

УДК 538.3

НАПРЯЖЕННОЕ СОСТОЯНИЕ У НАНОРАЗМЕРНОГО ДВОЙНИКОВОГО ЗАРОДЫША ПРИ НАЛИЧИИ ВНУТРИ НЕГО ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА РАСШИРЕНИЯ

О. М. ОСТРИКОВ

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

Введение

Изучение стадий зарождения двойников является весьма сложной экспериментальной задачей [1]. В работе [2] впервые сообщалось о наблюдении нанодвойников, характеризующих начальную стадию развития двойников. Современные теоретические методы могут дать основу для определения направлений экспериментального исследования зарождения двойникования в деформируемом кристалле. Поэтому моделирование процессов зарождения двойников является актуальной задачей не только с научной, но и с практической точки зрения, так как это способствует развитию технологий, позволяющих управлять процессом двойникования, которое часто является причиной разрушения материалов, когда их ресурс прочности еще не исчерпан.

Цель данной работы – изучение напряженного состояния у наноразмерного двойника формы близкой к линзовидной форме при наличии внутри его центра-тора напряжений.

Постановка задачи и ее решение

Для расчета полей напряжений, создаваемых нанодвойником, воспользуемся схемой, представленной на рис. 1. На ней нанодвойник представлен в виде совокупности краевых и винтовых дислокаций. Пусть d и h – параметры, определяющие расстояние между двойниующими дислокациями (рис. 1) и находящиеся как проекции на оси OX и OY соответственно отрезка, соединяющего две соседние дислокации. Обозначим длину нанодвойника через $2L$, а ширину – через $2H$.

Так как двойниующие дислокации являются частичными дислокациями Шокли [2], [3], то их вектор Бюргерса можно разложить на две составляющие: краевую (\vec{b}_v) и винтовую (\vec{b}_b). Пусть данные составляющие вектора Бюргерса направлены так, как это показано на рис. 1. Тогда в приближении изотропности и однородности среды из известных соотношений для расчета полей напряжений у единичной дислокации [3]:

$$\sigma_{xx}^d = -\frac{\mu b_v}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

$$\sigma_{yy}^d = \frac{\mu b_v}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2},$$

$$\begin{aligned}\sigma_{xy}^d &= \frac{\mu b_v}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{zz}^d &= -\frac{\mu b_v \nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\ \sigma_{zx}^d &= -\frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\ \sigma_{zy}^d &= \frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2},\end{aligned}\tag{1}$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона, напряжения у рассматриваемого нанодвойника могут быть определены из выражений:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -\frac{\mu b_v}{2\pi(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{(y+nh)[3(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} - \right. \\ &\quad - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(y+nh)[3(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \\ &\quad + \sum_{n=1}^N \frac{(y-nh)[3(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]^2} - \\ &\quad \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{(y-nh)[3(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]^2} \right), \\ \sigma_{yy} &= \frac{\mu b_v}{2\pi(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{(y+nh)[(x+nd-L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} - \right. \\ &\quad - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(y+nh)[(x-nd+L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \\ &\quad + \sum_{n=1}^N \frac{(y-nh)[(x+nd-L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]^2} - \\ &\quad \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{(y-nh)[(x-nd+L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]^2} \right), \\ \sigma_{zz} &= -\frac{\mu b_v \nu}{\pi(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \right. \\ &\quad - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{y+nh}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{n=1}^N \frac{y-nh}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \\ &\quad \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{y-nh}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} = & \frac{\mu b_y}{2\pi(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} - \right. \\
& - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \\
& + \sum_{n=1}^N \frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]^2} - \\
& \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]^2} \right), \\
\sigma_{xx} = & -\frac{\mu b_b}{2\pi} \left(\sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \right. \\
& - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{y+nh}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{n=1}^N \frac{y-nh}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \\
& \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{y-nh}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right), \\
\sigma_{yy} = & \frac{\mu b_b}{2\pi} \left(\sum_{n=0}^N \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \right. \\
& - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{n=1}^N \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \\
& \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right), \tag{2}
\end{aligned}$$

где n – индекс суммирования; N – определяет число двойникующих дислокаций на каждой из двойниковых границ.

В соотношениях (2) учтено, что в точках A , B , C и D (рис. 1) может находиться только одна двойникующая дислокация.

Следует отметить, что рассматриваемые соотношения применимы для всех двойникующихся материалов, но с ограниченной точностью в рамках приближения изотропной и однородной среды.

Для определения напряжений у точечного источника расширения мощностью $\delta\nu$, находящегося в точке O (рис. 1), воспользуемся соотношением [2]:

$$\sigma_{rr} = -\frac{\mu\delta\nu}{\pi r^3}, \tag{3}$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

Используя соотношения [4]:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{rr} \sin^2\theta,$$

В нашем случае она составила 49,6 нм.

При отсутствии концентратора напряжений внутри двойникового зародыша положительные напряжения локализируются у его вершин (в точках *A* и *C* на рис. 1), а отрицательные – в средней его части (в точках *B* и *D* на рис. 1).

При помещении в точку *O* источника расширения, создающего напряжения, определяемые по формулам (4), при $\delta v = 1 \text{ мкм}^3$ и в приближении отсутствия процесса генерации двойниующих дислокаций положительные напряжения у вершин нанодвойника несколько уменьшаются, а отрицательные – увеличиваются (рис. 2б). При $\delta v = 10 \text{ мкм}^3$ отрицательные напряжения в средней части нанодвойника (в точках *B* и *D* на рис. 1) возрастают почти на порядок, а положительные напряжения, в отличие от предыдущего случая, у вершин нанодвойника (в точках *A* и *C* на рис. 1) также возрастают (рис. 2в).

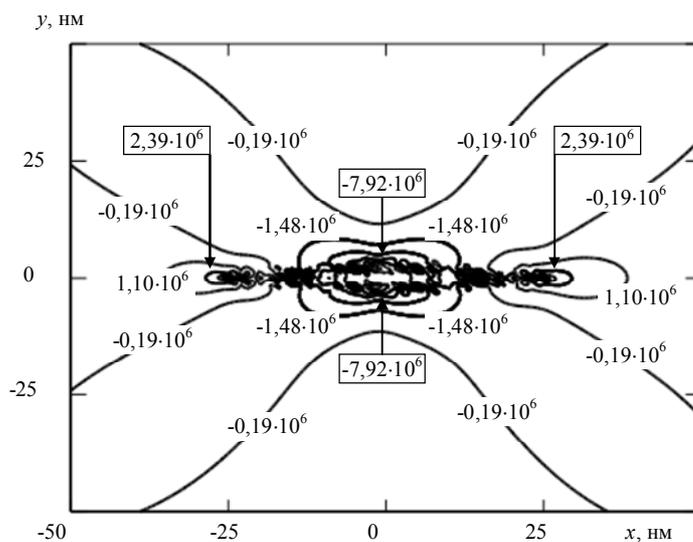


Рис. 2а. Распределение скалывающих σ_{xy} напряжений у нанодвойника при отсутствии дополнительных источников напряжений

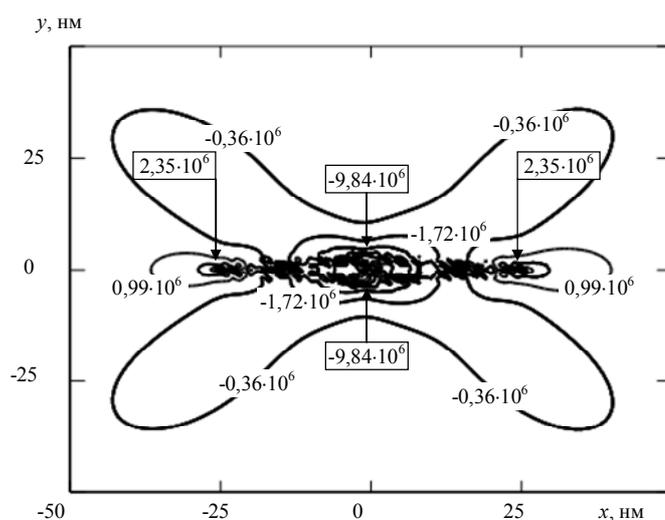


Рис. 2б. Распределение скалывающих σ_{xy} напряжений у нанодвойника при наличии точечного источника расширения с $\delta v = 1 \text{ мкм}^3$

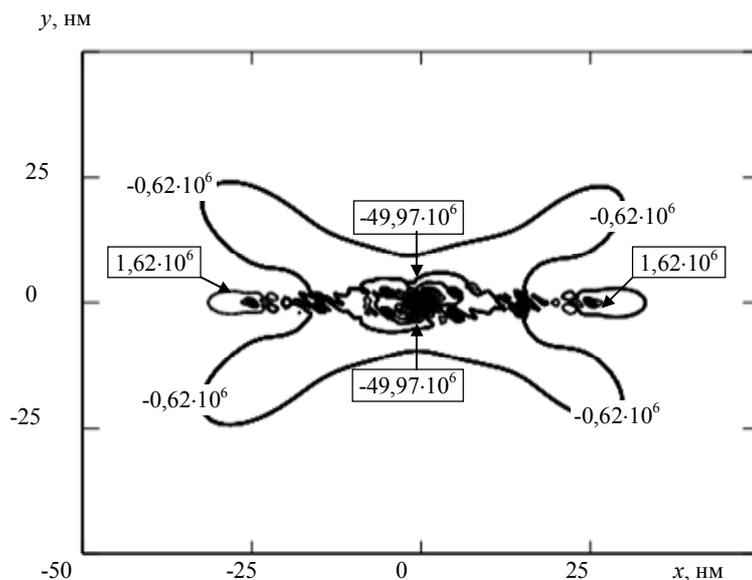


Рис. 2в. Распределение скальвающих σ_{xy} напряжений у нанодвойника при наличии точечного источника расширения с $\delta v = 1 \text{ нм}^3$

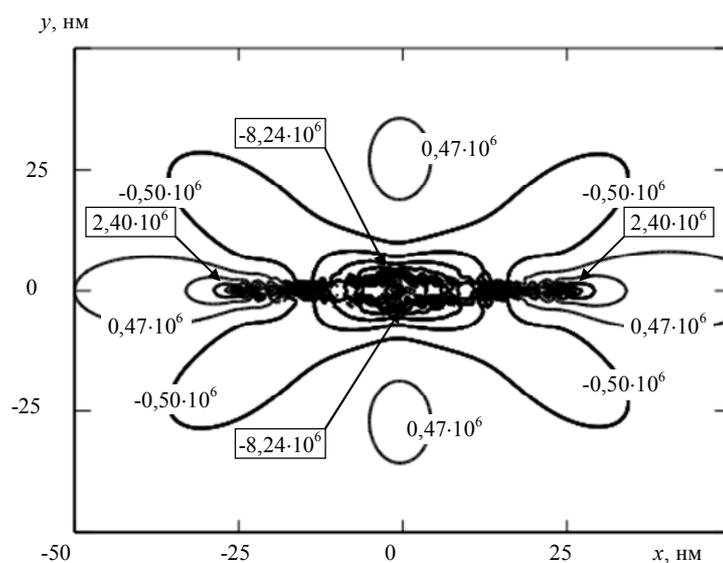


Рис. 2г. Распределение скальвающих σ_{xy} напряжений у нанодвойника при наличии в точке O полной краевой дислокации с величиной вектора Бюргера $b = 0,348 \text{ нм}$

Повышение уровня напряжений в средней части нанодвойника (в точках B и D на рис. 1) способствует генерации двойникующих дислокаций и росту ширины двойника. Поэтому можно предположить, что на начальных стадиях развитие двойников обусловлено преимущественно процессами генерации двойникующих дислокаций.

Интересна ситуация, когда в точке O (рис. 1) находится дислокация, так как в качестве одного из типов источников двойникующих дислокаций могут выступать полные дислокации, расщепляющиеся на частичные двойникующие дислокации [6].

В случае краевой дислокации, находящейся в точке O , распределение скальвающих напряжений σ_{xy} представлено на рис. 2г.

Как видно из рис. 2г, напряжения возрастают в точках, соответствующих токам B и D на рис. 1. В меньшей степени эти напряжения растут в области точек A и C на рис. 1. Это означает, что полная дислокация в точке O с вектором Бюргерса, ориентированным вдоль оси OX (рис. 1), способствует генерации новых двойникующихся дислокаций на границах двойникового зародыша.

Заключение

Таким образом, на основании дислокационной модели рассчитаны поля напряжений у наноразмерного двойникового зародыша. Изучено влияние на напряженное состояние у нанодвойника, находящегося внутри него точечного источника расширения. Установлено, что наличие точечного источника расширения способствует росту уровня скальвающих напряжений у нанодвойника таким образом, что благоприятным становится процесс генерации двойникующихся дислокаций. Этому также способствует полная дислокация, находящаяся внутри двойникового зародыша.

Литература

1. Остриков, О. М. Нанодвойникование монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Сер. Черная металлургия. – 2002. – № 3. – С. 51–52.
2. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – Москва : АН СССР, 1960. – 262 с.
3. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – Москва : Атомиздат, 1972. – 600 с.
4. Джонсон, К. Механика контактного взаимодействия / К. Джонсон. – Москва : Мир, 1989. – 510 с.
5. Полухин, П. И. Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – Москва : Металлургия, 1982. – 584 с.
6. Остриков, О. М. Влияние импульсов электрического тока на работу источников двойникующихся дислокаций в монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Инженер.-физ. журн. – 1999. – Т. 72, № 3. – С. 592–594.

Получено 20.02.2009 г.