединения антимонида индия (InSb) и арсенида индия (InAs). Параметры кристаллических решеток материалов квантовой точки и подложки:  $a_{\text{InSb}}=0.6479\text{нм}$  и  $a_{\text{InAs}}=0.60593\text{нм}$ . Несоответствие решеток моделируется с помощью собственной деформации островка. Компоненты собственной деформации островка в декартовой  $(x, y, z)$  и цилиндрической  $(r, \phi, z)$  системах координат (рис. 7) заданы соотношением:

$$\varepsilon_{xx}^* = \varepsilon_{yy}^* = \varepsilon_{rr}^* = \varepsilon_{\phi\phi}^* = \varepsilon^* = \frac{a_{\text{QD}} - a_{\text{Sub}}}{a_{\text{Sub}}}, \varepsilon_{zz}^* = \varepsilon^* = \frac{a_{\text{QD}} - a_{\text{Sub}}}{a_{\text{Sub}}}, \varepsilon_{r\phi}^* = \varepsilon_{rz}^* = \varepsilon_{\phi z}^* = 0,$$

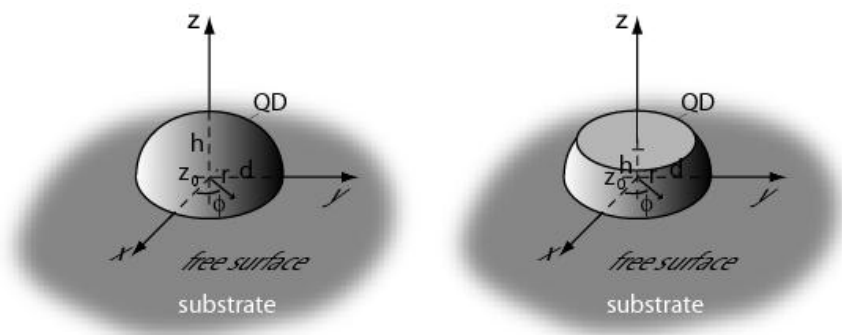


Рис. 7. Система «InSb – квантовая точки / InAs – подложка» для разных форм островка

С помощью метода конечных элементов получено распределение радиальных перемещений для КТ в форме сегмента сфероида с радиусом:  $r=21$  (все линейные величины в расчетах выражены в произвольных единицах). Остальные размеры КТ:  $h=7$ ,  $2d=31.3$ ,  $\delta=0.22$ . Получено, что внутри КТ радиальная компонента перемещений квазилинейна вдоль координаты  $r$ . Поэтому возможно следующее представление радиальной компоненты перемещений внутри КТ:  $u_r(r, z) \approx \varepsilon^* \alpha(A, z)r$ , где параметр  $A$  зависит от упругих модулей КТ и подложки. Выражение для  $\alpha(A, z)$  может быть найдено при помощи стандартных программ интерполяции (например, “Wolfram Mathematica”) и численно рассчитанных значений радиальных перемещений. Необходимость получения аналитической формулы для радиальных перемещений вызвана тем, что эта формула будет использоваться для моделирования электронно-микроскопического (ЭМ)-изображения квантовой точки

Проведено исследование влияния формы квантовой точки на распределение радиальной компоненты перемещений. Были рассмотрены квантовые точки трех наиболее типичных форм: сферического сегмента, полуэллипсоида и усеченного сферического сегмента при одинаковых характеристических отношениях  $\delta=0.22$ . Установлено, что зависимости  $u_r(r)|_{z=const}$  линейны на значительных участках внутри КТ и одинаковы для всех рассматриваемых форм островков. Таким образом, расчеты показывают, что изменение формы островка не влияет на перемещения в подложке.

Исследовано влияние параметра  $\delta = h/2d$  на распределение радиальных перемещений. Для квантовых точек в виде усеченного сферического сегмента с характеристическими отношениями  $\delta = 0.13$ ,  $\delta = 0.22$  и  $\delta = 0.33$  были вычислены компоненты перемещений  $u_r(r, z)$ . Обнаружено, что общий вид распределения линий  $u_r(r, z) = \text{const}$  в подложке и квантовой точке не зависит от  $\delta$ , по крайней мере, в диапазоне изученных  $\delta$ . Радиальные перемещения в квантовой точке увеличиваются с ростом  $\delta$ , причем для точек с  $\delta = 0.22$  и  $\delta = 0.33$  характер распределения перемещений по высоте не меняется. Обнаружено, что начиная с характеристических отношений  $\delta > \delta_{\text{crit}}$ , радиальные перемещения верхних слоев квантовых точек можно аппроксимировать функцией  $u_r(r)|_{z \geq 2d} = \left( \frac{a_{\text{InSb}} - a_{\text{InAs}}}{a_{\text{InAs}}} \right) r \approx 0.07r$ . Это означает, что, рассчитав распределение полей перемещений для КТ сферической формы с характерным соотношением  $\delta > \delta_{\text{crit}}$ , можно построить распределение радиальных перемещений для КТ практически произвольной высоты и формы: эллиптической, усеченных фигур и т.д. Такое распределение полей можно считать эталонным для данного материала квантовой точки.

На рис. 8 представлено электронно-микроскопическое (ЭМ) изображение (псевдомуар) системы «квантовая точка – подложка», полученное с помощью динамической теории контраста и найденной с помощью программ интерполяции зависимости  $u_r(r, z) \approx \varepsilon^* \alpha(A, z)r$ .

Расстояние между полосами псевдомуара  $\Delta$  зависит от характеристического отношения  $\delta$ . На рис. 9 представлена рассчитанная зависимость расстояния между полосами псевдомуара в центральной части усеченного островка от характеристического отношения  $\delta$  для системы InSb/InAs.

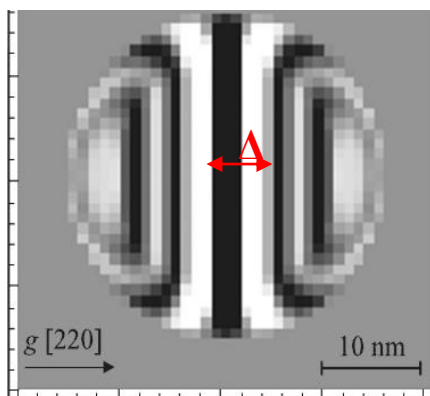


Рис. 8 – светлопольное ЭМ-изображение InSb-островка в форме усеченного сегмента,

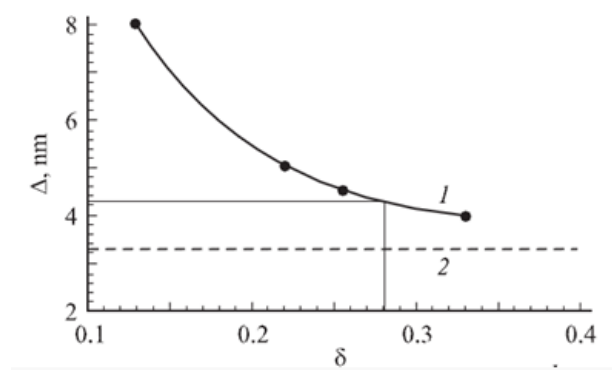


Рис. 9 – зависимость периода псевдомуара от параметра  $\delta$

Для системы «квантовая точка (InSb) – подложка (InAs)» в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе была экспериментально получена

картина псевдомуара с  $\Delta=4.3$  нм. Согласно ЭМ-просвечиванию поперечного среза рассматриваемой системы характеристическое отношение  $\delta_{\text{exp}} \approx 0.3$ .

На полученной в данной работе расчетной зависимости, приведенной на рис. 9, экспериментально найденному значению  $\Delta=4.3$  нм соответствует значение  $\delta=0.28$ , что хорошо согласуется с экспериментом.

Таким образом, полученная зависимость  $\Delta(\delta)$  позволяет определять характеристическое отношение островка путем простого измерения величины  $\Delta$ , следовательно, и высоту островка при известном латеральном размере. При известных же геометрических параметрах КТ эта зависимость позволит определить степень однородности материала квантовой точки по отклонению экспериментально измеренного значения  $\Delta$  от теоретического значения для соответствующей точки на рис. 9.

**В приложении** развивается новый подход к построению сетки конечных элементов, которая может быть использована при численном моделировании развития областей новой фазы в теле с учетом необходимости сохранять информацию о последовательном изменении свойств элементов структуры материала, избегая необходимость перестроения сетки. В данном случае термин «новая фаза» можно трактовать в широком смысле, а именно – наличие в теле объектов, различающихся по упругим и/или иным характеристикам.

Тестирование предложенной новой сетки конечных элементов было проведено на задаче моделирования распространении усталостной трещины. Развитие усталостной трещины связано с информацией о предыстории накопления повреждений, поэтому перестроение сетки как стандартный прием при моделировании роста трещины ведет к серьезным сложностям, так как он приводит к стиранию информации о деградации структуры и необходимости ее искусственной перезаписи для новой сетки. Поэтому целесообразно проводить исследование на фиксированной сетке конечных элементов, которая с одной стороны, благодаря моделированию всего процесса развития усталостной трещины на одной сетке позволяет естественным образом сохранять информацию об уровне поврежденности, предшествующим разрушению элемента, а с другой стороны минимизирует влияние топологии сетки на траекторию усталостной трещины.

Основные требования, предъявляемые к конечно-элементным сеткам, для минимизации влияния топологии сетки на траекторию распространения дефекта:

1. Обеспечение возможности свободного поворота траектории распространения дефекта согласно локальным полям напряжений.
2. Изотропность сетки.

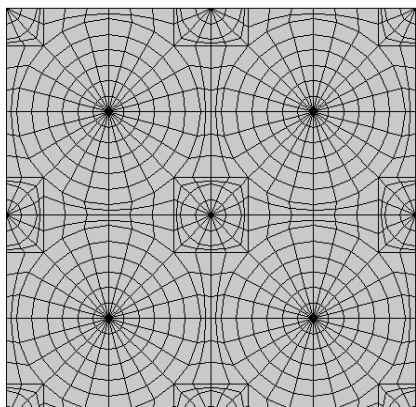


Рис. 10

На рис. 10 представлен вариант конечно-элементной сетки, который отвечает указанным принципам. Предложена двухуровневая топология сетки. Первый уровень состоит из больших «блоков-кругов», в центре которых расположены треугольные элементы, позволяющие траектории распространения дефекта поворачивать согласно локальным полям напряжений.

Второй уровень состоит из малых «блоков-кругов», в центре которых также расположены треугольные элементы. Назначение второго уровня состоит в том, чтобы у дефекта была возможность поворачивать, даже если он распространяется по границе больших «блоков-кругов». Сетка была успешно апробирована для определения траектории развития усталостной трещины в материале с деградирующими свойствами.

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы:

- 1) Разработана новая модель, позволяющая описать взаимное влияние трещины и включения, претерпевающего фазовое превращение. Разработан алгоритм определения текущего фазового состояния включения в поле трещины и проведена его конечно-элементная реализация. На основе вычислительного эксперимента установлено как изменение фазового состояния включения влияет на траекторию распространения трещины.
- 2) Проведена численная реализация модели кинетики фронта химической реакции в упругом теле. Исследовано влияние напряжений на кинетику роста плоского слоя превращенного материала. Показано существование «запирающего» начального слоя превращенного материала, порождающего внутренние напряжения, блокирующие химическую реакцию. Исследована кинетика фронта химических реакций в пластине с выточкой. Объяснен экспериментальный факт увеличения скорости фронта реакции в области концентрации напряжений.
- 3) Исследованы напряжения и деформации в системе «квантовая точка – подложка». На основе найденного поля перемещений построен псевдомуар этой системы. Найденная ширина полос псевдомуара верифицирована экспериментальными данными для системы InSb – InAs. Предложена новая методика оценки однородности материала квантовой точки на основе сравнения расчетного и экспериментально определенного расстояний между полосами псевдомуара.
- 4) Разработана и апробирована на примере усталостной трещины новая структура построения сетки конечных элементов, которая позволяет



реализовать численное моделирование зарождения и развития трещин с сохранением информации о накопленных изменениях в структуре материала без перестройки сетки.

#### ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Е.Н. Вильчевская, И.К. Королев, А.Б.Фрейдin. О фазовых превращениях в области неоднородности материала. Ч.2. Взаимодействие трещины с включением, претерпевающим фазовое превращение // Известия РАН. Механика твердого тела. 2011. № 5, стр. 32-42. (из перечня ВАК)
2. Н.А. Берт, А.Л. Колесникова, И.К. Королев, А.Е. Романов, А.Б. Фрейдin, В.В. Чалдышев, Е.С. Aifantis. Упругие поля и физические свойства поверхностных квантовых точек // Физика твердого тела, 2011, т.53, вып.10, стр.1986-1996. (из перечня ВАК)
3. I.K. Korolev, S.V. Petinov, A.B. Freidin. FEM simulation of damage accumulation and fatigue crack growth in elastic materials. // Proceedings of XXXVI International Summer School-Conference APM 2010, P.56.
4. N. A. Bert, A. B. Freidin, A. L. Kolesnikova, I. K. Korolev and A. E. Romanov. On strain state and pseudo-moiré TEM contrast of InSb quantum dots coherently grown on InAs surface // Phys. Status Solidi A, 1–4 (2010) / DOI 10.1002 / pssa.201026247. (из перечня ВАК)
5. И.К. Королев, С.В. Петинoв, А.Б. Фрейдin. Конечно-элементное моделирование накопления повреждений и развития усталостной трещины в материале со стохастическим распределением сопротивления элементов микроструктуры. // Труды ЦНИИ им. академика А.Н.Крылова, 2010, №53, с.59-66.
6. I.K. Korolev, S.V. Petinov, A.B. Freidin. FEM simulation of fatigue damage, crack nucleation and growth in a pre-damaged material. // Proceedings of XXXVI International Summer School-Conference APM 2009, P.372-379
7. И.К. Королев, С.В. Петинoв, А.Б. Фрейдin. Численное моделирование накопления повреждений и развития усталостной трещины в упругих материалах. // Вычислительная механика сплошных сред, Пермь, 2009, т.2, №3, с.34-43. (из перечня ВАК)
8. I. Korolev, S. Petinov, A. Freidin. FEM simulation of fatigue damage, crack nucleation and growth in a pre-damaged material. // Advances in materials science. Eds: N.Kuznezov, O.N.Shubin, 2009, VI-12-VI-16.
9. I. Korolev, S. Petinov, A. Freidin. FEM simulation of fatigue crack nuclearion and growth in a pre-damaged material // International Conference on Crack Paths (CP 2009). Procedings, Padua, 2009, 1089-1096.

10. Igor K. Korolev, Sergei V. Petinov, Alexander B. Freidin. Finite element meshing in modeling of the initial crack growth from defect in a plate under cyclic loading. // Proceedings of the XXXVI Summer School APM2008. P.374-380.
11. A. Freidin, I. Korolev, E. Vilchevskaya. "Modeling an Interaction between a Phase Transforming Inclusion and a Crack". // Proc. 17th European Conference on Fracture Multilevel Approach to Fracture of Materials, Components and Structures. 2-5 September 2008. Brno. Czech Republic, P.2089-2096.
12. I.K. Korolev, S.V. Petinov, A.B. Freidin. FEM simulation of fatigue damage in a polycrystalline silicon structures. RELMAS'2008. (Assesment of reliability of materials and structures: problems and solutions). // International Conference. St.Petersburg, Russia, June 17-20, 2008. Vol. 1. St.Petersburg, Polytechnical Publishing House. 2008. P. 177-181.
13. И.К.Королев. Особенности конечно-элементного моделирования развития начальных дефектов в материалах под действием циклической нагрузки. // Тезисы докладов 6 международной конференции пользователей ANSYS, Москва, 28-30 октября 2008.
14. Korolev I., Petinov S., Freidin A. FEM simulation of damage evolution including distribution of fatigue strength // Proc. of the XXXV Summer School Advanced Problems in Mechanics. (2007), p.67.
15. Korolev I., Freidin A., Vilchevskaya E. Modeling of interaction between a phase transforming inclusion and a fatigue crack // Proc. of the XXXIV Summer School Advanced Problems in Mechanics. (2006), p.154-160.
16. Королев И.К. Конечно-элементное моделирование взаимодействия включения, претерпевающего фазовое превращение, с трещиной. // Тезисы XXXIII Международной молодежной «Гагаринские чтения», Москва, 2006, стр.28-29.
17. Королев И.К., Боровков А.И., Фрейдin А.Б. Конечно-элементное моделирование взаимодействия трещины и включения. претерпевающего фазовое превращение. // Материалы XIV Всероссийской конференции молодых ученых и студентов: Математическое моделирование в естественных науках, Пермь, 2005, стр.35-36.