УДК 548.24

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВОЙНИКОВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ С УЧЕТОМ СОПУТСТВУЮЩИХ ПРОЦЕССОВ СКОЛЬЖЕНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ

О. М. ОСТРИКОВ

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

Введение

Кинетике двойникования посвящено большое количество экспериментальных работ [1]–[4]. Однако кинетическая теория данного явления отсутствует. Разработка кинетической теории двойникования и таких сопутствующих ему процессов, как скольжение и образование трещин, позволит прогнозировать поведение двойникующихся материалов при их внешнем деформировании. Поэтому представляется актуальной цель данной работы, заключающаяся в применении подходов кинетического анализа [5] к таким явлениям, как двойникование, скольжение и разрушение.

Постановка задачи

Схематическое изображение развития сопутствующих друг другу процессов двойникования, скольжения и разрушения показано на рис. 1. Представим эти процессы в виде параллельной кинетической реакции [5]. Пусть в результате внешнего деформирования в монокристаллическом твердом теле активировалось $N_{\text{и}}$ источников дислокаций, которые дали начало первичным процессам двойникования, скольжения и разрушения (рис. 1). При этом из данных источников $N_{\text{дв}(1)}$ дислокаций со скоростью $k_{\text{дв}(1)}$ расщепилось на частичные двойникующие дислокации, $N_{\text{тр}(1)}$ – со скоростью $k_{\text{тр}(1)}$ выделилось на образование дислокационных трещин и $N_{\text{ск}(1)}$ – со скоростью $k_{\text{ск}(1)}$ задействовалось в процессе скольжения. Тогда по аналогии с параллельными химическими реакциями [5] для рассматриваемых процессов можно записать:

$$\begin{cases} \dfrac{dN_{\text{и}}}{dt} = -\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)N_{\text{и}}; \\ \dfrac{dN_{\text{дв}(1)}}{dt} = k_{\text{дв}(1)}N_{\text{и}}; \\ \dfrac{dN_{\text{ск}(1)}}{dt} = k_{\text{ск}(1)}N_{\text{и}}; \\ \dfrac{dN_{\text{тр}(1)}}{dt} = k_{\text{тр}(1)}N_{\text{и}}. \end{cases} \tag{1}$$

Результаты и их обсуждение

Методом разделения переменных и интегрированием из первого уравнения в (1), как и в [5], получим:

$$\int_{(N_{\text{и}})_{\max}}^{N_{\text{и}}} \frac{dN_{\text{и}}}{N_{\text{и}}} = -\int_0^t \left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)dt. \tag{2}$$

Отсюда

$$N_{\text{и}}(t) = (N_{\text{и}})_{\max} e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t} . \tag{3}$$

Длительность процесса будет определяться временем $t_{\text{и}}$ истощения источника дислокаций. Очевидно, что минимальное количество дислокаций в источнике равно единице ($(N_{\text{и}})_{\min} = 1$). Тогда из (3) получим:

$$\frac{1}{(N_{\text{и}})_{\max}} = e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t_{\text{и}}} . \tag{4}$$

Логарифмируя правую и левую части (4), после несложных преобразований имеем:

$$t_{\text{и}} = \frac{(N_{\text{и}})_{\max}}{k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}} . \tag{5}$$

Таким образом, из (5) следует, что длительность процесса формирования первичного двойникования, скольжения и разрушения (рис. 1) определяется максимальным числом дислокаций генерируемых возбужденными внешним деформированием источниками дислокаций и скоростями реализации процессов двойникования, скольжения и разрушения.

Второе, третье и четвертое уравнения системы (1) представим в виде:

$$dN_{\text{дв}(1)} = k_{\text{дв}(1)} N_{\text{и}} dt; \tag{6}$$

$$dN_{\text{ск}(1)} = k_{\text{ск}(1)} N_{\text{и}} dt; \tag{7}$$

$$dN_{\text{тр}(1)} = k_{\text{тр}(1)} N_{\text{и}} dt. \tag{8}$$

Подстановка (3) в (6)–(8) дает:

$$dN_{\text{дв}(1)} = k_{\text{дв}(1)} (N_{\text{и}})_{\max} e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t} dt; \tag{9}$$

$$dN_{\text{ск}(1)} = k_{\text{ск}(1)} (N_{\text{и}})_{\max} e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t} dt; \tag{10}$$

$$dN_{\text{тр}(1)} = k_{\text{тр}(1)} (N_{\text{и}})_{\max} e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t} dt. \tag{11}$$

Отсюда после интегрирования получим:

$$N_{\text{дв}(1)}(t) = \frac{k_{\text{дв}(1)} (N_{\text{и}})_{\max}}{k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}} \left[1 - e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t}\right]; \tag{12}$$

$$N_{\text{ск}(1)}(t) = \frac{k_{\text{ск}(1)} (N_{\text{и}})_{\max}}{k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}} \left[1 - e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t}\right]; \tag{13}$$

$$N_{\text{тр}(1)}(t) = \frac{k_{\text{тр}(1)} (N_{\text{и}})_{\max}}{k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}} \left[1 - e^{-\left(k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}\right)t}\right]. \tag{14}$$

Или с учетом (3):

$$N_{\text{дв}(1)}(t) = \frac{k_{\text{дв}(1)}}{k_{\text{дв}(1)} + k_{\text{ск}(1)} + k_{\text{тр}(1)}} \left[(N_{\text{и}})_{\max} - N_{\text{и}}(t)\right]; \tag{15}$$

$$N_{\text{ск}(1)}(t)=\frac{k_{\text{ск}(1)}}{k_{\text{дв}(1)}+k_{\text{ск}(1)}+k_{\text{тр}(1)}}\left[(N_{\text{и}})_{\max}-N_{\text{и}}(t)\right]; \quad (16)$$

$$N_{\text{тр}(1)}(t)=\frac{k_{\text{тр}(1)}}{k_{\text{дв}(1)}+k_{\text{ск}(1)}+k_{\text{тр}(1)}}\left[(N_{\text{и}})_{\max}-N_{\text{и}}(t)\right]. \quad (17)$$

Сформировавшиеся первичные двойники, скопления дислокаций и трещины, являясь концентраторами больших внутренних напряжений, и, при достаточном уровне внешних напряжений, могут активировать вторичные процессы двойникования, скольжения и разрушения. В свою очередь вторичные процессы, как и первичные, могут инициировать последующее двойникование, скольжение и образование трещин. Количество данных процессов будет определяться уровнем внешнего деформирования и свойствами деформируемых твердых тел.

Кинетика вторичных процессов реакции среды на внешнее деформирование может быть описана следующими системами уравнений:

$$\begin{cases}\dfrac{dN_{\text{дв}(1)}}{dt}=-\left(k_{\text{дв}(21)}+k_{\text{ск}(21)}+k_{\text{тр}(21)}\right)N_{\text{дв}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{дв}(21)}}{dt}=k_{\text{дв}(21)}N_{\text{дв}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{ск}(21)}}{dt}=k_{\text{ск}(21)}N_{\text{дв}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{тр}(21)}}{dt}=k_{\text{тр}(21)}N_{\text{дв}(1)};\end{cases} \quad (18)$$

$$\begin{cases}\dfrac{dN_{\text{ск}(1)}}{dt}=-\left(k_{\text{дв}(22)}+k_{\text{ск}(22)}+k_{\text{тр}(22)}\right)N_{\text{ск}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{дв}(22)}}{dt}=k_{\text{дв}(22)}N_{\text{ск}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{ск}(22)}}{dt}=k_{\text{ск}(22)}N_{\text{ск}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{тр}(22)}}{dt}=k_{\text{тр}(22)}N_{\text{ск}(1)};\end{cases} \quad (19)$$

$$\begin{cases}\dfrac{dN_{\text{тр}(1)}}{dt}=-\left(k_{\text{дв}(23)}+k_{\text{ск}(23)}+k_{\text{тр}(23)}\right)N_{\text{тр}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{дв}(23)}}{dt}=k_{\text{дв}(23)}N_{\text{тр}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{ск}(23)}}{dt}=k_{\text{ск}(23)}N_{\text{тр}(1)};\\ \dfrac{dN_{\text{тр}(23)}}{dt}=k_{\text{тр}(23)}N_{\text{тр}(1)},\end{cases} \quad (20)$$

где $N_{\text{дв}(2i)}$, $N_{\text{ск}(2i)}$, $N_{\text{тр}(2i)}$ – число вторичных двойникующих и полных дислокаций и дислокаций, формирующих трещины, генерированных, соответственно, первичным двойникованием, скольжением и разрушением (здесь и далее i = 1, 2 или 3); $k_{\text{дв}(2i)}$, $k_{\text{ск}(2i)}$, $k_{\text{тр}(2i)}$ – скорости кинетических реакций формирования вторичных двойникования, скольжения и разрушения, соответственно.

Решения систем (18)–(20) имеют аналогичный вид решениям (15)–(17). Из-за громоздкости решения систем (18)–(20) приводить не будем. Аналогичные результаты можно получить и в случае записи уравнений (1), (18)–(20) не для числа дислокаций, а для их плотностей.

Следует отметить, что вторичные процессы двойникования, скольжения и образования трещин при определенных условиях могут инициировать следующую группу процессов двойникования, скольжения и разрушения. Это будет продолжаться до тех пор, пока не наступит полная релаксация внешних и внутренних напряжений. Очевидно, что для данных процессов в рамках разрабатываемого подхода возможно использование уравнений типа (1), (18)–(20).

В работах [2], [6]–[8] исследовалась роль двойникования в процессах разрушения металлов. На рис. 1 эта проблема проиллюстрирована ветвью, идущей от первичного двойникования к вторичным процессам двойникования, скольжения и разрушения. На языке кинетической теории реализация разрушения после первичного двойникования определяется величинами параметров $k_{дв(21)}$, $k_{ск(21)}$, $k_{тр(21)}$. В случае доминирования разрушения будем иметь $k_{тр(21)} > k_{дв(21)}$ и $k_{тр(21)} > k_{ск(21)}$.

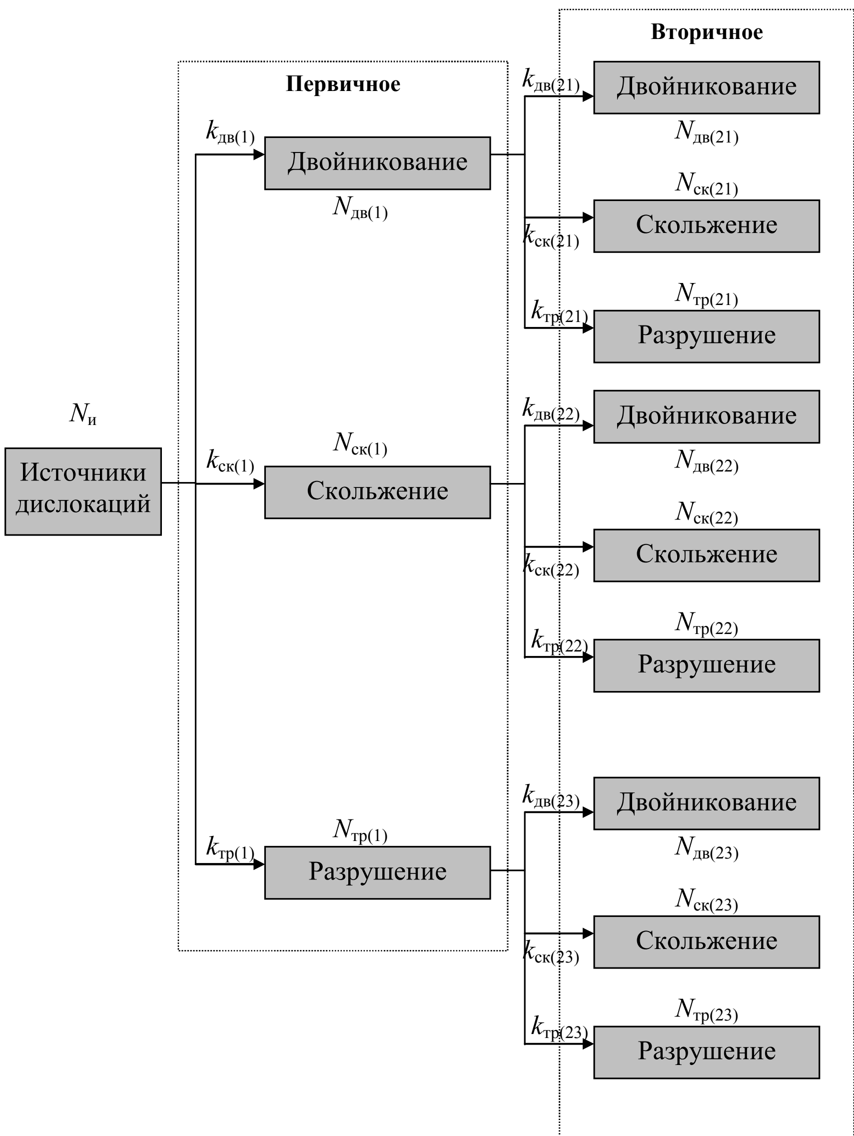

Рис. 1. Схематическое изображение развития сопутствующих друг другу двойникования, скольжения и разрушения

Двойникование может выступать и резервом пластичности материала [9]. Это означает, что $k_{дв(1)} > k_{тр(1)}$. Если же $k_{тр(1)} > k_{дв(1)}$, и тем более, когда $k_{тр(1)} > k_{ск(1)}$, преобладающим процессом в реакции твердого тела на внешнее деформирование будет разрушение.

Параметры $k_{дв(1)}$, $k_{ск(1)}$, $k_{тр(1)}$, $k_{дв(2i)}$, $k_{ск(2i)}$, $k_{тр(2i)}$ могут изменяться в зависимости от условий деформирования (термических воздействий, импульсного электрического тока, магнитного поля, ионной имплантации и т. д.), а также легирования. Схема на рис. 1 позволяет определить, к каким последствиям приведет то или иное изменение условий деформирования твердого тела, что удобно при программном управлении механическими свойствами деформируемых твердых тел.

Заключение

Таким образом, используя аналогию математического описания кинетики параллельных химических реакций, впервые получены кинетические уравнения для описания протекающих параллельно процессов двойникования, скольжения и разрушения в деформируемом твердом теле. Показано, что при заданной нагрузке каждый из указанных процессов конечен во времени и определяется количеством выделенных на него дислокаций активизированных источников и скоростью вовлечения этих дислокаций в двойникование, скольжение и разрушение.

Литература

1. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – М. : АН СССР, 1960. – 261 с.
2. Brunton, J. H. The kinetics of twinning in zinc and tin crystals / J. H. Brunton, M. P. W. Wilson // Proc. Roy. Soc. – 1969. – Vol. A309. – № 1498. – P. 345–361.
3. Остриков, О. М. Механика двойникования твердых тел : монография / О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2008. – 301 с.
4. Остриков, О. М. Кинетика образования клиновидных двойников в кристаллах висмута, облученных нерастворимыми в матрице мишени ионами / О. М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 1999. – Т. 87, № 5. – С. 78–82.
5. Стромберг, А. Г. Физическая химия / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко. – М. : Высш. шк., 1988. – 496 с.
6. Гиндин, И. А. Повышение долговечности предварительно двойникованного чистого железа и развитие двойников в процессе высокотемпературной ползучести / И. А. Гиндин, Я. Д. Стародубов // Физика металлов и металловедение. – 1964. – Т. 18, № 5. – С. 762–769.
7. Финкель, В. М. Физические основы торможения разрушения / В. М. Финкель. – М. : Металлургия, 1977. – 557 с.
8. Финкель, В. М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В. М. Финкель, В. А. Федоров, А. П. Королев. – Ростов н/Д, 1990. – 172 с.
9. Савенко, В. С. Влияние облучения на электромеханический эффект при двойниковании кристаллов висмута / В. С. Савенко, М. С. Цедрик // Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1980. – № 1. – С. 105–108.

Получено 07.02.2012 г.