

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ НА ОСНОВАНИИ МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ МОДЕЛИ РАВНОВЕСНЫХ ПАРАМЕТРОВ КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА ПРИ ОТСУТСТВИИ ВНЕШНИХ НАПРЯЖЕНИЙ

*Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого*

Определение равновесных параметров двойников является важной задачей, решение которой позволит прогнозировать развитие пластической деформации двойникованием при различных условиях деформирования двойникующихся материалов [1]. Величина напряжений, локализованных на двойниковых границах, зависит от плотности двойникующих дислокаций, которая в свою очередь определяется числом двойникующих дислокаций и расстоянием между ними [2–5]. Большая локализация напряжений на двойниковых границах приводит к образованию у них трещин, что способствует активизации процессов разрушения двойникующихся материалов [1]. Поэтому с практической точки зрения определение равновесной плотности двойникующих дислокаций и равновесного расстояния между ними при заданных внешних напряжениях и силах сопротивления развития двойника позволит определять оптимальные условия обработки материалов давлением, при которых будет исключено вредное влияние двойников. Это также позволит использовать свойство двойников улучшать механические характеристики материалов за счет создания резерва их пластичности.

Цель данной работы – определение с использованием мезоскопической дислокационной модели равновесного расстояния между двойникующими дислокациями на двойниковых границах на основе равновесного распределения сил, действующих на вершинную двойникующую дислокацию.

Представим клиновидный двойник состоящим из совокупности двойникующих дислокаций, представленных на рис. 1. Линии дислокаций расположены параллельно оси  $OZ$ , перпендикулярной плоскости рисунка. Двойникующие дислокации являются частичными дислокациями [1, 6],

вектор Бюргерса ( $\mathbf{b}$ ) которых может быть разложен на краевую ( $\mathbf{b}_{\text{кр}}$ ) и винтовую ( $\mathbf{b}_{\text{в}}$ ) составляющие. Тогда, зная напряжения, которые в однородной изотропной среде создает единичная дислокация [6], на основании принципа суперпозиции компоненты тензора напряжений возникающих вокруг рассматриваемого скопления дислокаций (рис. 1) в общем виде могут быть представлены следующим образом:

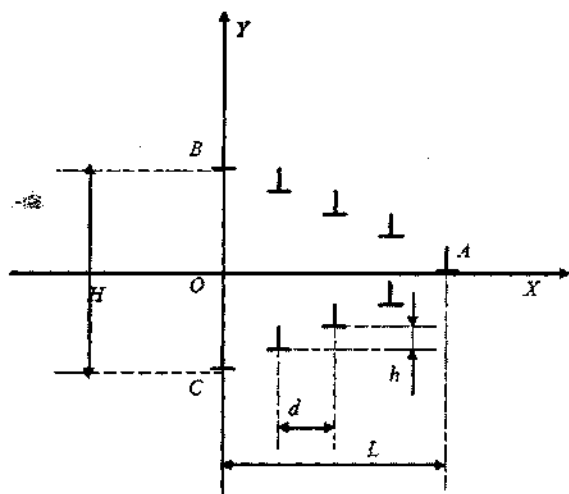


Рис. 1. Схематическое изображение клиновидного двойника в виде совокупности двойникующих дислокаций

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sum_n \sigma_{ij}^{BA}(x - nd, y + nh) + \sum_m \sigma_{ij}^{CA}(x - md, y - mh), \quad (1)$$

где  $i$  и  $j$  принимают значения  $x$ ,  $y$  или  $z$ ;  $n$  и  $m$  – индексы суммирования;  $d$  и  $h$  – проекции соответственно на оси  $OX$  и  $OY$  отрезка, соединяющего

две соседние дислокации (рис. 1);  $\sigma_{ij}^{BA}(x-nd, y+nh)$  и  $\sigma_{ij}^{CA}(x-md, y-mh)$  – напряжения, создаваемые скоплениями дислокаций на границах  $BA$  и  $CA$  соответственно (рис. 1).

В случае двойника, представленного на рис. 1, соотношение (1) примет вид:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx}(x, y) &= -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(y+nh)[3(x-nd-L)^2 + (y+nh)^2]}{[(x-nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \right. \\
 &\quad \left. \sum_{m=1}^M \frac{(y-mh)[3(x-md-L)^2 + (y-mh)^2]}{[(x-md-L)^2 + (y-mh)^2]^2} \right\}, \\
 \sigma_{yy}(x, y) &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(y+nh)[(x-nd-L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} - \right. \\
 &\quad \left. \sum_{m=1}^M \frac{(y-mh)[(x-md-L)^2 - (y-mh)^2]}{[(x-md-L)^2 + (y-mh)^2]^2} \right\}, \\
 \sigma_{xy}(x, y) &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(x-nd-L)[(x-nd-L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \right. \\
 &\quad \left. \sum_{m=1}^M \frac{(x-md-L)[(x-md-L)^2 - (y-mh)^2]}{[(x-md-L)^2 + (y-mh)^2]^2} \right\}, \\
 \sigma_{zz}(x, y) &= -\frac{\mu b_{кр}\nu}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd-L)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md-L)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \\
 \sigma_{xz}(x, y) &= -\frac{\mu b_{\epsilon}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd-L)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md-L)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \\
 \sigma_{yz}(x, y) &= \frac{\mu b_{\epsilon}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{x-nd}{(x-nd-L)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{x-md}{(x-md-L)^2 + (y-mh)^2} \right\},
 \end{aligned} \tag{2}$$

где  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$  – нормальные, а  $\sigma_{xy}$ ,  $\sigma_{xz}$ ,  $\sigma_{yz}$  – скалывающие напряжения двойникующих дислокаций;  $N$  и  $M$  – число дислокаций на каждой из границ двойника.

Для ведения дальнейших расчетов необходимо знание напряжений в вершине клиновидного двойника при отсутствии в ней вершинной двойникующей дислокации. Для этого в (2) необходимо принять  $x=L$ ,  $y=0$  и суммирование по  $n$  вести не от нуля, а от единицы. Тогда из (2) получим

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx}(L, 0) &= -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{nh[3(nd)^2 + (nh)^2]}{[(nd)^2 + (nh)^2]^2} - \sum_{m=1}^M \frac{mh[3(md)^2 + (mh)^2]}{[(md)^2 + (mh)^2]^2} \right\}, \\
 \sigma_{yy}(L, 0) &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{nh[(nd)^2 - (nh)^2]}{[(nd)^2 + (nh)^2]^2} - \sum_{m=1}^M \frac{mh[(md)^2 - (mh)^2]}{[(md)^2 + (mh)^2]^2} \right\}, \\
 \sigma_{xy}(L, 0) &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{nd[(nd)^2 - (nh)^2]}{[(nd)^2 + (nh)^2]^2} + \sum_{m=1}^M \frac{md[(md)^2 - (mh)^2]}{[(md)^2 + (mh)^2]^2} \right\}, \\
 \sigma_{zz}(L, 0) &= -\frac{\mu b_{кр}\nu}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{nh}{(nd)^2 + (nh)^2} - \sum_{m=1}^M \frac{mh}{(md)^2 + (mh)^2} \right\}, \\
 \sigma_{xz}(L, 0) &= -\frac{\mu b_{\epsilon}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{nh}{(nd)^2 + (nh)^2} - \sum_{m=1}^M \frac{mh}{(md)^2 + (mh)^2} \right\}, \\
 \sigma_{yz}(L, 0) &= -\frac{\mu b_{\epsilon}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{nd}{(nd)^2 + (nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{md}{(md)^2 + (mh)^2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{3}$$

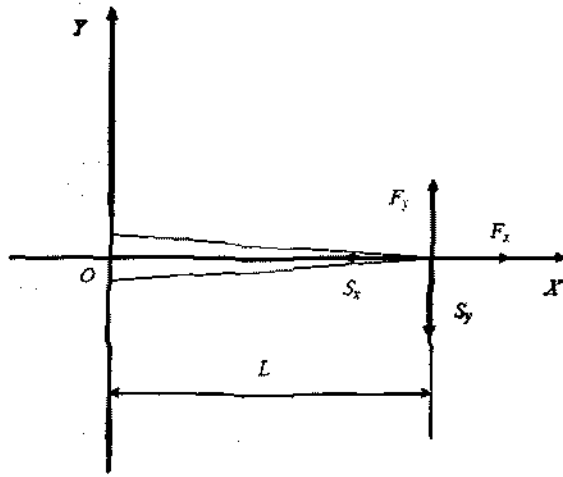


Рис. 2. Иллюстрация проекций сил, действующих на вершинную двойникующую дислокацию

Равновесные параметры заклинившегося клиновидного двойника будем находить исходя из условия равенства нулю сил, действующих на вершинную двойникующую дислокацию этого двойника. В случае отсутствия внешних сил, действующих на двойник, можно записать

$$\begin{cases} F_x - S_x = 0, \\ F_y - S_y = 0, \end{cases} \quad (4)$$

где  $S_x$  и  $S_y$  – проекции на оси  $OX$  и  $OY$  соответственно силы сопротивления движению вершинной двойникующей дислокации (рис. 2);  $F_x$  и  $F_y$  – проекции силы, действующей на дислокацию в вершине клиновидного двойника со стороны двойникующих дислокаций его границ, которые могут быть найдены следующим образом:

$$F_x = b_{кр} \sigma_{xx} + b_{кр} \sigma_{xy} + b_e \sigma_{xz}, \quad (5)$$

$$F_y = b_{кр} \sigma_{xy} + b_{кр} \sigma_{yy} + b_e \sigma_{yz}. \quad (6)$$

В данных соотношениях компоненты тензора напряжений берутся из (3).

В настоящей работе рассмотрим случай, когда число двойникующих дислокаций на каждой двойниковой границе одинаково. Это значит, что  $N = M$  и индекс суммирования  $m$  в (3) может быть заменен на индекс  $n$ . Тогда формула (4) примет следующий вид:

$$\frac{\mu b_{кр}^2}{\pi(1-\nu)} \sum_{n=1}^N \frac{nd[(nd)^2 - (nh)^2]}{[(nd)^2 + (nh)^2]^2} - S_x = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\mu b_{кр}^2}{\pi(1-\nu)} \sum_{n=1}^N \frac{nd[(nd)^2 - (nh)^2]}{[(nd)^2 + (nh)^2]^2} - \frac{\mu b_e^2}{\pi} \sum_{n=1}^N \frac{nd}{(nd)^2 + (nh)^2} - S_y = 0. \quad (8)$$

Введем параметр  $\alpha$ , связывающий  $d$  и  $h$  следующим образом:

$$d = 2\alpha h. \quad (9)$$

Используя операции элементарной геометрии, нетрудно показать, что параметр  $\alpha$  определяется как

$$\alpha = \frac{L}{H}, \quad (10)$$

где  $L$  – длина двойника,  $H$  – его ширина у устья (рис. 1). Тогда

$$S_x = \frac{1}{h} A \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}, \quad (11)$$

$$S_y = \frac{1}{h} B \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}, \quad (12)$$

где

$$A = \frac{\mu b_{кр}^2}{\pi(1-\nu)} \frac{2\alpha(4\alpha^2 - 1)}{(4\alpha^2 + 1)^2}, \quad (13)$$

$$B = \frac{\mu}{\pi} \frac{2\alpha}{4\alpha^2 + 1} \left[ \frac{b_{кр}^2}{1-\nu} \frac{4\alpha^2 - 1}{4\alpha^2 + 1} - b_e^2 \right] \quad (14)$$

Полная сила сопротивления, действующая на вершинную двойникующую дислокацию, находится из соотношения

$$S = \sqrt{S_x^2 + S_y^2}. \quad (15)$$

Подставляя в формулу (15) выражения (11) и (12) с учетом (13) и (14), получаем

$$S = \frac{1}{h} \sqrt{A^2 + B^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}. \quad (16)$$

Результаты расчета  $S$  в зависимости от  $L$  при разных значениях  $H$  при подстановке (10) в формулы (13) и (14) представлены на рис. 3. При этом принималось  $h = a$  (здесь  $a$  – межатомное расстояние). Расчеты велись для железа,  $a = 0,25$  нм;  $\mu = 81$  ГПа;  $\nu = 0,29$ ;  $b_v = b_{кр} = 0,124$  нм [7]. Количество дислокаций на двойниковой границе определяли по формуле

$$N = \frac{H}{2a}. \quad (17)$$

Из рис. 3 видно, что с ростом длины клиновидного двойника уменьшается сила сопротивления, действующая на вершинную дислокацию и обеспечивающая баланс сил заклинившего двойника. Это указывает на то, что увеличение расстояния между двойникующими дислокациями уменьшает уровень напряжений у вершины клиновидного двойника и требует меньшего сопротивления развитию двойника при формировании его равновесных геометрических параметров. При увеличении ширины двойника растет сила  $S$ . Это обусловлено тем, что число двойникующих дислокаций на двойниковой границе с шириной двойника у устья связано соотношением (17), согласно которому  $N$  растет с ростом  $H$ , что в свою очередь приводит к увеличению напряжений у двойниковых границ и росту сил, действующих на вершинную двойникующую дислокацию. Поэтому для обеспечения неподвижности двойника растет и сила  $S$ , компенсирующая взаимодействие вершинной двойникующей дислокации с дислокациями двойниковых границ.

Равновесное расстояние между двойникующими дислокациями может быть найдено из соотношения

$$R = \sqrt{d^2 + h^2} = h\sqrt{4\alpha^2 + 1}. \quad (18)$$

Здесь  $h$  находится из формулы (16). В результате получим

$$R = \frac{1}{S} \sqrt{4\alpha^2 + 1} \sqrt{A^2 + B^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}. \quad (19)$$

Результаты расчетов представлены на рис. 4. С ростом длины двойника при фиксированной его ширине у устья расстояние между двойникующими дислокациями увеличивается. Скорость роста параметра  $R$  при длинах двойника, меньших 100 мкм, выше, чем при более высоких значениях  $L$ . Это указывает на то, что для роста двойников при  $L > 100$  мкм необходимо участие процесса генерации двойникующих дислокаций, проявляющегося в росте ширины двойника у устья.

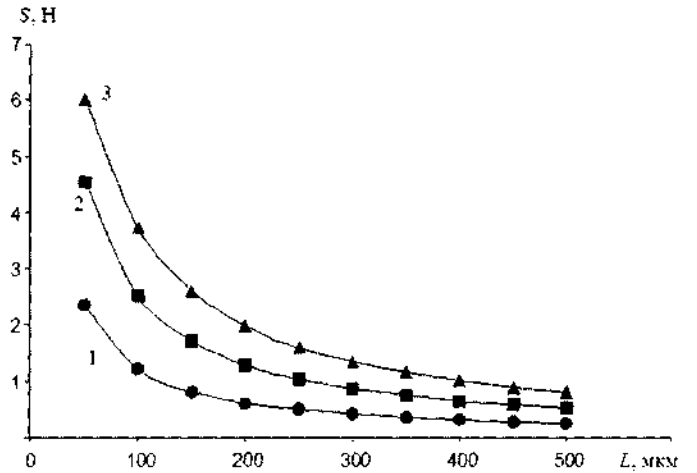


Рис. 3. Зависимость модуля силы сопротивления, действующей на вершинную двойникующую дислокацию, от длины клиновидного двойника при следующих значениях ширины двойника у устья: 10 мкм (1), 20 (2), 30 мкм (3)

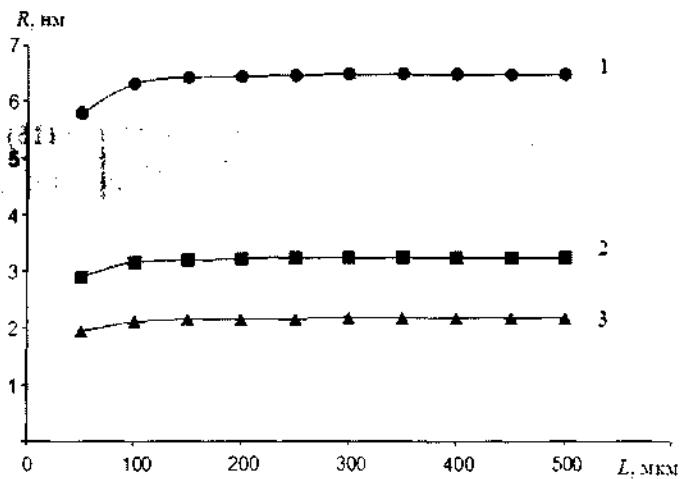


Рис. 4. Зависимость расстояния между двойнивающими дислокациями на границах клиновидного двойника от его длины при следующих значениях силы  $S$ , действующей на вершинную дислокацию: 1 — при  $S = 100$  МПа; 2 — при  $S = 200$  МПа; 3 — при  $S = 300$  МПа.

С ростом силы сопротивления развитию двойника расстояние между двойнивающими дислокациями уменьшается. Это связано с тем, что для достижения равновесного состояния при высоких значениях  $S$  необходимо повышение плотности двойнивающих дислокаций на двойниковых границах.

Таким образом, на основании мезоскопической дислокационной модели двойника получены соотношения для расчета сил сопротивления развитию клиновидного двойника и величины равновесного расстояния между двойнивающими дислокациями. Установлено, что с ростом длины двойника сила сопротивления, действующая на вершинную дислокацию клиновидного двойника, убывает, а расстояние между двойнивающими дислокациями растет.

### Литература

1. Классен-Неклюдова М. В. Механическое двойникование кристаллов. М., 1960.
2. Косевич А. М., Бойко В. С. // Успехи физических наук. 1971. Т. 104, № 2. С. 101–255.
3. Остриков О. М. // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2004. № 2. С. 104–113.
4. Остриков О. М. // Прикладная механика и техническая физика. 2002. Т. 43, №4. С. 180–182.
5. Остриков О. М. // Вестн. ГГТУ им. П. О. Сухого. 2006. № 2. С. 10–18.
6. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М., 1972.
7. Новиков И. И., Розин К. М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. М., 1990.

*O. M. OSTRIKOV*

### THE DETERMINATION OF EQUILIBRIUM PARAMETERS OF WEDGE-SHAPED TWIN AT ABSENCE OF EXTERNAL STRESSES BASED ON MESOSCOPIC DISLOCATION MODEL

### Summary

It is established on the base of the mesoscopic dislocation twin model, that with a twin length growth, the resistance force which acts on the vertex dislocation of the wedge-shaped twin, decreases, and the distance between twinning dislocations increases.