

УДК 548.24

ДИСЛОКАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКОГО ДВОЙНИКА

О. М. ОСТРИКОВ, Е. В. КОРНЕЕВЕЦ

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

В настоящее время активно ведется исследование закономерностей формирования и развития групп двойников у концентратора напряжений [1]–[3]. При этом двойники, как правило, ориентированы не только параллельно, но и под определенным углом друг к другу, в соответствии с кристаллографией двойникования [4], [5]. Интересным является исследование поведения групп параллельных друг к другу двойников (полисинтетических двойников), так как такие двойники часто встречаются в зернах поликристаллов и образуют на поверхности монокристаллов специфический рельеф, который в [6] предлагается использовать для синтеза фазовых дифракционных решеток.

Целью данной работы явился расчет и физический анализ полей напряжений, которые создают полисинтетические двойники.

К наиболее хорошо зарекомендовавшим себя моделям двойников относятся дислокационные модели [4]. Известно [4], [7], [8], что двойничающие дислокации являются частичными дислокациями, вектор Бюргера которых имеет краевую $b_{кр}$ и винтовую составляющие b_v . Пусть вектор $b_{кр}$ направлен вдоль оси OY (рис. 1), а вектор b_v – перпендикулярно плоскости XOY . Тогда систему параллельных двойников одинаковой ширины d и ориентированных вдоль оси OY можно представить так, как это показано на рис. 1. Пусть H – расстояние между двойниками, а h – расстояние между двойничающими дислокациями (см. выноску на рис. 1). Учитывая, что дислокации на двух двойниковых границах имеют противоположный знак, используя принцип суперпозиции, не трудно показать, что компоненты тензора напряжений полисинтетического двойника могут быть рассчитаны по формулам:

$$\sigma_{xx}^{(1)} = -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[3(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2]}{[(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2]^2},$$

$$\sigma_{yy}^{(1)} = \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[(x-m(d+H))^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2]^2},$$

$$\sigma_{zz}^{(1)} = -\frac{\mu b_{кр} \nu}{\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2},$$

$$\sigma_{xy}^{(1)} = \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x-m(d+H))[(x-m(d+H))^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2]^2},$$

$$\sigma_{zx}^{(1)} = -\frac{\mu b_v}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2},$$

$$\begin{aligned} \sigma_{zy}^{(1)} &= \frac{\mu b_B}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x - n(d + H))^2}{(x - m(d + H))^2 + (y - nh)^2}, \\ \sigma_{xx}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y - nh)[3(x - m(d + H) - d)^2 + (y - nh)^2]}{[(x - m(d + H) - d)^2 + (y - nh)^2]^2}, \\ \sigma_{yy}^{(2)} &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y - nh)[(x - m(d + H) - d)^2 - (y - nh)^2]}{[(x - m(d + H) - d)^2 + (y - nh)^2]^2}, \\ \sigma_{zz}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{кр} \nu}{\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y - nh)^2}{(x - m(d + H) - d)^2 + (y - nh)^2}, \\ \sigma_{xy}^{(2)} &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x - m(d + H) - d)[(x - m(d + H) - d)^2 - (y - nh)^2]}{[(x - m(d + H) - d)^2 + (y - nh)^2]^2}, \\ \sigma_{zx}^{(2)} &= -\frac{\mu b_B}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y - nh)^2}{(x - m(d + H) - d)^2 + (y - nh)^2}, \\ \sigma_{zy}^{(2)} &= \frac{\mu b_B}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x - n(d + H) - d)^2}{(x - m(d + H) - d)^2 + (y - nh)^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; n и m – индексы суммирования; N – число дислокаций на двойниковой границе; M – число двойников в полисинтетическом двойнике; $\sigma_{ij}^{(1)}$ и $\sigma_{ij}^{(2)}$ – напряжения, создаваемые двумя границами единичного двойника, входящего в состав полисинтетического двойника.

Учитывая, что на двух границах двойника дислокации имеют противоположный знак, результирующие напряжения определяются из соотношения

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(1)} - \sigma_{ij}^{(2)}. \quad (2)$$

В соотношениях (1) учитывается конечное число двойникующих дислокаций. Это связано с тем, что при переходе к бесконечному суммированию в (1) теряется возможность получения точного решения в начале декартовой системы координат (рис. 1) и вдоль ее осей [9].

Результаты расчетов представлены на рис. 2. Из рис. 2 видно, что напряжения в полисинтетическом двойнике локализуются у вершин его двойников ($y = 0$ или, аналогично, $y = Nh = L$, здесь L – длина полисинтетического двойника). На рис. 3 показано расположение областей локализации напряжений по отношению к полисинтетическому двойнику. При $y = (Nh)/2 = L/2$ напряжения равны нулю, то есть внутри полисинтетического двойника напряжения скомпенсированы из-за симметричности рассматриваемой задачи. При $y = (Nh)/2 = L/2$ (рис. 2) величина напряжений значительно меньше, чем у вершин двойников.

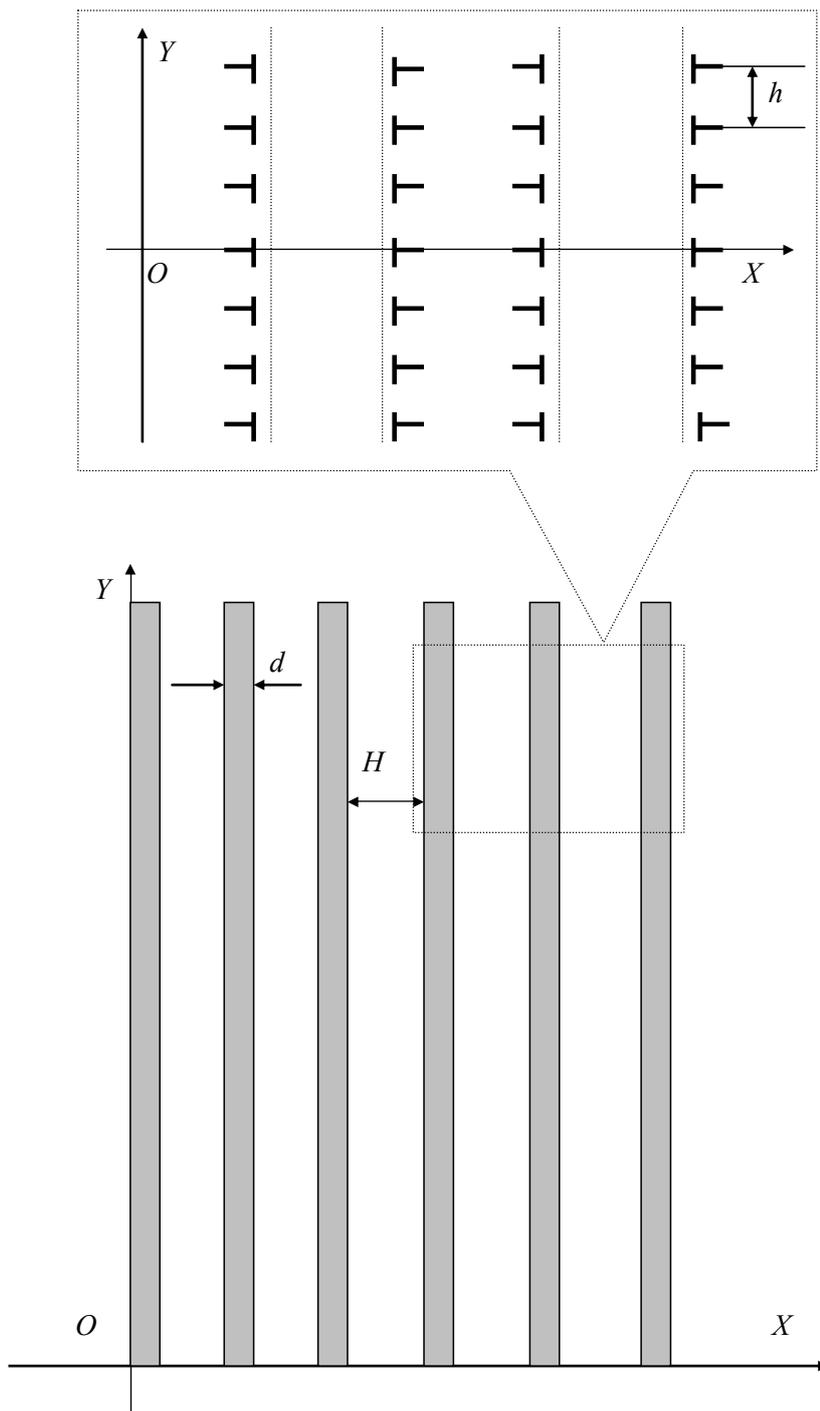


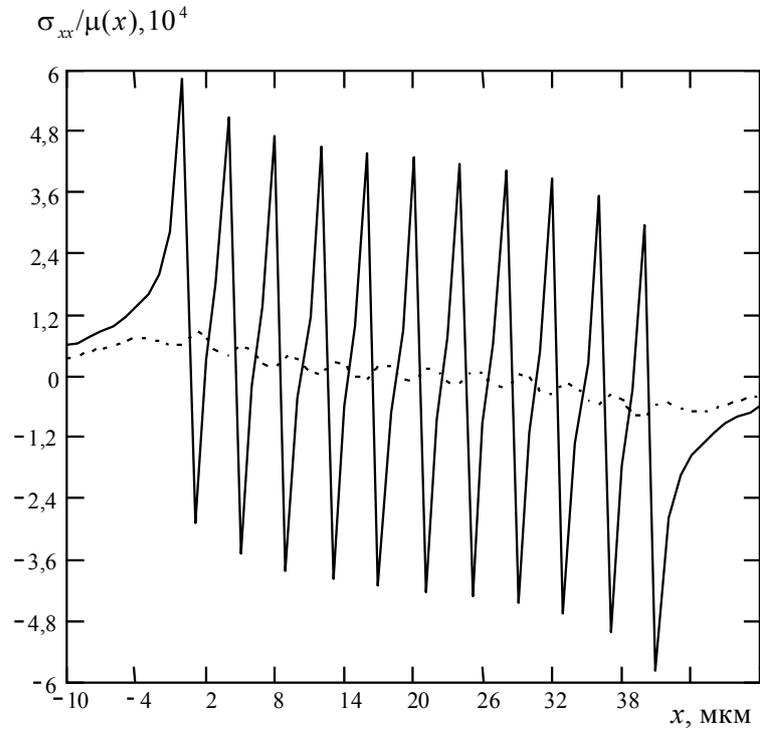
Рис. 1. Схематическое изображение полисинтетического двойника
(выноски – дислокационная модель полисинтетического двойника)

Следует обратить внимание на периодический характер напряжений в области их локализации (рис. 2). Период перепадов напряжений связан с шириной двойников d , расстоянием между ними H , а величина напряжений зависит от плотности ρ двойникующих дислокаций на двойниковых границах ($\rho = N/L$).

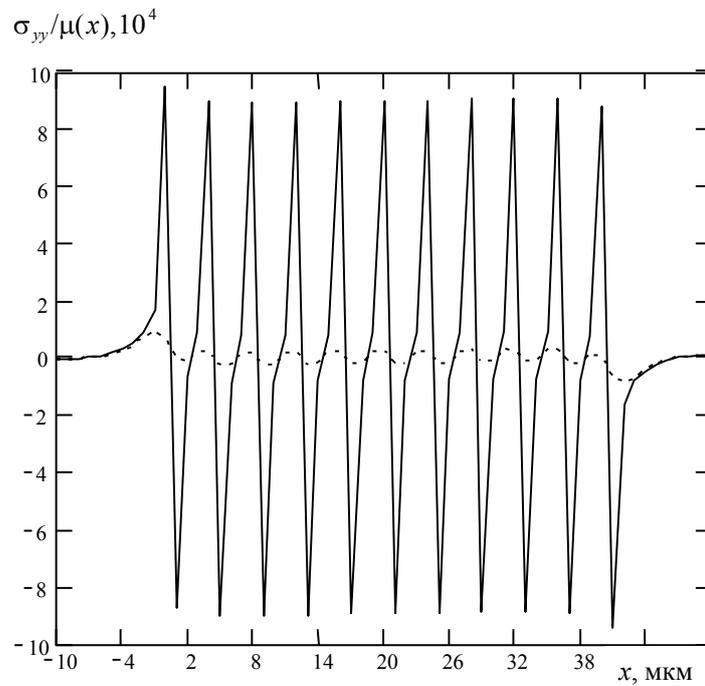
Интересно знать условие равновесия полисинтетического двойника, которое по аналогии с [10] можно записать в виде:

$$b_{кр} \sigma_{xy}(0, y) + b_{в} \sigma_{xy}(0, y) + S(y) + b_{кр} \sigma_{xy}^e(0, y) + b_{в} \sigma_{xz}^e(0, y) = 0, \quad (3)$$

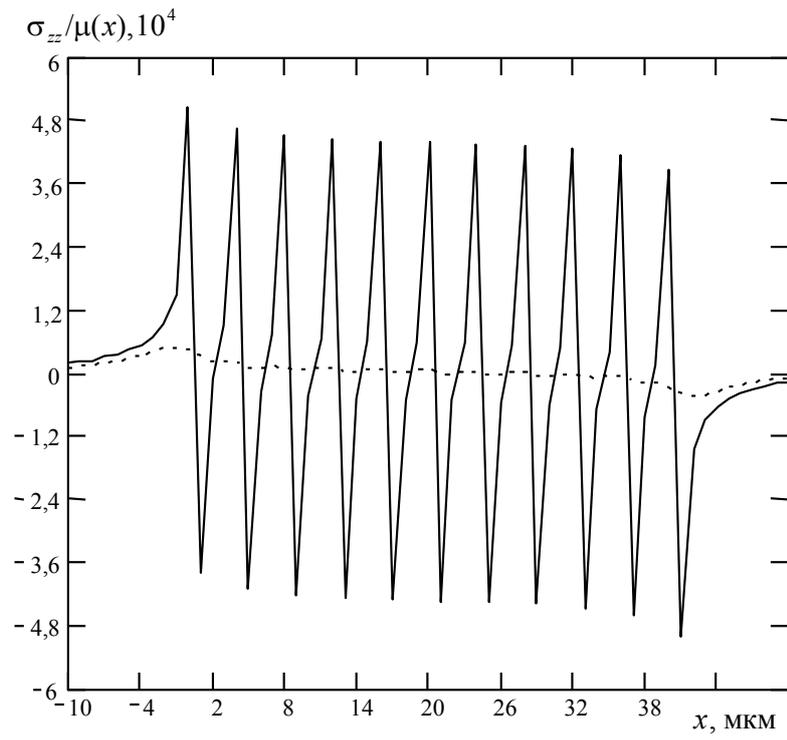
где $\sigma_{xy}(0, y)$ и $\sigma_{xz}(0, y)$ берутся из (1) при $x = 0$; $\sigma_{xy}^e(0, y)$ и $b_b \sigma_{xz}^e(0, y)$ – компоненты тензора внешних напряжений; $S(y)$ – сила торможения, величина и направление которой в состоянии равновесия зависят от направления движения дислокаций, предшествовавшего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



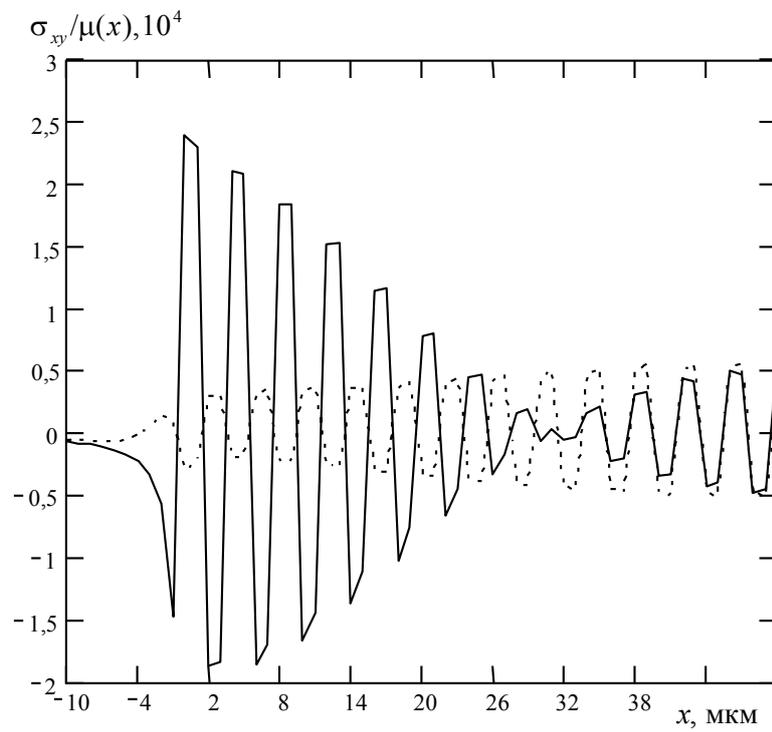
a)



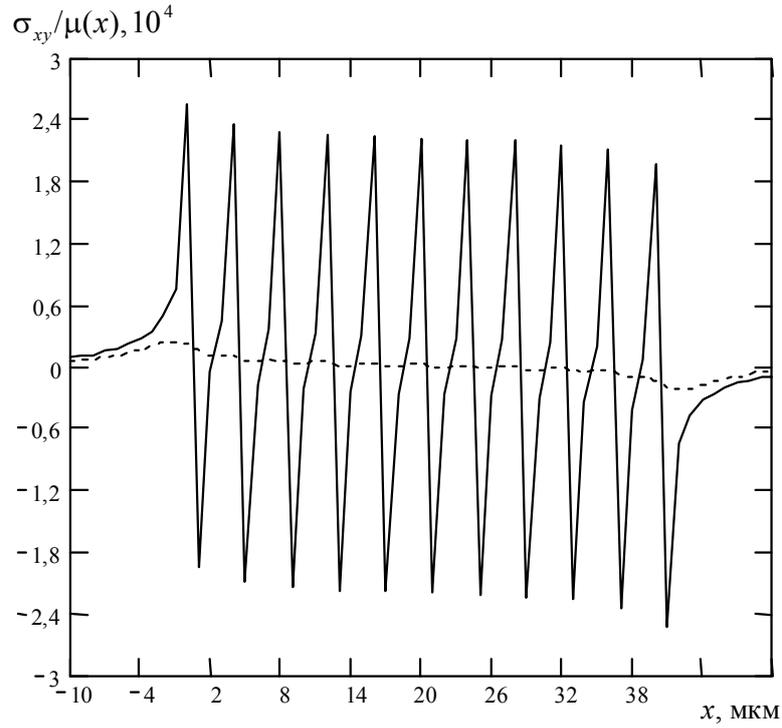
b)



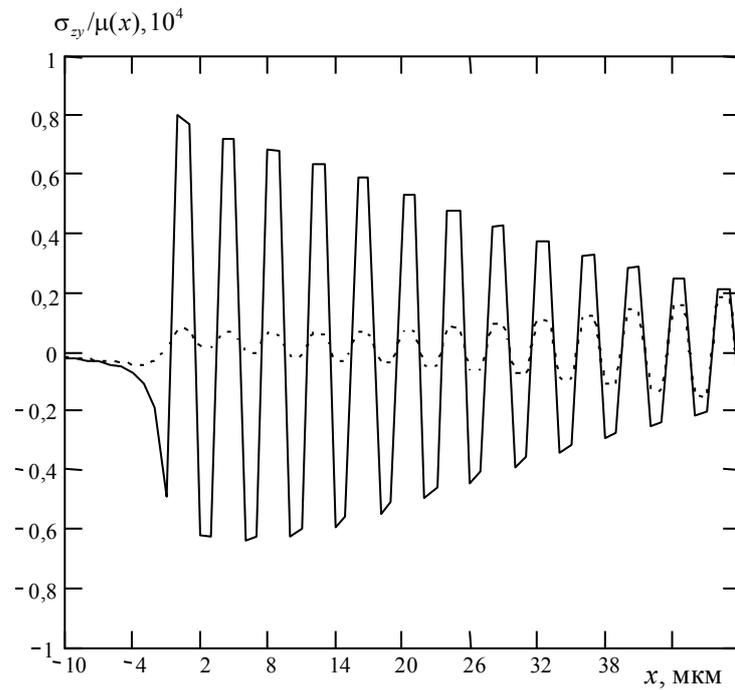
б)



в)



д)



е)

Рис. 2. Результаты расчета полей напряжений у полисинтетического двойника (сплошная линия – $y = 0$, пунктирная $y = (Nh)/4$): а – $\sigma_{xx}/\mu(x)$; б – $\sigma_{yy}/\mu(x)$; в – $\sigma_{zz}/\mu(x)$; г – $\sigma_{xy}/\mu(x)$; д – $\sigma_{zx}/\mu(x)$; е – $\sigma_{zy}/\mu(x)$. При расчете принималось: $\nu = 0,33$; $b_{кр} = 1 \text{ \AA}$; $b_B = 0,5 \text{ \AA}$; $d = 1 \text{ мкм}$; $H = 3 \text{ мкм}$; $h = 0,1 \text{ мкм}$; $M = 10$; $N = 100$

Рассмотрим случай, когда $\sigma_{xy}^e(0, y) = 0$ и $b_b \sigma_{xz}^e(0, y) = 0$. Это соответствует случаю заклинившего двойника [10]. Тогда $S/\mu(y)$ в случае полисинтетического двойника будет иметь вид, представленный на рис. 4. Наибольшее значение сила торможения принимает у вершин двойников, где наблюдается локализация напряжений (рис. 3). В то же время вдоль направления развития двойников (вдоль оси OY) данная сила близка к нулю и меняет знак у противоположных вершин двойников. Увеличение силы торможения у одной из вершин единичного двойника способствует тому, что двойники в полисинтетическом двойнике способны развиваться в одном направлении.

Если сравнивать величину $S/\mu(y)$ в направлениях, проходящих вдоль двойниковой границы единичного двойника, входящего в группу двойников полисинтетического двойника, и вдоль направления, проходящего через середину двойника параллельно оси OY , то из рис. 4 видно, что у границ двойников сила торможения ниже, чем внутри их.

Зависимость от y всех рассматриваемых в (3) сил обусловлена тем, что свободное перемещение двойникующих дислокаций возможно только в плоскости, параллельной вектору Бюргерса, поэтому интересны лишь составляющие сил, параллельные оси OY .

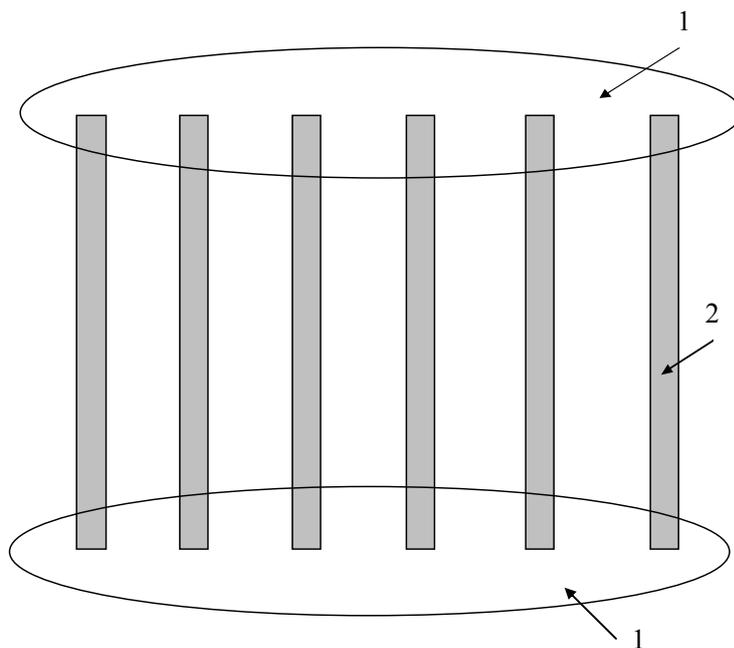


Рис. 3. Области максимальной локализации (1) напряжений у полисинтетического двойника конечной длины (2 – двойник)

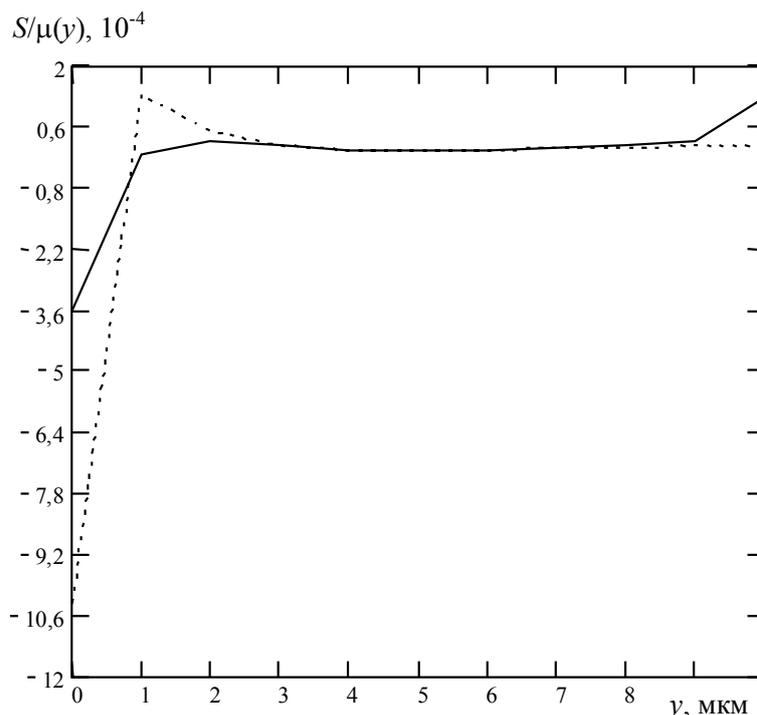


Рис. 4. Зависимость силы торможения (отнесенной к модулю сдвига) от расстояния вдоль двойника (y): сплошная линия – вдоль границы двойника; пунктирная – вдоль середины двойника

Таким образом, разработана дислокационная модель полисинтетического двойника. На основании данной модели рассчитаны поля напряжений в полисинтетическом двойнике и показано, что напряжения локализованы у вершин двойника и носят осциллирующий знакопеременный характер в направлении, перпендикулярном границам двойников, входящих в состав полисинтетического двойника. Из условия равновесия заклинившего полисинтетического двойника рассчитана сила торможения, действующая на полисинтетический двойник. Показано, что данная сила имеет разный знак у противоположных вершин полисинтетического двойника и близка к нулю вдоль длины двойника. Величина силы сопротивления выше в средней части, чем у границы, единичного двойника, входящего в состав полисинтетического двойника.

Работа поддержана ФФИ Республики Беларусь (грант Ф05М-009).

Литература

1. Остриков, О. М. Влияние температурных условий деформирования на реализацию двойникового монокристаллов висмута, облученных ионами бора, азота и углерода / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2003. – № 2. – С. 29–31.
2. Остриков, О. М. Исследование механического двойникового монокристаллов сурьмы методом наноиндентирования / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Инженер.-физ. журн. – 2003. – Т. 76, № 1. – С. 170–172.
3. Остриков, О. М. Особенности зарождения клиновидных двойников у отпечатка пирамиды Вика на поверхности (111) монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Материаловедение. – 2002. – № 1. – С. 17–20.

4. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – Москва : АН СССР, 1960. – 262 с.
5. 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.
6. 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.
7. Остриков, О. М. Напряженное состояние у вершины клиновидного двойника / О. М. Остриков // Механика твердого тела. – 2004. – № 2. – С. 104–113.
8. 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.
9. 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.
10. Косевич, А. М. О дислокационной модели двойника / А. М. Косевич, Л. А. Пастур // Физика твердого тела. – 1961. – Т. 3, № 4. – С. 1290–1297.

Получено 06.06.2005 г.