УДК 534.5

ПОЛЯ ДЕФОРМАЦИЙ У КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА, НАХОДЯЩЕГОСЯ У ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА

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

Двойникование, как и скольжение, относится к основным процессам пластической деформации кристаллов [1], [2]. Учет двойникования особенно важен при изучении пластической деформации таких материалов, как олово, сурьма, висмут, бронзы, латуни и др. Особенно активно двойникование реализуется в условиях затруднения скольжения, например, при низких температурах, ориентационном запрете на скольжение, больших скоростях деформирования и т. д.

Однако данный канал пластической деформации все еще относится к разряду малоизученных. Несмотря на множество экспериментальных работ [1]–[3], механизмы зарождения и развития двойников в настоящее время не достаточно ясны. Это позволяет выделить направление теоретического исследования процесса двойникования, направленное на моделирование процессов формирования и эволюции двойников в кристаллах [4]–[6].

Целью данной работы стала разработка способа расчета полей деформаций вблизи двойника клиновидной формы с использованием дислокационного подхода на масштабном уровне, позволяющем учесть расстояние между двумя соседними дислокациями двойниковой границы.

Для расчета деформаций у клиновидного двойника, находящегося вблизи поверхности кристалла, необходимо найти суперпозицию деформаций у клиновидного двойника и у двойника-изображения, зеркально симметричного исходному двойнику относительно плоскости поверхности, но состоящего из дислокаций противоположного знака (рис. 1) [7].

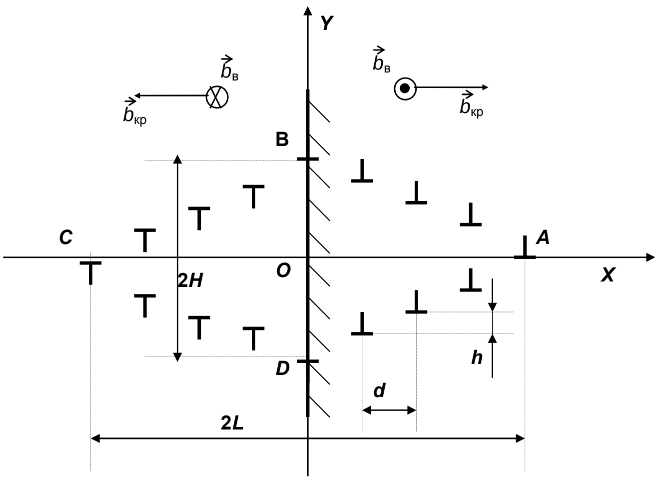


Рис. 1. Схематическое изображение распределения дислокаций в системе клиновидный двойник и двойник-изображение. След плоскости поверхности на плоскости *XOY* совпадает с осью *OY*

Двойникующие дислокации являются частичными дислокациями Шокли [7], поэтому их вектор Бюргерса $(\vec{b})$ можно разложить на винтовую $(\vec{b}_{\text{в}})$ и краевую $(\vec{b}_{\text{кр}})$ составляющие. Примем ориентировку данных составляющих у клиновидного двойника и двойника-изображения такой, как показано на рис. 1. Тогда для однородной изотропной среды на основании принципа суперпозиции в случае плоского деформированного состояния можно получить соотношения для компонент тензора деформации:

$$u_{xx}(x,y)=\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y+nh}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}-\right.\right.$$

$$\left.-\frac{(x+nd-L)^2(y+nh)}{(1-\nu)[(x+nd-L)^2+(y+nh)^2]^2}\right)-$$

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y+nh}{(x-nd+L)^2+(y+nh)^2}-\right.$$

$$\left.-\frac{(x-nd+L)^2(y+nh)}{(1-\nu)[(x-nd+L)^2+(y+nh)^2]^2}\right)+$$

$$+\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y-nh}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}-\right.$$

$$\left.-\frac{(x+nd-L)^2(y-nh)}{(1-\nu)[(x+nd-L)^2+(y-nh)^2]^2}\right)-$$

$$-\sum_{n=1}^{N-1}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y-nh}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}-\right.$$

$$\left.\left.-\frac{(x-nd+L)^2(y-nh)}{(1-\nu)[(x-nd+L)^2+(y-nh)^2]^2}\right)\right];$$

$$u_{yy}(x,y)=-\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y+nh}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}-\right.\right.$$

$$\left.-\frac{(y+nh)[(x+nd-L)^2-(y+nh)^2]}{2(1-\nu)[(x+nd-L)^2+(y+nh)^2]^2}\right)-$$

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y+nh}{(x-nd+L)^2+(y+nh)^2}-\right.$$

$$\left.-\frac{(y+nh)[(x-nd+L)^2-(y+nh)^2]}{2(1-\nu)[(x-nd+L)^2+(y+nh)^2]^2}\right)+$$

$$+\sum_{n=1}^{N-1}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y-nh}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}-\right.$$

$$\left.-\frac{(y-nh)[(x+nd-L)^2-(y-nh)^2]}{2(1-\nu)[(x+nd-L)^2+(y-nh)^2]^2}\right)-$$

$$-\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y-nh}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}-\right.$$

$$\left.\left.-\frac{(y-nh)[(x-nd+L)^2-(y-nh)^2]}{2(1-\nu)[(x-nd+L)^2+(y-nh)^2]^2}\right)\right];$$

$$u_{zz}(x,y)=0\,; \qquad (1)$$

$$u_{xy}(x,y)=\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1}{4(1-\nu)}\frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}+\right.\right.$$

$$\left.+\frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2-3(y+nh)^2]}{4(1-\nu)[(x+nd-L)^2+(y+nh)^2]^2}\right)-$$

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\left(\frac{1}{4(1-\nu)}\frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2+(y+nh)^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2-3(y+nh)^2]}{4(1-\nu)[(x-nd+L)^2+(y+nh)^2]^2}\right)+$$

$$+\sum_{n=1}^{N-1}\left(\frac{1}{4(1-\nu)}\frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2-3(y-nh)^2]}{4(1-\nu)[(x+nd-L)^2+(y-nh)^2]^2}\right)-$$

$$-\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{1}{4(1-\nu)}\frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}+\right.$$

$$\left.\left.+\frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2-3(y-nh)^2]}{4(1-\nu)[(x-nd+L)^2+(y-nh)^2]^2}\right)\right];$$

$$u_{xz}(x,y)=-\frac{b_{\text{в}}}{4\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\frac{y+nh}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}-\right.$$

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

$$+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{y-nh}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}-\sum_{n=1}^{N}\frac{y-nh}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}\Bigg];$$

$$u_{yz}(x,y)=\frac{b_{\text{в}}}{4\pi}\Bigg[\sum_{n=0}^{N}\frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}-$$

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

$$+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}-\sum_{n=1}^{N}\frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}\Bigg],$$

где ν – коэффициент Пуассона; L – расстояние от поверхности до вершины клиновидного двойника; d и h – величины проекций на оси OX и OY соответственно отрезка, соединяющего две соседние двойникующие дислокации на двойниковой границе; n – индекс суммирования; N – число, равное количеству дислокаций на двойниковых границах.

В (1) учтено, что в вершине двойника может находиться только одна двойникующая дислокация. Данные соотношения получены на основании формул для расчета деформаций у единичной двойникующей дислокации [7] путем суммирования деформаций представленного на рис. 1 скопления дислокаций.

Пример использования метода представлен на рис. 2. Принималось: $0 < x < 30$, $-15 < y < 15$ (в мкм); $N = 100$; $d = 0{,}15$ мкм; $h = 0{,}05$ мкм. Такие параметры имеют двойники, например, в монокристаллах висмута [8]–[10]. Рассматривались двойники, находящиеся у поверхности, когда существенно ее влияние на деформированное состояние у двойника. Для удобства вычислялись безразмерные величины:

$$\chi_{ij}(x,y)=u_{ij}(x,y)\Big/u_{ij}^{(0)}, \tag{2}$$

где

$$u_{ij}^{(0)}=B_{ij}/L. \tag{3}$$

Здесь $B_{xx}=B_{yy}=B_{xy}=\dfrac{b_{\text{кр}}}{2\pi}$; $B_{xz}=B_{yz}=\dfrac{b_{\text{в}}}{2\pi}$.

Деформации u_{xx} и u_{yy} (безразмерный эквивалент χ_{xx} и χ_{yy} (соответственно) локализованы не только у границ клиновидного двойника, но и в ограниченных областях внутри двойника и за его пределами (рис. 2*а*, 2*б*). В то же время деформации u_{xy} сосредоточены на двойниковых границах (рис. 2*в*).

При сравнении данных деформаций с деформациями у двойника, находящегося вдали от поверхности, можно отметить, что в случае деформаций u_{xy} поверхность не оказала существенного влияния на конфигурацию распределений у двойника. Изменились почти на порядок численные значения данных деформаций в областях их локализации.

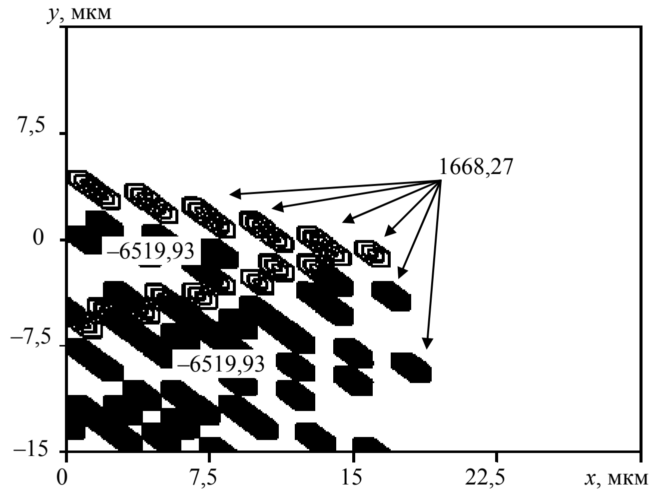


Рис. 2а. Распределение безразмерных величин деформаций у клиновидного двойника, находящегося у поверхности $\chi_{xx}(x, y)$

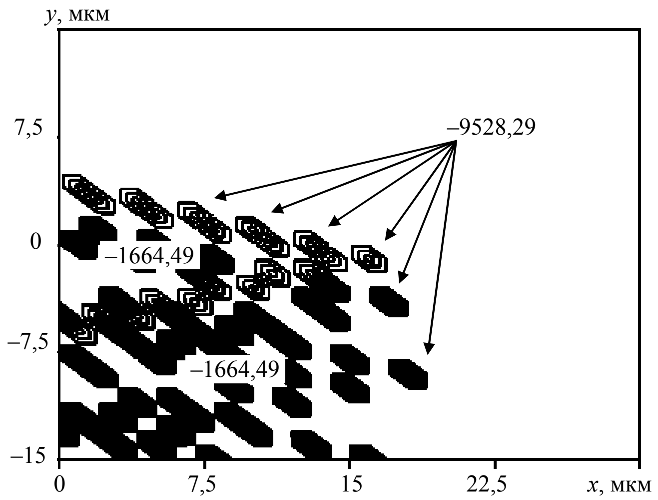


Рис. 2б. Распределение безразмерных величин деформаций у клиновидного двойника, находящегося у поверхности $\chi_{yy}(x, y)$

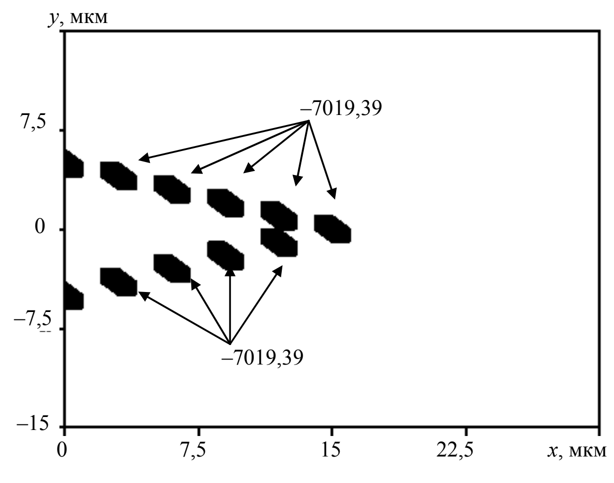


Рис. 2в. Распределение безразмерных величин деформаций у клиновидного двойника, находящегося у поверхности $\chi_{xy}(x, y)$

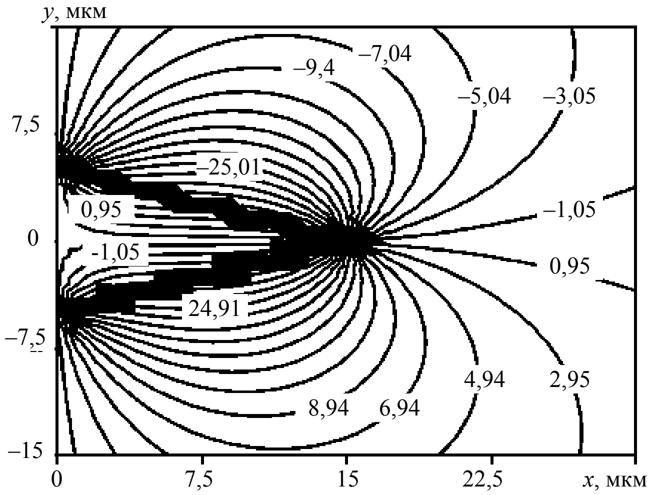
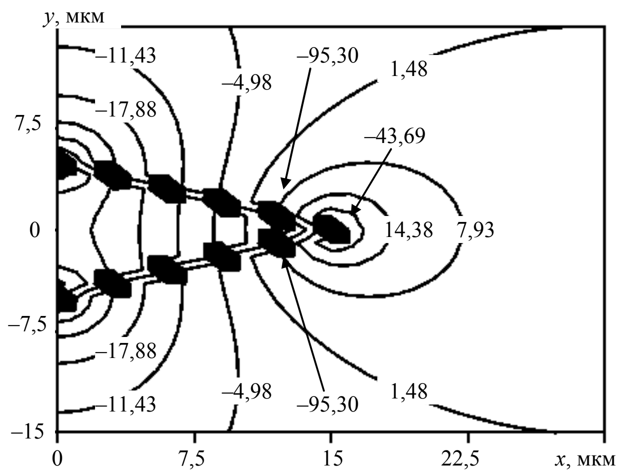


Рис. 2г. Распределение безразмерных величин деформаций у клиновидного двойника, находящегося у поверхности $\chi_{xz}(x, y)$



д)

Рис. 2д. Распределение безразмерных величин деформаций у клиновидного двойника, находящегося у поверхности $\chi_{yz}(x, y)$

В случае деформаций u_{xx} и u_{yy} поверхность поспособствовала созданию распределенных у двойника областей локализации деформаций, величина которых возросла на два порядка.

Конфигурация распределения деформаций u_{xz} и u_{yz} (рис. 2*г*, 2*д*) у двойника, находящегося у поверхности, такая же, как и у двойника, удаленного от поверхности. При этом деформации u_{xz} в обоих случаях имеют одинаковые численные значения в идентичных областях относительно двойника. Величина деформаций u_{yz} уменьшилась на четыре порядка.

Таким образом, предложена дислокационная модель, позволяющая рассчитывать деформации у клиновидного двойника, находящегося у поверхности. Модель дает возможность учитывать численное значение расстояния между двойникующими дислокациями. Проведен сравнительный анализ конфигураций распределения деформаций у двойника, находящегося у поверхности, и у двойника, расположенного вдали от поверхности.

Литература

1. Полухин, П. И. Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – Москва : Металлургия, 1982. – 584 с.
2. Финкель, В. М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В. М. Финкель, В. А. Федоров, А. П. Королев. – Ростов-на-Дону, 1990. – 172 с.
3. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – Москва : АН СССР, 1960. – 262 с.
4. Остриков, О. М. Колебания атомов двойниковой границы / О. М. Остриков // Журн. техн. физики. – 1999. – Т. 69, № 6. – С. 115–118.
5. Остриков, О. М. Напряженное состояние у поверхности кристалла, деформируемой сосредоточенной нагрузкой, при наличии клиновидного двойника / О. М. Остриков // Журн. техн. физики. – 2009. – Т. 79, № 5. – С. 137–139.
6. Остриков, О. М. Расчет полей напряжений у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности кристалла / О. М. Остриков // Инженер.-физ. журн. – 2009. – Т. 82, № 1. – С. 184–190.
7. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – Москва : Атомиздат, 1972. – 600 с.
8. Остриков, О. М. Закономерности развития клиновидных двойников в монокристаллах висмута, подвергнутых полисинтетическому двойникованию / О. М. Остриков // Прикладная механика и техн. физика. – 2008. – Т. 49, № 3. – С. 208–216.
9. Остриков, О. М. Форма клиновидных двойников в локально деформируемых ионноимплантированных монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2006. – № 9. – С. 5–7.
10. 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.

Получено 20.02.2009 г.