

ПОЛЕ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ И СМЕЩЕНИЙ В СИСТЕМЕ «КЛИНОВИДНЫЙ НАНОДВОЙНИК – ЦЕПОЧКА ПОЛНЫХ ДИСЛОКАЦИЙ»

О. М. ОСТРИКОВ

*Учреждение образования «Гомельский государственный
технический университет имени П. О. Сухого»,
Республика Беларусь*

В чистом виде двойникование протекает лишь при специальных условиях деформирования [1]. В подавляющем же большинстве случаев развитие двойников сопровождается интенсивным скольжением [2]. Причем скольжение как предшествует зарождению двойников, так и сопутствует процессу двойникования, а также развивается после завершения двойникования, приводя к релаксации напряжений у сформировавшихся границ раздела. Поэтому в физико-механическом анализе важное значение приобретает знание напряженно-деформированного состояния в системе «двойник – группа полных дислокаций».

Остаточный нанодвойник может рассматриваться как зафиксированная начальная стадия развития двойников [2], которая относится к малоизученным стадиям двойникования [4]. Представляет интерес моделирование условий, при которых реализуется зарождение двойника вблизи скоплений полных дислокаций. В анизотропной среде эти скопления не всегда хаотичны. Влияние упорядоченности структуры деформируемого материала приводит к образованию упорядоченных скоплений полных дислокаций в виде дислокационных стенок или цепочек [5].

Целью данной работы является расчет в приближении однородной изотропной среды полей смещений и деформаций в системе «клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций».

На рис. 1 схематически представлен клиновидный нанодвойник длиной L и шириной у устья H , находящийся вблизи цепочки полных дислокаций. Для упрощения задачи исключим из рассмотрения напряженно-деформированное состояние у устья двойника, обусловленное концентратором напряжений (у которого, как правило, зарождаются механические двойники), дислокациями двойника, либо границей зерна, в котором формируется механический двойник. Если обозначить через d и h проекции на оси OX и OY соответственно отрезку, соединяющего две соседние двойникующие дислокации на двойниковой границе (рис. 1), то, зная поля смещений, создаваемые единичной дислокацией, для поля смещений у рассматриваемого нанодвойника с N двойникующими дислокациями на каждой из границ в общем виде можно записать соотношение:

$$u_i^{tw}(x, y) = \sum_{n=0}^N u_i^{(1)}(x + nd - L, y - nh) + \sum_{n=1}^N u_i^{(2)}(x + nd - L, y + nh), \quad (1)$$

где в формулах для случая единичной дислокации, при переходе к суммированию общего вклада двойникующих дислокаций на двойниковых границах выполнены замены $x \rightarrow x + nd - L$ и $y \rightarrow y - nh$ для первой границы, поле смещений которой в (1) описывается первым слагаемым, и $x \rightarrow x + nd - L$, $y \rightarrow y + nh$ – для второй границы, поле смещений которой в (1) задается вторым слагаемым. В (1) i принимает значения x , y или z .

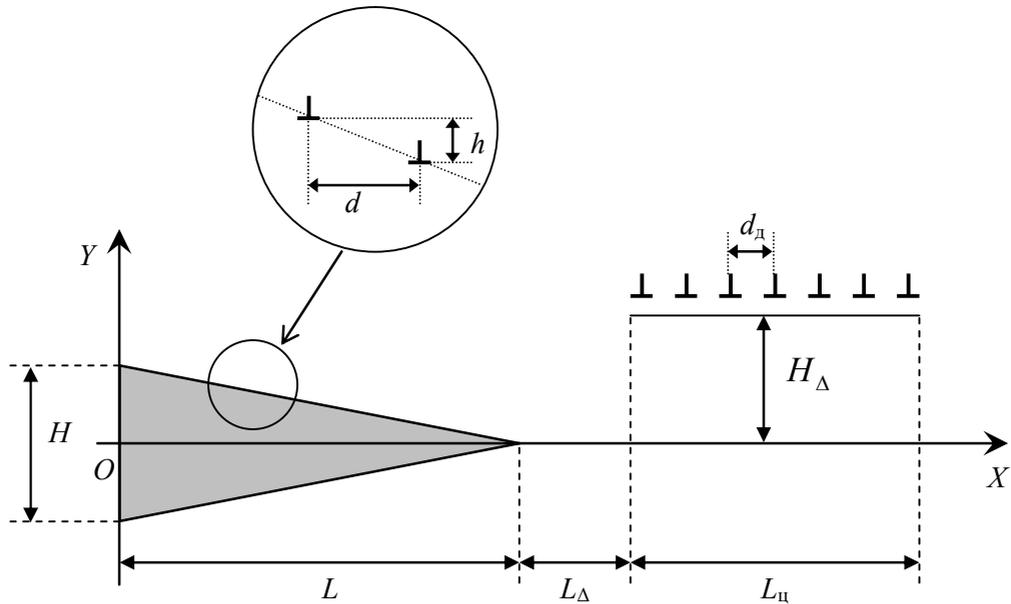


Рис. 1. Схематическое изображение системы «клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций». Цепочка параллельна направлению развития двойника

Распределение полей смещений, созданных цепочкой полных краевых дислокаций с модулем вектора Бюргера $b_{кр}$, будем находить с помощью соотношений:

$$\begin{aligned}
 u_x^{||}(x, y) &= \frac{b_{кр}}{2\pi} \sum_{n=0}^{N_{ц}} \left(\operatorname{arctg} \frac{y - H_{\Delta}}{x - (L + L_{\Delta} + nd_{ц})} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x - (L + L_{\Delta} + nd_{ц}))(y - H_{\Delta})}{2(1 - \nu) \left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{ц}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right)} \right), \\
 u_y^{||}(x, y) &= -\frac{b_{кр}}{2\pi} \sum_{n=0}^{N_{ц}} \left(\frac{1 - 2\nu}{2\pi} \ln \left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{ц}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x - (L + L_{\Delta} + nd_{ц}))^2 - (y - H_{\Delta})^2}{4(1 - \nu) \left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{ц}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right)} \right), \quad (2)
 \end{aligned}$$

где $L_{ц}$ – длина цепочки дислокаций; $d_{ц}$ – расстояние между дислокациями в этом скоплении; L_{Δ} и H_{Δ} – проекции на оси OX и OY соответственно расстоянию от вершины двойника до цепочки полных дислокаций.

Для цепочки винтовых дислокаций с модулем вектора Бюргера $b_{в}$ получим:

$$u_z^{||}(x, y) = \frac{b_{в}}{2\pi} \sum_{n=0}^{N_{ц}} \left(\operatorname{arctg} \frac{y - H_{\Delta}}{x - (L + L_{\Delta} + nd_{ц})} \right). \quad (3)$$

В соотношениях (2) и (3) полагается $\vec{b}_{кр} \parallel \vec{b}_{кр}^{tw}$ и $\vec{b}_в \parallel \vec{b}_в^{tw}$, где $\vec{b}_{кр}^{tw}$ и $\vec{b}_в^{tw}$ – краевая и винтовая составляющие вектора Бюргерса частичной двойнивающей дислокации Шокли.

Очевидно, что длина цепочки полных дислокаций зависит от количества $N_{ц}$ полных дислокаций и расстояния между ними $d_{ц}$ и связана с ними соотношением

$$L_{ц} = (N_{ц} - 1)d_{ц}. \quad (4)$$

В случае неподвижных источников внутренних напряжений [6] справедливо соотношение

$$u_i(x, y) = u_i^{tw}(x, y) + u_i^{шл}(x, y). \quad (5)$$

Методика расчета полей напряжений у нанодвойника подробно рассмотрена в [4]. В общем виде формулу для расчета полей напряжений у нанодвойника можно представить в виде:

$$\sigma_{ij}^{tw}(x, y) = \sum_{n=0}^N \sigma_{ij}^{(1)}(x + nd - L, y - nh) + \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^{(2)}(x + nd - L, y + nh), \quad (6)$$

где первое слагаемое задает напряжения, создаваемые первой границей двойника, а второе – второй. В (6) и далее j принимает значения x, y или z .

Зная поля напряжений и используя соотношения, связывающие компоненты тензора деформаций с компонентами тензора напряжений [5], [6]:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{1}{E} [\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})] \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{1}{E} [\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})] \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{1}{E} [\sigma_{zz} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})] \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2\mu} \sigma_{xy} \\ \varepsilon_{xz} &= \frac{1}{2\mu} \sigma_{xz} \\ \varepsilon_{yz} &= \frac{1}{2\mu} \sigma_{yz} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

получим формулу для расчета полей деформаций, созданных клиновидным нанодвойником, устье которого находится в начале декартовой системы координат (рис. 1). Расчетная формула в общем случае имеет вид:

$$\varepsilon_{ij}^{tw}(x, y) = \sum_{n=0}^N \varepsilon_{ij}^{(1)}(x + nd - L, y - nh) + \sum_{n=1}^N \varepsilon_{ij}^{(2)}(x + nd - L, y + nh). \quad (8)$$

Тогда для цепочки полных дислокаций получим:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{xx}^{\text{пл}}(x, y) &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi E(1-\nu)} \times \\
 &\times \sum_{n=0}^{N_{\text{ц}}} \frac{(y-H_{\Delta}) \left((2\nu^2 - \nu - 3)(x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 + (2\nu^2 - \nu - 1)(y - H_{\Delta})^2 \right)}{\left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right)^2}, \\
 \varepsilon_{yy}^{\text{пл}}(x, y) &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi E(1-\nu)} \times \\
 &\times \sum_{n=0}^{N_{\text{ц}}} \frac{(y-H_{\Delta}) \left((2\nu^2 + 3\nu + 1)(x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 + (2\nu^2 + \nu - 1)(y - H_{\Delta})^2 \right)}{\left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right)^2}, \\
 \varepsilon_{zz}^{\text{пл}}(x, y) &= 0, \\
 \varepsilon_{xy}^{\text{пл}}(x, y) &= \frac{b_{\text{кр}}}{4\pi(1-\nu)} \times \\
 &\times \sum_{n=0}^{N_{\text{ц}}} \frac{(x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}})) \left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 - (y - H_{\Delta})^2 \right)}{\left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right)^2}, \\
 \varepsilon_{xz}^{\text{пл}}(x, y) &= -\frac{b_{\text{в}}}{4\pi} \sum_{n=0}^{N_{\text{ц}}} \frac{y - H_{\Delta}}{\left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right)^2}, \\
 \varepsilon_{yz}^{\text{пл}}(x, y) &= \frac{b_{\text{в}}}{4\pi} \sum_{n=0}^{N_{\text{ц}}} \frac{x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}})}{\left((x - (L + L_{\Delta} + nd_{\text{ц}}))^2 + (y - H_{\Delta})^2 \right)^2}. \tag{9}
 \end{aligned}$$

Результирующие деформации находятся по формуле

$$\varepsilon_{ij}(x, y) = \varepsilon_{ij}^{\text{нв}}(x, y) + \varepsilon_{ij}^{\text{пл}}(x, y). \tag{10}$$

Результаты расчетов полей смещений и деформаций в случае, когда цепочка полных дислокаций параллельна направлению развития двойника, приведены на рис. 2 и 3. Принималось: $\nu = 0,33$; $\mu = 81$ ГПа; $E = 200$ ГПа; $d = 2,5$ нм; $h = 0,25$ нм; $N = 10$; $b_{\text{кр}}^{\text{нв}} = b_{\text{в}}^{\text{нв}} = 0,1$ нм; $b_{\text{кр}} = b_{\text{в}} = 0,5$ нм; $N_{\text{ц}} = 5$; $d_{\text{ц}} = 5$ нм; $L_{\Delta} = 10$ нм; $H_{\Delta} = 20$ нм. Очевидно, что $L = Nd$. Следует также отметить, что при $d_{\text{ц}} = a$, где a – межатомное расстояние, цепочка полных дислокаций может рассматриваться, как дислокационная трещина [5].

Из рис. 2 видно, что поля смещений искажаются нанодвойником, не приводя к их локализации на границах. В случае смещений $u_x(x, y)$ и $u_z(x, y)$ цепочка дислокаций приводит к периодическим изменениям конфигурации линий равных значений смещений (рис. 2, а, в). Эти изменения носят дальнедействующий характер и выходят далеко за рамки системы «нанодвойник – цепочка дислокаций». Конфигурация полей смещений $u_y(x, y)$ существенно отличается от конфигурации смещений $u_x(x, y)$ и

$$u_z(x, y).$$

При этом наблюдается локализация смещений у цепочки дислокаций (рис. 2, б).

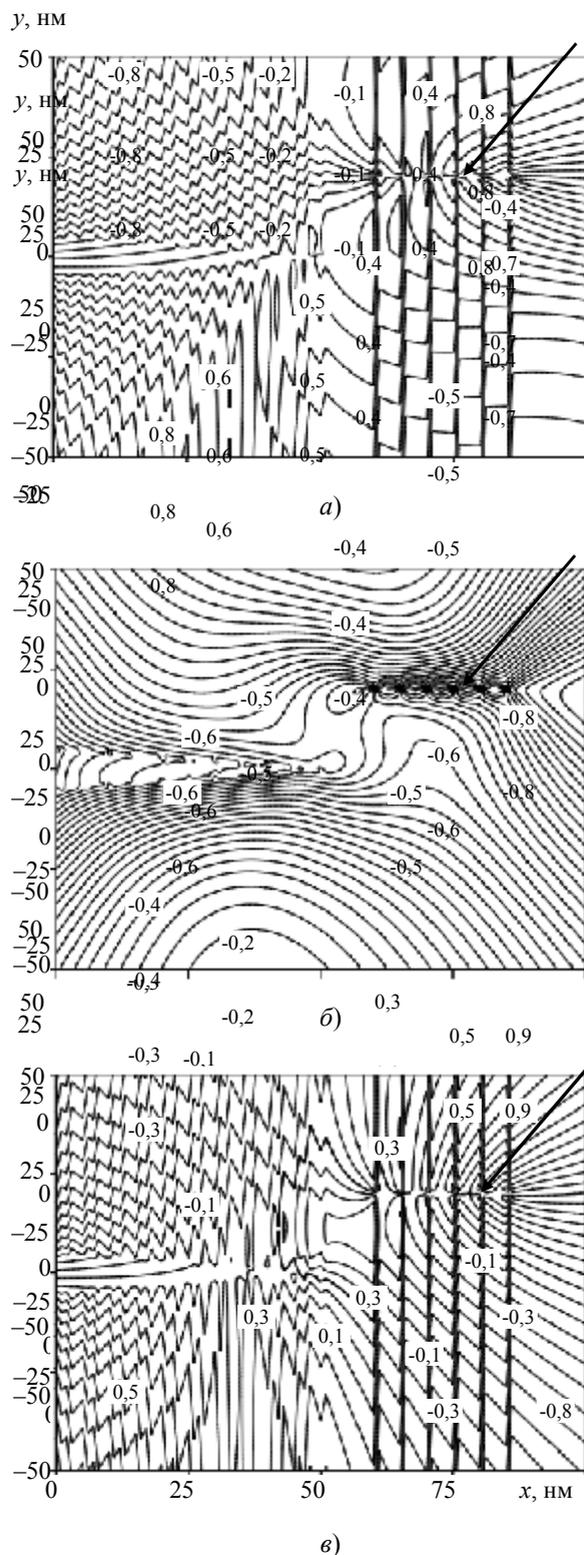


Рис. 2. Результаты расчета полей смещений в системе «клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций»: а – $u_x(x, y)$ (цепочка краевых дислокаций); б – $u_y(x, y)$ (цепочка краевых дислокаций); в – $u_z(x, y)$ (цепочка винтовых дислокаций). Вектор Бюргера цепочки дислокаций направлен в одну сторону с направлением

соответствующей составляющей вектора Бюргера частичных двойникующих дислокаций; цепочка дислокаций указана стрелкой и параллельна направлению развития двойника

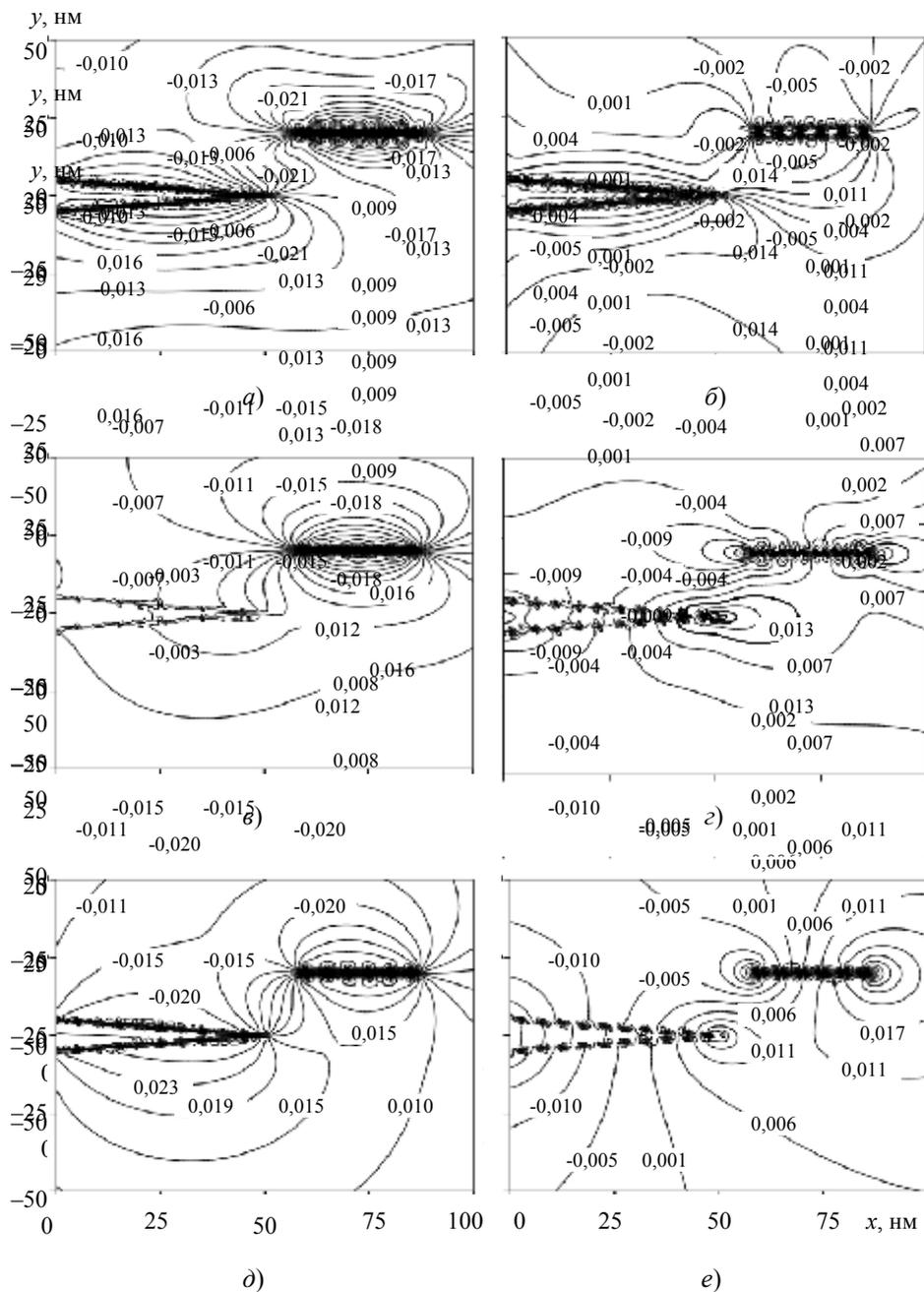


Рис. 3. Поле деформаций в системе «некогерентный нанодвойник – цепочка полных дислокаций»: а – $\varepsilon_{xx}(x, y)$; б – $\varepsilon_{yy}(x, y)$; в – $\varepsilon_{zz}(x, y)$; г – $\varepsilon_{xy}(x, y)$; д – $\varepsilon_{xz}(x, y)$; е – $\varepsilon_{yz}(x, y)$. Вектор Бюргера цепочки дислокаций направлен в одну сторону с направлением соответствующей составляющей вектора Бюргера частичных двойникующих дислокаций; цепочка дислокаций параллельна направлению развития двойника

Как видно из рис. 3, полям деформаций свойственна локализация, как вдоль границ нанодвойника, так и у цепочки дислокаций. Наибольшие значения величина деформаций принимает у цепочки дислокаций. Это связано с тем, что величина

вектора Бюргера полных дислокаций цепочки выше величины мощности частичных двойникующих дислокаций, а количество дислокаций в цепочке и на границе нанодвойника в рассматриваемом примере мало отличается.

Ситуация, представленная на рис. 1, типична для случая, когда цепочка дислокаций существовала в кристалле еще до зарождения двойника. Если же двойникование первично, а скольжение – вторично, то чаще цепочка дислокаций зарождается на границе двойника или у его вершины. В первом случае $L_{\Delta} < 0$, а во втором – $L_{\Delta} = 0$. Причем в первом случае, как правило, $H_{\Delta} \neq 0$, а во втором – $H_{\Delta} \rightarrow 0$. Возможна ситуация, когда цепочка дислокаций находится внутри двойника. В этом случае $L_{\Delta} < L$, а $L_{\Delta} < 0$. Нахождение цепочки дислокаций у границы двойника или у его вершины приведет к увеличению в этой области величины деформаций.

Однако в этих областях возможно и уменьшение значения некоторых компонент тензора деформаций, если направление вектора Бюргера полных дислокаций цепочки будет противоположным направлению соответствующей компоненты частичной двойникующей дислокации.

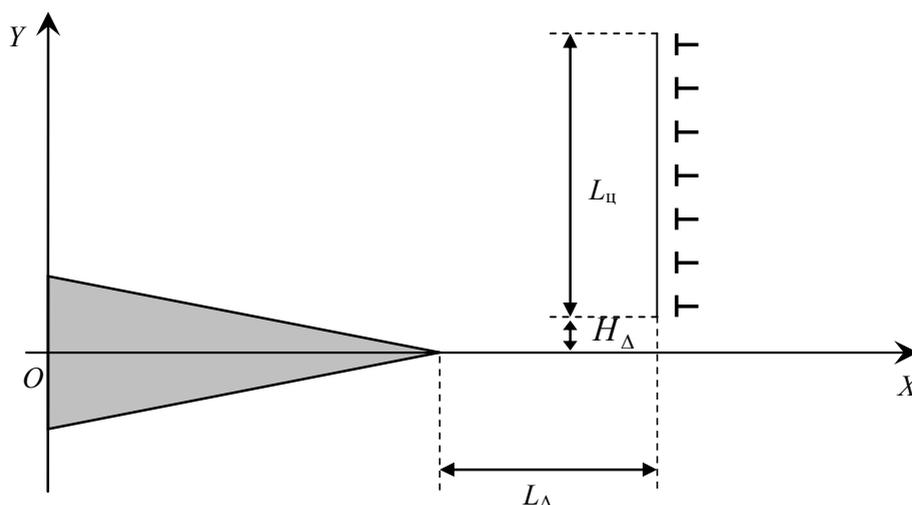


Рис. 4. Схематическое изображение системы «клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций». Цепочка перпендикулярна направлению развития двойника

Если цепочка дислокаций перпендикулярна направлению развития двойника (рис. 4), то поля смещений и деформаций могут быть найдены по формулам

$$u_i(x, y) = u_i^{fw}(x, y) + u_i^{n\perp}(x, y); \tag{11}$$

$$\varepsilon_{ij}(x, y) = \varepsilon_{ij}^{fw}(x, y) + \varepsilon_{ij}^{n\perp}(x, y). \tag{12}$$

Здесь

$$u_x^{n\perp}(x, y) = \frac{b_{кр}}{2\pi} \sum_{n=0}^{N_{\Delta}} \left(\arctg \frac{x - (L + L_{\Delta})}{y - (H_{\Delta} + nd_{\Delta})} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& \left. + \frac{(y - (H_{\Delta} + nd_u))(x - (L + L_{\Delta}))}{2(1 - \nu) \left((y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)} \right\} \\
u_y^{\perp}(x, y) = & -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \sum_{n=0}^{N_u} \left(\frac{1 - 2\nu}{2\pi} \ln \left((y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2 \right) + \right. \\
& \left. + \frac{(y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 - (x - (L + L_{\Delta}))^2}{4(1 - \nu) \left((y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)} \right) \\
u_z^{\perp}(x, y) = & \frac{b_B}{2\pi} \sum_{n=0}^{N_u} \left(\operatorname{arctg} \frac{x - (L + L_{\Delta})}{y - (H_{\Delta} + nd_u)} \right); \tag{13} \\
\varepsilon_{xx}^{\perp}(x, y) = & \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi E(1 - \nu)} \times \\
& \times \sum_{n=0}^{N_u} \frac{(x - (L + L_{\Delta})) \left((2\nu^2 - \nu - 3)(y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (2\nu^2 - \nu - 1)(x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)}{\left((y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)^2}, \\
\varepsilon_{yy}^{\perp}(x, y) = & \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi E(1 - \nu)} \times \\
& \times \sum_{n=0}^{N_u} \frac{(x - (L + L_{\Delta})) \left((2\nu^2 + 3\nu + 1)(y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (2\nu^2 + \nu - 1)(x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)}{\left((y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)^2}, \\
\varepsilon_{zz}^{\perp}(x, y) = & 0, \\
\varepsilon_{xy}^{\perp}(x, y) = & \frac{b_{\text{кр}}}{4\pi(1 - \nu)} \times \\
& \times \sum_{n=0}^{N_u} \frac{(y - (H_{\Delta} + nd_u)) \left((y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 - (x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)}{\left((y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2 \right)^2}, \\
\varepsilon_{xz}^{\perp}(x, y) = & -\frac{b_B}{4\pi} \sum_{n=0}^{N_u} \frac{x - (L + L_{\Delta})}{(y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2}, \\
\varepsilon_{yz}^{\perp}(x, y) = & \frac{b_B}{4\pi} \sum_{n=0}^{N_u} \frac{y - (H_{\Delta} + nd_u)}{(y - (H_{\Delta} + nd_u))^2 + (x - (L + L_{\Delta}))^2}. \tag{14}
\end{aligned}$$

Результаты расчетов представлены на рис. 5 и 6. Данные для расчета брались такие же, как и в предыдущем случае, за исключением $H_{\Delta} = 10$ нм.

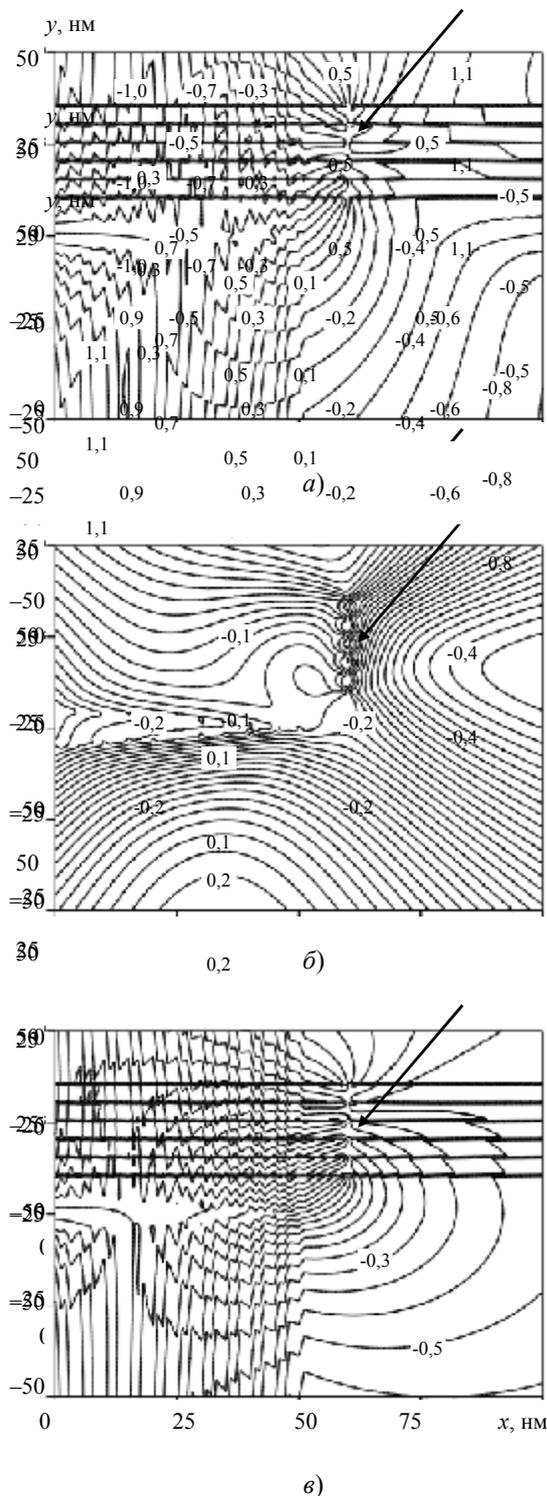


Рис. 5. Поле смещений в системе «клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций»: а – $u_x(x, y)$ (цепочка краевых дислокаций); б – $u_y(x, y)$ (цепочка краевых дислокаций); в – $u_z(x, y)$ (цепочка винтовых дислокаций). Вектор Бюргера цепочки краевых дислокаций перпендикулярен соответствующей составляющей вектора Бюргера частичных двойниующих дислокаций и направлен в сторону развития двойника; вектор Бюргера цепочки полных винтовых дислокаций направлен в одну сторону с направлением соответствующей составляющей вектора Бюргера

частичных двойниующих дислокаций; цепочка дислокаций перпендикулярна направлению развития двойника

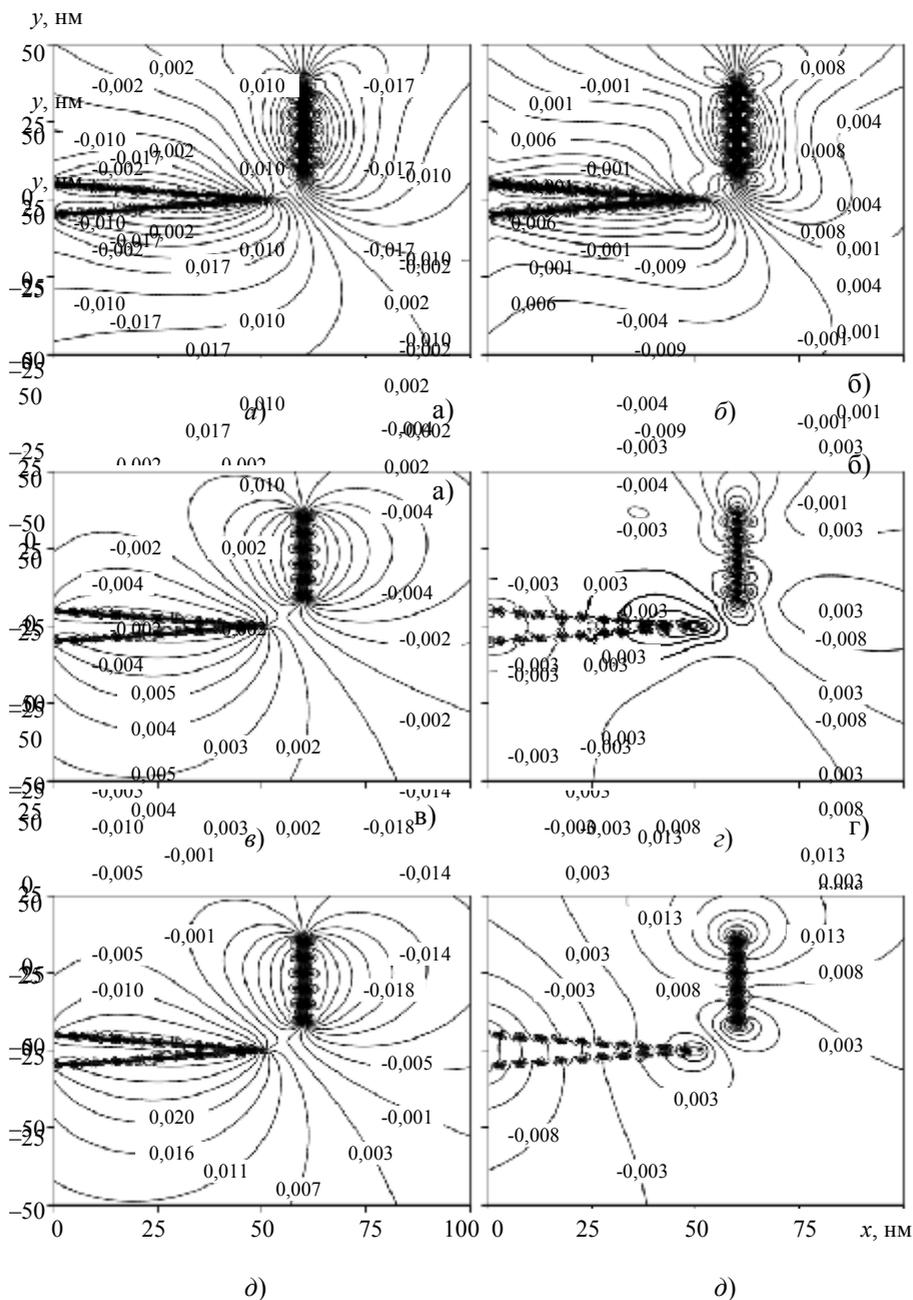


Рис. 6. Поле смещений в системе «клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций»: а – $\varepsilon_{xx}(x, y)$; б – $\varepsilon_{yy}(x, y)$; в – $\varepsilon_{zz}(x, y)$; г – $\varepsilon_{xy}(x, y)$; д – $\varepsilon_{xz}(x, y)$; е – $\varepsilon_{yz}(x, y)$. Вектор Бюргера цепочки краевых дислокаций перпендикулярен соответствующей составляющей вектора Бюргера частичных двойниующих дислокаций и направлен в сторону развития двойника; вектор Бюргера цепочки полных винтовых дислокаций направлен в одну сторону с направлением соответствующей составляющей вектора Бюргера частичных двойниующих дислокаций; цепочка дислокаций перпендикулярна направлению развития двойника

Как видно из рис. 5, а, в поворот цепочки полных дислокаций на угол 90° в случае смещений $u_x(x, y)$ и $u_z(x, y)$ приводит к переориентировке периодических изменений конфигурации линий равных значений смещений на угол, равный углу

поворота цепочки дислокаций. Смещения $u_y(x, y)$, как и в предыдущем случае, локализованы у цепочки дислокаций и отражают наличие ее поворота (рис. 5, б) по сравнению с предыдущим случаем.

Поворот цепочки полных дислокаций, удаленной от нанодвойника на расстояние $H_{\Delta} = 10$ нм и $L_{\Delta} = 10$ нм, к существенному изменению конфигурации и величины деформаций у границ двойника и внутри него по сравнению с предыдущим случаем ориентировки цепочки дислокаций не приводит. Такие изменения существенны, когда цепочка дислокаций касается границы двойника, или его вершины.

Таким образом, с использованием дислокационного подхода разработан метод расчета полей смещений и деформаций в системе «клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций». Установлено, что цепочка полных дислокаций является концентратором больших напряжений, чем границы нанодвойника. Это связано

с тем, что количество дислокаций на двойниковых границах имеет такой же, или меньший, порядок, что и у цепочки дислокаций, а мощность вектора Бюргерса частичной двойнивающей дислокаций меньше, чем у вектора Бюргерса полной дислокации.

Литература

1. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – М. : АН СССР, 1960. – 262 с.
2. Лаврентьев, Ф. Ф. Взаимодействие дислокаций в цинке, висмуте и сурьме при двойниковании / Ф. Ф. Лаврентьев // Физика металлов и металловедение. – 1964. – Т. 18, № 3. – С. 428–436.
3. Остриков, О. М. Нанодвойникование монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Изв. вузов. Сер. Черная металлургия. – 2002. – № 3. – С. 51–52.
4. Остриков, О. М. Механика двойникования твердых тел : монография / О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2008. – 301 с.
5. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М. : Атомиздат, 1972. – 600 с.
6. Старовойтов, Э. И. Основы теории упругости, пластичности и вязкоупругости / Э. И. Старовойтов. – Гомель : БелГУТ, 2001. – 344 с.

– Получено 22.09.2011 г.