

ДИСЛОКАЦИОННАЯ МЕЗОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКОГО ДВОЙНИКА

О. М. ОСТРИКОВ

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

Введение

Деформационное двойникование во многом определяет физико-механические свойства двойникующихся материалов [1]–[3]. Двойники формируются в деформируемом кристалле в условиях затруднения развития скольжения, что определяется не только структурой материала, условиями деформирования, но и ориентационным фактором Шмида [1, с. 4–6]. При этом двойникование, с одной стороны, является резервом пластичности материалов [7]–[9], так как способствует релаксации напряжений в областях их концентрации, чем уменьшает вероятность образования в этих областях микротрещин, а с другой стороны, при дальнейшем увеличении уровня внешних напряжений способствует образованию трещин вдоль двойниковых границ [10]–[12], которые сами являются концентраторами больших внутренних напряжений.

В настоящее время экспериментально и теоретически хорошо исследованы процессы развития единичных двойниковых прослоек [1, с. 13–15]. Закономерности развития двойников в полях напряжений одновременно развивающихся других двойников находящихся друг от друга на малых расстояниях, в настоящее время слабо изучено [1]. В этом плане интересны полисинтетические двойники, представляющие собой систему параллельных двойниковых прослоек [1]. Полисинтетические двойники часто образуются в зернах поликристаллов [1] и способствуют перераспределению легирующего компонента, приводя к формированию слоистого материала. В работе [16] отмечалось, что полисинтетические двойники интересны в плане формирования фазовых дифракционных решеток благодаря специфическому рельефу, который образуют двойники на поверхности монокристалла.

Целью данной работы стали расчет и физический анализ на основании дислокационной модели, полей напряжений и распределения примесей в системе параллельных двойников с когерентными границами.

Дислокационная модель двойника

Рассмотрим систему параллельных двойников одинаковой ширины h и бесконечной длины, ориентированных вдоль оси y (рис. 1). Пусть H – расстояние между двойниками, а D – расстояние между двойникующими дислокациями (см. выноску на рис. 1). Зная напряжения, которые создают в изотропной однородной среде бесконечные по длине дислокационные стенки [17], [18], используя принцип суперпозиции и учитывая, что вектор Бюргера двойникующей дислокаций имеет краевую ($b_{кр}$) и винтовую (b_v) составляющие, не трудно показать, что компоненты тензора напряжений, создаваемых полисинтетическим двойником, представленном на рис. 1, могут быть найдены из соотношений

$$\sigma_{xy}^{(1)} = \frac{\mu b_{кр}}{2D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y - 2\pi X_n^{(1)} \operatorname{sh} 2\pi X_n^{(1)})}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2},$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}^{(1)} &= -\frac{\pi\mu b_{\text{кр}}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{2\pi X_n^{(1)} (\text{ch}2\pi X_n^{(1)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\text{ch}2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2}; \\
\sigma_{yy}^{(1)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\text{sh}2\pi X_n^{(1)} (\text{ch}2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y) - \pi X_n^{(1)} (\text{ch}2\pi X_n^{(1)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\text{ch}2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2}; \\
\sigma_{xz}^{(1)} &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y}{\text{ch}2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y}; \\
\sigma_{yz}^{(1)} &= \frac{\mu b_{\text{в}}}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\text{sh}2\pi X_n^{(1)}}{\text{ch}2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y}; \\
\sigma_{xy}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y (\text{ch}2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y - 2\pi X_n^{(2)} \text{sh}2\pi X_n^{(2)})}{(\text{ch}2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2}; \\
\sigma_{xx}^{(2)} &= \frac{\pi\mu b_{\text{кр}}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{2\pi X_n^{(2)} (\text{ch}2\pi X_n^{(2)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\text{ch}2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2}; \\
\sigma_{yy}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\text{sh}2\pi X_n^{(2)} (\text{ch}2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y) - \pi X_n^{(2)} (\text{ch}2\pi X_n^{(2)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\text{ch}2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2}; \\
\sigma_{xz}^{(2)} &= \frac{\mu b_{\text{в}}}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y}{\text{ch}2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y}; \\
\sigma_{yz}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\text{sh}2\pi X_n^{(2)}}{\text{ch}2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y};
\end{aligned} \tag{1}$$

где $Y = y/D$; $X_n^{(1)} = (x - n(h+H) - h)/D$; $X_n^{(2)} = (x - n(h+H))/D$; n – индекс суммирования; N – число двойников в полисинтетическом двойнике; μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; $\sigma_{ij}^{(1)}$ и $\sigma_{ij}^{(2)}$ – компоненты тензора напряжений, создаваемых дислокациями, находящимися на противоположных двойниковых границах.

Очевидно, что результирующие напряжения, формируемые полисинтетическим двойником, представленным на рис. 1, находятся из соотношения

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(1)} - \sigma_{ij}^{(2)}, \tag{3}$$

где учтено, что на противоположных границах отдельного двойника полисинтетического двойника находятся разноименные дислокации.

В отличие от дислокационной модели двойника, рассмотренной в [1], где рассматриваются дальнедействующие поля напряжений двойниковых границ на уровне, когда расстояние между двойниующими дислокациями пренебрежимо мало, рассматриваемая в данной работе модель позволяет изучать поля напряжений в непосредственной близости у двойниующих дислокаций, когда расстояние между ними соизмеримо с областью исследования.

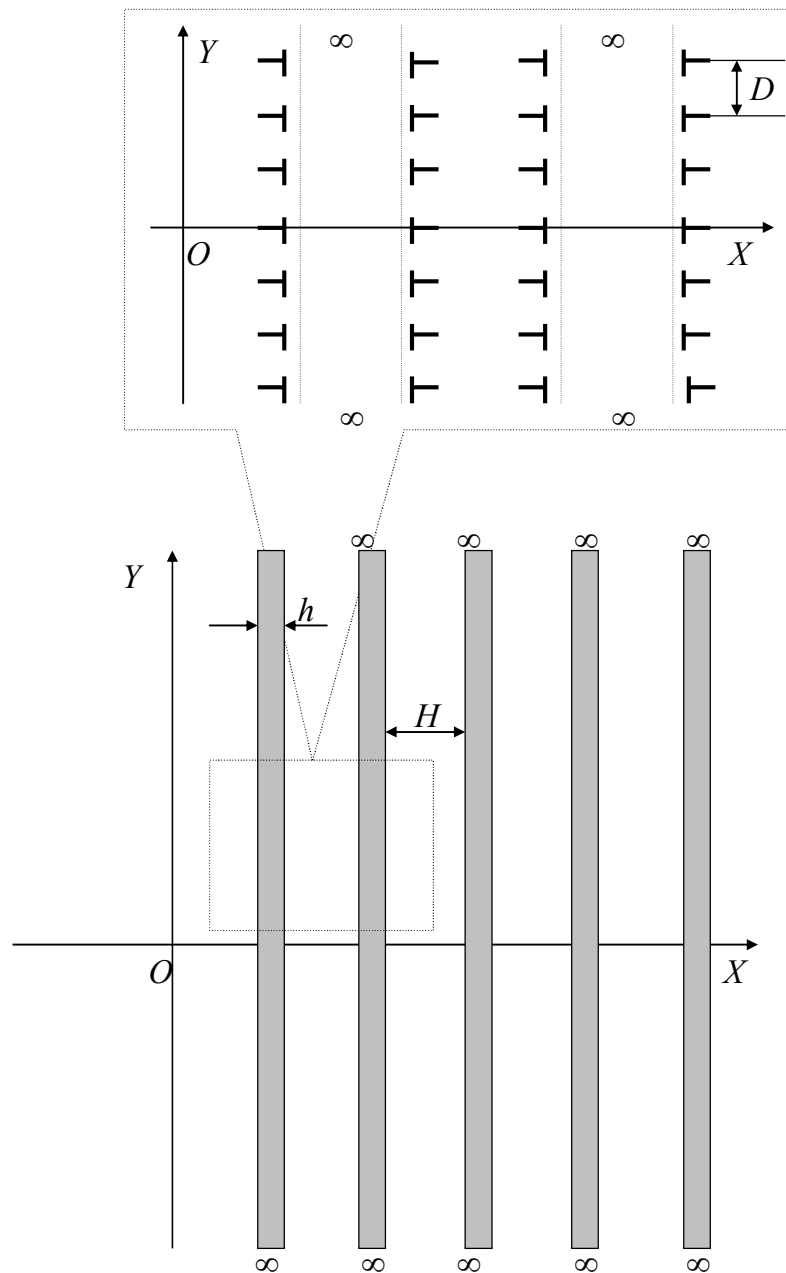


Рис. 1. Дислокационная модель полисинтетического двойника

В качестве недостатка предлагаемой модели можно отметить использование исходных соотношений для расчета полей напряжений вблизи единичной бесконечной дислокационной стенки, исключающих бесконечное суммирование, однако не позволяющих рассматривать напряжения в начале декартовой системы координат (рис. 1) и вдоль ее осей. Физический смысл имеет лишь картина полей напряжений, наблюдаемая вдали от начала координат и от осей x и y [19]. Однако, используя допущение о бесконечности длины двойников в полисинтетическом двойнике, в соотношениях (1) и (2) можно перейти от суммирования к функциональным зависимостям, что делает модель более экономичной в плане компьютерных расчетов.

Анализ результатов расчета полей напряжений в полисинтетическом двойнике

Результаты компьютерного расчета полей напряжений, которые создает полисинтетический двойник, представлены на рис. 2. В расчетах принималось $D = 0,01$ мкм; $h = 2$ мкм; $H = 5$ мкм; $N = 10$; $\nu = 0,33$; $b_{кр} = b_b = 1 \text{ \AA}$. Для устранения

необходимости учета параметра μ и повышения общности результатов рассчитывались величина σ_{ij}/μ . На рис. 2 масштаб подобран таким образом, чтобы детально можно было бы рассматривать напряжения не только в самих двойниках (на рис. 2 их два из десяти заданных), но и в пространстве между ними.

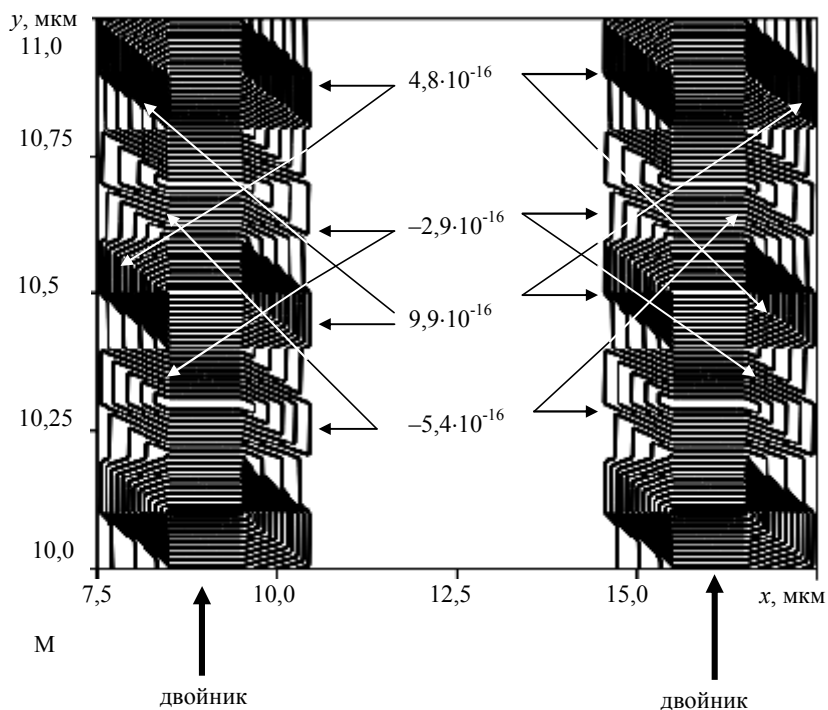


Рис. 2а. Распределение напряжений в полисинтетическом двойнике: σ_{xy}/μ

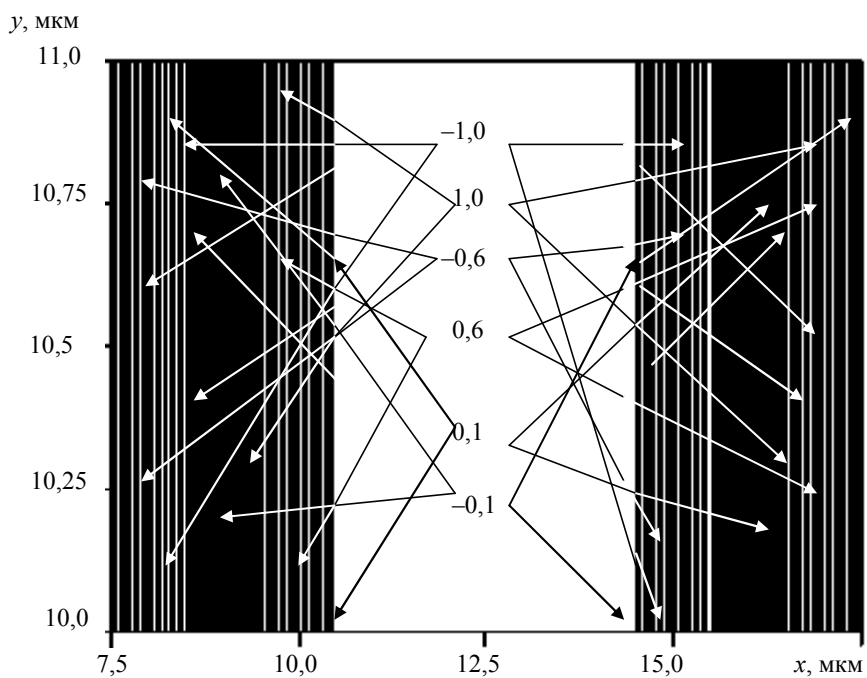


Рис. 2б. Распределение напряжений в полисинтетическом двойнике: σ_{xx}/μ

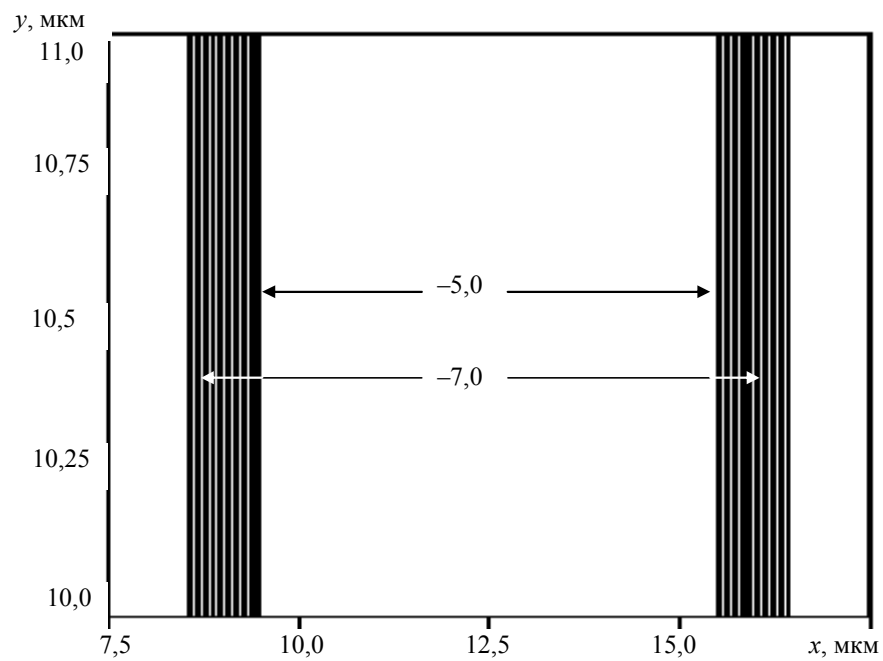


Рис. 2в. Распределение напряжений в полисинтетическом двойнике: σ_{yy}/μ

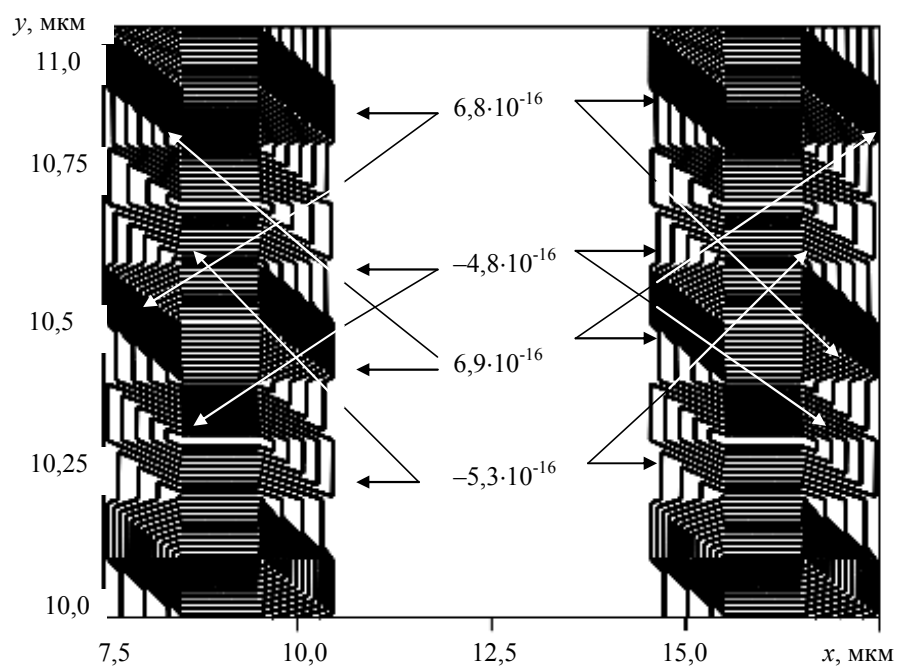


Рис. 2г. Распределение напряжений в полисинтетическом двойнике: σ_{xz}/μ

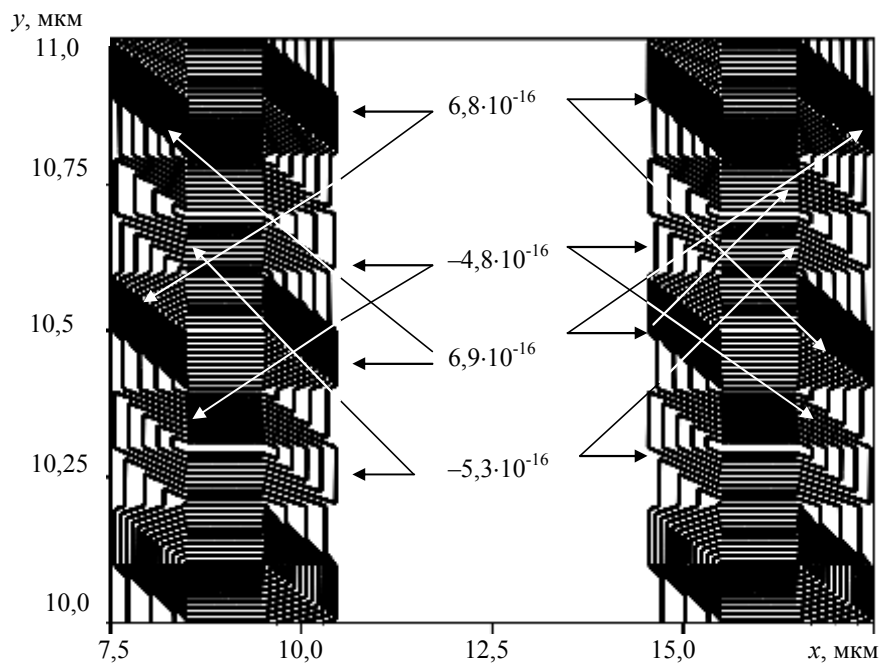


Рис. 2д. Распределение напряжений в полисинтетическом двойнике: σ_{yz}/μ

Из рис. 2 видно, что напряжения локализованы на границах двойников и внутри них. В пространстве между двойниками полисинтетического двойника напряжения скомпенсированы и равны нулю. Это обусловлено заданной в рассматриваемой задаче антисимметричностью расположения дислокаций на двойниковых границах.

Сдвиговые напряжения σ_{xy} играют важную роль в междислокационном взаимодействии, а именно во взаимодействии двойниковых границ друг с другом и с дислокациями, находящимися внутри полисинтетического двойника и не являющимися дислокациями, образующими его границы. Данные напряжения обусловлены наличием краевой составляющей у вектора Бюргера двойникующих дислокаций и определяют области притяжения дислокаций одного знака и отталкивания – другого знака. На основании рис. 2а, данные области схематически показаны на рис. 3. Аналогичную картину можно изобразить и для случая напряжений σ_{xz} и σ_{yz} (рис. 2г, 2д). Скопление в отдельных областях у двойниковых границ полных дислокаций одного знака способствует интенсификации процесса их расщепления на частичные двойникующие дислокации, что приводит к искривлению двойниковых границ в результате захвата двойником данных дислокаций. В случае, когда такие дислокационные реакции энергетически не выгодны, в областях скопления одноименных полных дислокаций возможно зарождение микротрещин по дислокационному механизму [20]. При этом двойниковая граница с одной стороны выступает в качестве стопора, препятствующего движению дислокаций (рис. 4), а с другой стороны – способствует притяжению к ней дислокаций.

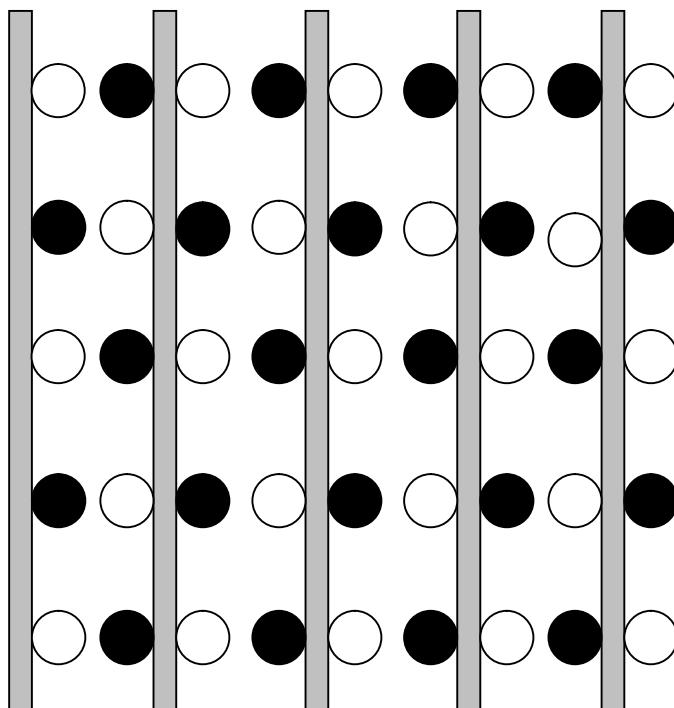


Рис. 3. Схема распределения областей (белые и черные окружности) локализации разноименных дислокаций (отмечено белым и черным цветом окружностей) у двойниковых границ (серые вытянутые прямоугольники – двойники)

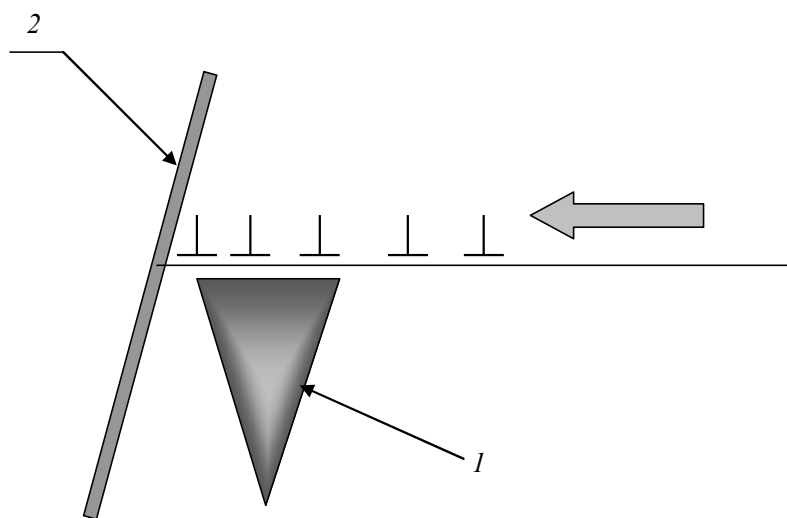


Рис. 4. Схема, иллюстрирующая дислокационный механизм образования трещины (1) у двойниковой границы (2)

Важным фактором, способствующим миграции полных дислокаций в указанные на рис. 3 области, является интенсивность термической обработки материалов с полисинтетическими двойниками, так как процесс движения дислокаций является термически активируемым [17].

В работах [21], [22] изучалось поведение клиновидных двойниковых прослоек при пульсирующих нагрузках по схеме трехточечного изгиба. Интересен анализ полученных в [21], [22] результатов на основании проведенных в данной работе расчетов напряжений в системе параллельных двойников. Согласно данным работ [21], [22], с ростом числа циклов нагружения сдвойникованных монокристаллов при одинаковой величине нагрузки в каждом цикле нагружения прирост ширины двойников уменьшается. При трехточечном изгибе активно пирамидальное скольжение [21], [22], благодаря чему число полных дислокаций у двойниковых границ растет. Если предположить, что реакции расщепления

полных дислокаций на частичные двойникующие дислокации затруднены, то, скапливаясь у двойниковых границ в указанных на рис. 3 областях, пирамидальные дислокации будут тормозить процесс увеличения ширины двойников. Однако, при малом количестве циклов нагружения, подвижность пирамидальных дислокаций существенно не ограничена. Подвижные пирамидальные дислокации существенным образом не способны повлиять на процесс увеличения ширины двойников, так как они участвуют в процессе одновременного перемещения с двойникующими дислокациями, но в плоскостях, отличных от плоскостей двойникования.

При достижении критического числа пирамидальных дислокаций в областях их скопления у двойниковых границ на данные дислокации уже с их стороны начинают действовать напряжения обратного знака, что приводит к запираению источников пирамидальных дислокаций и ограничению их подвижности. Это в свою очередь приводит к уменьшению подвижности двойниковых границ в результате ограничения подвижности двойникующих дислокаций взаимодействующих со ставшими неподвижными, или малоподвижными, пирамидальными дислокациями.

Таким образом, при малом числе циклов нагружения наблюдается согласованное движение, как двойникующих, так и пирамидальных дислокаций. При большом количестве циклов нагружения подвижность пирамидальных дислокаций ограничивается запирающими напряжениями, из-за чего данные дислокации становятся препятствием на пути движения двойниковых границ.

Распределение примесей у полисинтетических двойников

Нормальные напряжения σ_{xx} и σ_{yy} интересны с той точки зрения, что они не только определяют процесс переползания дислокаций, но и распределение примесей у системы параллельных двойников. Данное распределение может быть рассчитано по формуле [17], [23]:

$$C = C_0 \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \quad (4)$$

где C_0 – концентрация примеси вдали от внутренних источников напряжений; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Энергия U взаимодействия примеси с полисинтетическим двойником определяется по формуле:

$$U = -\frac{4}{3}\pi r^3 \varepsilon (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}), \quad (5)$$

где r – радиус атома матрицы; $\varepsilon = (r_0 - r)/r$ – малый параметр (здесь r_0 – радиус атома примеси).

Результаты расчетов представлены на рис. 5. Максимальная концентрация примеси наблюдается у двойниковых границ. При этом сторона, по отношению к двойниковой границе с какой располагаются примесные атомы, определяется соотношением между радиусами атомов матрицы и примесей. Схематически это продемонстрировано на рис. 6.

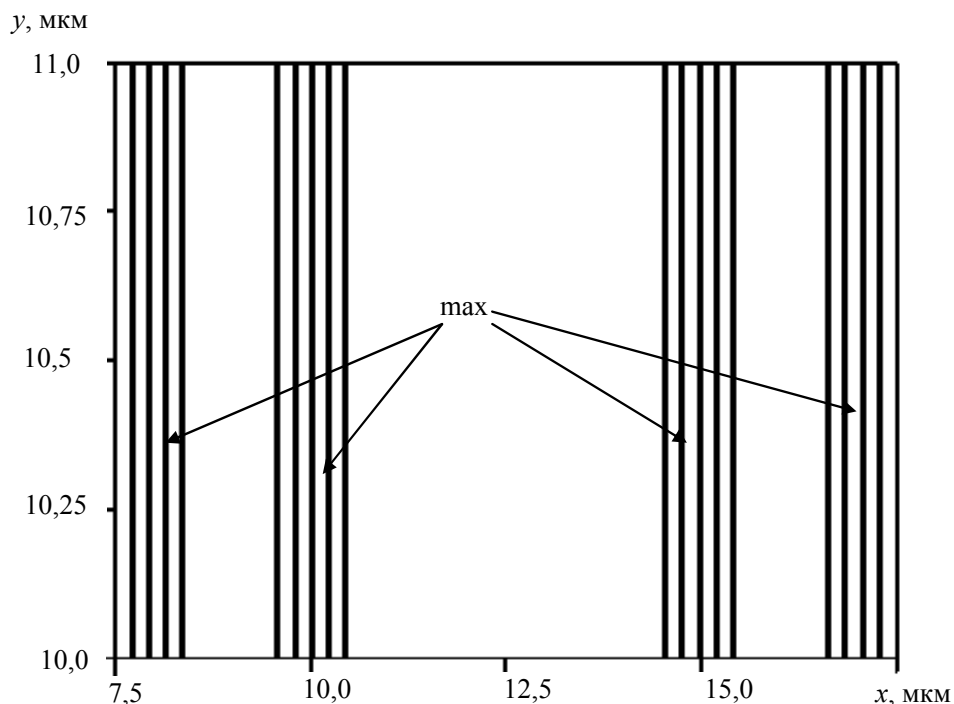


Рис. 5. Концентрационные профили распределения примесей в полисинтетическом двойнике

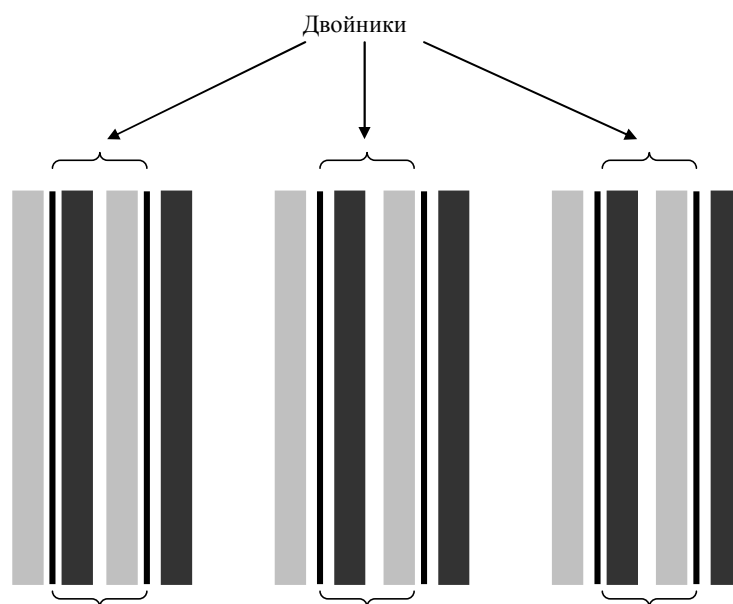


Рис. 6. Схематическое изображение областей локализации примесей у границ двойников полисинтетического двойника: серые прямоугольники – случай, когда $r_0 > r$, черные – $r_0 < r$. Черные вертикальные линии – двойниковые границы

Если предположить, что в качестве примеси в материале выступает легирующий компонент, то полисинтетическое двойникование благодаря своей способности сортировать атомы по их радиусу и благодаря трансляционно-симметричному расположению областей локализации легирующего компонента (рис. 6), может выступать в качестве способа синтеза слоистых бинарных, или многокомпонентных, монокристаллических систем.

Миграции легирующего компонента к двойниковым границам способствует термическая обработка. А так как существует явление раздвойнивания монокристаллов при приложении к ним напряжений обратного знака, то данное явление может устранять в слоистом материале напряжения, связанные с наличием двойниковых границ.

Естественно, что структура такого материала с упорядоченно распределенным в тонких слоях легирующим компонентом при устранении двойников будет неустойчивой. Более устойчивой будет конденсированная система, в которой в результате термической обработки в областях локализации легирующего компонента произойдут фазовые превращения.

Заключение

Таким образом, на основании дислокационной модели полисинтетического двойникового поля напряжений у системы параллельных двойников, изучены процессы миграции к двойниковым границам полисинтетического двойника дислокаций и примесных атомов.

Работа поддержана Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (грант Ф05М-009).

Литература

1. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – Москва : АН СССР, 1960. – 262 с.
2. Остриков, О. М. Влияние скорости нагружения на механизм пластической деформации в висмуте / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Журн. техн. физики. – 2001. – Т. 71, № 5. – С. 44–46.
3. Остриков, О. М. Исследование механического двойникования монокристаллов сурьмы методом наноиндентирования / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Инженер.-физ. журн. – 2003. – Т. 76, № 1. – С. 170–172.
4. Остриков, О. М. Влияние температурных условий деформирования на реализацию двойникования монокристаллов висмута, облученных ионами бора, азота и углерода / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Серия «Черная металлургия». – 2003. – № 2. – С. 29–31.
5. Остриков, О. М. Влияние импульсного электрического тока большой плотности на особенности двойникования монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Физика и химия обработки материалов. – 2003. – № 1. – С. 12–15.
6. Остриков, О. М. Особенности зарождения клиновидных двойников у отпечатка пирамиды Виккерса на поверхности (111) монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Материаловедение. – 2002. – № 1. – С. 17–20.
7. Остриков, О. М. Двойникование кристаллов при воздействии на них облучения и электрического поля / О. М. Остриков // Изв. НАН Беларуси. Серия физ.-мат. наук. – Минск, 1999. – 39 с. – Деп. в ВИНТИ, № 3702-В98.
8. Остриков, О. М. Влияние импульсов электрического тока на работу источников двойникоующих дислокаций в монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Инженер.-физ. журн. – 1999. – Т. 72, № 3. – С. 592–594.
9. Остриков, О. М. Ветвление клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой / О. М. Остриков // Физика металлов и материаловедение. – 1999. – Т. 87, № 1. – С. 94–96.
10. Финкель, В. М. Кинетика двойникования и образования КР2 в цинке / В. М. Финкель, В. А. Федоров, В. П. Плотников // Физика металлов и материаловедение. – 1979. – Т. 47, № 4. – С. 867–870.
11. Федоров, В. А. Образование трещин на границах зерен и двойников в цинке при охлаждении до низких температур / В. М. Финкель, В. А. Федоров, В. П. Плотников // Физика металлов и материаловедение. – 1980. – Т. 49, № 2. – С. 413–416.
12. Остриков, О. М. Некоторые особенности формы клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой

- / О. М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 2000. – Т. 90, № 1. – С. 91–95.
13. Остриков, О. М. Напряженное состояние у вершины клиновидного двойника / О. М. Остриков // Механика твердого тела. – 2004. – № 2. – С. 104–113.
 14. Остриков, О. М. Напряженное состояние у клиновидного двойника при дисбалансе плотностей двойникующих дислокаций / О. М. Остриков // Прикладная механика и техн. физика. – 2002. – Т. 43, № 4. – С. 180–182.
 15. Савенко, В. С. Поля напряжений у границы клиновидного двойника / В. С. Савенко, О. М. Остриков // Письма в журн. техн. физики. – 1997. – Т. 23, № 22. – С. 1–6.
 16. Остриков, О. М. О возможности формирования фазовых дифракционных решеток на основе явления двойникования монокристаллов / О. М. Остриков // Письма в журн. техн. физики. – 2000. – Т. 26, № 21. – С. 49–52.
 17. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – Москва : Атомиздат, 1972. – 600 с.
 18. Фридель, Ж. Дислокации / Ж. Фридель. – Москва : Мир, 1967. – 644 с.
 19. Савенко, В. С. Поля напряжений вокруг бесконечной дислокационной лестницы / В. С. Савенко, О. М. Остриков // Изв. АНБ. Серия физ.-мат. наук. – Минск, 1997. – 12 с. – Деп. в ВИНТИ, № 327-В97.
 20. Владимиров, В. И. Физическая природа разрушения металлов / В. И. Владимиров. – Москва, 1984.
 21. Башмаков, В. И. Исследование взаимодействия двойникующих дислокаций с дислокациями «леса» в кристаллах цинка / В. И. Башмаков, М. Е. Босин, Ф. Ф. Лаврентьев // Проблемы прочности. – 1972. – № 2. – С. 74–78.
 22. Влияние легирования на деформационное упрочнение двойниковых прослоек в кристаллах висмута и бериллия при пульсации напряжений / В. И. Башмаков [и др.] // Проблемы прочности. – 1974. – № 1. – С. 80–84.
 23. Савенко, В. С. Влияние электрического тока на распределение примесей у двойниковой границы / В. С. Савенко, О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Серия «Черная металлургия». – 1998. – № 6. – С. 12–14.

Получено 05.12.2006 г.