

## ДИСЛОКАЦИОННАЯ ГАРМОНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОЛОСЫ СДВИГА В АМОРФНОМ МАТЕРИАЛЕ

**О. М. ОСТРИКОВ**

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

### **Введение**

Понятие дислокации в аморфном материале является сложно определимым [1] из-за отсутствия в структуре аморфной среды дальнего порядка. В источнике [2] дислокация в аморфной среде представляется таким образом, что вектор Бюргера вдоль ее линии изменяет свои направление и величину. Это противоречит требованию того, что у дислокации вектор Бюргера должен быть постоянен вдоль всей ее линии [3]. Поэтому можно утверждать, что дислокация в аморфном материале является иным по своей природе структурным образованием, чем в случае дислокаций в кристаллических материалах. Несмотря на это имеется сходство в развитии пластической деформации в аморфных и кристаллических материалах. Так, например, в источниках [1], [4] были обнаружены аналогии в процессах развития сдвиговой пластической деформации в аморфных и монокристаллических материалах. При этом было выявлено сходство в процессах взаимодействия с микровключениями двойников в монокристаллах и полос сдвига в аморфных материалах; имеется сходство в процессах ветвления двойников в монокристаллах и полос сдвига в аморфных материалах. Аналогичны также процессы развития пирамидального скольжения в монокристаллах и негомогенной пластической деформации в аморфных средах при их локальном деформировании. Это делает целесообразным использование накопленного в современной науке опыта математического моделирования дислокационных процессов для описания деформирования аморфных материалов.

Деформирование аморфных материалов протекает гомогенно и негомогенно [5]. Основным каналом негомогенной пластической деформации являются так называемые полосы сдвига [1], [5]. Природа полос сдвига в аморфных материалах в настоящее время мало изучена. Однако сходство развития полос сдвига в аморфных материалах, а также двойникования и скольжения в монокристаллах [1], [4], позволяет предложить дислокационный подход к моделированию негомогенной пластической деформации в аморфных материалах, что было реализовано в [6]–[10].

Целью данной работы является разработка дислокационной модели полосы сдвига в аморфном материале, в которой осуществлен переход от такого масштабного уровня, когда возможно применение принципа суперпозиции, использованного в [6]–[10], к такому масштабному уровню, когда рассматриваемые квазидислокации непрерывно распределены вдоль полосы сдвига, в частности, с гармонически изменяющейся плотностью.

### **Постановка задачи**

Рассмотрим случай, когда полоса сдвига находится в объеме аморфного материала вдали от его поверхности. Свяжем начало декартовой системы координат с одним из концов полосы сдвига так, как это показано на рис. 1. Пусть след полосы сдвига в плоскости  $XOY$  представляет собой отрезок длиной  $L$ . Направим ось  $OX$  вдоль этого отрезка. В приближении непрерывного распределения квазидислокаций вдоль полосы сдвига с плотностью  $\rho(x_0)$  произведем расчет полей напряжений  $\sigma_{ij}(x, y)$  у данной полосы с использованием метода функций Грина [11]. Для этого запишем соотношение

$$\sigma_{ij}(x, y) = \int_0^L \sigma_{ij}^0(x, y, x_0) \rho(x_0) dx_0, \quad (1)$$

где  $\sigma_{ij}^0(x, y)$  – компоненты тензора напряжений, создаваемых единичной дислокацией, и определяемые по формулам [11]:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^0 &= -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \frac{y[3(x-x_0)^2 + y^2]}{[(x-x_0)^2 + y^2]^2}, \\ \sigma_{yy}^0 &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \frac{y[(x-x_0)^2 - y^2]}{[(x-x_0)^2 + y^2]^2}, \\ \sigma_{xy}^0 &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x-x_0)[(x-x_0)^2 - y^2]}{[(x-x_0)^2 + y^2]^2}, \\ \sigma_{zz}^0 &= -\frac{\mu b_{кр}\nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y}{(x-x_0)^2 + y^2}; \\ \sigma_{zx}^0 &= -\frac{\mu b_{в}}{2\pi} \frac{y}{(x-x_0)^2 + y^2}; \\ \sigma_{zy}^0 &= -\frac{\mu b_{в}}{2\pi} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + y^2}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь в соответствии с экспериментальными данными и их анализом, приведенными в [1], полагалось, что полоса сдвига может формироваться по двум механизмам, описываемым краевыми, либо винтовыми дислокациями с векторами Бюргера  $b_{кр}$  и  $b_{в}$  соответственно. При этом, как и в [1], [6]–[10], в соотношениях (2) величины и их направления векторов Бюргера брались усредненными, с учетом того, что величина и направление вектора Бюргера дислокации в аморфном материале изменяются вдоль дислокационной линии [2].

В этой работе рассмотрим частный случай, когда в соотношении (1) плотность дислокаций изменяется по гармоническому закону:

$$\rho(x_0) = \frac{\rho_0}{2} \left( \cos\left(\frac{2\pi x_0}{l}\right) + 1 \right), \quad (3)$$

где  $\rho_0$  – максимальная плотность дислокаций;  $l$  – период. Вид функции  $\rho(x_0)$  представлен на рис. 1. Из-за того, что в формуле (3) принято периодическое распределение плотности дислокаций вдоль полосы сдвига, назовем рассматриваемую модель гармонической. В отличие от моделей полос сдвига, разрабатываемых в [6]–[10], где использовалось периодическое чередование цепочек дислокаций, преимущество данной модели заключается в том, что использование гармонического распределения дислокаций позволяет не учитывать краевые эффекты, связанные с введением в модели пор [6]–[10], расположенных в пространстве между упорядоченными скоплениями дислокаций.

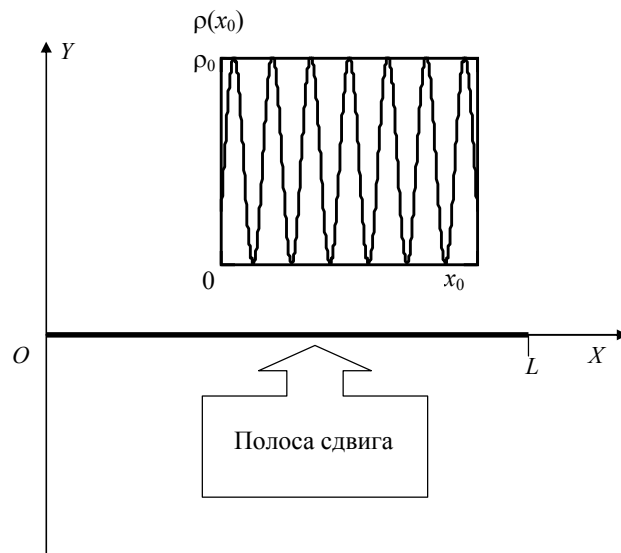


Рис. 1. След полосы сдвига в плоскости  $XOY$ . Схематическое изображение функции плотности распределения дислокаций вдоль полосы сдвига

### Результаты расчетов полей напряжений и их обсуждение

Результаты расчетов представлены на рис. 2а–2д. Видно, что напряжения локализуются не только вдоль полосы сдвига, но и в удалении от нее. Нормальные напряжения  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  (рис. 2а и 2б) в плоскости  $XOY$  знакопеременны по отношению к оси  $OX$ . В области положительных значений  $y$  данные напряжения положительны, а в области отрицательных значений – отрицательны. Максимальное значение напряжения  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  принимают в области, находящейся в некотором удалении от полосы сдвига на перпендикуляре, отложенном от средней части длины полосы сдвига. Аналогично ведут себя и напряжения  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$ . Сдвиговые напряжения  $\sigma_{xy}$  и  $\sigma_{yz}$  локализуются у вершины полосы сдвига.

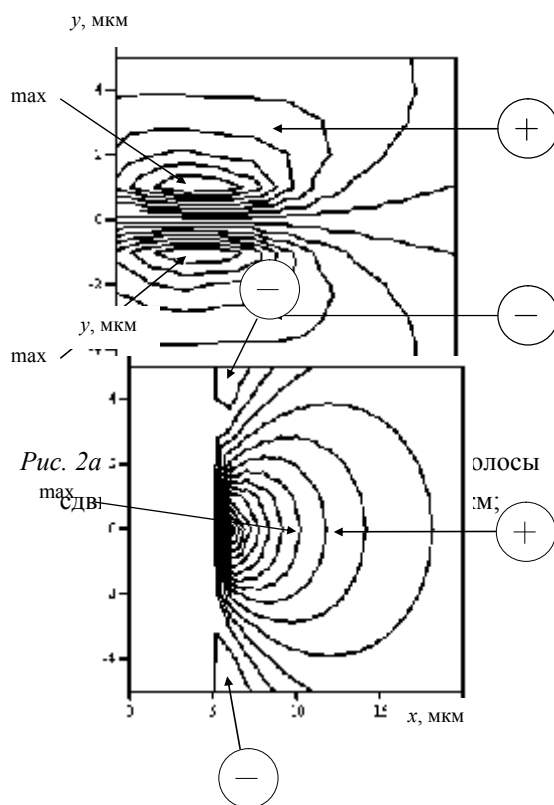


Рис. 2а. Распределение напряжений у полосы сдвига:  $\sigma_{xy}$ . Принималось:  $L = 5$  мкм;

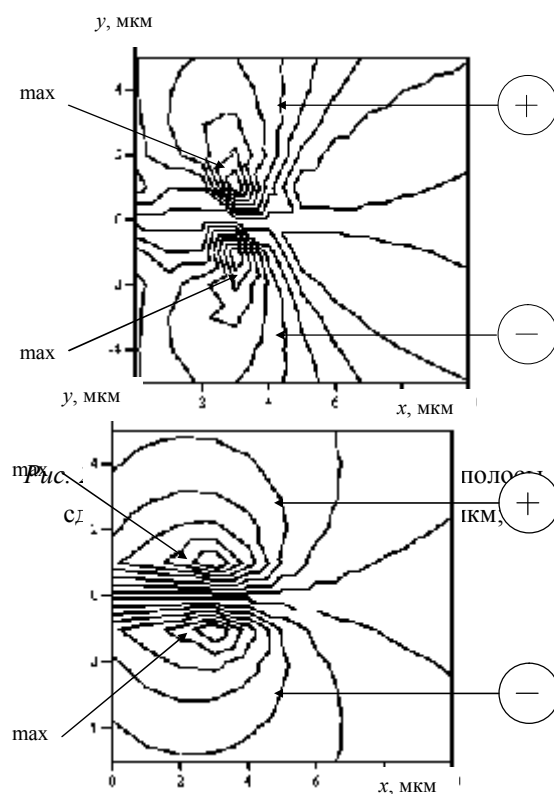


Рис. 2б. Распределение напряжений у полосы сдвига:  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$ . Принималось:  $L = 5$  мкм;

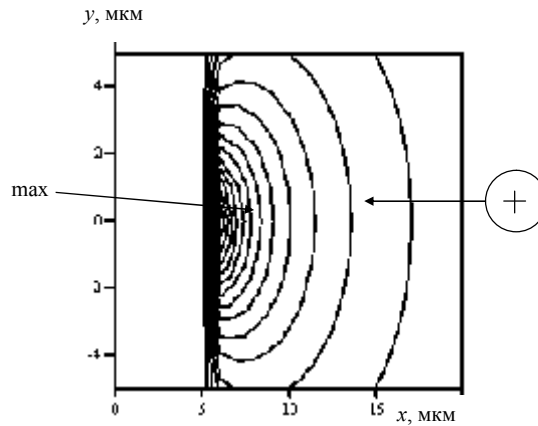


Рис. 2d. Распределение напряжений у полосы сдвига:  $\sigma_{yz}$ .

Принималось:  $L = 5$  мкм;  $l = 3$  мкм;  $\rho_0 = 5$  мкм<sup>-1</sup>

Нормальные напряжения ответственны за такие процессы, как, например, переползание дислокаций, массоперенос легирующего компонента и т. д. В отличие от характера протекания процесса переползания в монокристаллах, в аморфных материалах этот процесс связан с изменением величины и направления вектора Бюргерса из-за неупорядоченности структуры конденсированной системы, не имеющей дальнего порядка. Схематически этот процесс представлен на рис. 3. При этом рассматривается бесконечно малый отрезок дислокации в аморфном материале с вектором Бюргерса в точке  $A$ , равным  $b_A$ . При миграции в процессе переползания дислокации из точки  $A$  в точку  $B$  величина и направление вектора Бюргерса в точке дислокационной линии, находящейся в плоскости  $XOY$ , изменяется и принимает значение  $b_B$ . Такая ситуация не свойственна дислокациям в монокристаллах. Поэтому нельзя утверждать, что дислокации в монокристаллах и аморфных материалах идентичны. Из-за изменения величины вектора Бюргерса в процессе переползания дислокаций в аморфных материалах изменяется и величина силы, действующей на дислокацию со стороны нормальных напряжений полосы сдвига. Наибольшее значение эти напряжения имеют вдоль полосы сдвига, а также в некотором удалении от нее. В результате в этих областях подвижность дислокаций, связанная с облегчением преодоления ими стопоров, увеличивается. В аморфных материалах в качестве таких стопоров могут выступать нанокристаллические включения.

Распределение легирующего компонента у концентратора напряжений, к которому относится полоса сдвига, определяется по формуле [11]:

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

где  $C_0$  – концентрация легирующего компонента вдали от внутренних источников напряжений;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура. Энергия  $U$  взаимодействия легирующего компонента с полосой сдвига, которая находится по формуле [10], [11]:

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

где  $r$  – радиус атома матрицы;  $\varepsilon = (r_0 - r)/r$  – малый параметр ( $r_0$  – радиус атома легирующего компонента);  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  – нормальные компоненты тензора напряжений, создаваемых полосой сдвига в аморфном материале.

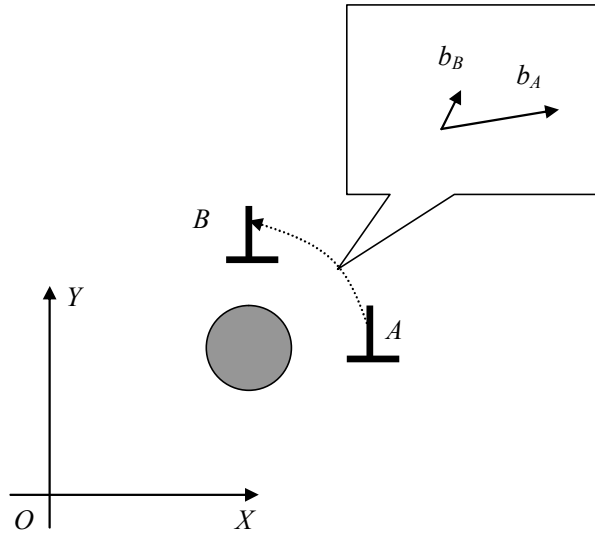


Рис. 3. Схематическое изображение процесса переползания стопора из точки A в точку B дислокацией в аморфном материале. Выноска – изменение при этом в плоскости XOY величины и направления вектора Бюргерса дислокации в аморфном материале

Расчеты показывают, что легирующий компонент локализуется не только вдоль полосы сдвига, но и в некотором удалении от средней части ее длины. Область локализации легирующего компонента также зависит от температуры и соотношения радиуса атома матрицы и легирующего компонента, что следует из формулы (5).

#### Условие равновесия полос сдвига в аморфном материале

Равновесные параметры полос сдвига могут быть найдены с использованием условия равновесия полосы сдвига. При этом также могут использоваться и дополнительные условия. По аналогии с условием равновесия, приведенным в [12], запишем условие равновесия полосы сдвига в аморфном материале:

$$b_{кр} \sigma_{xy}(x, 0) + b_B \sigma_{xz}(x, 0) + S(x) + b_{кр} \sigma_{xy}^e(x, 0) + b_B \sigma_{xz}^e(x, 0) = 0, \quad (6)$$

где  $\sigma_{xy}(x, 0)$  и  $\sigma_{xz}(x, 0)$  берутся из соотношения (1) при  $y = 0$ ;  $\sigma_{xy}^e(x, 0)$  и  $\sigma_{xz}^e(x, 0)$  – компоненты тензора внешних напряжений;  $S(x)$  – сила торможения, величина и направление которой в состоянии равновесия зависят от направления движения дислокаций в аморфном материале, предшествовавшего равновесию. Она включает в себя диссипативную силу трения и всегда направлена против движения. Из формул (2) следует, что  $\sigma_{xz}(x, 0) = 0$ .

При  $\sigma_{xy}^e(x, 0) = 0$  и  $\sigma_{xz}^e(x, 0) = 0$  выражение (6) принимает вид:

$$S(x) = -\frac{\mu \rho_0 b_{кр}^2}{4\pi(1-\nu)} \int_0^L \frac{\cos\left(\frac{2\pi x_0}{l}\right) + 1}{x - x_0} dx_0. \quad (7)$$

Результаты расчетов схематически представлены на рис. 4. При отсутствии внешних сил ( $\sigma_{xy}^e(x, 0) = 0$ ,  $\sigma_{xz}^e(x, 0) = 0$ ) сила  $S(x)$  имеет максимальные значения на начальном этапе развития полосы сдвига. При дальнейшем развитии полосы сила сопротивления убывает до нуля (рис. 4). При  $\sigma_{xy}^e(x, 0) = \text{const}$  и  $\sigma_{xz}^e(x, 0) = \text{const}$  ход зависимости  $S(x)$  практически не изменяется. Меняются лишь численные значения силы сопротивления. В случае, если  $\sigma^e = ax + b$  (здесь  $a$  и  $b$  константы), сила сопротивления вначале убывает, а затем снова растет (рис. 4). Это соответствует процессу, когда зарождение полосы сдвига

связано с большими энергетическими затратами, а рост полосы сдвига до равновесных параметров длины  $L$ , определяемых внешними силами  $\sigma^e$ , облегчен из-за уменьшения силы сопротивления. При этом дальнейшее увеличение длины полосы сдвига требует дополнительных энергетических затрат, в результате чего дальнейшее развитие полосы сдвига прекращается. Такая ситуация, когда в общем случае  $\sigma^e = ax^n + b$  (здесь  $n$  – степенной показатель), соответствует случаю, наблюдаемому на эксперименте. Это естественная ситуация, так как процессы зарождения и развития полос сдвига в аморфном материале всегда происходят при  $\sigma^e \neq 0$ . Однако согласно разрабатываемой в данной работе модели на  $\sigma^e$  накладывается условие зависимости от  $x$  ( $\sigma^e = f(x)$ ), т. е.  $\sigma^e \neq \text{const}$ .

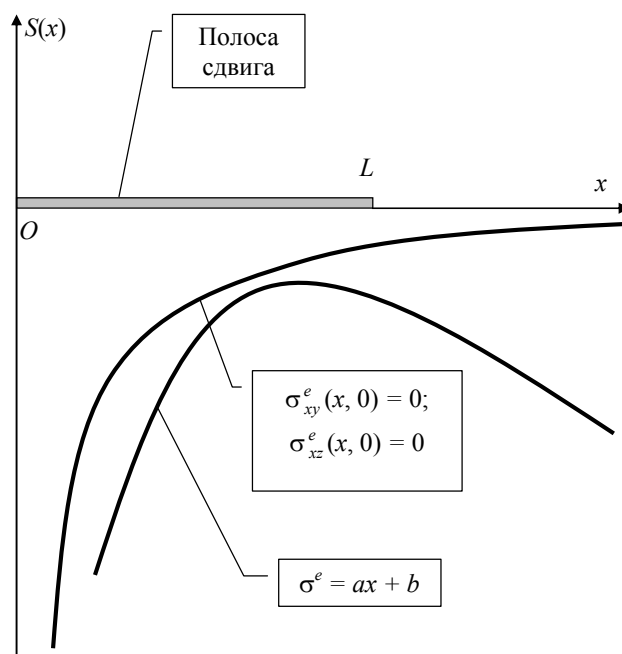


Рис. 4. Схематическое изображение зависимости  $S(x)$  при  $\sigma_{xy}^e(x, 0) = 0$ ,  $\sigma_{xz}^e(x, 0) = 0$  и  $\sigma^e = ax + b$

### Заключение

Таким образом, предложена дислокационная модель полосы сдвига в аморфном материале. Рассмотрен частный случай, когда квазидислокации вдоль полосы сдвига распределены по гармоническому закону. На основании модели рассчитаны поля напряжений, которые создает полоса сдвига в аморфном материале. Определены концентрационные профили, которые указывают на то, что легирующий компонент локализуется не только вдоль полосы сдвига, но и в некотором удалении от средней ее части. На основании условия равновесия полосы сдвига в аморфном материале показано, что равновесная длина полосы сдвига определяется не только силами сопротивления, но и характером внешних напряжений.

### Литература

1. Верещагин, М. Н. Негомогенная пластическая деформация аморфных сплавов на основе железа : моногр. / М. Н. Верещагин, В. Г. Шепелевич, О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2004. – 134 с.
2. Судзуки, К. Аморфные металлы / К. Судзуки, Х. Фудзимори, К. Хасимото. – Москва : Металлургия, 1987. – 328 с.
3. Новиков, И. И. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки / И. И. Новиков, К. М. Розин. – Москва : Металлургия, 1990. – 336 с.

4. Верещагин, М. Н. Аналогии и различия в развитии сдвиговой пластической деформации при локальном деформировании аморфных и монокристаллических материалов / М. Н. Верещагин, О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2003. – № 3. – С. 35–37.
5. Глезер, А. М. Структура и механические свойства аморфных сплавов / А. М. Глезер, Б. В. Молотилов. – Москва : Металлургия, 1992. – 208 с.
6. Верещагин, М. Н. Дислокационная модель полос сдвига в аморфных материалах / М. Н. Верещагин, О. М. Остриков, С. Н. Цыбранкова // Механика твердого тела. – 2004. – № 4. – С. 98–105.
7. Верещагин, М. Н. Использование модели чередующихся дислокационных стенок для моделирования напряженного состояния у полос сдвига в аморфных материалах / М. Н. Верещагин, О. М. Остриков // Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого. – 2003. – № 4. – С. 36–40.
8. Верещагин, М. Н. Механизм пластической деформации аморфных сплавов / М. Н. Верещагин, О. М. Остриков, Д. Б. Зюков // Докл. НАН Беларуси. – 2003. – Т. 47, № 3. – С. 117–120.
9. Верещагин, М. Н. Дислокационная модель полисинтетических полос сдвига в аморфных материалах / М. Н. Верещагин, О. М. Остриков // Приклад. механика и техн. физика. – 2003. – Т. 44, № 3. – С. 164–168.
10. Верещагин, М. Н. Ветвление полос сдвига аморфных материалов / М. Н. Верещагин, О. М. Остриков // Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого. – 2003. – № 1. – С. 11–20.
11. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – Москва : Атомиздат, 1972. – 600 с.
12. Косевич, А. М. О дислокационной модели двойника / А. М. Косевич, Л. А. Пастур // Физика твердого тела. – 1961. – Т. 3, № 4. – С. 1290–1297.

*Получено 05.12.2006 г.*