

**О. М. Остриков**

**МЕХАНИКА ДВОЙНИКОВАНИЯ  
ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

**Гомель  
ГГТУ им. П. О. Сухого  
2008**

УДК 539.21

**Остриков, О. М.** Механика двойникования твердых тел / О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2008. – 301 с. : ил. – ISBN 978-985-420-724-7.

В монографии обобщены и систематизированы результаты собственных исследований автора в области механики двойникования твердых тел.

Разработаны мезоскопическая и макроскопическая теории двойникования кристаллов, что позволило рассчитать поля напряжений у клиновидного двойника с различной формой границ, а также у нанодвойника, полисинтетического двойника и применить результаты расчетов для решения задач механики деформируемого твердого тела с учетом вклада двойникования.

Для специалистов в области механики деформируемого твердого тела, обработки материалов давлением, физики конденсированных сред, материаловедения; инженерно-технических и научных работников, преподавателей, аспирантов, магистрантов и студентов соответствующего профиля.

Табл. 4, ил. 236, список лит. – 125 назв.

Рецензенты: член-корреспондент НАН Беларуси, доктор технических наук *Н. К. Мышкин* (ГНУ ИММС НАН Беларуси);  
доктор физико-математических наук, профессор *А. В. Чигарев* (БНТУ);  
кандидат технических наук *С. В. Шилько* (ГНУ ИММС НАН Беларуси)

*Рекомендовано к изданию Советом ГГТУ им. П. О. Сухого  
(протокол № 6 от 12.02.2008 г.)*

ISBN 978-985-420-724-7

© Остриков О. М., 2008

© Оформление. Учреждение образования  
«Гомельский государственный технический  
университет имени П. О. Сухого», 2008

Научное издание

**Остриков Олег Михайлович**

# **МЕХАНИКА ДВОЙНИКОВАНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

**Монография**

Редакторы: *Н. Г. Мансурова,  
Н. В. Гладкова,  
С. Н. Санько*

Компьютерная верстка *Н. Б. Козловская*  
Художник обложки *М. В. Дриго*

Подписано в печать 17.06.08.

Формат 60x84/16. Бумага офсетная. Гарнитура «Таймс».

Ризография. Усл. печ. л. 17,67. Уч.-изд. л. 16,19.

Тираж 100 экз. Заказ № /57.

Издатель и полиграфическое исполнение:  
Издательский центр учреждения образования  
«Гомельский государственный технический университет  
имени П. О. Сухого».

ЛИ № 02330/0131916 от 30.04.2004 г.

246746, г. Гомель, пр. Октября, 48.

## Оглавление

Введение .....	5
Глава 1. Механическое двойникование и его модели .....	8
1.1. Двойникование и его кристаллография .....	8
1.2. Макроскопическая теория двойникования И. М. Лифшица .....	10
1.3. Атомарная модель двойникования .....	20
1.4. Дислокационные модели двойникования .....	28
Глава 2. Мезоскопическая дислокационная модель клиновидных двойников .....	34
2.1. Клиновидные микро- и нанодвойники .....	35
2.2. Расчет полей напряжений, смещений и деформаций у клиновидного двойника на основании мезоскопической дислокационной модели .....	60
2.3. Расчет полей напряжений и деформаций у вершины двойника клиновидной формы .....	75
2.4. Влияние дисбаланса количества дислокаций на двойниковых границах на напряженное состояние у клиновидного двойника .....	87
2.5. Роль поверхности в формировании напряженно-деформированного состояния у клиновидного двойника .....	94
2.6. Расчет энергии клиновидного двойника на основании мезоскопической дислокационной модели .....	106
2.7. Условие равновесия клиновидного двойника на мезоскопическом уровне при отсутствии внешних напряжений .....	119
2.8. Мезоскопическая дислокационная модель развивающегося клиновидного двойника .....	126
Глава 3. Макроскопическая дислокационная модель заклинившихся двойников клиновидной формы .....	133
3.1. Метод расчета полей напряжений, смещений и деформаций у клиновидного двойника на основании макроскопической дислокационной модели .....	134
3.2. Учет формы границы и плотности двойникующих дислокаций у клиновидного двойника в макроскопической дислокационной модели .....	151
3.3. Поля напряжений у клиновидного двойника, находящегося вблизи поверхности кристалла, при непрерывном распределении двойникующих дислокаций на границах .....	171
3.4. Условие равновесия клиновидного двойника в его макроскопической дислокационной модели при отсутствии внешних напряжений .....	179
3.5. Расчет распределения примеси и потоков ее миграции у клиновидного двойника .....	183



Глава 4. Линзовидные двойники и наноразмерные зародыши двойников .....	187
4.1. Использование метода электростатической аналогии в модели линзовидного двойника .....	187
4.2. Дислокационная мезоскопическая модель нанодвойниковых зародышей .....	206
4.3. Зарождение наноразмерных фаз в нанодвойниках .....	214
Глава 5. Полисинтетическое двойникование .....	217
5.1. Классификация полисинтетических двойников .....	217
5.2. Мезоскопическая дислокационная модель полисинтетического двойника .....	225
5.3. Макроскопическая дислокационная модель полисинтетического двойника .....	240
5.4. Распределение примесей у полисинтетического двойника и теоретические основы синтеза слоистых материалов .....	248
5.5. О возможности применения полисинтетического двойникования для получения фазовых дифракционных решеток .....	252
Глава 6. Применение теории двойникования для решения некоторых задач механики деформируемых твердых тел при сопутствующем развитии двойникования .....	269
6.1. Напряженное состояние у наноразмерного двойникового зародыша при наличии точечного источника расширения .....	270
6.2. Расчет полей напряжений в деформируемом сосредоточенной или распределенной нагрузкой кристалле при наличии в нем клиновидного двойника .....	274
6.3. Метод расчета полей напряжений в упругом полупространстве при наличии полисинтетического двойника .....	285
Заключение .....	294
Литература .....	296

# ВВЕДЕНИЕ

Двойникование относится к основному каналу пластической деформации твердых тел. Оно чаще проявляется в тех случаях, когда затруднено скольжение. По сравнению со скольжением процесс двойникования можно считать менее изученным. Об этом, в частности, свидетельствует отсутствие целостной теории двойникования. Ввиду особого значения, которое играет двойникование в процессах разрушения материалов, изменении их физических свойств, закономерностей деформирования двойникующихся материалов, развитие теории двойникования является актуальной научной проблемой.

Решение задач механики деформируемых твердых тел в большинстве случаев не предполагает учет напряжений, которые создают дефекты кристаллической решетки. В случае двойникования, которое создает в кристалле высокий уровень напряжений, иногда соизмеримый с пределом прочности материала, такое пренебрежение может привести к завышенной оценке прочностных характеристик применяемых на практике материалов, что особенно недопустимо при использовании материалов в конструкциях, требующих высокой степени надежности при длительной эксплуатации. Поэтому другой важной научно-практической проблемой является разработка методов решения задач механики деформируемого твердого тела с учетом роли двойникования.

Решению этих проблем и посвящена данная монография, в которой обобщены и систематизированы результаты собственных исследований автора.

В первой главе дан краткий обзор признанных в настоящее время теорий двойникования, основным недостатком которых является недостаточное их развитие, приводящее к тому, что они могут быть изложены лишь в одной отдельной статье.

Во второй главе рассматриваются основы дислокационной мезоскопической теории двойникования, в которой двойникование

рассматривается на таком масштабном уровне, когда возможен учет расстояния между двойникующими дислокациями введением отдельного параметра, определяющего это расстояние.

В третьей главе масштабный уровень изменяется таким образом, что расстояние между двойникующими дислокациями считается бесконечно малым. В этом случае вступает в силу параметр, характеризующий линейную плотность двойникующих дислокаций на двойниковых границах. Следует отметить, что до недавнего времени данная теория использовала приближение тонкого двойника, выходя на еще более высокий уровень абстрагирования. Однако это привело к ограниченности в применении дислокационной макроскопической модели двойника из-за того, что она не позволяла рассматривать большой класс наблюдаемых на практике двойников, шириной которых нельзя пренебречь. Этому недостатка лишена разработанная автором теория, изложенная в третьей главе монографии.

Масштабный уровень мезоскопической дислокационной модели двойника позволяет рассматривать нанодвойники, характеризующие начальные стадии развития двойников. Это продемонстрировано в четвертой главе монографии. Более того, в данной главе впервые сделана попытка использования метода электростатических аналогий для расчета полей напряжений у двойников линзовидной формы.

Поскольку в большинстве случаев деформирования двойникующихся материалов двойники возникают группами, то представляет интерес изучение полисинтетического двойникования. Этому посвящена пятая глава, в которой также положены теоретические основы применения полисинтетического двойникования для синтеза слоистых материалов и получения фазовых дифракционных решеток.

Шестая глава посвящена решению ряда имеющих важное значение в механике деформируемого твердого тела задач для демонстрации возможной области применения развитой теории двойникования.

Автор стремится по возможности сопроводить изложение этапов развития дислокационной теории двойникования результатами собственных экспериментальных исследований, способствуя при этом, с одной стороны, расширению представлений читателя о явлении двойникования, с другой – экспериментальному обоснованию принимаемым в моделях допущениям.

Автор считает своим долгом выразить благодарность профессору Василевичу Юрию Владимировичу за сотрудничество, ценные замечания и рекомендации, которые воодушевили автора на написание

данной монографии, профессору Шепелевичу Василию Григорьевичу за плодотворную совместную работу и профессору Савенко Владимиру Семеновичу за переданный автору ценный опыт в исследовании двойникования монокристаллов висмута.

Автор выражает глубокую признательность рецензентам данной книги директору Института механики металло-полимерных систем НАН Беларуси, члену-корреспонденту НАН Беларуси, доктору технических наук Н. К. Мышкину, заведующему отделом механики адаптивных материалов и биомеханики этого же института С. В. Шилько и заведующему кафедрой «Теоретическая механика» БНТУ, доктору физико-математических наук, профессору А. В. Чигареву за ценные замечания и предложения, учтенные при подготовке монографии к изданию.

Работа поддержана БР ФФИ (гранты Ф99М-025, Ф05М-009, Ф07М-045, Ф08-106).

# Глава 1

## МЕХАНИЧЕСКОЕ ДВОЙНИКОВАНИЕ И ЕГО МОДЕЛИ

Несмотря на имеющиеся в настоящее время работы по математическому моделированию процессов двойникования кристаллов, теория двойникования еще далека от своего завершения. Рассмотрим основные существующие подходы к моделированию двойникования.

### 1.1. Двойникование и его кристаллография

Двойники представляют собой области кристаллической решетки, закономерно переориентированные относительно матричной решетки [1]. Специфика переориентации кристаллической решетки при двойниковании заключается в том, что решетка двойника совмещается с исходной кристаллической решеткой либо поворотом вокруг двойниковой оси, либо отражением в двойниковой плоскости, или той и другой операцией вместе [1]. Такая переориентация, следовательно, может быть достигнута операцией инверсии в двойниковом центре [1], [2].

В плоскости двойникования атомы занимают положения, являющиеся общими для двойниковой области и матричного кристалла. В этом случае плоскости двойникования когерентные. Торцевые же границы двойника являются некогерентными и заканчиваются, как правило, внутри зерна или на его границах [1], [3].

Согласно определению, приведенному в [1], «двойником называется такой дефект кристаллической решетки, который возникает

при одновременном существовании в теле двух кристаллических структур, являющихся зеркальным изображением одна другой» (рис. 1.1). Следует добавить, что двойниковая граница является двумерным дефектом кристаллической решетки. Плоскость  $AA'$  на рис. 1.1 носит название плоскости двойникования [4]. Такое же название имеют и плоскости, параллельные данной. В кристалле может быть несколько эквивалентных систем плоскостей двойникования.

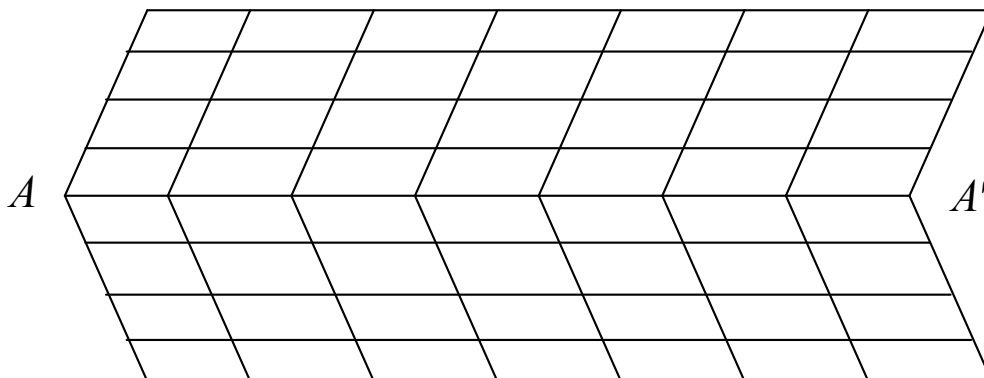


Рис. 1.1. Плоскость двойникования [4]

В кристаллографии для описания двойникового сдвига используют четыре основные характеристики, которые называют элементами двойникования. К ним относятся плоскость двойникования, направление двойникования, вторая основная плоскость или второе круговое сечение и ось основной зоны, являющейся линией пересечения второй основной плоскости и плоскости сдвига [1], [3].

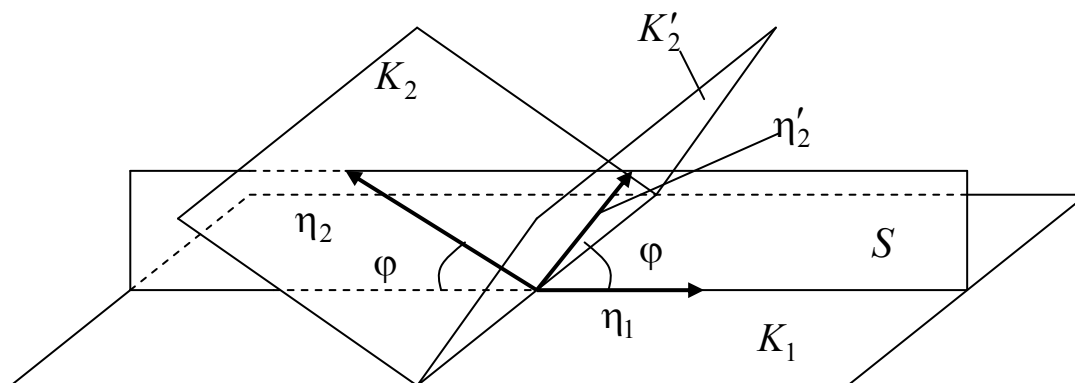


Рис. 1.2. Схема для определения элементов двойникования [3]

При двойниковании смещения атомов происходят в плоскости сдвига  $S$  (рис. 1.2) в направлении  $\eta_1$ . Для полного кристаллографиче-

ского описания двойникования необходимо указание совокупности следующих элементов двойникования [3]:

1.  $K_1$  – плоскость двойникования и  $\eta_1$  – направление сдвига. Направление  $\eta_1$  лежит в плоскости  $K_1$  (рис. 1.2). Плоскость  $K_1$  имеет название первой неискаженной плоскости. Это название связано с тем, что атомы, лежащие в данной плоскости, не смещаются.

2.  $K_2$  – плоскость до деформации и  $K'_2$  – плоскость после деформации (рис. 1.2). Данные плоскости пересекают плоскость  $K_1$  по линии, перпендикулярной направлению  $\eta_1$ , и составляют с данной плоскостью равные углы  $\varphi$  до и после сдвига в плоскости  $S$ .

3. Направления  $\eta_2$  и  $\eta'_2$ , которые ориентированы вдоль линии пересечения плоскости сдвига  $S$  с плоскостью  $K_2$  или  $K'_2$ .

4. Величина сдвига  $s$  и сдвиговая деформация в плоскости  $S$ . Угол  $\varphi$  между плоскостями  $K_1$  и  $K_2$  не меняется до и после двойникования. Величина сдвига  $s$  пропорциональна расстоянию от плоскости зеркального отражения.

## 1.2. Макроскопическая теория двойникования

### И. М. Лифшица

На основании опытов Р. И. Гарбера [5]–[8] в работе [9] И. М. Лифшицем была предложена макроскопическая модель двойникования кристаллов. Данная модель позволила показать целесообразность представлений о нелинейной зависимости между тензором напряжений  $\sigma_{ik}$  и тензором деформаций  $u_{ik}$ . При этом рассматривался плоский случай, который соответствует, например, случаю нагрузки кристалла лезвием, приложенным по прямой пересечения плоскости двойникования с поверхностью кристалла. На рис. 1.3 ось  $OY$  является следом плоскости двойникования, а  $\alpha$  – угол двойникования, который в работе [9] принимался малым, так как, например, для кальцита  $\alpha = 19^\circ$ . Это позволяет описывать деформацию сдвига обычными соотношениями теории упругости вплоть до углов, сравнимых с  $\alpha$  [10].

Зависимость между тензором напряжений  $\sigma_{ik}$  и деформациями сжатия  $u_{xx}$  и  $u_{yy}$  в работе [9] в первом приближении считалась линейной, а при выяснении зависимости между  $\sigma_{xy}$  и деформациями

сдвига  $u_{xy}$  учитывалось наличие равновесного двойникового положения при  $u_{xy} = 2\alpha$ , симметричного с первоначальным относительно оси  $OY$ . Это приводит к зависимости, представленной на рис. 1.4.

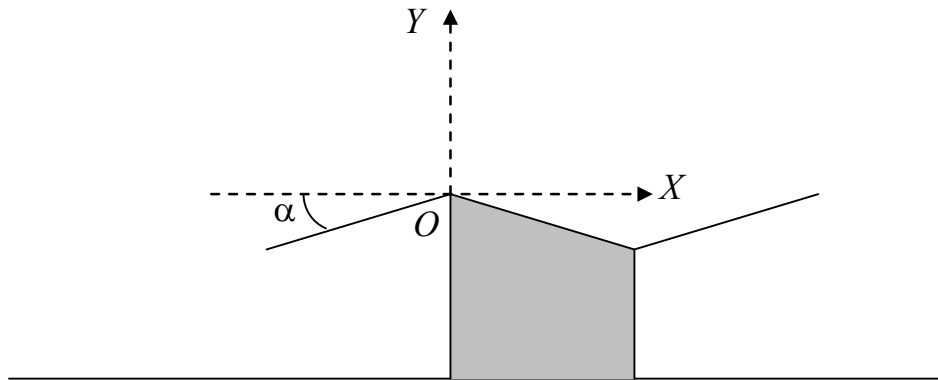


Рис. 1.3. Схема для определения угла двойникования [9]

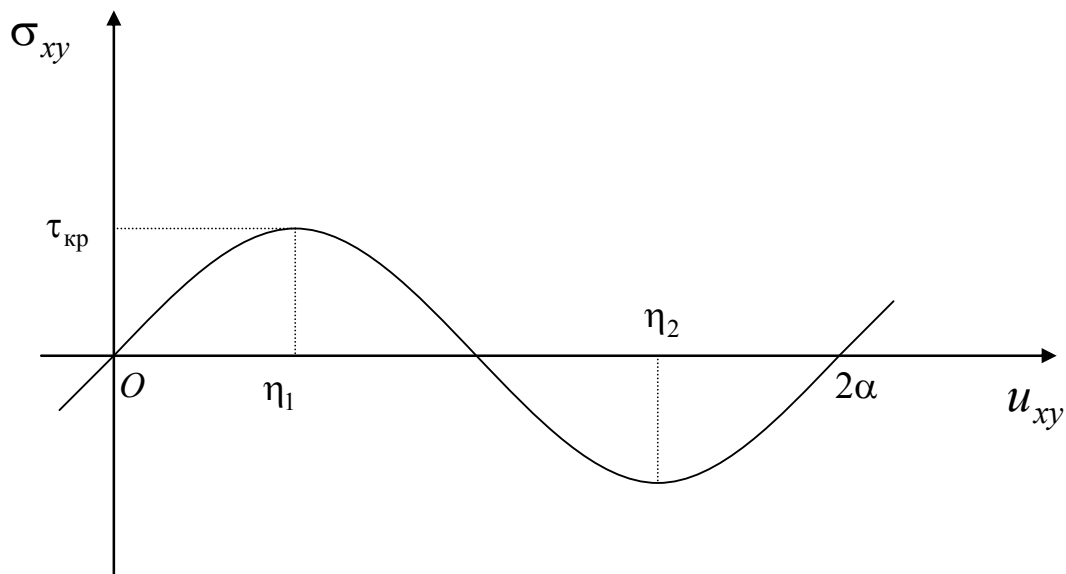


Рис. 1.4. Зависимость между скалывающими напряжениями и сдвиговыми деформациями в модели И. М. Лифшица [9]

Требование механической устойчивости относительно бесконечно малых сдвигов приводит к неравенству [9]:

$$\partial\sigma_{xy}/\partial u_{xy} > 0. \tag{1.1}$$

Это означает, что состояние  $\eta_1 < u_{xy} < \eta_2$  ( $\partial\sigma_{xy}/\partial u_{xy} < 0$ ) является неустойчивым и существовать не может. Это приводит к тому, что область кристалла, в которой  $u_{xy}$  достигло критического значения



$\eta_1$ , перейдет в двойниковое положение  $u_{xy} > \eta_2$ . При этом область двойника (область 1 на рис. 1.5) будет отделена от остального кристалла (область 2 на рис. 1.5) резкой границей разрывов тензора деформаций:

$$u_{xy}^{(2)} < \eta_1, \quad u_{xy}^{(1)} > \eta_2 \quad (\eta_1 = \eta_2, \quad \eta_2 = 2\alpha - \eta). \quad (1.2)$$

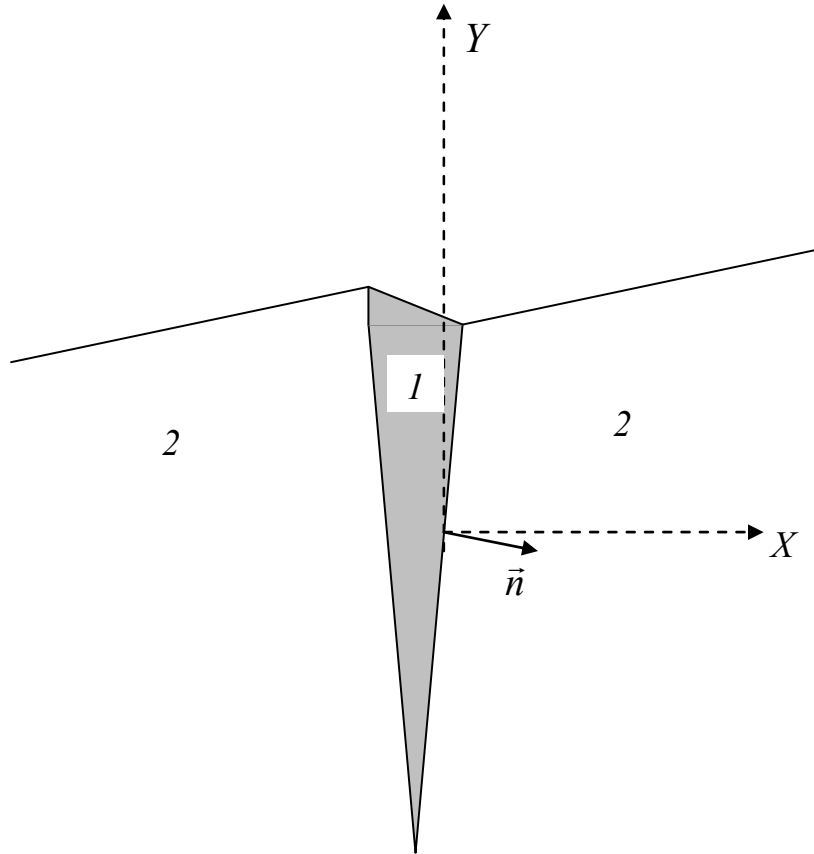


Рис. 1.5. Схематическое представление взаимного расположения двойникованной области (1) и остальной области кристалла (2) [9]

В работе [9] исследовалось условие равновесия между областями 1 и 2 на рис. 1.5. Выяснялось, к какой форме двойников это условие приводит. При этом зависимость  $\sigma_{xy}(u_{xy})$  на участках  $(0, \eta_1)$  и  $(\eta_2, 2\alpha)$  рис. 1.4 заменялась на отрезки, что аналогично введению эффективного модуля сдвига  $\mu_{\text{эфф}}$  для каждого из участков устойчивости кристалла. Этот модуль может сильно отличаться от модуля сдвига  $\mu_0$  в законе Гука для  $u_{xy} = 0$ , но этого не происходит при интересующих деформациях, сравнимых с  $\alpha$ . На основании данных

предположений в [9] для  $\sigma_{xy}$  в областях 1 и 2 рис. 1.5 были получены следующие соотношения:

$$\sigma_{ik} = \lambda_{iklm} u_{lm} - \sigma_{ik}^0 \Psi, \quad \Psi = \begin{cases} 0; & u_{12} < \eta_1 \\ 1; & u_{12} > \eta_2 \end{cases} \quad (x = x_1, y = x_2); \quad (1.3)$$

$$\sigma_{ik}^0 = \lambda_{iklm} u_{lm}^0 = (\lambda_{ik12} + \lambda_{ik21}) 2\alpha = 4\alpha \lambda_{ik12}, \quad (1.4)$$

где  $\lambda_{iklm}$  – тензор модулей упругости монокристалла, в котором модуль сдвига  $2\lambda_{1212}$  имеет значение  $\mu_{эфф}$  вместо значения  $\mu_0$ .

Уравнение равновесия имеет вид

$$\partial \sigma_{ik} / \partial x_k = F_i. \quad (1.5)$$

Здесь  $F_i$  – приложенная внешняя сила.

Подстановка (1.3) в (1.5) позволяет получить уравнения [9]:

$$\lambda_{iklm} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k \partial x_m} = F_i + f_i, \quad f_i = \sigma_{ik}^0 \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} = f_i^0 |\nabla \Psi|; \quad (1.6)$$

$$f_i^0 = \sigma_{ik}^0 n_k, \quad (1.7)$$

где  $f_i$  – сосредоточенные силы интенсивности  $f_i^0$ . Эти силы возникают на границе областей 1 и 2 из-за дополнительного слагаемого  $\sigma_{ik}^0 \Psi$  в (1.3). Вектор  $\vec{n}$  является единичным вектором нормали к поверхности двойника (рис. 1.5).

Для кубической решетки в [9] приняты следующие упрощения:

$$\begin{aligned} \lambda_{1111} = \lambda_{2222} = \lambda_1, \quad \lambda_{1122} = \lambda_2, \\ 2\lambda_{1212} = \mu_{эфф}, \quad \lambda_{1121} = \lambda_{2221} = 0. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Тогда

$$\begin{aligned} f_1^0 = \sigma_{11}^0 n_1 + \sigma_{12}^0 n_2 = f_0 n_2, \quad f_2^0 = \sigma_{21}^0 n_1 + \sigma_{22}^0 n_2 = f_0 n_1, \\ f_0 = 2\mu_{эфф} \alpha. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Таким образом, сила  $f_0$  постоянна по величине, а ее направление определяется наклоном границы двойника. Сосредоточенные силы  $f$  на границе двойника заменяют граничные условия на поверхно-

сти раздела, а единственным условием, накладываемым на (1.6), является непрерывность вектора смещения  $\vec{u}$  на границе двойника.

Условие механической устойчивости в работе [9] определялось из знания распределения деформаций  $u_{ik}$  под влиянием сосредоточенной силы  $F_i$ , приложенной в точке  $\vec{\xi}$ . В плоской задаче теории упругости имеет место следующее соотношение:

$$u_{xy}(\vec{r}) = F_i g_i(\vec{r}, \vec{\xi}). \quad (1.10)$$

Исходя из данного соотношения, при известной форме границы двойника можно записать

$$u_{xy}(\vec{r}) = \vec{F}\vec{g}(\vec{r}, \vec{\xi}) + f_0\psi_C(\vec{r}). \quad (1.11)$$

Здесь  $\psi_C(\vec{r})$  зависит от вида границы  $C$ , заданного уравнением  $\vec{\xi} = \vec{\xi}(s)$ , и находится из соотношения

$$f_0\psi_C(\vec{r}) = \int_C f_i^0(\vec{\xi}) g_i(\vec{r}, \vec{\xi}) ds, \quad (1.12)$$

где  $ds$  – дифференциал длины дуги границы  $C$ .

Учитывая (1.9) и соотношения

$$n_1 ds = -d\eta, \quad n_2 ds = d\xi \quad (\xi_1 = \xi, \xi_2 = \eta),$$

в [9] было получено:

$$\psi_C(\vec{r}) = \int_C \{g_1(\vec{r}, \vec{\xi}) d\xi - g_2(\vec{r}, \vec{\xi}) d\eta\}. \quad (1.13)$$

В случае бесконечной плоскости

$$g_i(\vec{r}, \vec{\xi}) = \text{Re} \left\{ \frac{A_{1i}}{z_1 - \zeta_1} + \frac{A_{2i}}{z_2 - \zeta_2} \right\}, \quad (1.14)$$

где

$$z_i = x + \mu_i y; \quad \zeta_i = \xi + \mu_i \eta. \quad (1.15)$$

Здесь  $\mu_i$ ,  $A_{ki}$  – комплексные числа, связанные с упругими константами кристалла  $\lambda_{iklm}$ . Отсюда

$$u_{xy}(\vec{r}) = \text{Re} \left\{ \frac{A_{1i}F_i}{z_1} + \frac{A_{2i}F_i}{z_2} + f_0 \int_C \left[ \frac{A_{11}d\xi - A_{12}d\eta}{z_1 - \zeta_1} + \frac{A_{21}d\xi - A_{22}d\eta}{z_2 - \zeta_2} \right] \right\}. \quad (1.16)$$

В данном соотношении интеграл берется по контуру двойниковой области.

Согласно (1.2) условия механической устойчивости примут вид

$$u_{xy}^{(2)} = \vec{F}\vec{g}(\vec{r}) + f\psi_C^{(2)}(\vec{r}) < \eta_1 \text{ внутри области } 2 \text{ (рис. 1.4);} \quad (1.17)$$

$$u_{xy}^{(1)} = \vec{F}\vec{g}(\vec{r}) + f\psi_C^{(1)}(\vec{r}) < \eta_2 \text{ внутри области } 1 \text{ (рис. 1.4).} \quad (1.18)$$

Скачок  $\Delta u_{xy}$  в точке  $\vec{r}_C$  на границе двойника определяется сосредоточенной силой  $\vec{f}$  на границе и наклоном двойниковой границы, что следует из (1.9). Из (1.5) и (1.6) можно получить уравнения:

$$\lambda_{11lm}\Delta u_{lm} \cdot \vec{n}_1 + \lambda_{12lm}\Delta u_{lm} \cdot \vec{n}_2 = \vec{f}\vec{n}_2; \quad (1.19)$$

$$\lambda_{21lm}\Delta u_{lm} \cdot \vec{n}_1 + \lambda_{22lm}\Delta u_{lm} \cdot \vec{n}_2 = \vec{f}\vec{n}_1. \quad (1.20)$$

Еще одно соотношение в [9] получено из условия непрерывности тангенциальной производной вектора смещения вдоль границы:

$$n_2^2\Delta u_{xx} + n_1^2\Delta u_{yy} - 2n_1n_2\Delta u_{xy} = 0. \quad (1.21)$$

С учетом (1.8) для значений  $\lambda_{iklm}$  будем иметь:

$$\lambda_1 n_1 \Delta u_{xx} + \lambda_2 n_1 \Delta u_{yy} + \mu_{\text{эфф}} n_2 \Delta u_{xy} = 2\alpha n_2 \mu_{\text{эфф}}; \quad (1.22)$$

$$\lambda_2 n_2 \Delta u_{xx} + \lambda_1 n_2 \Delta u_{yy} + \mu_{\text{эфф}} n_1 \Delta u_{xy} = 2\alpha n_1 \mu_{\text{эфф}}. \quad (1.23)$$

Из (1.21), (1.22) и (1.23) находятся  $\Delta u_{xx}$ ,  $\Delta u_{yy}$  и  $\Delta u_{xy}$ . Это дает

$$\Delta u_{xy} = \frac{2\mu_{\text{эфф}}\alpha}{\mu_{\text{эфф}} + n_1^2 n_2^2 \beta}, \quad \beta = \frac{2(\lambda_1^2 - \lambda_2^2)}{\lambda_1 - 2n_1^2 n_2^2 (\lambda_1 + \lambda_2)}. \quad (1.24)$$

По обе стороны границы  $C$  должны выполняться условия (1.2), которые с учетом

$$u_{xy}^{(1)}(\vec{\xi}) = u_{xy}^{(2)}(\vec{\xi}) + \Delta u_{xy} \quad (1.25)$$

приводят к неравенству

$$\Delta u_{xy} > \eta_2 - u_{xy}^{(2)} > \eta_2 - \eta_1 = 2(\alpha - \eta), \quad (1.26)$$

которое может быть приведено к виду

$$n_1^2 n_2^2 \beta / (\mu_{эфф} + n_1^2 n_2^2 \beta) < \eta / \alpha. \quad (1.27)$$

Из-за малости  $\mu_{эфф}$  данное соотношение выполняется лишь при малом  $n_1^2 n_2^2$ , удовлетворяющем неравенству

$$\sin^2 \varphi \cos^2 \varphi \ll \frac{\tau_{кр}}{2} \left( \frac{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}{\lambda_1} \right) (\alpha - \eta), \quad \tau_{кр} = \sigma_{xy}^{(кр)} = \mu_{эфф} \eta, \quad (1.28)$$

где  $\varphi$  – угол наклона поверхности двойника к плоскости двойникова-ния ( $n_1 = \cos \varphi$ ,  $n_2 = \sin \varphi$ ).

Это позволило в работе [9] сделать вывод о том, что либо  $\sin \varphi \ll 1$ , либо  $\cos \varphi \ll 1$ , и границы двойника образуют малый угол с осью  $OY$  или  $OX$ . Возможность формирования малого угла между границей двойника и осью  $OX$  исключается, так как между участками границы с  $n_1 \ll 1$  и  $n_2 \ll 2$  должна лежать угловая точка излома в связи с тем, что промежуточные углы наклона не удовлетворяют условию (1.28). При этом выражения  $\psi_C(\vec{r})$ ,  $u_{xy}^{(1)}$  и  $u_{xy}^{(2)}$  обращаются в логарифмическую бесконечность во всякой угловой точке.

Для оценки интегралов  $\psi_C(\vec{r})$  вблизи угловой точки в работе [9] предложено воспользоваться формулой (1.16), так как конечные размеры кристалла при этом роли не играют. Таким образом, следует оценить интеграл типа

$$I = \int_C \frac{Ad\xi + Bd\eta}{z - \zeta}, \quad (1.29)$$

где  $z = x + i\mu y$ ,  $\zeta = \xi + i\mu\eta$  вблизи угловой точки  $z_0$  кривой  $C$ . Углы наклона кривой  $C$  к оси  $OX$  в угловой точке равны  $\theta_1$  и  $\theta_2$ . Тогда

$$\begin{aligned} \int_C \frac{Ad\xi + Bd\eta}{z - \zeta} &= \int_C \left( A \frac{d\xi}{dz} + B \frac{d\eta}{dz} \right) d \ln(z - \zeta) \cong -\ln|z - z_0| \left( A \frac{d\xi}{dz} + B \frac{d\eta}{dz} \right) \Big|_{(2)}^{(1)} = \\ &= (A - iB/\mu) e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)} \sin(\varphi_1 - \varphi_2) \ln|z - z_0|, \\ \operatorname{tg} \varphi_1 &= \mu \operatorname{tg} \theta_1, \quad \operatorname{tg} \varphi_2 = \mu \operatorname{tg} \theta_2. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Логарифмическая особенность в данном случае исчезает, когда  $\theta_1 = \theta_2$  или  $\theta_1 = \theta_2 + \pi$ . В этом случае интеграл не расходится только в точке возврата.

Неограниченное возрастание  $u_{xy}^{(1)}$  и  $u_{xy}^{(2)}$  в окрестности угловой точки противоречит условиям механической устойчивости (1.17), что и указывает на невозможность существования угловых точек границы и участков, где граница образует малый угол с осью  $OX$ . По этой причине в работе [9] делается вывод о том, что угол при вершине двойниковой области должен быть нулевым.

Таким образом, макроскопическая теория И. М. Лифшица утверждает, что двойник должен иметь форму длинного и узкого клина с нулевым углом при вершине. Максимально возможный угол наклона поверхности двойника к плоскости двойникования может быть найден из соотношения

$$\varphi_{\max}^2 \approx \tau_{\text{кр}} / \lambda \alpha. \quad (1.31)$$

Критические напряжения  $\tau_{\text{кр}} = \sigma_{xy}^{\text{кр}}$  не выражаются через упругие модули  $\lambda_{iklm}$  и входят в теорию Лифшица в качестве независимого параметра.

Несмотря на то, что полученные результаты теории Лифшица согласуются с экспериментальными данными Р. И. Гарбера [5]–[8], согласно которым  $\tau_{\text{кр}} \approx 10^3$  г/мм<sup>2</sup>, что дает  $\varphi_{\max} \approx 3 \cdot 10^{-3}$ , в настоящее время вопрос об энергетической предпочтительности существования тонких двойников остается открытым. Это противоречие основано на данных работ по изучению нанодвойникования и микродвойников, возникающих у концентратора напряжений [11]–[16]. Однако нано- и микродвойники не подчиняются законам макроскопической теории Лифшица, но рассматриваемое противоречие может быть исключено на масштабном уровне, граничащим с макро- и микроскопической теорией двойникования.

Замечательной особенностью работы И. М. Лифшица [9] является возможность расчета на основании его макроскопической теории напряжений и деформаций у тонкого двойника. При этом они представлялись в виде суммы напряжений, возникающих от внешней силы и напряжений от дополнительных поверхностных сил двойника:

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ik}^{(0)} + \{\sigma_{ik}\}_C. \quad (1.32)$$

В неограниченной среде напряжения под влиянием сосредоточенной силы  $\vec{f}$ , приложенной в точке  $(\xi, \eta)$ , даются формулами:

$$\sigma_{xx} = 2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{D_1}{z_1 - \zeta_1} + \frac{D_2}{z_2 - \zeta_2} \right\}, \quad D_i = A_i f_1 + B_i f_2; \quad (1.33)$$

$$\sigma_{yy} = -2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{D_1 \gamma_1^2}{z_1 - \zeta_1} + \frac{D_2 \gamma_2^2}{z_2 - \zeta_2} \right\}, \quad z_i = x + iy / \gamma_i; \quad (1.34)$$

$$\sigma_{xy} = 2 \operatorname{Re} \left\{ \frac{D_1 \gamma_1}{z_1 - \zeta_1} + \frac{D_2 \gamma_2}{z_2 - \zeta_2} \right\}, \quad \zeta_i = \xi + i\eta / \gamma_i. \quad (1.35)$$

Здесь  $A_i, B_i, \gamma_i$  – постоянные, связанные с упругими модулями среды.

Величина  $\{\sigma_{ik}\}$  получается интегрированием (1.33), (1.34) и (1.35) вдоль границы двойника  $C$ :

$$\{\sigma_{ik}\}_C = \int_C \sigma_{ik}(\vec{r} - \vec{\xi}) ds. \quad (1.36)$$

Согласно (1.9)

$$f_1 = f(d\xi/ds); \quad f_2 = -f(d\eta/ds). \quad (1.37)$$

В приближении тонкого двойника длиной  $2a$  в неограниченной среде при учете уравнений левой и правой границ двойника, имеющих вид  $x = \xi_1(y)$  и  $x = \xi_2(y)$ , при учете справедливого для  $z$  вне области двойника равенства типа

$$\int d\zeta / (z - \zeta) = 0, \quad (1.38)$$

в [9] для точки  $(x, y)$  вне области двойника было получено:

$$\begin{aligned} \int_C \frac{A d\xi - B d\eta}{z - \zeta} &= (A - i\gamma B) \int \frac{d\xi}{z - \zeta} = \\ &= C \int_{-a}^a \left\{ \frac{\xi_1'(\eta)}{(y - \eta) - i\gamma[x - \xi_1(\eta)]} - \frac{\xi_2'(\eta)}{(y - \eta) - i\gamma[x - \xi_2(\eta)]} \right\} d\eta, \quad (1.39) \end{aligned}$$

где  $C = -\gamma(\gamma B + iA)$ .

Считая двойник достаточно тонким, в [9] полагалось

$$\xi_1(\eta) - \xi_2(\eta) = \varepsilon\delta(\eta), \quad \varepsilon \ll 1, \quad (1.40)$$

где  $\varepsilon = \max(\xi'_1(\eta) - \xi'_2(\eta))$  – наибольший угол между двойниками.

Тогда

$$\delta(a) = \delta(-a) = \delta'(a) = \delta'(-a) = 0, \quad |\delta'(\eta)| \leq 1. \quad (1.41)$$

С точностью до членов второго порядка в [9] получено:

$$\int_C \frac{Ad\xi - Bd\eta}{z - \zeta} = \varepsilon C \int_{-a}^a \frac{\delta'(\eta)d\eta}{y - \eta - i\gamma(x - \xi(y))} + O(\varepsilon^2); \quad (1.42)$$

$$\xi = \xi_1, \quad x - \xi_1(y) \geq 0; \quad \xi = \xi_2, \quad x - \xi_2(y) \geq 0; \quad \xi = 0, \quad y > a, \quad y < -a.$$

Отсюда, с учетом (1.33), (1.34) и (1.35), получается

$$\{\sigma_{xx}\}_C = 2 \operatorname{Re}\{C_1\varphi(v_1) + C_2\varphi(v_2)\} \varepsilon; \quad (1.43)$$

$$\{\sigma_{xy}\}_C = 2 \operatorname{Re}\{iC_1\gamma_1\varphi(v_1) + iC_2\gamma_2\varphi(v_2)\} \varepsilon; \quad (1.44)$$

$$\{\sigma_{yy}\}_C = 2 \operatorname{Re}\{C_1\gamma_1^2\varphi(v_1) + C_2\gamma_2^2\varphi(v_2)\} \varepsilon, \quad (1.45)$$

где  $C_j = -\gamma_j(\gamma_j B_j + iA_j)$ ;  $v_1 = y - i[x - \xi(y)]\gamma_1$ ;  $v_2 = y - i[x - \xi(y)]\gamma_2$ ;

$$\varphi(v) = \int_{-a}^{-a} \frac{\delta'(\eta)d\eta}{\eta - v}. \quad (1.46)$$

Это справедливо на больших по сравнению с толщиной двойника расстояниях, а  $v_i = y + i\gamma_i x$ . На границе двойника при  $v_1 = v_2 = y$  получается

$$\varphi(y \pm i0) = V.p. \int_{-a}^a \frac{\delta'(\eta)d\eta}{y - \eta} \pm i\pi\delta'(y). \quad (1.47)$$

Отсюда для напряжений и деформаций на левой и правой внешней границе двойника соответственно можно получить

$$\{\sigma_{xy}\}_C^{(2)} = \mu_{эфф} \{u_{xy}\}_C^{(2)} = \varepsilon b \left[ V.p. \int_{-a}^a \frac{\delta'(\eta)d\eta}{y - \eta} \right] \pm \varepsilon\beta\delta'(y), \quad (1.48)$$

где  $b = \operatorname{Im}\{C_1\gamma_1 + C_2\gamma_2\}$ ;  $\beta = \operatorname{Re}\{C_1\gamma_1 + C_2\gamma_2\}\pi$ .

Для скачка  $\Delta u_{xy}$  на границе двойника согласно (1.16) получается



$$\Delta u_{xy} = u_{xy}^{(1)} - u_{xy}^{(2)} = 2\alpha + O(\varepsilon^2). \quad (1.49)$$

Отсюда на внутренних границах

$$\{u_{xy}\}_C^{(1)} = 2\alpha + \varepsilon b \int_{-a}^a \frac{\delta'(\eta)d\eta}{y-\eta} \pm \varepsilon c \delta'(y). \quad (1.50)$$

При  $\delta(\eta) = 2\eta/(\eta^2 + 1)$  получается

$$\varphi(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\eta d\eta}{(\eta-y)(\eta^2+1)} = \frac{2\pi}{1+iy} = \frac{2\pi}{1+y^2} - \frac{2\pi iy}{1+y^2}. \quad (1.51)$$

Тогда при достаточно малом  $\varepsilon$  имеет место

$$\{u_{xy}\}_C^{(2)} = 2\pi\varepsilon(b \pm cy)/(1+y^2) < \eta; \quad (1.52)$$

$$\{u_{xy}\}_C^{(1)} = 2\alpha + 2\pi\varepsilon(b \pm cy)/(1+y^2) > 2\alpha - \eta. \quad (1.53)$$

Это означает, что такой двойник может существовать без внешней нагрузки, но при низкой температуре [9].

### 1.3. Атомарная модель двойникования

В работе [17] предложена атомарная модель двойникования. По мнению авторов данной работы, эта модель позволяет более наглядно иллюстрировать начальные стадии процесса двойникования. При этом рассматривается произвольная трансляционная пространственная решетка (рис. 1.6). Положение атома в решетке определяется по формуле

$$\vec{k} = \vec{a}k + \vec{b}l + \vec{c}m, \quad (1.54)$$

где  $\vec{k}$  – радиус-вектор атома;  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  – постоянные решетки;  $k$ ,  $l$ ,  $m$  – целые числа.

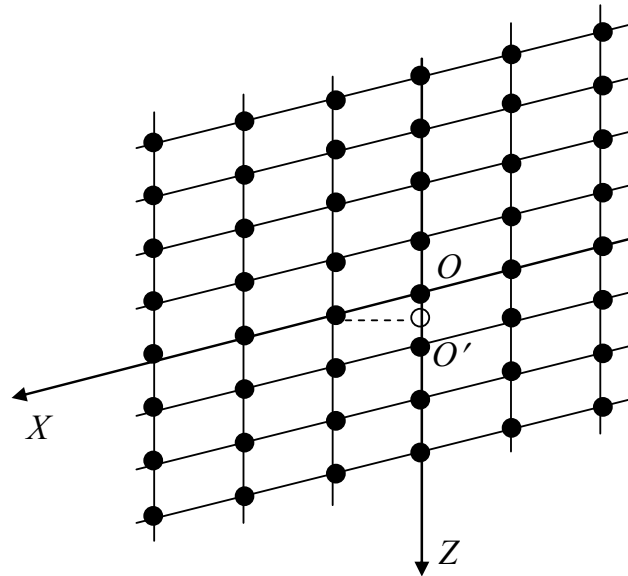


Рис. 1.6. Трансляционная пространственная решетка для рассмотрения двойникования в его атомной модели [17]

Для упрощения в [17] сделано допущение о том, что все смещения направлены вдоль оси  $Z$ . При ограничении квадратичными членами в разложении энергии по степеням относительного смещения атомов в [17] приведено уравнение равновесия решетки в виде

$$\sum A_{k-k'} \xi_{k'} = F_k, \quad (1.55)$$

где  $\xi_k$  – смещение  $k$ -го атома в направлении оси  $Z$ , а  $F_k$  – внешняя сила, приложенная к  $k$ -му атому в том же направлении, параллельном оси  $Z$ .

Вводя нелинейные члены, в [17] из (1.55) окончательно получено:

$$\sum A_{k-k'} (\xi - \xi') - F_k = f \sum_r (\delta_{k,r} - \delta_{k,r+a}), \quad (1.56)$$

где  $f$  – дополнительная двойникующая сила;  $\delta_{k,r} = 0$  при  $k \neq r$  и  $\delta_{k,r} = 1$  при  $k = r$ .

Смещения  $k$ -го атома под влиянием единичной силы, приложенной к началу координат, должны удовлетворять условию:

$$\sum A_{k-k'} u_k = \delta_{k,0}, \quad (1.57)$$

где  $A_0$  определяется из условия  $\sum A_k = 0$ , т. е.  $A_0 = -\sum_{n \neq 0} A_n$ .

Для однородной системы имеем

$$\sum A_{k-k'} \chi(\vec{k}) - \mu \chi(\vec{k}) = 0. \quad (1.58)$$

Собственными значениями матрицы  $A_{k-k'}$  являются числа:

$$\mu(\vec{k}) = \sum_n A_n e^{2\pi i n \vec{k}}, \quad (1.59)$$

где  $n$  – целочисленные векторы прямой решетки;  $\vec{k}$  – произвольная точка элементарной ячейки обратной решетки.

Соответствующая нормированная собственная функция имеет вид

$$\chi_{\vec{k}}(n) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{2\pi i n \vec{k}}, \quad (1.60)$$

где  $V$  – объем элементарной ячейки обратной решетки.

Квадрат частоты колебания, обладающего волновым вектором  $\vec{k}$ , при малых  $\vec{k}$  может быть найден из соотношения

$$\omega^2(\vec{k}) = \omega^2(\alpha, \beta, \gamma) = c_1^2 \alpha^2 + c_2^2 \beta^2 + c_3^2 \gamma^2, \quad (1.61)$$

где  $c_1, c_2, c_3$  – скорости звука для двух поперечных и одного продольного колебания. Раскладывая решение уравнения (1.57) по собственным функциям  $\chi(\vec{k})$  и учитывая равенство

$$\frac{1}{V} \int e^{2\pi i k \vec{k}} d\vec{k} = \delta_{k,0}, \quad (1.62)$$

в [17] было получено:

$$u(k) = \frac{1}{V} \int e^{2\pi i k \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{\mu(\vec{k})}, \quad (1.63)$$

где интегрирование распространяется на весь объем элементарной ячейки обратной решетки.

Если на атом, находящийся в начале координат, действует сила  $F$ , то смещение  $\xi_k$  будет равно:

$$\xi_k = F \cdot u(k). \quad (1.64)$$

Уравнение равновесия решетки в этом случае будет:

$$\sum_{k'} A_{k-k'} \xi_{k'} = F \cdot \delta_{k,0} + f \sum_r (\delta_{k,r} - \delta_{k,r+a}). \quad (1.65)$$

При  $F > F_{crit} = \frac{d}{u(0)}$  уравнение для смещение принимает вид

$$\sum A_{k-k'} \xi_{k'} = (F + f) \delta_{k,0} - f \delta_{k,a} . \quad (1.66)$$

Пусть группа атомов с номерами 1, 2, ...,  $n$  перешла в двойниковое положение. В этом случае уравнение равновесия имеет вид (1.65). Из (1.65) с учетом (1.60) следует выражение для смещения

$$\xi_k = F \cdot u(k) + f[v_1(k) + v_1(k-1) + \dots + v_1(k-n)], \quad (1.67)$$

где

$$v_1(k) = u(k) - u(k-a) = \frac{1}{V} \int \frac{e^{2\pi i \vec{k} k} (1 - e^{2\pi i \vec{k} a})}{\mu(\vec{k})} d\vec{k} . \quad (1.68)$$

Принимая

$$\eta_k = \xi_k - \xi_{k+a} , \quad (1.69)$$

для относительного смещения в [17] было получено:

$$v_2(k) = u(k) - u(k+a) = \frac{1}{V} \int \frac{(1 - e^{2\pi i \vec{k} a}) e^{2\pi i \vec{k} k}}{\mu(\vec{k})} d\vec{k} , \quad (1.70)$$

откуда согласно (1.68)

$$\eta_k = F v_2(k) + 2f[v(k) + \dots + v(k-n)], \quad (1.71)$$

где

$$2v(k) = v_1(k) + v_2(k) = \frac{2}{V} \int \frac{(1 - \cos 2\pi \alpha) e^{2\pi i \vec{k} k}}{\mu(\vec{k})} d\vec{k} . \quad (1.72)$$

Здесь  $\alpha = a\vec{k}$ .

В работе [18] была предложена атомарная модель двойника, позволяющая рассчитывать колебания атомов двойниковой границы. Модель основана на классическом подходе и на известном [19] выражении, описывающем колебания цепочки атомов одинаковой массы  $M$ , в виде которой моделируется одномерная кристаллическая решетка:

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\beta}{M}} \left| \sin\left(\frac{aq}{2}\right) \right| , \quad (1.73)$$

где  $\omega$  – частота колебаний атомов;  $q$  – волновой вектор;  $a$  – расстояние между атомами;  $\beta$  – константа.

Используя метод, которым было получено соотношение (1.73), в [18] рассчитывалась зависимость  $\omega$  от  $q$  для атома, находящегося на двойниковой границе  $AA'$  (рис. 1.1). Рассматривался кристалл, состоящий из атомов одинаковой массы  $M$ . В модели использовалось допущение о том, что каждый атом взаимодействует только с соседними атомами. В гармоническом приближении потенциальная энергия взаимодействия данных атомов связана с расстоянием  $x$  между ними соотношением [18]:

$$U(x) \approx x^2. \quad (1.74)$$

Соответственно сила взаимодействия между атомами  $f$  пропорциональна  $x$  в первой степени.

Свяжем начало декартовой системы координат с атомом двойниковой границы (рис. 1.7). Его положение на оси  $OX$  обозначим через  $x_n$ . Положения атомов 1 и 2 (рис. 1.7) на данной оси соответственно равны  $x_{n+1} \cos \alpha$  и  $x_{n-1} \cos \alpha$  ( $\alpha$  – угол двойникования). Тогда сила, действующая на атом двойниковой границы, будет равна:

$$f_n = f_{n+1} + f_{n-1} = \beta(x_{n+1} \cos \alpha + x_{n-1} \cos \alpha - 2x_n), \quad (1.75)$$

где  $f_{n+1}$  – сила, действующая на атом двойниковой границы со стороны атома 1 (рис. 1.7), а  $f_{n-1}$  – со стороны атома 2.

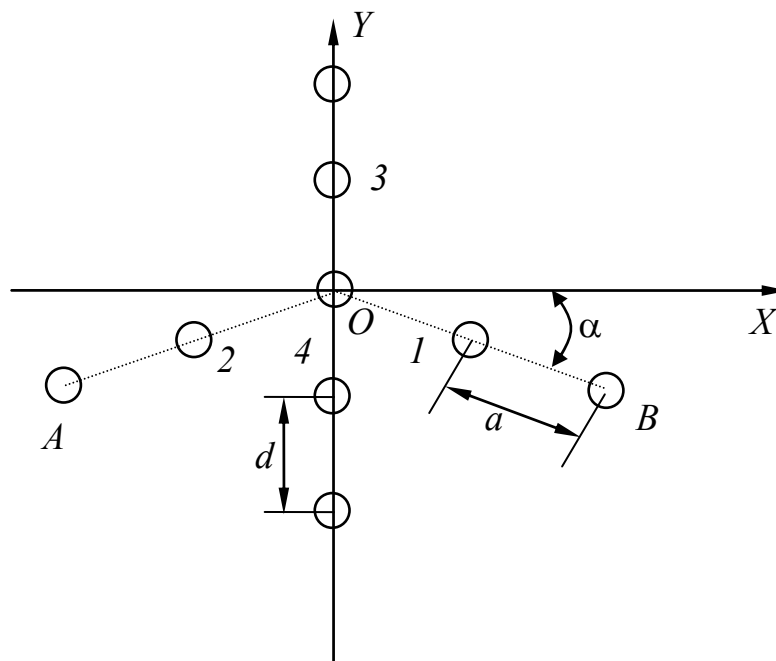


Рис. 1.7. Атом двойниковой границы, находящийся в точке  $O$ , в окружении соседних атомов [18]

Уравнение движения атомов двойниковой границы в этом случае имеет вид

$$M\ddot{x}_n = \beta(x_{n+1} \cos \alpha + x_{n-1} \cos \alpha - 2x_n). \quad (1.76)$$

Решение уравнения (1.76) в [18] определялось в виде

$$x_n = x_0 e^{i(\omega t - naq)}, \quad (1.77)$$

здесь  $x_0$  – амплитуда колебаний;  $n$  – номер атома.

Положение на оси  $OX$  соседних атомов с номерами  $n + 1$  и  $n - 1$  в момент времени  $t$ , очевидно, можно задать выражениями:

$$x_{n+1} = x_0 e^{i(\omega t - (n+1)aq)}, \quad (1.78)$$

$$x_{n-1} = x_0 e^{i(\omega t - (n-1)aq)}. \quad (1.79)$$

Подстановка (1.77), (1.78) и (1.79) в (1.76) приведет к решению, которое можно записать в виде зависимости  $\omega$  от  $q$ :

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{M} (1 - \cos(aq) \cos \alpha), \quad (1.80)$$

или

$$\omega = \pm 2 \sqrt{\frac{\beta}{M} \left( \sin^2 \left( \frac{aq}{2} \right) + \cos(aq) \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right)}. \quad (1.81)$$

Из сравнения (1.73) и (1.81) видно, что данные соотношения отличаются друг от друга слагаемым под знаком корня  $\cos(aq) \sin^2 \frac{\alpha}{2}$ . В предельном случае, когда  $\alpha = 0$ , выражение (1.81) переходит в (1.73).

На рис. 1.8 представлены зависимости  $\frac{\omega}{2} \sqrt{\frac{M}{\beta}} = f(aq)$  для колебаний атома двойниковой границы вдоль оси  $OX$  при изменении угла двойникования  $\alpha$ . Величина угла  $\alpha$  изменялась от 0 до 40°. Значения величины  $\sin^2 \frac{\alpha}{2}$  в соотношении (1.81) при заданных значениях  $\alpha$  приведены в табл. 1.1.

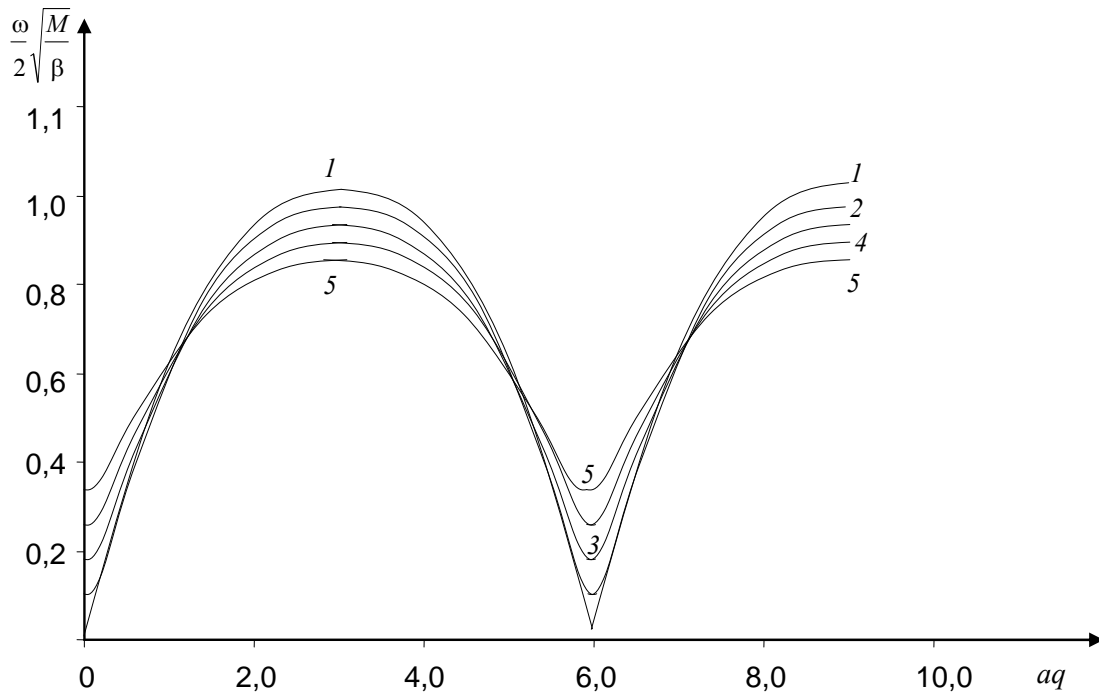


Рис. 1.8. Зависимость  $\omega/2\sqrt{M/\beta}$  от  $aq$ :  
 1 –  $\alpha = 0^\circ$ ; 2 –  $10^\circ$ ; 3 –  $20^\circ$ ; 4 –  $30^\circ$ ; 5 –  $40^\circ$

Таблица 1.1

Численные значения  $\sin^2 \frac{\alpha}{2}$  и  $\sin \alpha$  при различных значениях  $\alpha$

$\alpha$	$\sin^2 \frac{\alpha}{2}$	$\sin \alpha$
0	0,000	0,0
10	0,008	0,2
20	0,030	0,3
30	0,070	0,5
40	0,100	0,6

Как видно из рис. 1.8, увеличение угла двойникования  $\alpha$  приводит к «срезанию» низких частот и уменьшению диапазона частот колебаний атомов двойниковой границы.

Со стороны ближайших атомов 1, 2, 3 и 4 на атом двойниковой границы вдоль оси  $OY$  действует сила:

$$F_n = F_{n+1} + F_{n-1} + 2F = \beta(y_{n+1} + y_{n-1}(1 + 2\sin \alpha) - 2y_n), \quad (1.82)$$

где  $F_{n+1}$  – сила, действующая на атом двойниковой границы со стороны атома 3,  $F_{n-1}$  – со стороны атома 4, а  $F$  – сила, действующая со стороны атома 1 или 2.

Уравнение движения в этом случае примет вид

$$M\ddot{y}_n = \beta(y_{n+1} + y_{n-1}(1 + 2\sin\alpha) - 2y_n), \quad (1.83)$$

решение которого может быть найдено в виде

$$y_n = y_0 e^{i(\Omega t - ndq)}, \quad (1.84)$$

где  $\Omega$  – частота колебаний атомов вдоль оси  $OY$ ;  $d$  – расстояние между атомами вдоль этой же оси.

В данном случае решение уравнения (1.83) можно записать:

$$\Omega^2 = \frac{2\beta}{M} \left( 2\sin^2\left(\frac{dq}{2}\right) - \cos(dq)\sin\alpha \right), \quad (1.85)$$

или

$$\Omega = \pm 2\sqrt{\frac{\beta}{M} \left( \sin^2\left(\frac{dq}{2}\right) - \frac{1}{2}\cos(dq)\sin\alpha \right)}. \quad (1.86)$$

Данное соотношение отличается от соотношения (1.73) слагаемым под знаком корня  $-\frac{1}{2}\cos(dq)\sin\alpha$ . Также как и в предыдущем случае (см. формулу (1.81)), соотношение (1.86) при  $\alpha = 0$  переходит в (1.73).

График зависимости  $\frac{\Omega}{2}\sqrt{\frac{M}{\beta}} = f(dq)$  представлен на рис. 1.9.

В данном случае увеличение угла двойникования приводит к появлению дополнительного максимума у границы зоны Бриллюэна и увеличению диапазона частот колебаний атома двойниковой границы.



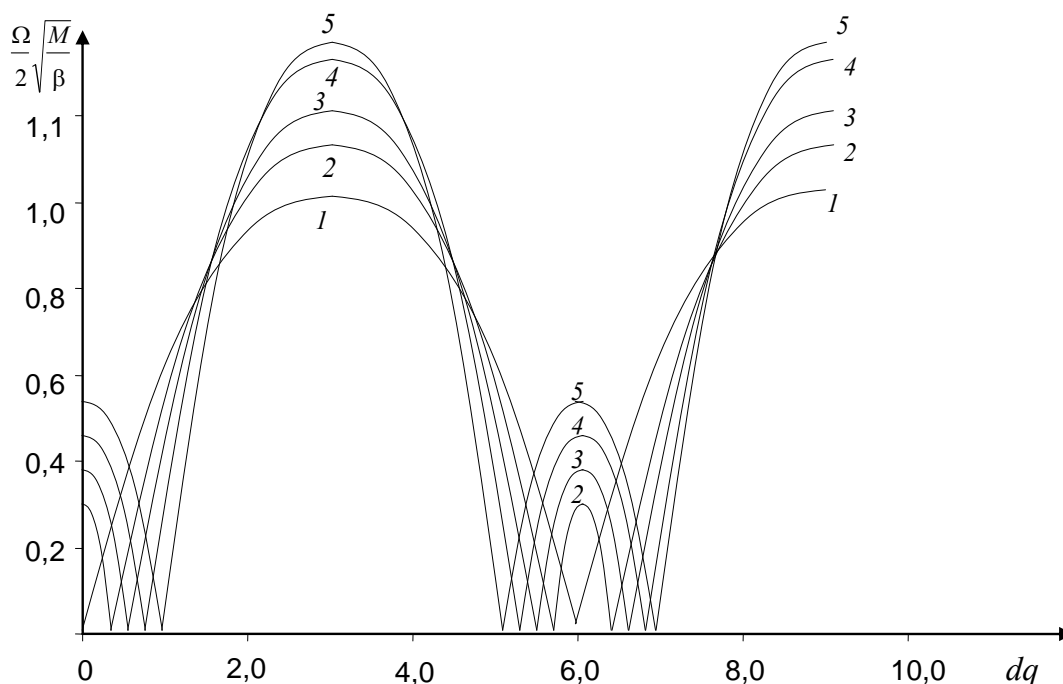


Рис. 1.9. Зависимость  $\Omega/2\sqrt{M/\beta}$  от  $dq$ :  
 1 –  $\alpha = 0^\circ$ ; 2 –  $10^\circ$ ; 3 –  $20^\circ$ ; 4 –  $30^\circ$ ; 5 –  $40^\circ$

Отметим, что при построении графика, показанного на рис. 1.9, от соотношения (1.86) требовалось, чтобы подкоренное выражение было больше нуля.

Таким образом, в работе [18] показано, что с помощью классического метода можно рассчитать дисперсионную зависимость колебаний атомов двойниковой границы. Увеличение угла двойникования приводит к уменьшению диапазона частот колебаний атома двойниковой границы в направлении, перпендикулярном двойниковой границе и увеличению этого диапазона для колебаний, происходящих вдоль двойниковой границы.

#### 1.4. Дислокационные модели двойникования

В дислокационной теории упругого двойника, представленной в [4], используется приближение тонкого двойника. При этом двойник считается плоским, а ось  $OX$  совпадает с линией двойникования, наклоненной под углом  $\theta$  к поверхности кристалла (рис. 1.10). Такой двойник образован скоплением прямолинейных дислокаций, параллельных оси  $OZ$ . В [4] предполагается, что источник прямолинейных двойниующих дислокаций находится у поверхности кристалла

в точке  $x = a_0$ . Этот источник под действием внешней нагрузки способен генерировать нужное количество двойникующих дислокаций.

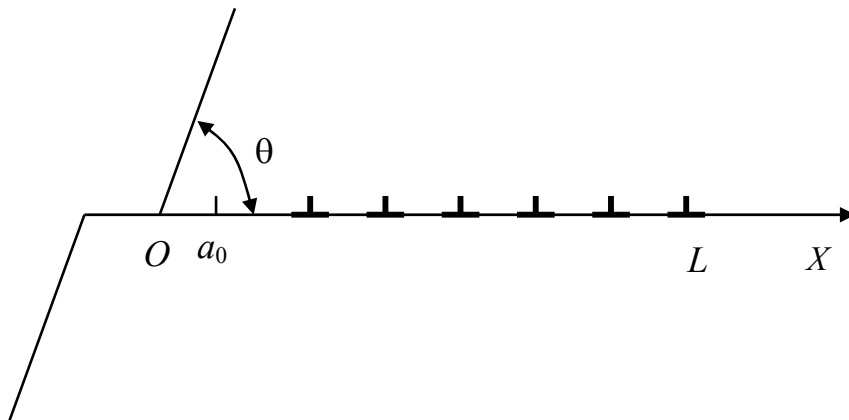


Рис. 1.10. Дислокационная модель тонкого двойника [4]

Толщина двойника  $h(x)$  в некоторой точке  $x$  с плотностью двойникующих дислокаций  $\rho(x)$  связана соотношением [4], [20]:

$$h(x) = a \int_x^L \rho(\xi) d\xi, \quad (1.87)$$

где  $a$  – межатомное расстояние в плоскости, перпендикулярной плоскости двойникования;  $L$  – длина двойника (рис. 1.10).

Функция  $\rho(x)$  должна удовлетворять условию

$$\int_{a_0}^L \rho(x) dx = \frac{\delta}{b} = \frac{h}{a} = N, \quad (1.88)$$

где  $N$  – полное число двойникующих дислокаций одного знака;  $\delta$  – полный сдвиг по линии двойникования на поверхности тела;  $b$  – модуль вектора Бюргерса.

Упругая сила, действующая на единицу длины дислокации со стороны внешнего поля и других дислокаций двойника, определяется по формуле

$$f^{упр}(x) = b\sigma^e(x) + b \left[ V.p. \int_{a_0}^L \sigma^0(x, \xi) \rho(\xi) d\xi \right], \quad (1.89)$$

где  $\sigma^e(x)$  – напряжения, созданные внешними нагрузками;  $\sigma^0(x, \xi)$  – напряжения, созданные в точке  $x$  на линии двойникования отдельной дислокацией, расположенной в точке  $\xi$  этой же линии.

В случае неограниченного однородного кристалла имеет место следующее соотношение:

$$\sigma^0(x, \xi) = \frac{B}{x - \xi}, \quad (1.90)$$

где  $B$  для краевой и винтовой дислокаций соответственно имеет вид

$$B_{\text{кр}} = \frac{\mu b}{2\pi(1 - \nu)}, \quad B_{\text{в}} = \frac{\mu b}{2\pi}. \quad (1.91)$$

Здесь  $\nu$  – коэффициент Пуассона.

Для ограниченной среды

$$\sigma^0(x, \xi) = B \left[ \frac{1}{x - \xi} + K(x, \xi) \right], \quad (1.92)$$

где  $K(x, \xi)$  – функция двух переменных, имеющая громоздкий вид.

Условие равновесия дислокации в точке  $x$  имеет вид [4]:

$$f^{\text{упр}}(x) + f^{\text{неупр}}(x) = 0, \quad f^{\text{неупр}}(x) = bS(x), \quad (1.93)$$

где  $S(x)$  – напряжения на линии двойникования, эквивалентные наличию сил неупругого происхождения.

Соотношение (1.93) в [4] также представлено в виде

$$V.p. \int_{a_0}^L \frac{\rho(\xi)d\xi}{\xi - x} - \int_{a_0}^L K(x, \xi)\rho(\xi)d\xi = \frac{1}{B} [\sigma(x) + S(x)] \equiv \omega(x). \quad (1.94)$$

Если  $S(x)$  известна, то данное уравнение позволяет находить функцию  $\rho(x)$  при заданной функции  $\omega(x)$ , которая удовлетворяет специальному условию ортогональности:

$$\int_{a_0}^L \omega(x)\rho_0(x)dx = 0, \quad (1.95)$$

где  $\rho_0(x)$  – решение следующего уравнения:

$$\int_{a_0}^L K(\xi, x) \rho_0(x) dx = 0. \quad (1.96)$$

Для определения напряжений у тонкого двойника, представленного на рис. 1.10, в случае оси  $OY$ , направленной вдоль направления двойникования, а оси  $OX$  – вдоль поверхности кристалла, в работе [20] было предложено использовать выражение вида

$$\sigma_{ik}(x, y) = \int_{a_0}^L \sigma_{ik}^0(x, y, y_0) \rho(y_0) dy_0, \quad (1.97)$$

где  $\sigma_{ik}^0$  определяются из формул:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^0(x, y, y_0) &= -D_1 \frac{x[x^2 - (y - y_0)^2]}{[x^2 + (y - y_0)^2]^2} + D_1 \frac{x[x^2 - (y + y_0)^2]}{[x^2 + (y + y_0)^2]^2} + \\ &+ 4D_1 \frac{xy_0[x^2(3y + 2y_0) - (y + y_0)^2(y - 2y_0)]}{[x^2 + (y + y_0)^2]^3}, \\ \sigma_{yy}^0(x, y, y_0) &= -D_1 \frac{x[x^2 + 3(y - y_0)^2]}{[x^2 + (y - y_0)^2]^2} + D_1 \frac{x[x^2 + 3(y + y_0)^2]}{[x^2 + (y + y_0)^2]^2} - \\ &- 4D_1 \frac{xyy_0[x^2 - 3(y + y_0)^2]}{[x^2 + (y + y_0)^2]^3}, \\ \sigma_{xy}^0(x, y, y_0) &= -D_1 \frac{(y - y_0)[x^2 - (y - y_0)^2]}{[x^2 + (y - y_0)^2]^2} + D_1 \frac{(y + y_0)[x^2 - (y + y_0)^2]}{[x^2 + (y + y_0)^2]^2} - \\ &- 2D_1 y_0 \frac{x^4 - 6x^2 y(y + y_0) + (y - y_0)(y + y_0)^3}{[x^2 + (y + y_0)^2]^3}, \\ \sigma_{xz}^0(x, y, y_0) &= D_2 \left[ \frac{y - y_0}{x^2 + (y - y_0)^2} - \frac{y + y_0}{x^2 + (y + y_0)^2} \right], \\ \sigma_{yz}^0(x, y, y_0) &= -D_2 \left[ \frac{x}{x^2 + (y - y_0)^2} - \frac{x}{x^2 + (y + y_0)^2} \right], \end{aligned} \quad (1.98)$$

где  $D_1 = \frac{\mu b_1}{2\pi(1-\nu)}$ ;  $D_2 = \frac{\mu b_2}{2\pi}$  (здесь  $\mu$  – модуль сдвига;  $b_1$  и  $b_2$  – вектор Бюргерса соответственно краевой и винтовой дислокации).

При выводе соотношений (1.98) в [20] учитывалось влияние поверхности на конфигурацию полей напряжений у дислокации. При этом сила притяжения дислокации к поверхности равна:

$$F_s = -\frac{D_1 b_1 + D_2 b_2}{2y}. \quad (1.99)$$

Тогда условие равновесия тонкого двойника, находящегося у поверхности кристалла, может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} b_1 \sigma_{xy}(0, y) + b_2 \sigma_{xz}(0, y) - \frac{D_1 b_1 + D_2 b_2}{2y} + S(y) + \\ + b_1 \sigma_{xy}^e(0, y) + b_2 \sigma_{xz}^e(0, y) = 0, \end{aligned} \quad (1.100)$$

где  $S(y)$  – сила торможения.

В интегральной форме в [20] выражение (1.100) представлено следующим образом:

$$V.p. \int_{a_0}^L \frac{\rho(\xi) d\xi}{\xi - y} + \int_{a_0}^L \frac{\rho(\xi) d\xi}{\xi + y} + M \int_{a_0}^L \frac{\rho(\xi)(y - \xi) d\xi}{(\xi + y)^5} = f(y), \quad (1.101)$$

где

$$f(y) = \frac{b_1 \sigma_{xy}^e(0, y) + b_2 \sigma_{xz}^e(0, y) + S(y)}{D_1 b_1 + D_2 b_2} - \frac{1}{2y}; \quad (1.102)$$

$$M = \frac{D_1 b_1}{D_1 b_1 + D_2 b_2}. \quad (1.103)$$

Из (1.101) получается

$$\rho(y) - \int_{a_0}^L N(y, \xi) \rho(\xi) d\xi = F(y), \quad (1.104)$$

где

$$N(y, \xi) = \frac{1}{\pi^2 \sqrt{(y - a_0)(L - y)}} V.p. \int_{a_0}^L \left[ \frac{1}{\eta + \xi} + M \frac{(\eta - \xi)\xi}{(\eta + \xi)^3} \right] \frac{\sqrt{(\eta - a_0)(L - y)}}{\eta - y} d\eta;$$

$$F(y) = \frac{1}{\pi^2 \sqrt{(y - a_0)(L - y)}} \left\{ C - V.p. \int_{a_0}^L \frac{\sqrt{(\xi - a_0)(L - \xi)}}{\xi - y} f(\xi) d\xi \right\}.$$

Здесь  $C$  – постоянная, выбором которой определяется поведение решения (1.104) на концах интервала  $(a_0, L)$ .

Таким образом, существующие модели двойникования кристаллов обладают рядом ограничений, которые не позволяют полностью охватить все классы двойников, не подходящие под определение тонкого двойника. Также проблематично использовать существующие модели двойникования для описания начальных стадий двойникования. Это указывает на наличие в современной науке проблемы, связанной с необходимостью развития теории двойникования.

## Глава 2

# МЕЗОСКОПИЧЕСКАЯ ДИСЛОКАЦИОННАЯ МО- ДЕЛЬ КЛИНОВИДНЫХ ДВОЙНИ- КОВ

Развитие теории заклинившихся двойников оправдано тем, что на практике часто приходится иметь дело с двойникующимися материалами, предварительно обработанными давлением [3]. В таких твердых телах уже сформирована система двойников, которые выступают в качестве статических концентраторов напряжений, оказывающих существенное влияние на физические свойства материала [2], [21]– [24]. Целенаправленно изменять свойства двойникующихся материалов, разрабатывать основы технологии их обработки удобно при использовании теоретических расчетов и моделей, основанных на представлениях о дислокационной природе процесса двойникования [25]–[27]. Поэтому хорошо зарекомендовавший себя ранее дислокационный подход и лег в основу моделей заклинившихся двойников.

На мезоскопическом уровне расстояние между двойникующими дислокациями нельзя считать пренебрежимо малым [28]. Поэтому в математических моделях двойников на этом уровне должен присутствовать параметр, определяющий данное расстояние. Напряжения и деформации в моделях двойника рассматриваемого уровня определяются в результате дискретного суммирования напряжений и деформаций, сформированных каждой отдельной двойникующей дислокацией двойниковой границы. На мезоскопическом уровне

возможно рассмотрение не только участка границы микродвойника, но и изучение отдельных двойников длиной до десятых долей микрометра. Такие двойники характеризуют начальную стадию развития двойникования и в некоторых случаях могут рассматриваться как зародыши двойников.

Существующая в настоящее время дислокационная модель тонкого двойника [4], [20] справедлива для ограниченного класса клиновидных двойников, для которых выполняется соотношение  $H/L < 10^{-4} - 10^{-3}$ , где  $H$  – ширина двойника у устья, а  $L$  – длина клиновидного двойника. Указанные двойники чаще встречаются в титане, кремнистом железе и т. д. [2]. Как правило, на практике приходится иметь дело с двойниками, для которых  $H/L > 10^{-2} - 10^{-1}$  [12]–[15]. Теория данных двойников в настоящее время слабо развита. Особый интерес представляет математическое моделирование и изучение энергетики начальных стадий двойникования, которые во многом определяют дальнейшее развитие двойников.

Для моделирования начальных стадий развития двойников целесообразно использование математических моделей такого масштабного уровня, когда из-за малости размеров двойников нужно учитывать параметр, определяющий расстояние между двойникующими дислокациями. К этим моделям можно отнести мезоскопическую дислокационную модель, развитую в работах [25], [28]–[32]. Упрощение, которое дает данная модель, заключается в возможности оперирования дискретными величинами, а суммарный вклад в деформационную картину, сформированную двойником, может быть определен суммированием вкладов составляющих двойниковые границы компонентов – двойникующих дислокаций. Недостатком таких моделей является их низкая экономичность при компьютерных расчетах, когда изучаются двойники длиной более 100 мкм и при высокой плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах.

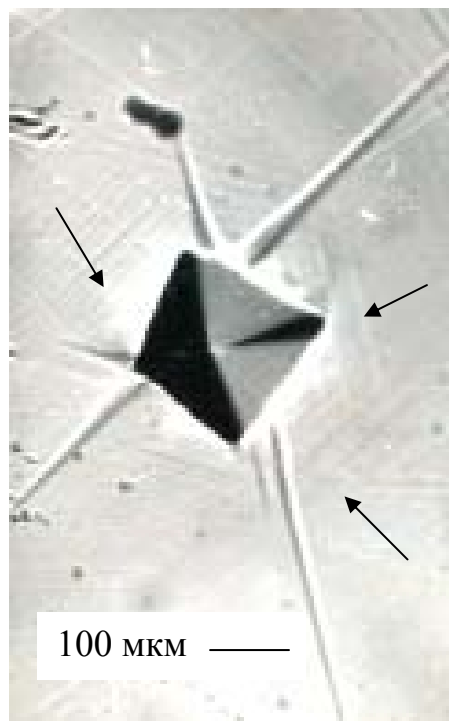
Представляют интерес вопросы, связанные с трансформацией полей напряжений у движущегося двойника. В этой связи целесообразно получение расчетных соотношений для развивающегося двойника.

## 2.1. Клиновидные микро- и нанодвойники

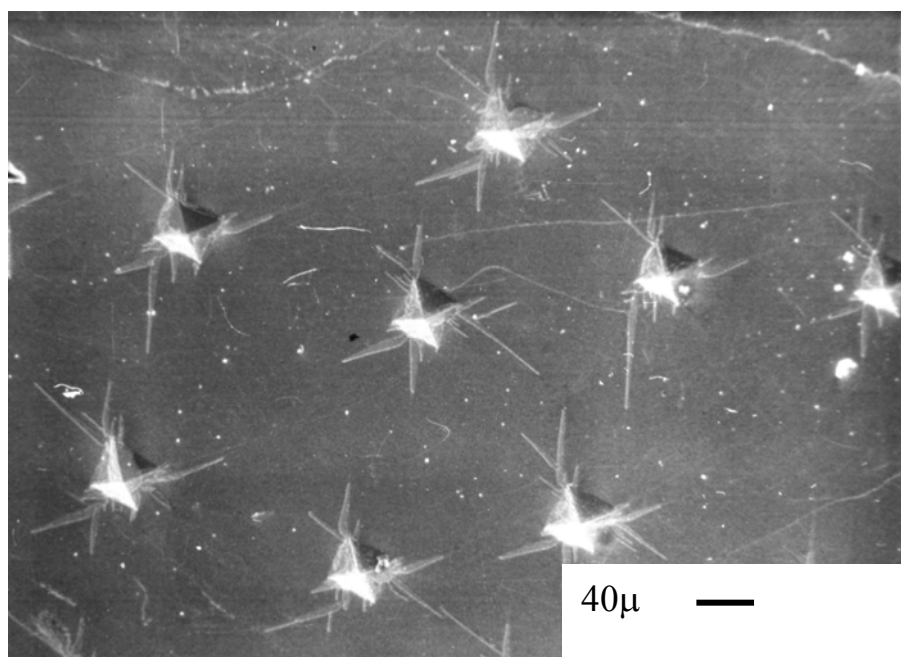
Клиновидные микродвойники, как правило, возникают в монокристаллах в областях локализации внешних напряжений, например, при деформировании поверхности двойникующегося кристалла ал-



мазной пирамидкой Виккерса, Берковича или Кнупа [11]–[14], [33]. Типичный вид клиновидных двойников, возникающих при этом у отпечатка индентора, представлен на рис. 2.1 и 2.2.



*Рис. 2.1.* Клиновидные двойники у отпечатка алмазной пирамиды Виккерса на поверхности (111) монокристалла висмута. Оптическая микроскопия. Стрелками показаны следы пирамидального скольжения, формирующие у отпечатка индентора шестиугольник



*Рис. 2.2.* Система отпечатков пирамиды Виккерса и клиновидные двойники вокруг них на поверхности (111) монокристалла висмута. Растровая электронная микроскопия с использованием электронного микроскопа *NANOLAB-7*

Свойства остаточных двойниковых прослоек, возникающих у отпечатка индентора, изучались в работах [12]–[16], [34]–[38]. Установлено, что ансамбль клиновидных двойников у отпечатка индентора весьма чувствителен к условиям деформирования монокристалла. На рис. 2.3 представлена зависимость от нагрузки на индентор ( $P$ ) длины и ширины вблизи устья наибольшей остаточной двойниковой прослойки, возникающей у отпечатка индентора. Данные результаты получены при локальном деформировании поверхности (111) монокристаллов висмута, выращенных методом Бриджмена из сырья чистотой 99,999 %. Исходная плотность дислокаций у полученных образцов определялась методом избирательного травления и составила  $10^5 \text{ см}^{-2}$  базисных и  $10^3 \text{ см}^{-2}$  пирамидальных дислокаций. В исследуемом интервале нагрузок зависимости  $L_m = f(P)$  и  $H = f(P)$  линейные. Численные значения длины и ширины клиновидных двойников увеличиваются с ростом нагрузки на индентор. Количество двойников у отпечатка индентора с ростом нагрузки на индентор увеличивается незначительно и в исследованном интервале нагрузок находится в пределах 6–8 штук.

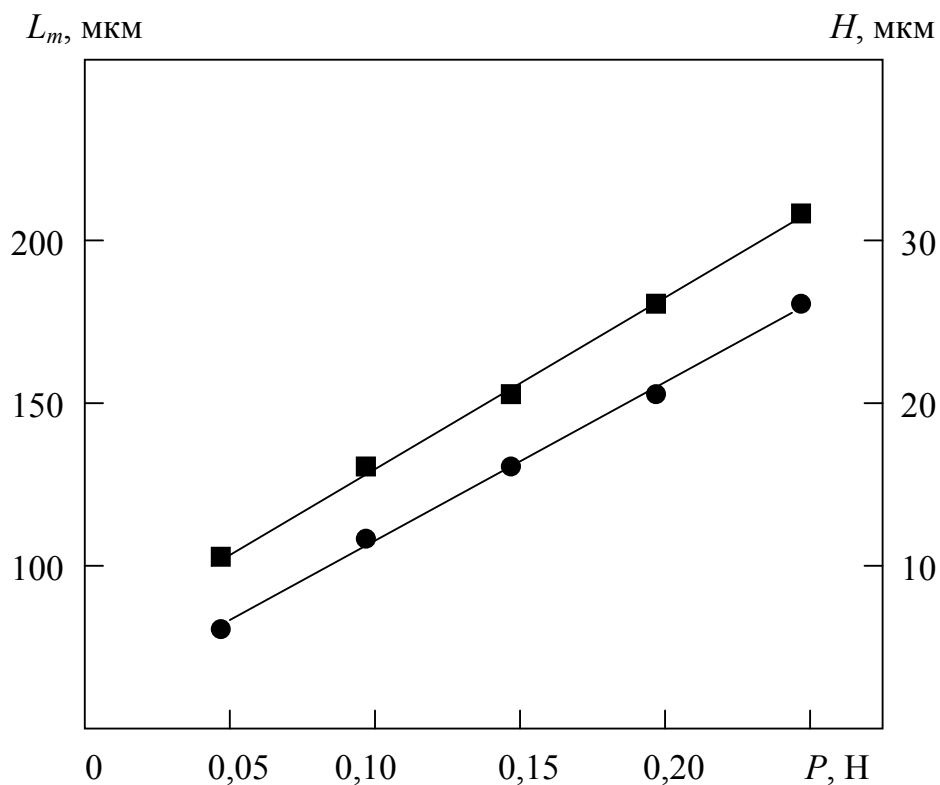


Рис. 2.3. Зависимость длины ( $L_m$ ) и ширины у устья ( $H$ ) наибольшей остаточной двойниковой прослойки у отпечатка индентора от нагрузки ( $P$ ) на него: ● –  $L_m = f(P)$ ; ■ –  $H = f(P)$

Распределение двойников по длинам в монокристалле висмута при нагрузке на индентор 0,3 Н представлено на рис. 2.4. Данное распределение чувствительно к условиям деформирования кристаллов. Так, например, пропускание электрического тока большой плотности (порядка  $500 \text{ А/мм}^2$  длительностью  $10^{-5}$  с) через монокристалл висмута при его локальном деформировании приводит к появлению на рассматриваемом распределении второго максимума [39].

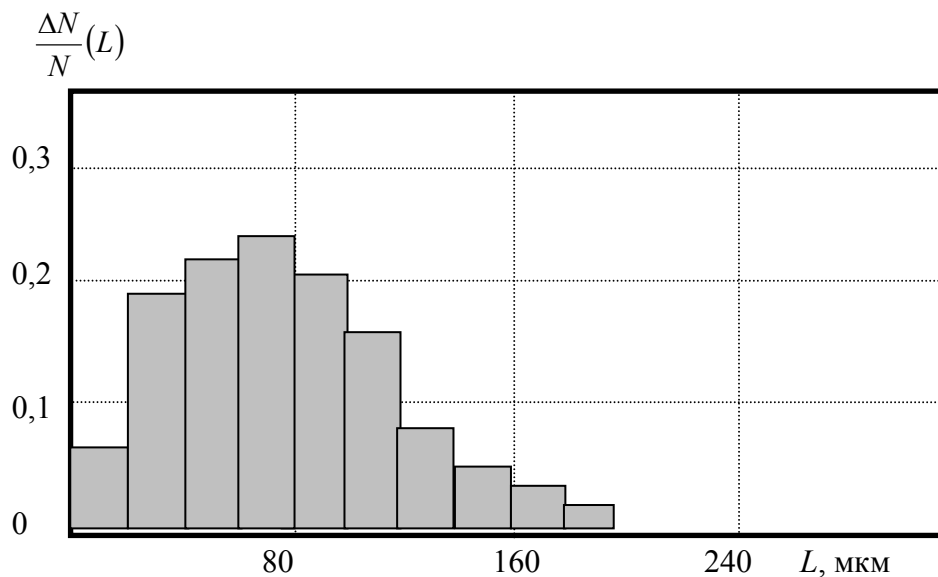


Рис. 2.4. Распределение двойников по длинам.  
Нагрузка на индентор 0,3 Н

В металлах двойникование в чистом виде проявляется крайне редко. Преимущественно двойникование развивается наряду со скольжением. В работе [21] был предложен способ определения вклада двойникования и скольжения в процесс деформирования монокристаллов. Способ основан на методе локального дозированного деформирования поверхности кристалла.

Известно, что скорость пластической деформации кристаллов определяется по формуле [40]:

$$\dot{\epsilon} = \rho b V, \quad (2.1)$$

где  $\rho$  – плотность дислокаций, участвующих в акте пластической деформации;  $b$  – модуль их вектора Бюргерса;  $V$  – скорость дислокаций.

На базе соотношения (2.1) и рассматривается вклад двойниующих дислокаций в пластическую деформацию монокристалла, подвергнутого воздействию сосредоточенной нагрузки [21]. Пусть  $\rho_{\text{дв}}$  – плотность двойниующих дислокаций одинаковая для всего ансамбля двойников, возникающих у отпечатка индентора (т. е.  $\rho_{\text{дв}} = \text{const}$  для ансамбля). Средняя длина пробега дислокаций  $i$ -го двойника равна  $L_i/2$  ( $L_i$  – длина  $i$ -го двойника), тогда (2.1) можно записать как:

$$\dot{\epsilon}_i = \frac{b}{2} \rho L_i, \quad (2.2)$$

или

$$\varepsilon_i = \frac{b}{2} \rho L_i. \quad (2.3)$$

Вклад, вносимый в пластическую деформацию всеми двойниками ансамбля, определится следующим образом [21]:

$$\varepsilon_{\text{дв}} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i = \frac{b}{2} \rho_{\text{дв}} \sum_{i=1}^N L_i, \quad (2.4)$$

или, как это можно просто показать, при плотности двойникующих дислокаций, индивидуальной для каждого двойника, (2.4) примет вид

$$\varepsilon_{\text{дв}} = \frac{b}{2} \sum_{i=1}^N \rho_{\text{дв}i} L_i. \quad (2.5)$$

В (2.4) и (2.5)  $N$  – число двойников в ансамбле.

Один двойник длиной 100 мкм с плотностью двойникующих дислокаций на границах  $10^5 \text{ см}^{-2}$  [4], [21] и величиной их вектора Бюргера  $0,2 \cdot 10^{-3}$  мкм дает  $\varepsilon_{\text{дв}} \approx 10^{-3}$ .

Чтобы найти вклад скольжения при микроиндентировании кристалла, необходимо измерить его микротвердость ( $H_\mu$ ). Далее, воспользовавшись соотношением [21]:

$$H_\mu = \alpha \sigma, \quad (2.6)$$

где  $\sigma$  – напряжения, создаваемые в кристалле при его деформировании сосредоточенной нагрузкой; для металлов  $\alpha = 3$ , учитывая, что

$$\sigma = \theta \varepsilon, \quad (2.7)$$

где  $\theta$  – коэффициент деформационного упрочнения (для ГЦК металлов  $\theta \approx 10^{-3} - 10^{-4} \mu$ , где  $\mu$  – модуль сдвига), а

$$\varepsilon = \varepsilon_{\text{дв}} + \varepsilon_{\text{ск}}, \quad (2.8)$$

где  $\varepsilon_{\text{ск}}$  – вклад скольжения в пластическую деформацию; отсюда получим

$$\varepsilon_{\text{ск}} = \frac{H_\mu}{\alpha \theta} - \varepsilon_{\text{дв}}. \quad (2.9)$$

Для висмута при  $H_\mu = 12,3 \text{ кгс/мм}^2$  [1],  $\mu = 1260 \text{ кг/мм}^2$  [2],  $N = 6$ , т. е.  $\varepsilon_{\text{дв}} \approx 6 \cdot 10^{-3}$ , получим  $\varepsilon_{\text{ск}} \approx 10^{-3} - 10^{-2}$ . Сравнивая полученные зна-

чения для  $\varepsilon_{\text{дв}}$  и  $\varepsilon_{\text{ск}}$ , можно сделать вывод, что вклады, вносимые в процесс реализации пластической деформации двойникованием и скольжением в случае воздействия на кристалл висмута сосредоточенной нагрузки, соизмеримы по порядку величины. Важно отметить, что деформация при двойниковании равная по порядку величины доле скольжения, локализована на двойниковых границах, приводя к возникновению в этих областях больших внутренних напряжений.

Зная  $\varepsilon_{\text{дв}}$  и  $\varepsilon_{\text{ск}}$ , можно ввести величину

$$\eta = \frac{\varepsilon_{\text{дв}}}{\varepsilon_{\text{ск}}}, \quad (2.10)$$

которая определяет вклад двойникования и скольжения в пластическую деформацию.

Таким образом, показано, как, используя метод микроиндентирования, можно сравнительно просто оценить степень участия двойникования и скольжения в пластической деформации кристаллов. Следует подчеркнуть, что для определения вклада скольжения при применении описанной методики нет необходимости в использовании травления [41] и прочих методов, применяемых, например, в [42].

Если плотность базисных ( $\rho_{\text{б}}$ ) и пирамидальных ( $\rho_{\Delta}$ ) дислокаций при деформировании сосредоточенной нагрузкой поверхности кристалла известна, то можно записать

$$\varepsilon_{\text{ск}} = b_{\text{б}}\rho_{\text{б}}L_{\text{б}} + b_{\Delta}\rho_{\Delta}L_{\Delta}, \quad (2.11)$$

где  $b_{\text{б}}$  и  $b_{\Delta}$ ,  $L_{\text{б}}$  и  $L_{\Delta}$  – модули векторов Бюргерса и пробеги базисных и пирамидальных дислокаций соответственно.

Плотности базисных и пирамидальных дислокаций по многочисленным экспериментальным данным [2], [43]–[46] часто связаны соотношением

$$\rho_{\text{б}} = 10^2 \rho_{\Delta}, \quad (2.12)$$

т. е. в случае, например, всестороннего сжатия кристалла висмута плотность базисных дислокаций в нем на два порядка выше пирамидальных.

Пробег базисных дислокаций  $L_{\text{б}}$  связан с глубиной проникновения индентора  $h_{\text{инд}}$  по формуле [21]:

$$L_{\text{б}} = \sqrt{h_{\text{инд}}^2 + \frac{d_{\text{инд}}^2}{4}}, \quad (2.13)$$

где  $d_{\text{инд}}$  – величина диагонали отпечатка индентора. Для пирамиды Виккерса  $d_{\text{инд}} = 7h_{\text{инд}}$  [47], тогда (2.13) можно записать в виде

$$L_6 = \frac{\sqrt{53}}{14} d_{\text{инд}}. \quad (2.14)$$

Формулы (2.13) и (2.14) получены в рамках приближения, использованного в [48], согласно которому зона пластической деформации у индентора конечна и за ее пределами рассматриваемые дислокации отсутствуют.

Скольжение пирамидальных дислокаций происходит по граням пирамиды размером  $L_{\Delta} = 2L_6$ , определяемым из формулы

$$L_{\Delta} = \frac{\sqrt{53}}{7} d_{\text{инд}}. \quad (2.15)$$

Использование в работе [49] прозрачных тонких пленок полипараксилилена для исследования двойникового монокристаллов висмута позволило впервые установить, что, кроме скольжения, процесс двойникового сопровождается интенсивное выкрашивание приповерхностного слоя кристалла.

Полипараксилилен является линейным полимером с регулярной химической структурой  $(-\text{CH}_2-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CH}_2-)$  и молекулярной массой 200000–500000 ед. Плотность полипараксилилена составляет 1,1 г/см<sup>3</sup>, модуль упругости при растяжении 24500 кгс/см<sup>2</sup>, предел прочности при растяжении 630 кгс/см<sup>2</sup>. Осаждаемый на поверхности подложек полипараксилилен обычно имеет кристаллическую структуру. Он прозрачен в оптическом диапазоне, имеет высокие диэлектрические характеристики. Пленки конформны, являются равнотолщинными и ненапряженными. Адгезия полипараксилиленовых пленок к гладким поверхностям невелика, если не использованы различные методы предварительной обработки (например, плазмохимический).

Полипараксилиленовые (ППК) пленки на исследуемых образцах монокристаллического висмута получали по методу Горхэма, когда газ-мономер образуется в термическом реакторе в процессе пиролиза паров исходного димера – циклодипараксилола. Из высокотемпературного (550–650 °С) реактора газ-мономер поступает в низкотемпературную (–30 °С) камеру нанесения пленок, где полимеризуется на поверхностях, имеющих температуру менее 30 °С. Полу-

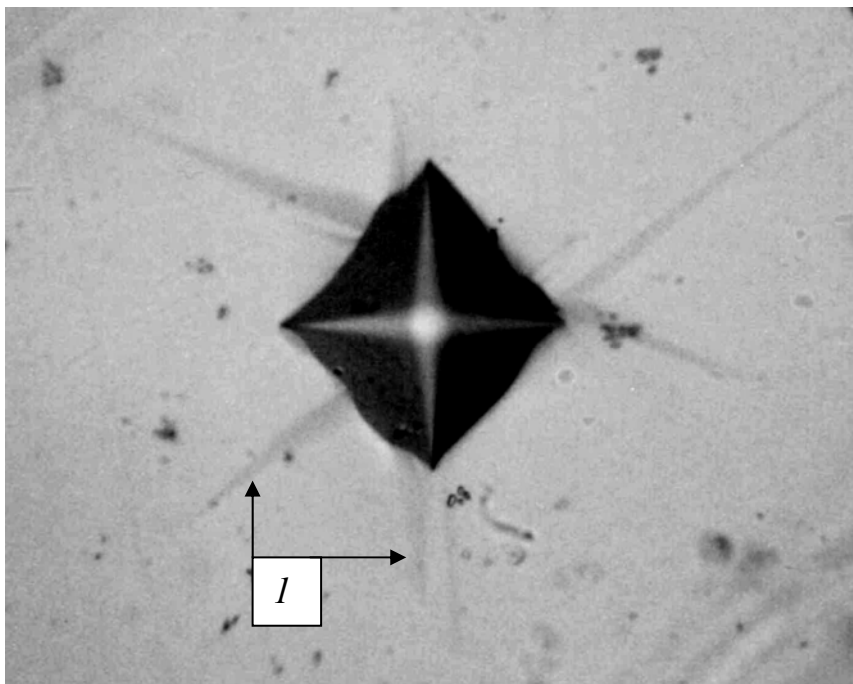
чение полипараксилиленовых пленок идет в проточном режиме, при низких давлениях – от 0,1 до 100 Па в различных технологических зонах установки.

Образцы монокристаллического висмута со свежесколотыми поверхностями (111) помещались в вакуумную камеру установки получения полипараксилиленовых пленок, камера откачивалась до давления 0,1 Па, затем при давлении мономера в камере 3–5 Па на образцах были получены пленки со средней скоростью осаждения 5 нм/мин. Толщина пленок составила 10–50 нм.

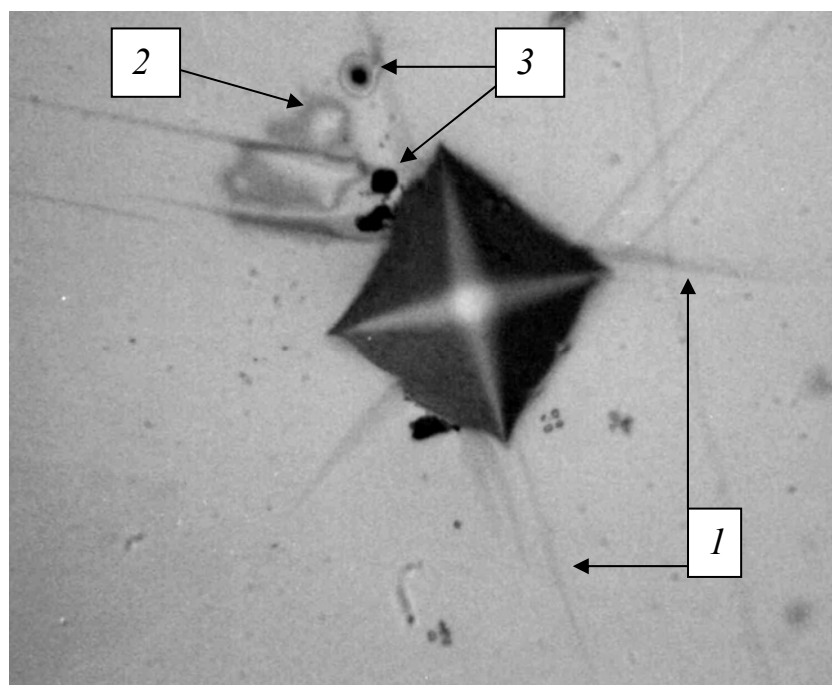
Сложное напряженное состояние в приповерхностном слое монокристаллов висмута создавалось алмазной пирамидой Виккерса стандартного прибора ПМТ-3. Велась съемка наиболее интересных фрагментов деформационной картины на поверхности (111) монокристаллов висмута с нанесенной на нее полипараксилиленовой пленкой.

На рис. 2.5–2.7 представлен вид деформационной картины, возникающей на поверхности (111) монокристалла висмута у отпечатка пирамиды Виккерса при различных нагрузках на индентор при наличии нанесенной на поверхность кристалла тонкой полипараксилиленовой пленки. Граница отпечатка на поверхности с нанесенной на нее тонкой пленкой неровная, несколько волнистая (рис. 2.5–2.7). Кроме того, в непосредственной близости к отпечатку при нагрузке на индентор 0,1 Н едва заметны потемнения, а также небольшие светлые пятна, указывающие на иное направление распространения светового потока, падающего на полипараксилиленовую пленку в области ее интенсивной деформации (рис. 2.5). Данные особенности, вероятно, вызваны неоднородностью пленки по упругим свойствам и толщине. В результате в отдельных микрообластях материал выдавливается индентором неодинаково. Это приводит к неровности границы отпечатка и неровности рельефа, вызывая неоднородность отражения светового потока.





*Рис. 2.5.* Ансамбль клиновидных двойников у отпечатка индентора на поверхности (111) монокристалла висмута с нанесенной пленкой толщиной 50 нм ( $\times 500$ ).  
Нагрузка на индентор 0,1 Н; 1 – двойники



*Рис. 2.6.* Ансамбль клиновидных двойников у отпечатка индентора на поверхности (111) монокристалла висмута с нанесенной пленкой толщиной 50 нм ( $\times 500$ ). Нагрузка на индентор 0,2 Н; 1 – двойники; 2 – область отслоения пленки от подложки; 3 – частицы выкрашивания

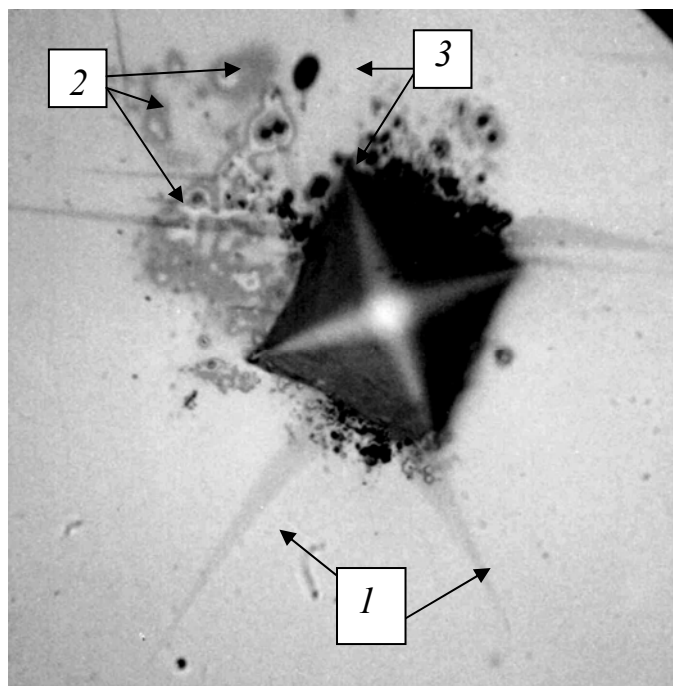


Рис. 2.7. Ансамбль клиновидных двойников у отпечатка индентора на поверхности (111) монокристалла висмута с нанесенной пленкой толщиной 50 нм ( $\times 500$ ). Нагрузка на индентор 0,3 Н;  
1 – двойники; 2 – область отслоения пленки от подложки;  
3 – частицы выкрашивания

С повышением нагрузки на индентор (рис. 2.6, 2.7) наблюдается выкрашивание материала подложки, имеющего вид черных частиц, задерживаемых нанесенной пленкой. Число таких частиц растет с увеличением нагрузки на индентор. Вероятно, выкрашивание происходит и в случае деформирования поверхности монокристалла висмута без наличия пленки, а свободные частицы материала висмута с его поверхности в ходе эксперимента удаляются или смещаются из зоны наблюдения потоками воздуха при перемещении столика прибора ПМТ-3 от индентора к объективу микроскопа. Следовательно, полипараксилиленовая пленка выступает в качестве фиксатора отколотых частиц.

Интересен механизм выкрашивания монокристаллов висмута при локальном деформировании их поверхности. Под действием сосредоточенной нагрузки  $P$ , кроме двойникового, активизируется и базисное скольжение в плоскостях, параллельных плоскости (111). При взаимодействии со стопором (рис. 2.8) такие дислокации образуют скопления, локализуя у стопора напряжения, что приводит к искривлению поверхности монокристалла висмута. В области концентрации напряжений активно развиваются трещины, которые

способствуют отделению данных областей от поверхности монокристалла висмута (рис. 2.8). При наличии упругой и слабо связанной с поверхностью пленки продукты выкрашивания удерживаются на поверхности. Использование прозрачной пленки, к которой относится полипараксилиленовая пленка, позволяет предложить удобный способ изучения процесса выкрашивания материалов.

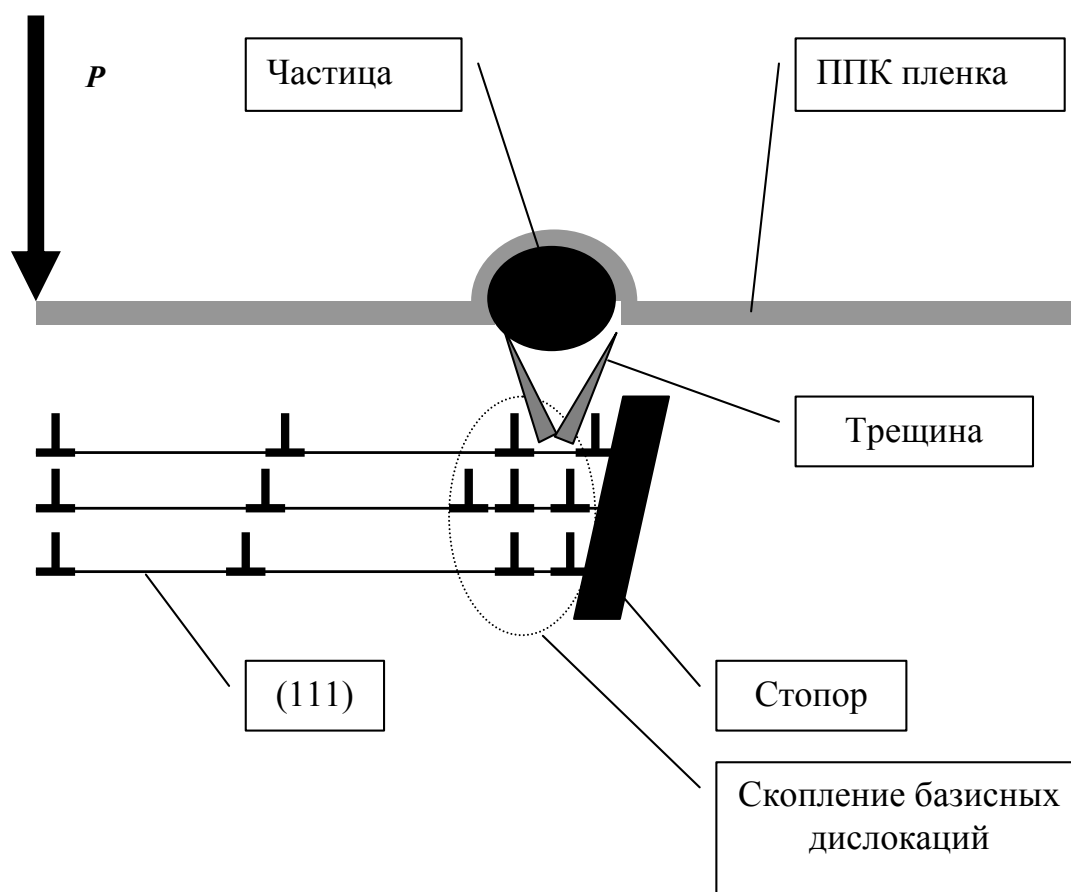


Рис. 2.8. Схема дислокационного механизма выкрашивания монокристаллов висмута

Кроме выкрашивания, наблюдается также локальное отслоение от подложки полипараксилиленовых пленок (рис. 2.5–2.7), связанное в первую очередь с их слабой адгезией. Такие отслоения пленки свидетельствует о локализации в данных областях напряжений, которые не повлекли выкрашивание. Однако в этих областях, очевидно, находятся дислокационные скопления, которые выявить в отсутствие пленки было бы невозможно. Поэтому нанесение на поверхность материала пленки со слабой адгезией может выступать и способом оптического исследования областей локализации дислокаций.

Двойники длиной порядка десятков-сотен нанометров можно отнести к нанодвойникам. Интерес к исследованию таких двойников связан с тем, что они характеризуют начальную стадию развития двойникования. Вопросы, связанные с механизмами зарождения двойников, в настоящее время являются малоизученными. Поэтому исследование нанодвойникования представляется актуальной научной проблемой.

На рис. 2.9 и 2.10 показаны микрофотоснимки, сделанные с помощью растрового электронного микроскопа. На них приведены фрагменты отпечатка индентора Виккерса на поверхности (111) монокристалла висмута, а также микродвойники. Нанодвойники на рис. 2.9 и 2.10 отмечены стрелками. На рис. 2.9 нанодвойник, зародившийся у вершины отпечатка индентора, имеет размеры порядка 800 нм. Нанодвойник на рис. 2.10 имеет размер порядка 200 нм. Возникали ситуации, когда нанодвойники наблюдались не у вершины отпечатка индентора, а у его грани. Причем в отдельных случаях нанодвойники появлялись вдали от отпечатка индентора на расстоянии порядка 50 нм.

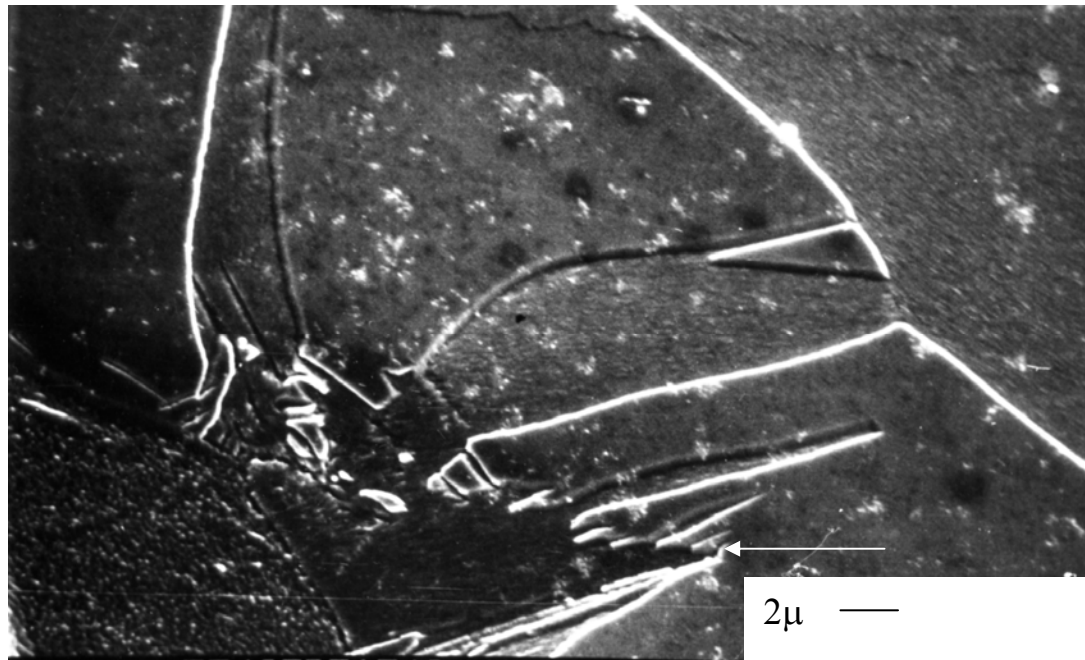


Рис. 2.9. Микрофотоснимок фрагмента отпечатка индентора Виккерса на поверхности (111) монокристалла висмута. Стрелкой показан нанодвойник

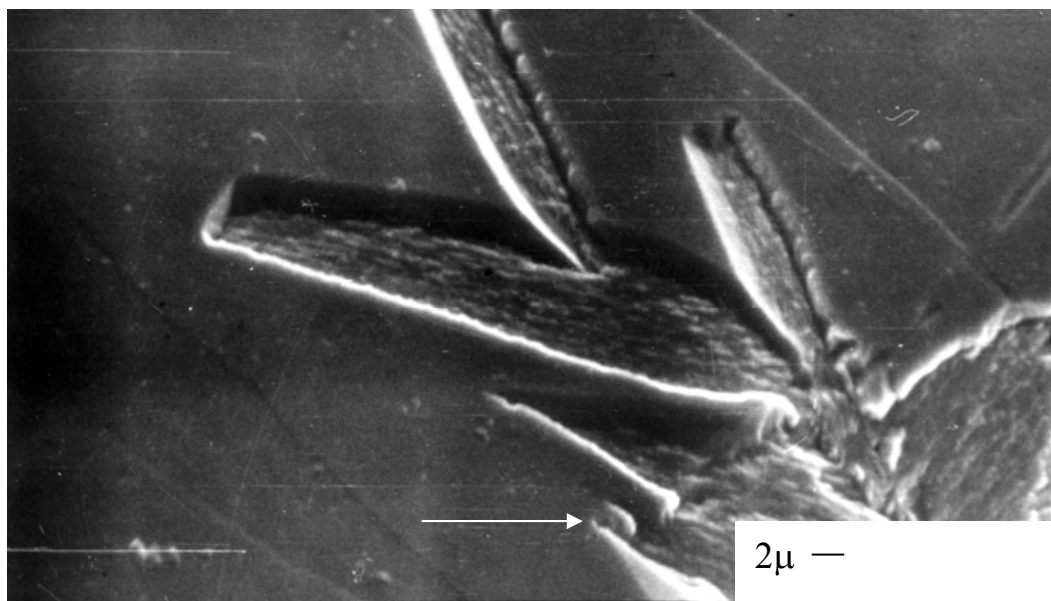


Рис. 2.10. Микрофотоснимок фрагмента отпечатка индентора Виккерса на поверхности (111) монокристалла висмута. Стрелкой показан нанодвойник

Принадлежность отмеченных стрелками на рис. 2.9 и 2.10 образований к нанодвойникам подтверждалась детальными исследованиями рельефа поверхности при большом увеличении с помощью микроскопа *CamScan-4*. Так как двойниковые прослойки на поверхности образуют специфический рельеф, присущий только двойникам, то метод выявления двойников по специфическому рельефу поверхности можно считать достаточным и достоверным. Благодаря этому данный метод и получил широкое распространение [11]–[16]. Было установлено, что нанодвойники образуют на поверхности скола (111) монокристалла висмута такой же рельеф, как и микродвойники.

Определим число двойникующих дислокаций на границах нанодвойников, отмеченных на рис. 2.9 и 2.10. В случае скольжения дислокации могут развиваться в больших количествах в одном направлении вдоль одной плоскости. При двойниковании, вообще говоря, в каждой плоскости в направлении развития двойника движется только одна дислокация [4]. Поэтому в направлении, нормальном направлению развития двойника, расстояние между двойникующими дислокациями равно межплоскостному расстоянию  $a$ . Тогда полное число дислокаций  $N_{\text{дисл}}$ , образующих границу двойника, определится из простого соотношения

$$N_{\text{дисл}} = \frac{H}{a}. \quad (2.16)$$

В нашем случае расстояние  $a$  не превышает  $3,3 \cdot 10^{-10}$  м [1] (двойникование происходит в плоскостях  $\{110\}$  монокристаллов висмута);  $H$  принимает значения, близкие к  $0,1 \cdot 10^{-6}$  м (рис. 2.9) и  $0,05 \cdot 10^{-6}$  м (рис. 2.10). Тогда, производя расчет по (2.16), получим, что  $N_{\text{дисл}}$  равно 300 для нанодвойника, показанного на рис. 2.9, и 150 для нанодвойника, изображенного на рис. 2.10. Следует отметить, что результаты расчета несколько отличаются от данных, приведенных в [4]. Это обусловлено тем, что представления о дислокационном строении двойников в [4] развивались на основании исследований двойников, имеющих длину, порой соизмеримую с размерами образцов. Плотность двойникующих дислокаций у таких двойников мала, как и степень некогерентности двойниковых границ. Соответственно велико расстояние между соседними двойникующими дислокациями на двойниковых границах.

Плотность двойникующих дислокаций  $\rho$  для двойников, представленных на рис. 2.9 и 2.10, может быть рассчитана по формуле

$$\rho = \frac{N_{\text{дисл}}}{L}. \quad (2.17)$$

В нашем случае  $L$  принимает значения 800 нм (рис. 2.9) и 200 нм (рис. 2.10). Тогда для  $\rho$  будем иметь  $375 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}$  (для нанодвойника на рис. 2.9) и  $750 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}$  (для нанодвойника на рис. 2.10).

Расстояние  $d$  между двойникующими дислокациями в направлении развития нанодвойников можно найти по формуле

$$d = \frac{L}{N_{\text{дисл}}}. \quad (2.18)$$

Для двойника длиной 800 нм  $d = 2,7 \cdot 10^{-9}$  м, а для двойника длиной 200 нм  $d = 1,3 \cdot 10^{-9}$  м.

Сравнивая полученные значения с величиной  $a$ , можно отметить, что расстояние между двойникующими дислокациями вдоль направления развития у нанодвойников почти на порядок ниже расстояния между двойникующими дислокациями в направлении, нормальном направлению развития нанодвойников. Это говорит о том, что процесс трансляции двойникующих дислокаций вдоль двойниковой границы у нанодвойников затруднен, затруднен и процесс образования границы раздела двойник – материнский кристалл. Причем это проявляется на фоне активной генерации двойникующих дислокаций.

Полученные в данной работе значения  $d$  существенно отличаются от значений, приведенных в работе [4]. Это говорит о том, что зарождение двойников и их дальнейшее развитие осуществляются в различных условиях.

Удобным способом исследования начальных стадий двойникового кристаллов можно считать наноиндентирование. В работе [50] исследования производились на нанотвердомере *NANO INDENTER II* производства фирмы *Nano Instrument Inc., USA*. Прибор производит испытания на твердость трехгранным индентором Берковича при малых (до 20 Г) нагрузках. В процессе исследования с высокой точностью регистрируется зависимость перемещения индентора Берковича от нагрузки  $h_{\text{инд}} = f(P)$  [50]. Точность измерения глубины отпечатка равна  $\pm 0,04$  нм, нагрузки на индентор –  $\pm 75$  нН.

Испытания производились на плоскости скола (111) монокристалла висмута при нагрузках до 200 мН. Скорость нагружения индентора изменялась от 1 до 10 мН/с. Было установлено, что при данных скоростях деформирования двойникование в висмуте не наблюдается. Это позволило в чистом виде изучить сопутствующее двойникованию скольжение.

Действие на поверхность (111) монокристалла висмута сосредоточенной нагрузки активирует скольжение в  $\{11\bar{1}\}$ , как наиболее выгодно расположенной по отношению к направлению действия внешней нагрузки. На рис. 2.11 место действия индентора обозначено точкой  $O$ . При пересечении плоскостей  $\{11\bar{1}\}$  с плоскостью (111) образуется шестиугольник  $A_1A_2A_3A_4A_5A_6$  (рис. 2.11). На рис. 2.1 следы этих плоскостей на поверхности (111) монокристалла висмута обозначены стрелками.

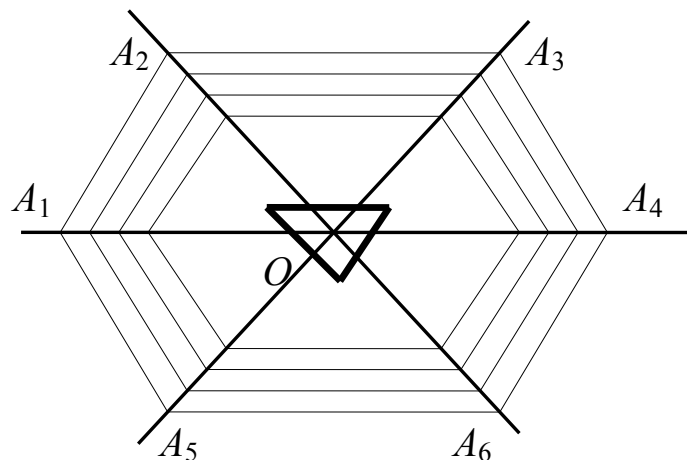


Рис. 2.11. Схема пересечения плоскостей  $\{11\bar{1}\}$  с плоскостью скола (111).  $O$  – точка действия сосредоточенной нагрузки

Под действием внешней сосредоточенной нагрузки  $P$  дислокации системы  $\{11\bar{1}\}$  начинают свое движение по плоскостям пирамиды, грани которой образуют плоскости  $\{11\bar{1}\}$  (рис. 2.12). Пройдя некоторое расстояние вглубь кристалла, благодаря особенностям полей напряжений, создаваемых внедряемой пирамидой Берковича, дислокации изменяют направление своего движения на противоположное, но по плоскостям той же системы  $\{11\bar{1}\}$ , расположенным под углом к плоскостям первоначального движения (рис. 2.12). Часть таких дислокаций выходит на поверхность, образуя ступени, которые могут быть обнаружены металлографическим методом (рис. 2.1). Вокруг отпечатка индентора такие ступени образуют шестиугольник, который схематически изображен на рис. 2.11.

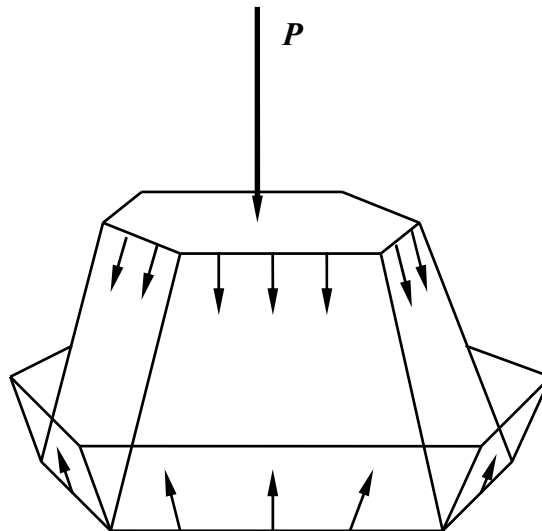


Рис. 2.12. Грани пирамиды, по которым осуществляется движение дислокаций системы  $\{11\bar{1}\}$

Предположим, что под действием нагрузки  $P$  дислокации начали свое движение по плоскостям  $\{11\bar{1}\}$  одновременно. Тогда их энергию  $W_i$  в некоторый фиксированный момент времени  $t$ , исходя из представления о том, что они образуют шестиугольник (рис. 2.11, 2.12), можно определить как энергию гексагональной дислокационной петли с вектором Бюргера, ортогональным к ее плоскости. Согласно [40], выражение для  $W_i$  в этом случае имеет вид

$$W_i = 6L_i \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left( \ln \frac{L_i}{\rho} + 0,16 \right), \quad (2.19)$$



где  $L_i$  – длина  $i$ -й дислокации типа  $\{11\bar{1}\}$ ;  $b$  – модуль ее вектора Бюргера;  $\nu$  – коэффициент Пуассона;  $\rho$  – некоторый малый параметр.

Суммарная энергия  $W_\Sigma$  всех  $N/6$  рассматриваемых дислокационных петель определится как

$$W_\Sigma = \sum_{i=1}^{N/6} W_i. \quad (2.20)$$

Для ансамбля из  $N$  дислокаций  $\{11\bar{1}\}$  удобно использовать величину  $\bar{L}$  – среднюю длину дислокационных сегментов гексагональной петли. Очевидно, что

$$\bar{L} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L_i. \quad (2.21)$$

Энергия, которой обладает гексагональная петля с длиной сегмента  $\bar{L}$ , равна

$$\bar{W} = 6\bar{L} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left( \ln \frac{\bar{L}}{\rho} + 0,16 \right). \quad (2.22)$$

Тогда, в приближении малости взаимодействия гексагональных петель друг с другом, (2.20) можно записать в виде

$$W_\Sigma \approx \frac{N}{6} \bar{W}, \quad (2.23)$$

или

$$W_\Sigma \approx N\bar{L} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left( \ln \frac{\bar{L}}{\rho} + 0,16 \right). \quad (2.24)$$

Выражением (2.24) можно пользоваться, когда подвижность дислокаций высока, а процессы их генерации затруднены. При активной генерации дислокаций и при малой их подвижности, когда расстояние  $R_d$  между соседними дислокациями разных ближайших друг к другу гексагональных петель настолько мало, что пренебречь взаимодействием дислокаций нельзя, энергию  $W_\Sigma^{B3}$  этого взаимодействия в приближении, что каждая петля взаимодействует только с двумя соседними петлями, можно оценить по формуле [40]:

$$W_\Sigma^{B3} \approx 12N\bar{L} \frac{\mu b^2}{2\pi} \ln \frac{2\bar{L}}{R_d}. \quad (2.25)$$

Оценочное выражение (2.25) было получено в приближении точно, что все дислокации имеют длину  $\bar{L}$ .

Суммируя (2.24) и (2.25), найдем полную энергию  $W$ , которая тратится внешними силами на скольжение  $\{11\bar{1}\}$ :

$$W \approx N\bar{L} \frac{\mu b^2}{2\pi} \left( \frac{1+24(1-\nu)}{2(1-\nu)} \ln \frac{\bar{L}}{R} + 8,5 \right), \quad (2.26)$$

или, учитывая, что  $\nu \approx 0,33$ ,

$$W \approx N\bar{L} \frac{\mu b^2}{2\pi} \left( 12,7 \ln \frac{\bar{L}}{R} + 8,5 \right). \quad (2.27)$$

В (2.27) допустимо приближение при  $R \rightarrow 0$ . В этом случае  $\ln\left(\frac{\bar{L}}{R}\right) \rightarrow \frac{\bar{L}}{R}$  и вторым слагаемым можно пренебречь. В результате получим

$$W \approx 12,7N \frac{\mu b^2 \bar{L}^2}{2\pi R}. \quad (2.28)$$

Для анализа физической картины рассматриваемого явления это выражение более удобно, чем (2.27).

В [33] было приведено соотношение, связывающее энергию  $W$  с глубиной  $h_{\text{инд}}$  проникновения индентора в деформируемый материал. Это соотношение имеет вид:

$$W = \frac{H_{\mu} h_{\text{инд}}^3}{3k}, \quad (2.29)$$

где  $k$  – геометрический параметр, определяемый формой индентора.

Из сопоставления (2.28) и (2.29) можно заметить, что  $h_{\text{инд}} \sim N^{1/3}$ ,  $h_{\text{инд}} \sim \bar{L}^{2/3}$  и  $h_{\text{инд}} \sim R^{-1/3}$ .

Зависимости глубины проникновения индентора от нагрузки на него при разных скоростях нагружения представлены на рис. 2.13, из которого видно, что скорость нагружения влияет на ход кривой данной зависимости: чем выше скорость нагружения, тем медленнее нарастают значения  $h_{\text{инд}}$  в зависимости от  $P$ .

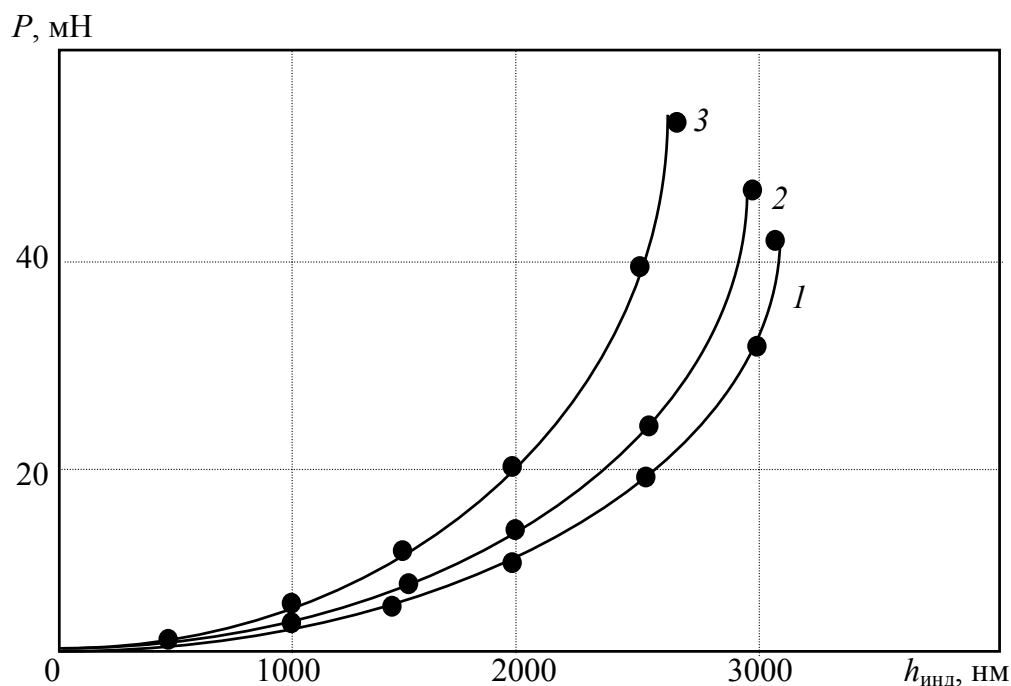


Рис. 2.13. Зависимость глубины проникновения в материал индентора Берковича от нагрузки при различных скоростях нагружения: 1 – 10 мН/с; 2 – 3 мН/с; 3 – 1 мН/с

По формуле [50]:

$$P = \frac{H_{\mu} h_{инд}^2}{k} \quad (2.30)$$

строилась теоретическая зависимость  $P$  от  $h_{инд}$ . При этом в (2.30) принималось  $k = 0,03797$  [33], а  $H_{\mu} = 152$  МПа. Значение микротвердости определялось экспериментально на исследуемых образцах, оно согласуется с общеизвестными значениями (132 МПа [50]). Ход теоретически рассчитанной кривой совпадает с ходом экспериментальной кривой, соответствующей скорости нагружения 3 мН/с. Это говорит о том, что формула (2.30) может быть использована не для всех скоростей нагружения. Поэтому имеет смысл ввести соотношение

$$P = \alpha \frac{H_{\mu} h_{инд}^2}{k}, \quad (2.31)$$

где  $\alpha$  – некоторый безразмерный коэффициент, зависящий от скорости нагружения  $V_P$ . Рассчитанные значения  $\alpha$  приведены в табл. 2.1, из которой видно, что с ростом  $V_P$  коэффициент  $\alpha$  возрастает. В пер-

вом приближении зависимость  $\alpha$  от  $V_P$  может быть представлена в виде

$$\alpha = \beta V_P, \quad (2.32)$$

где  $\beta$  – некоторая величина, имеющая размерность, обратную размерности  $V_P$ .

Таблица 2.1

**Расчетные значения  $\alpha$  в зависимости от скорости нагружения кристалла  $V_P$**

$V_P$ , мН/с	1	3	10
$\alpha$	0,8	1,0	1,5

Можно предположить, что  $\alpha$  характеризует инертность процесса формирования отпечатка индентора, обусловленного инертностью скольжения.

По аналогии с (2.31), (2.29) запишем как:

$$W = \alpha \frac{H_\mu h_{\text{инд}}^3}{3k}. \quad (2.33)$$

Сопоставляя это выражение с (2.28) и (2.32), получим, что  $N \sim V_P$ ,  $V_P \sim L^{-2}$ ,  $V_P \sim \frac{1}{R}$ , т. е. с увеличением скорости нагружения активируются процессы генерации дислокаций, но при этом уменьшается длина пробега дислокаций и расстояние между ними. Активация процесса генерации дислокаций дает основание полагать, что с увеличением скорости нагружения повышается вероятность включения в пластическую деформацию двойникования и базисного скольжения.

При рассматриваемых скоростях нагружения двойникование было обнаружено в монокристаллах сурьмы [33]. На кривых  $P = f(h_{\text{инд}})$  появление двойников у индентора проявлялось в виде разрывов функции  $P = f(h_{\text{инд}})$ . После снятия нагрузки двойники у отпечатка индентора наблюдались с помощью оптического микроскопа. На рис. 2.14–2.16 представлены зависимости  $P = f(h_{\text{инд}})$  для разных скоростей нагружения. На кривых  $P = f(h_{\text{инд}})$  наблюдаются разрывы, свидетельствующие о появлении двойников в монокристаллах сурьмы в результате действия на ее поверхность (111) нарастающей сосредоточенной нагрузки.

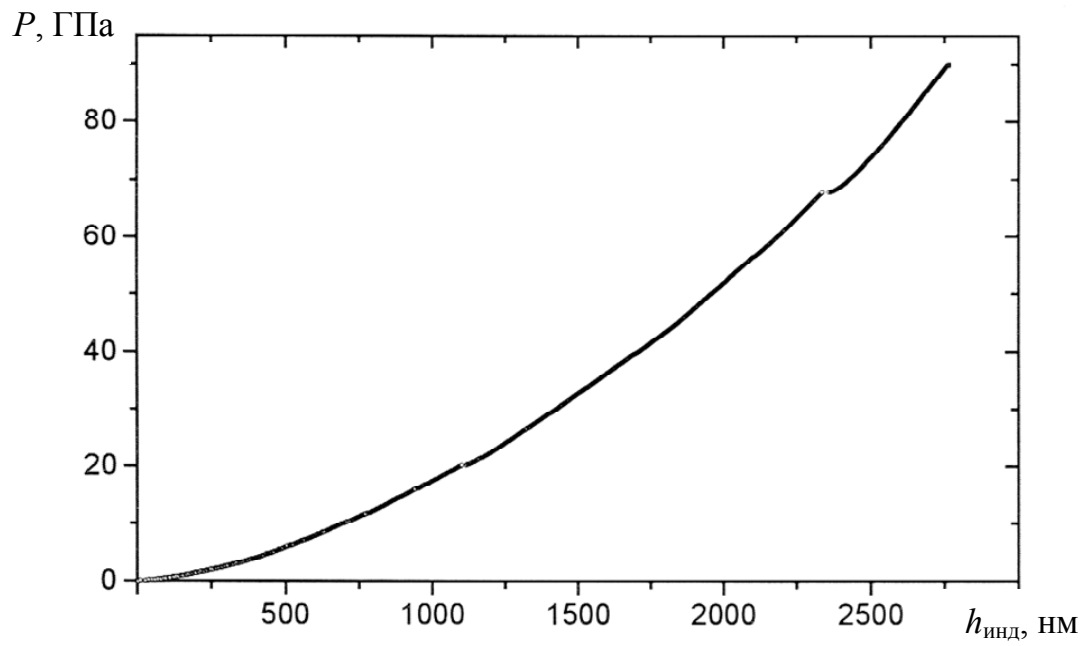


Рис. 2.14. Связь нагрузки на индентор с глубиной его проникновения при скорости нагружения 0,25 мН/с для монокристалла сурьмы

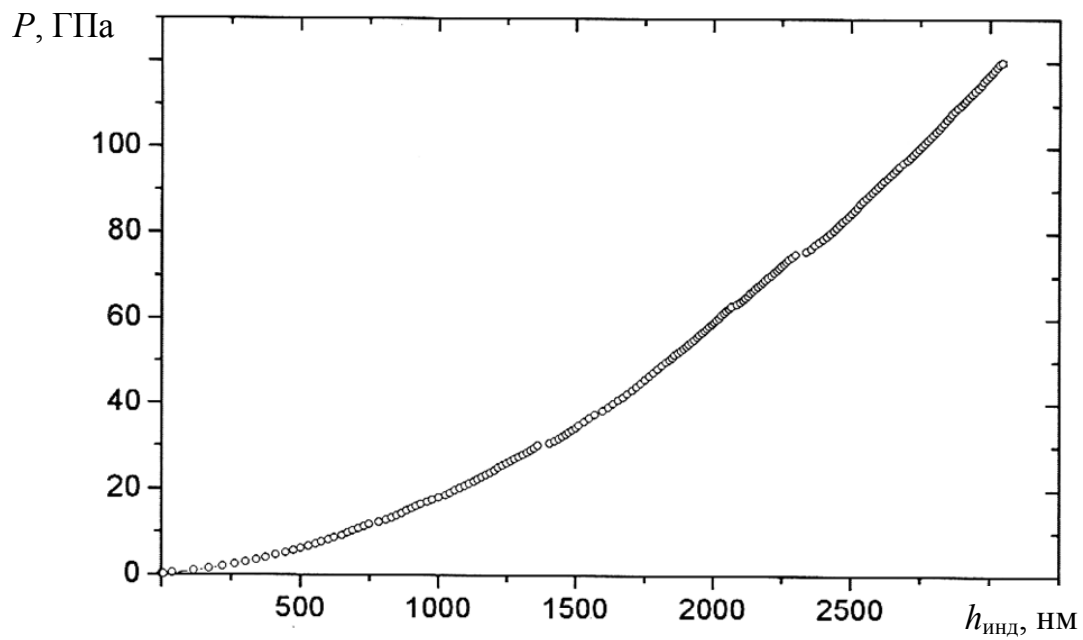


Рис. 2.15. Связь нагрузки на индентор с глубиной его проникновения при скорости нагружения 3 мН/с для монокристалла сурьмы



$\beta_j < \alpha$  ( $j \neq 1$ ), а  $\beta_1 = 1$ , поскольку в начальный момент нагружения двойникования не наблюдалось.

Важной мерой процесса двойникования является величина плотности дислокаций  $\rho$  на границах. Использование наноиндентирования позволяет определить  $\rho$  следующим образом. Запишем выражение

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{h_{\text{инд}}} \frac{dh_{\text{инд}}}{dt} = \rho b V. \quad (2.35)$$

Нетрудно показать, что из (2.35) получается

$$\frac{dh_{\text{инд}}}{h_{\text{инд}}} = \rho b dl. \quad (2.36)$$

Интегрируя (2.36), для единичного двойника имеем

$$\rho = \frac{2}{bL} \ln \frac{h'_{\text{инд}(2)}}{h'_{\text{инд}(1)}}, \quad (2.37)$$

где  $h'_{\text{инд}(1)}$  и  $h'_{\text{инд}(2)}$  – определяемые экспериментально величины глубин проникновения индентора до начала двойникования и после него соответственно.

Величина  $L$  определяется экспериментально. Но поскольку скорость двойникования известна [2], то  $L$  для возникшего двойника рассчитывается по формуле

$$L = 2V(t_2 - t_1), \quad (2.38)$$

где  $t_1$  и  $t_2$  – моменты времени начала двойникования и его окончания соответственно.

Для приведенного на рис. 2.17 случая двойникования время данного процесса имеет величину порядка 0,8 с. Из рис. 2.18 по границам области разрыва кривой  $P = f(h_{\text{инд}})$  находим, что  $h'_{\text{инд}(1)} = 2320$  нм, а  $h'_{\text{инд}(2)} = 2330$  нм. Принимая  $V = 10^{-4}$  м/с, а  $b = 2 \cdot 10^{-10}$  м [2], из (2.37) и (2.38) для рассматриваемого двойника получаем  $L \approx 160$  мкм, а  $\rho \approx 0,25 \cdot 10^8$  м<sup>-2</sup>, что соответствует экспериментальным данным [2] и говорит о правомерности предлагаемой методики для исследования основных параметров двойникования.

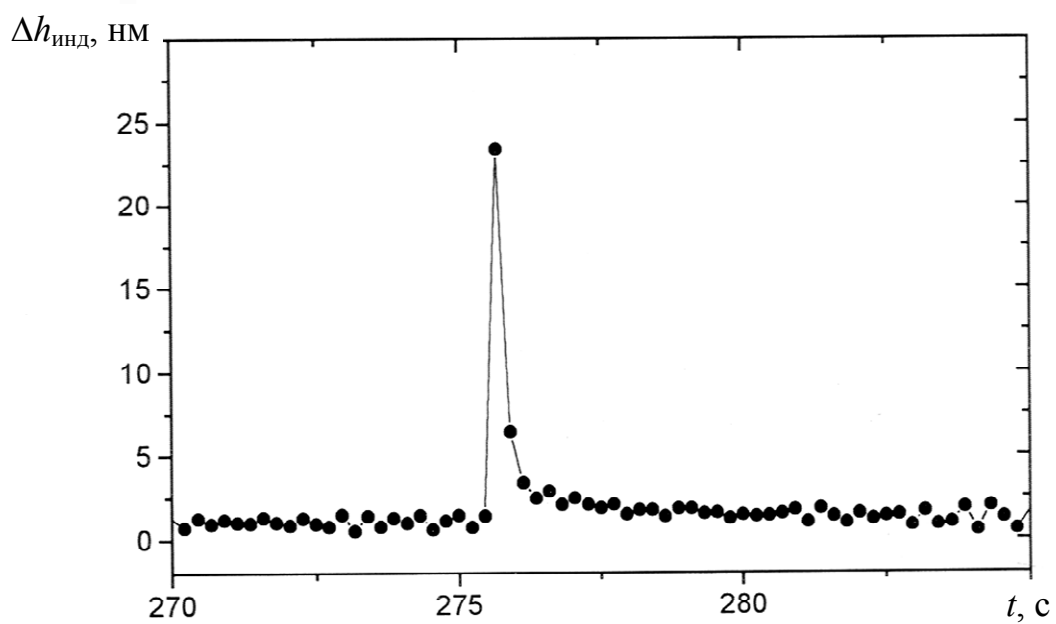


Рис. 2.17. Зависимость  $\Delta h_{\text{инд}}$  от времени  $t$

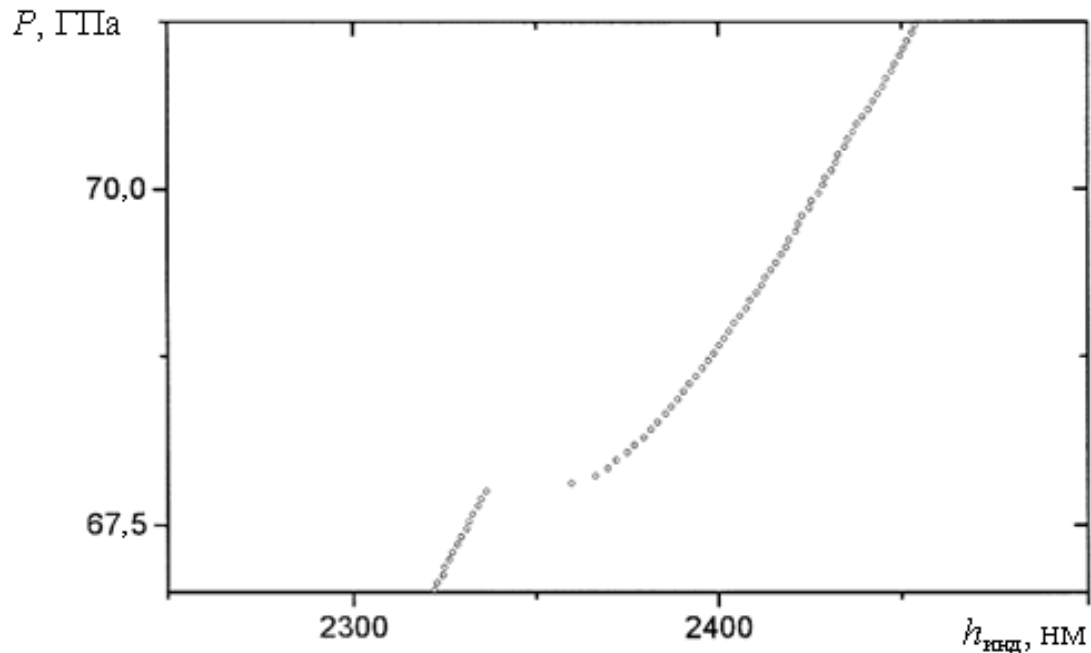


Рис. 2.18. Увеличенное изображение участка разрыва кривой  $P = f(h_{\text{инд}})$



## 2.2. Расчет полей напряжений, смещений и деформаций у клиновидного двойника на основании мезоскопической дислокационной модели

Увеличенное изображение клиновидного двойника правильной формы представлено на рис. 2.19.

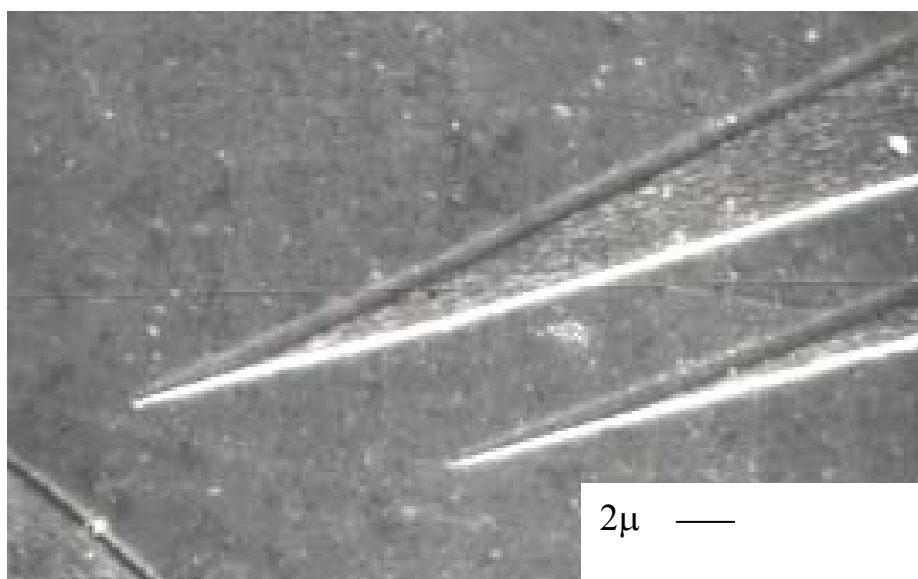


Рис. 2.19. Типичный вид клиновидных двойников формы равнобедренного треугольника (растровая электронная микроскопия с использованием *NANOLAB-7*)

Такие двойники, как правило, возникают в малодефектной области кристалла. Представим такой клиновидный двойник, имеющий форму, близкую равнобедренному треугольнику, состоящим из клиновидного скопления двойнивающих дислокаций с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  (рис. 2.20). Так как двойнивающие дислокации являются частичными [2], [40], [51], то их вектор Бюргерса можно разложить на две составляющие: винтовую  $\mathbf{b}_v$  и краевую  $\mathbf{b}_{кр}$ . Пусть краевая составляющая вектора Бюргерса направлена вдоль оси  $OX$  (рис. 2.20) вдоль положительного ее направления, а винтовая – перпендикулярно плоскости рисунка (вдоль оси  $OZ$ ), как это изображено на рис. 2.20. Среду, в которой находятся дислокации, будем считать однородной и изотропной. Проведем расчет на основании принципа суперпозиции компонент тензора напряжений, создаваемых такой совокупностью дислокаций. Для этого воспользуемся известными соотношениями для компонент тензора напряжений у единичных краевых и винтовых дислокаций [40], [51]:

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}^d &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\
\sigma_{yy}^d &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\
\sigma_{xy}^d &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\
\sigma_{zz}^d &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\
\sigma_{zx}^d &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\
\sigma_{zy}^d &= \frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}.
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Тогда на основании принципа суперпозиции компоненты тензора напряжений, возникающих вокруг рассматриваемого скопления дислокаций, в общем виде могут быть представлены следующим образом:

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sum_n \sigma_{ij}^{OA}(x - nd, y + nh) + \sum_m \sigma_{ij}^{OB}(x - md, y - mh), \tag{2.40}$$

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. 2.20);  $\sigma_{ij}^{OA}(x - nd, y + nh)$  и  $\sigma_{ij}^{OB}(x - md, y - mh)$  – напряжения, создаваемые скоплениями дислокаций на границах  $OA$  и  $OB$  соответственно (рис. 2.20).

В случае двойника, представленного на рис. 2.20, соотношение (2.40) примет вид

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

$$\begin{aligned}
\sigma_{yy}(x, y) &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(y+nh)[(x-nd)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(y-mh)[(x-md)^2 - (y-mh)^2]}{[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right\}, \\
\sigma_{xy}(x, y) &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(x-nd)[(x-nd)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(x-md)[(x-md)^2 - (y-mh)^2]}{[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right\}, \\
\sigma_{zz}(x, y) &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \\
\sigma_{xz}(x, y) &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \\
\sigma_{yz}(x, y) &= \frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{x-nd}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{x-md}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \tag{2.41}
\end{aligned}$$

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

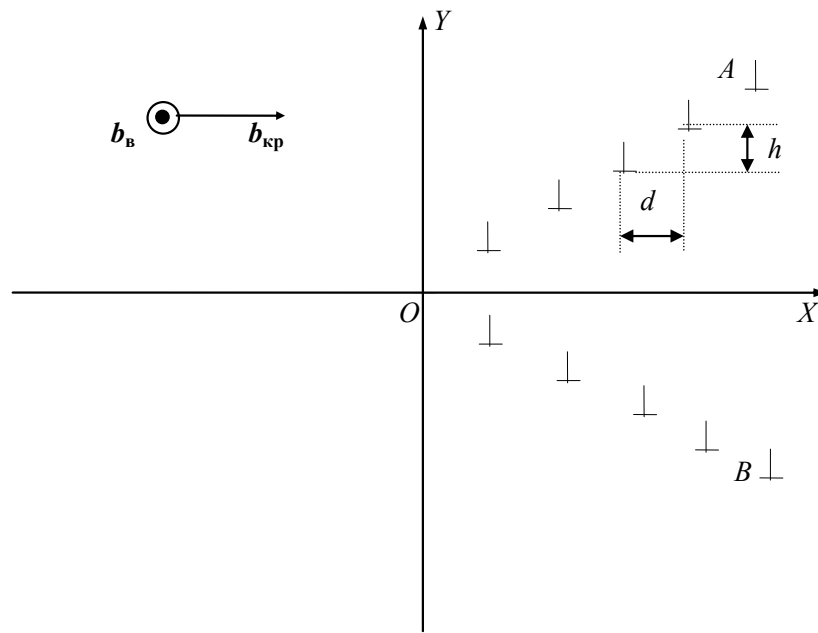


Рис. 2.20. Схема взаимного расположения дислокаций, ориентации их компонент вектора Бюргерса и декартовой системы координат для расчета полей напряжений и деформаций у клиновидного двойника

Результаты компьютерной обработки соотношений (2.41) приведены на рис. 2.21–2.25 на примере микродвойников с малой плотностью двойникующих дислокаций на двойниковых границах. При этом для удобства вычислялись безразмерные величины

$$\eta_{ij}(x, y) = \frac{\sigma_{ij}(x, y)}{\sigma_{ij}^{(0)}}, \quad (2.42)$$

где  $\sigma_{ij}^{(0)} = A_{ij}/L$ . Здесь  $A_{xx} = A_{yy} = A_{xy} = \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}$ ;  $A_{zz} = \frac{\mu\nu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}$ ;

$A_{zx} = A_{zy} = \frac{\mu b_B}{2\pi}$ . В расчетах принималось:  $N = 100$ ,  $M = 99$ ;  $d = 0,15$  мкм;  $h = 0,05$  мкм.

Сравнительный анализ полученного графического материала, представленного на рис. 2.21–2.25, говорит о том, что нормальные ( $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$ ) и скалывающие ( $\sigma_{xy}$ ,  $\sigma_{xz}$  и  $\sigma_{yz}$ ) напряжения вокруг клиновидного двойника ведут себя различным образом: нормальные напряжения распределены у границ двойника несимметрично, скалывающие же напряжения – симметричны относительно оси  $OX$ . Исключение составляют напряжения  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$ , конфигурация которых идентична. Однако общим является тот факт, что напряжения максимальны в непосредственной близости двойниковой границы.

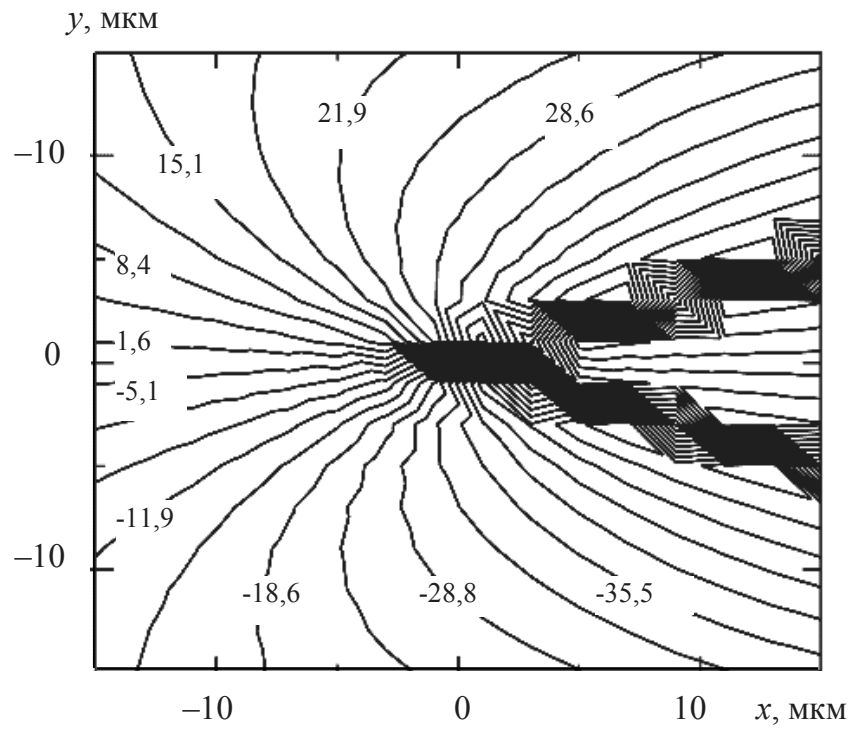


Рис. 2.21. Распределение нормальных  $\eta_{xx}$  (конфигурационный эквивалент  $\sigma_{xx}$ ) напряжений у клиновидного двойника

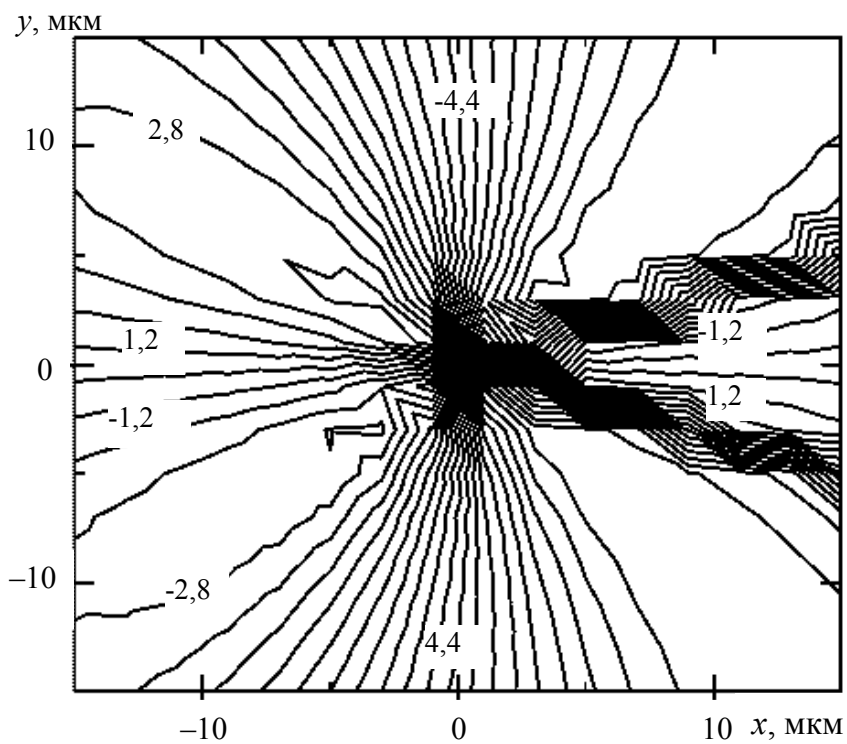


Рис. 2.22. Распределение нормальных  $\eta_{yy}$  (конфигурационный эквивалент  $\sigma_{yy}$ ) напряжений у клиновидного двойника

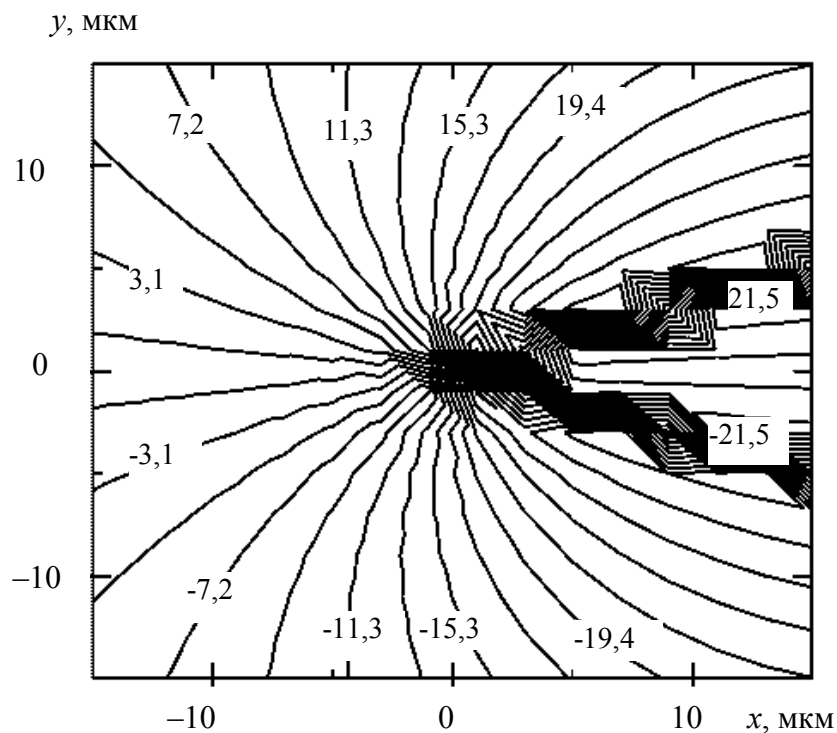


Рис. 2.23. Распределение нормальных  $\eta_{zz}$  (конфигурационный эквивалент  $\sigma_{zz}$ ) и скалывающих  $\eta_{xz}$  (эквивалент  $\sigma_{xz}$ ) напряжений у клиновидного двойника

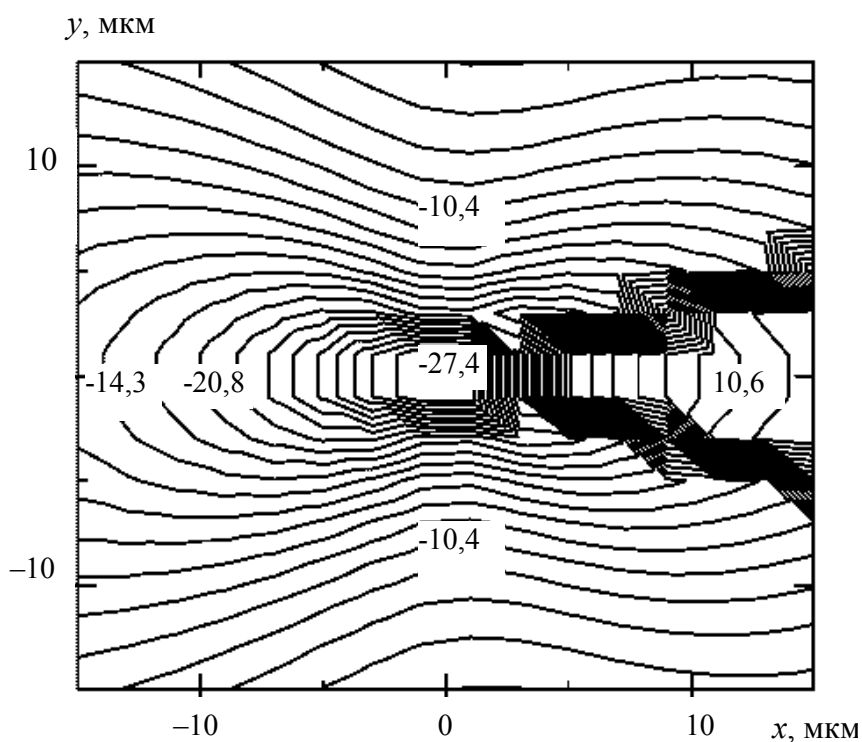


Рис. 2.24. Распределение скалывающих  $\eta_{xy}$  (конфигурационный эквивалент  $\sigma_{xy}$ ) напряжений у клиновидного двойника

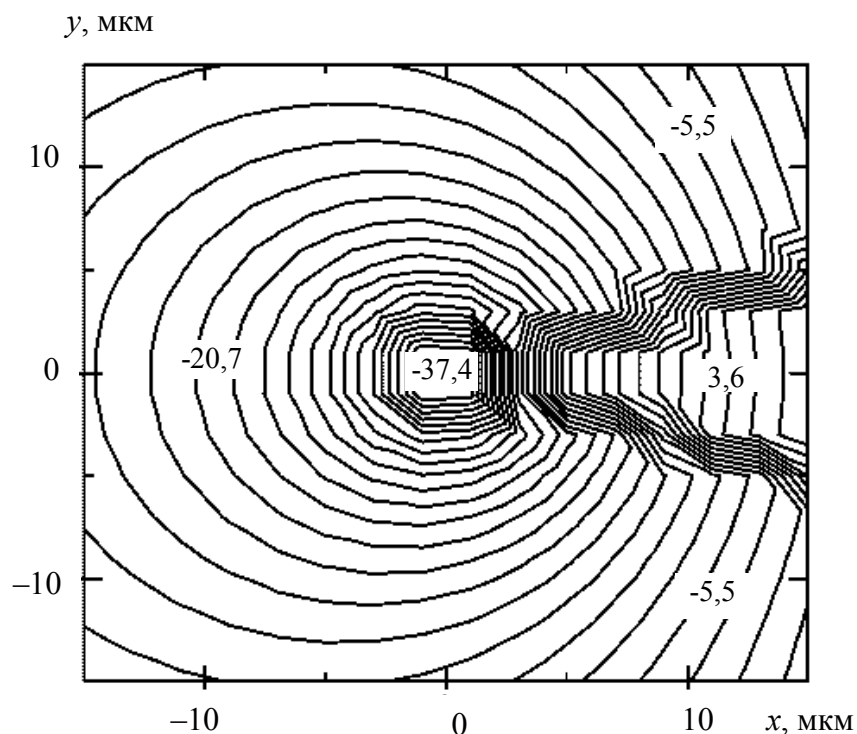


Рис. 2.25. Распределение скальвающих  $\eta_{yz}$  (конфигурационный эквивалент  $\sigma_{yz}$ ) напряжений у клиновидного двойника

Компьютерные расчеты показали, что увеличение числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах существенным образом не изменяет вид конфигурационных кривых полей напряжений. Однако при этом пропорционально числу дислокаций в рассматриваемом скоплении изменяется величина напряжений у двойника, что, в частности, следует из (2.41).

Отметим еще один, казалось бы, очевидный, но ранее не обсуждавшийся в литературе факт о том, что внутри двойника напряжения не являются однородными, а возрастают с удалением от устья двойника и с приближением к его вершине. Это не представляется возможным установить на основании модели тонкого двойника [4].

Увеличение масштаба построения полей напряжений в 3 раза и более показало, что конфигурация полей напряжений вокруг клиновидного двойника стремится принять такой же вид, что и у единичной дислокации. Подобная картина ранее наблюдалась при рассмотрении полей напряжений у дислокационной стенки [51].

Нормальные напряжения ( $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$ ) локализованы у одной из двойниковых границ. Это говорит о наличии избыточных внутренних напряжений у одной двойниковой границы, что должно сказываться на динамике двойникующих дислокаций, образующих в результате

деформации кристалла двойниковый клин. Нормальные напряжения способствуют процессу переползания дислокаций через препятствия в виде дефектов кристаллической решетки. Следовательно, двойниковая граница, у которой нормальные напряжения выше, в процессе своего формирования будет менее чувствительна к дефектам кристаллической структуры.

Напряжения  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  ответственны за миграцию точечных дефектов к двойниковой границе. Антисимметрия данных напряжений (см. рис. 2.21–2.23) приведет к тому, что у одной из границ концентрация точечных дефектов будет выше, чем у другой, величина нормальных напряжений у которой ниже. Избыточная концентрация, например, примесей у двойниковой границы будет способствовать образованию сегрегаций, состоящих из большего числа атомов, чем у границы, величина нормальных напряжений у которой ниже.

Наличие неоднородного поля нормальных напряжений внутри самого двойника способствует массопереносу в сдвойникованном объеме и миграции атомов к двойниковым границам.

Скалывающие напряжения (рис. 2.23–2.25) отвечают за процессы междислокационного взаимодействия, а также за процессы генерации дислокаций. Конфигурация полей данных напряжений говорит о том, что взаимодействующие с клиновидным двойником дислокации стремятся занять место у его границ и вершины, где величина скалывающих напряжений имеет наибольшее значение. Скопление дислокаций у двойниковых границ и у вершины способствует образованию в данных областях микротрещин, приводящих к релаксации внутренних напряжений, созданных скоплением дислокаций, мигрировавших к клиновидному двойнику.

Растущие с приближением к вершине двойника при движении от его устья скалывающие напряжения способствуют генерации двойникоующих дислокаций на готовых границах раздела двойник – материнский кристалл. Очевидно, что в области вершины клиновидного двойника двойникоующих дислокаций будет генерироваться больше, чем у устья. Образовавшиеся же у устья двойникоующие дислокации будут мигрировать к вершине двойника в область более высоких напряжений.

Неоднородность скалывающих напряжений внутри двойниковой прослойки активизирует в ней дислокационные процессы.



Аналогичным образом могут быть рассчитаны и поля смещений и деформаций у клиновидного двойника. Для этого в качестве исходных выступают выражения для расчета смещений у единичной дислокации [40]:

$$\begin{aligned} u_x^d(x, y) &= \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \text{arctg}\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right], \\ u_y^d(x, y) &= -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln(x^2 + y^2) + \frac{x^2 - y^2}{4(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right], \\ u_z^d(x, y) &= \frac{b_{\text{в}}}{2\pi} \text{arctg}\left(\frac{y}{x}\right). \end{aligned} \quad (2.43)$$

По аналогии с (2.40) для смещений получим

$$u_i(x, y) = \sum_n u_i^{OA}(x - nd, y + nh) + \sum_m u_i^{OB}(x - md, y - mh) \quad (2.44)$$

или

$$\begin{aligned} u_x(x, y) &= \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \text{arctg}\left(\frac{y + nh}{x - nd}\right) + \frac{(x - nd)(y + nh)}{2(1-\nu)[(x - nd)^2 + (y + nh)^2]} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^M \left( \text{arctg}\left(\frac{y - mh}{x - md}\right) + \frac{(x - md)(y - mh)}{2(1-\nu)[(x - md)^2 + (y - mh)^2]} \right) \right], \\ u_y(x, y) &= -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln((x - nd)^2 + (y + nh)^2) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(x - nd)^2 - (y + nh)^2}{4(1-\nu)((x - nd)^2 + (y + nh)^2)} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^M \left( \frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln((x - md)^2 + (y - mh)^2) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(x - md)^2 - (y - mh)^2}{4(1-\nu)((x - md)^2 + (y - mh)^2)} \right) \right], \\ u_z(x, y) &= \frac{b_{\text{в}}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \text{arctg}\left(\frac{y + nh}{x - nd}\right) + \sum_{m=1}^M \text{arctg}\left(\frac{y - mh}{x - md}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Результаты расчетов представлены на рис. 2.26–2.28. Параметры расчетов принимались такие же, как и в предыдущем случае. В данном случае необходим учет значения параметра  $\nu$ , который брался равным 0,33, как и для большинства металлов. Без ущерба общности полученных результатов для исключения необходимости учета численных значений индивидуальных для каждого материала величин  $b_{кр}/2\pi$  и  $b_{в}/2\pi$ , рассчитывались безразмерные распределения

$$\chi_i(x, y) = u_i(x, y) / B_i, \quad (2.46)$$

имеющие аналогичный вид, что и распределения  $u_i(x, y)$ . В (2.46) принималось  $B_x = B_y = b_{кр}/2\pi$ ;  $B_z = b_{в}/2\pi$ .

Конфигурация распределения смещений  $u_x$  и  $u_z$  имеет схожий вид. Отличие заключается в величине значений изолиний в одних и тех же областях относительно клиновидного двойника. Следует отметить, что данные смещения знакопеременны относительно оси  $OX$  (рис. 2.26, 2.28), а также оси, параллельной оси  $OY$ , и проходящей у устья двойника.

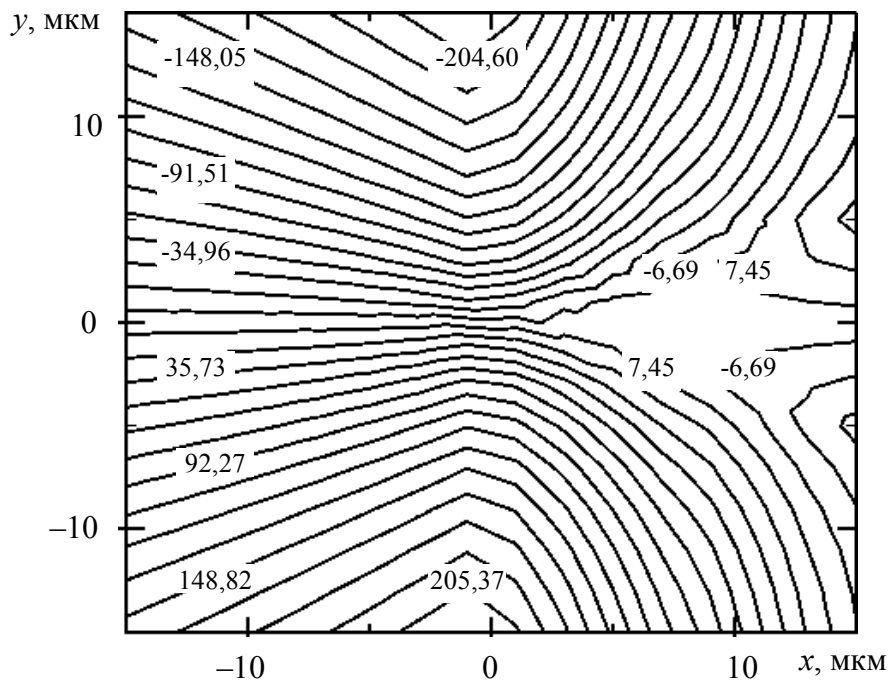


Рис. 2.26. Распределение  $\chi_x(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение смещений  $u_x(x, y)$ )

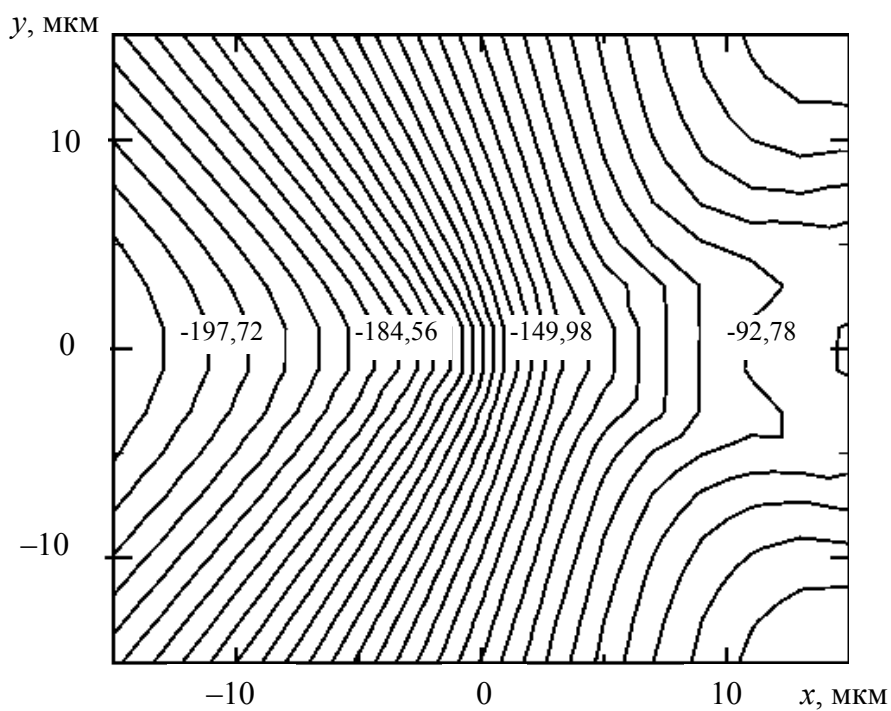


Рис. 2.27. Распределение  $\chi_y(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение смещений  $u_y(x, y)$ )

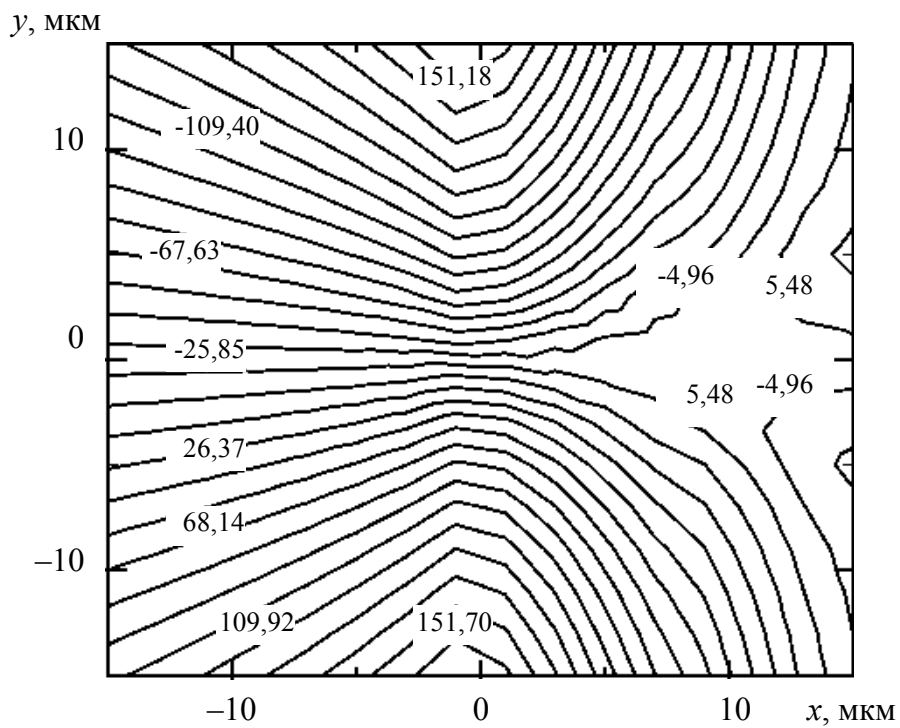


Рис. 2.28. Распределение  $\chi_z(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение смещений  $u_z(x, y)$ )

Смещения  $u_y$  отрицательны и имеют высокое численное значение также в удалении от вершины двойника (рис. 2.27).

Из соотношений (2.45) определяются и компоненты тензора деформаций  $u_{ij}$ . Для этого необходимо найти частные производные [52]:

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.47)$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} u_{xx}(x, y) &= \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{(x-nd)^2(y+nh)}{(1-\nu)[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left( \sum_{m=1}^M \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} - \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \frac{(x-md)^2(y-mh)}{(1-\nu)[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right) \right) \right], \\ u_{yy}(x, y) &= -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{(y+nh)[(x-nd)^2 - (y+nh)^2]}{2(1-\nu)[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left( \sum_{m=1}^M \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} - \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \frac{(y-mh)[(x-md)^2 - (y-mh)^2]}{2(1-\nu)[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right) \right) \right], \\ u_{zz}(x, y) &= 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_{xy}(x, y) &= \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-nd}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{(x-nd)[(x-nd)^2 - 3(y+nh)^2]}{4(1-\nu)[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \left( \sum_{m=1}^M \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-md}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} + \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + \frac{(x-md)[(x-md)^2 - 3(y-mh)^2]}{4(1-\nu)[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right) \right) \right], \\
u_{xz}(x, y) &= -\frac{b_{\text{в}}}{4\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right], \\
u_{yz}(x, y) &= \frac{b_{\text{в}}}{4\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \frac{x-nd}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{x-md}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right]. \tag{2.48}
\end{aligned}$$

Результаты расчетов представлены на рис. 2.29–2.33 в виде конфигурации распределения величин:

$$\chi_{ij}(x, y) = \frac{u_{ij}(x, y)}{B_{ij}}, \tag{2.49}$$

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

В отличие от смещений  $u_i$  (см. рис. 2.26–2.28), у распределений компонент тензора деформаций четко прослеживается локализация деформаций у границ двойника (см. рис. 2.29–2.33). Нормальные деформации  $u_{xx}(x, y)$  и  $u_{yy}(x, y)$  знакопеременны относительно оси  $OX$ , а также относительно двойниковых границ, т. е. у каждой границы клиновидного двойника нормальные деформации снаружи и внутри двойника имеют разный знак. Вдоль оси  $OX$  данные деформации близки к нулю.

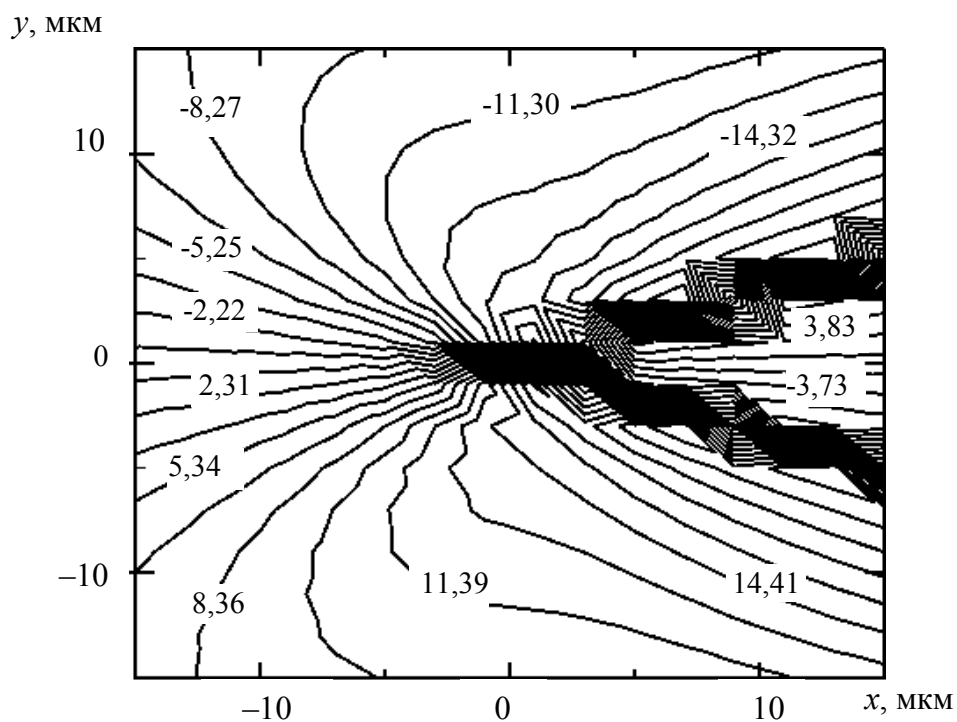


Рис. 2.29. Распределение  $\chi_{xx}(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение деформации  $u_{xx}(x, y)$ )

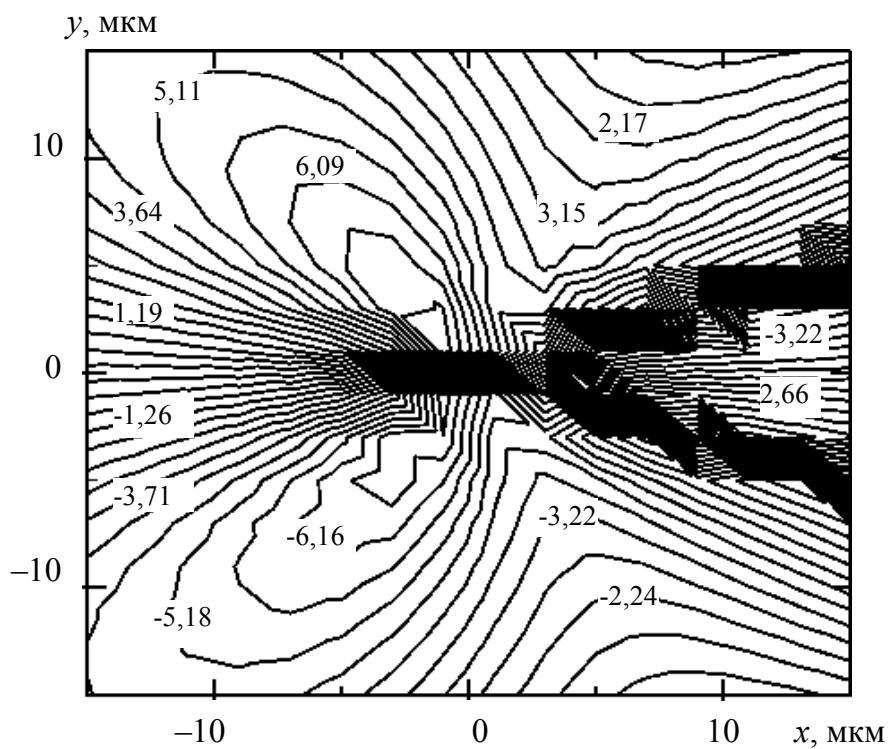


Рис. 2.30. Распределение  $\chi_{yy}(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение деформации  $u_{yy}(x, y)$ )

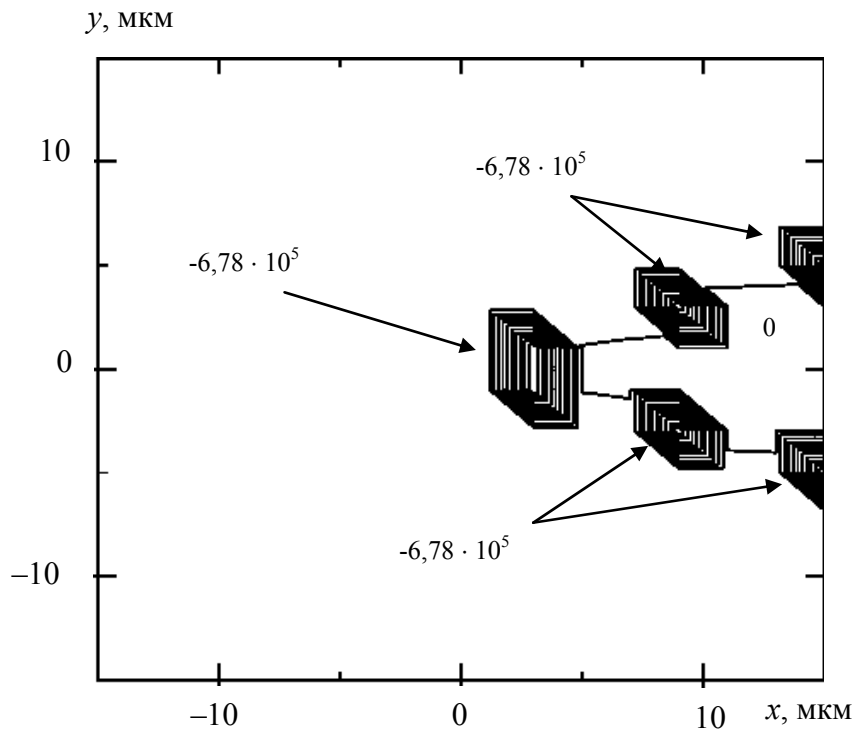


Рис. 2.31. Распределение  $\chi_{xy}(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение деформации  $u_{xy}(x, y)$ )

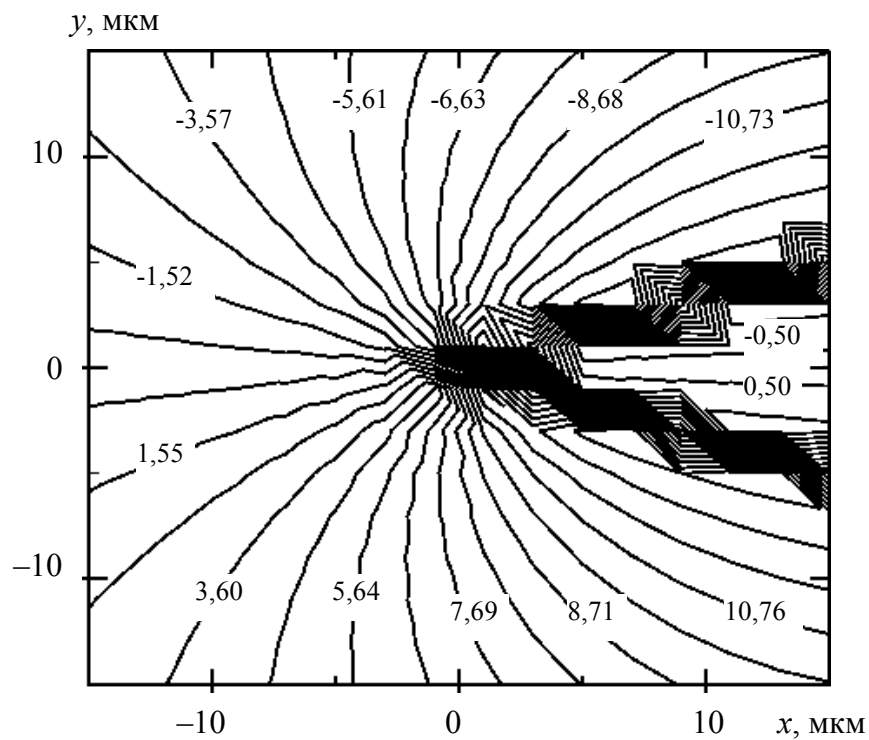


Рис. 2.32. Распределение  $\chi_{xz}(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение деформации  $u_{xz}(x, y)$ )

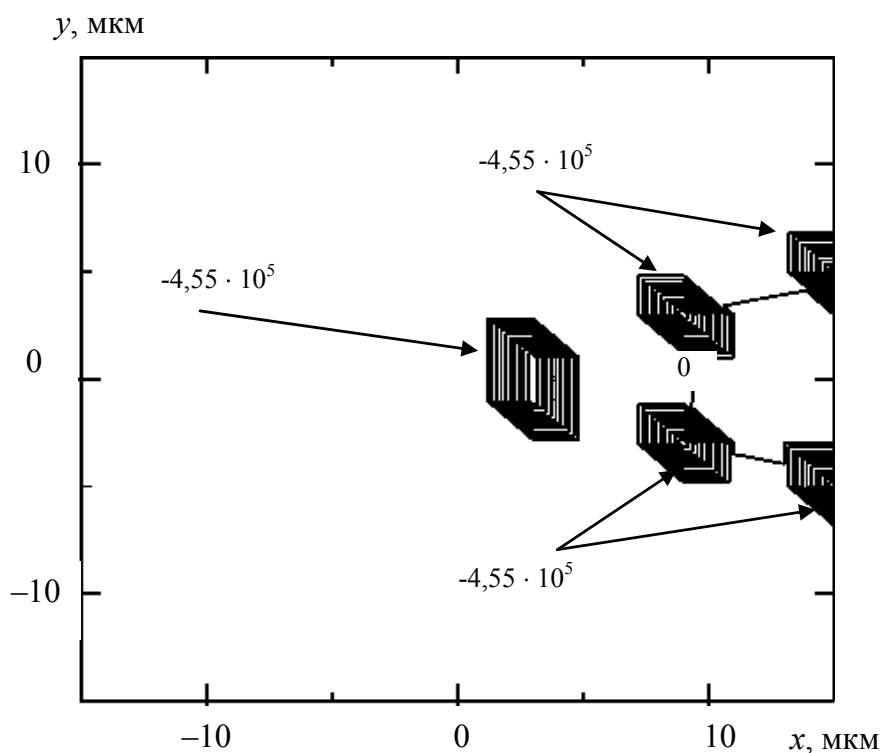


Рис. 2.33. Распределение  $\chi_{yz}(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение деформации  $u_{yz}(x, y)$ )

Деформации  $u_{xy}(x, y)$ , как и  $u_{yz}(x, y)$ , вдоль двойниковой границы локализуются в трех областях (рис. 2.31, 2.33): у вершины, у устья и средней части клиновидного двойника. Знак данных деформаций одинаков и они равны нулю внутри двойника на оси  $OX$ .

Конфигурация полей деформаций  $u_{xz}(x, y)$  схожа с конфигурацией деформаций  $u_{xx}(x, y)$ . Отличие заключается в численных значениях этих деформаций в одинаковых областях конденсированной среды по отношению к клиновидному двойнику.

### 2.3. Расчет полей напряжений и деформаций у вершины двойника клиновидной формы

В целях анализа напряжений и деформаций у клиновидного двойника представляет интерес их рассмотрение в особых точках двойника. В качестве одной из таких особых точек можно выделить вершину двойника. Удалим из вершины двойника двойническую дислокацию и рассмотрим напряженное и деформационное состояние, создаваемое в этой точке дислокациями двойниковых границ.



Такое удаление дислокации приведет к тому, что суммирование по  $n$  в (2.41) и (2.48) будет вестись не от нуля, как ранее, а от единицы. Чтобы определить напряжения и деформации в вершине двойника, необходимо в (2.41) и (2.48) принять  $x = y = 0$ . Тогда получим

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}(0,0) &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{h(3d^2 + h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\
\sigma_{yy}(0,0) &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{h(d^2 - h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\
\sigma_{xy}(0,0) &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{d(d^2 - h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\
\sigma_{zz}(0,0) &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{h}{d^2 + h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\
\sigma_{xz}(0,0) &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \frac{h}{d^2 + h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\
\sigma_{yz}(0,0) &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \frac{d}{d^2 + h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right); \tag{2.50} \\
u_{xx}(0,0) &= \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{h}{d^2 + h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{1-\nu} \frac{d^2 h}{(d^2 + h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) \right), \\
u_{yy}(0,0) &= -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \frac{1}{2(1-\nu)} \left( (1-2\nu) \frac{h}{d^2 + h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \frac{h(d^2 - h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) \right),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_{xy}(0,0) &= -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \frac{1}{4(1-\nu)} \left( \frac{d}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{d(d^2-3h^2)}{(d^2+h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) \right), \\
u_{xz}(0,0) &= -\frac{b_{\text{в}}}{4\pi} \frac{h}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\
u_{yz}(0,0) &= -\frac{b_{\text{в}}}{4\pi} \frac{d}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right). \tag{2.51}
\end{aligned}$$

В том случае, если  $N = M$ , из (2.50) и (2.51) получим

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= 0, \quad \sigma_{yy} = 0, \quad \sigma_{zz} = 0, \quad \sigma_{xz} = 0, \\
\sigma_{xy} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)} \frac{d(d^2-h^2)}{(d^2+h^2)^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}, \\
\sigma_{yz} &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{\pi} \frac{d}{d^2+h^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}; \tag{2.52} \\
u_{xx} &= 0, \quad u_{yy} = 0, \quad u_{xz} = 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_{xy} &= -\frac{b_{\text{кр}}}{\pi} \frac{1}{4(1-\nu)} \left( \frac{d}{d^2+h^2} + \frac{d(d^2-3h^2)}{(d^2+h^2)^2} \right) \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}, \\
u_{yz} &= -\frac{b_{\text{в}}}{\pi} \frac{d}{d^2+h^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}. \tag{2.53}
\end{aligned}$$

Из-за симметричного расположения дислокаций на двойниковых границах при  $N = M$  и постоянстве параметров  $d$  и  $h$  компоненты тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$  равны нулю в связи с тем, что напряжения дислокаций на двух двойниковых границах скомпенсированы. Аналогично компенсируют друг друга и деформации  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$  и  $u_{xz}$  двойникующих дислокаций, находящихся на разных двойниковых границах. В то же время, из-за расположения на двойниковых границах дислокаций одного знака напряжения

$\sigma_{xy}$ ,  $\sigma_{yz}$  и деформации  $u_{xy}$ ,  $u_{yz}$  удваиваются. Рассмотрим эти деформации и напряжения более подробно.

На рис. 2.34 и 2.35 представлены зависимости  $\eta_{xy}$ ,  $\eta_{yz}$  и  $\chi_{xy}$ ,  $\chi_{yz}$  соответственно от числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах  $N$ .

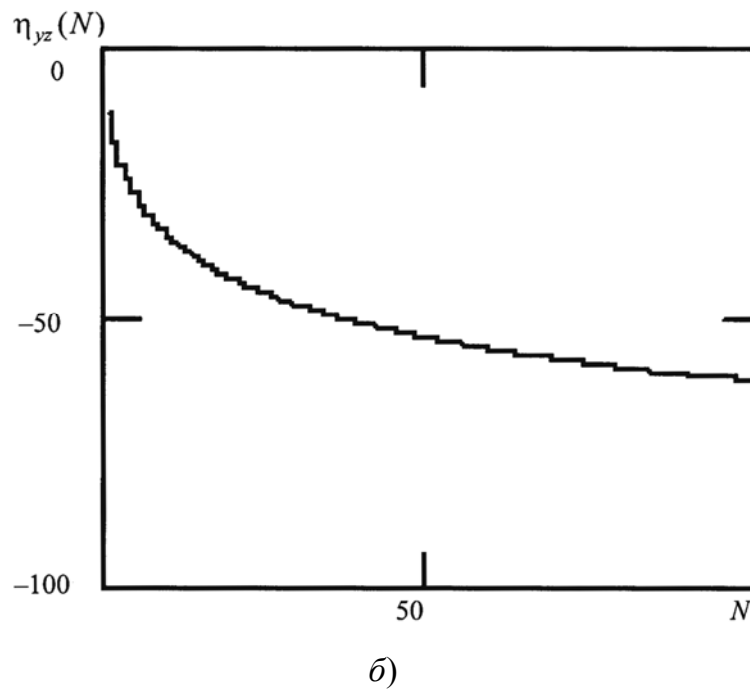
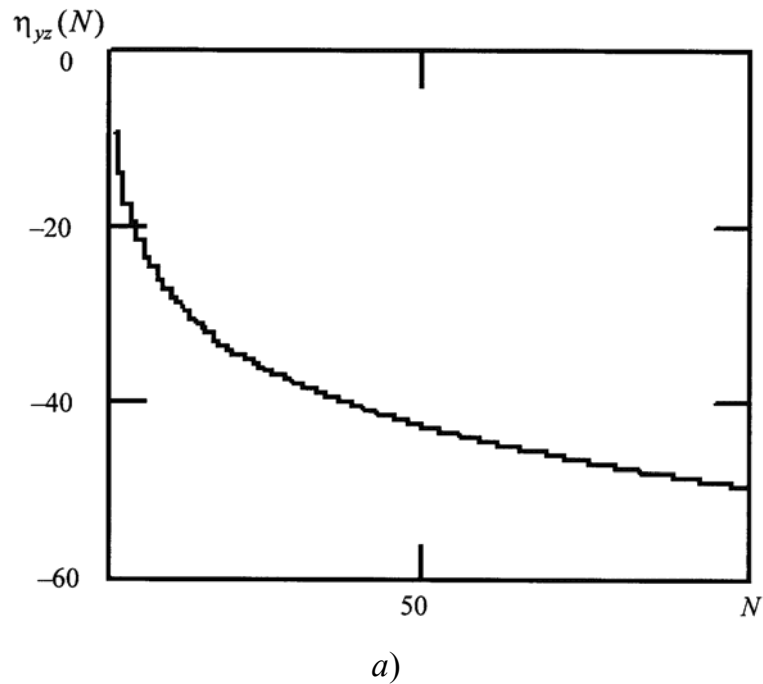


Рис. 2.34. Зависимости  $\eta_{xy}$  (а),  $\eta_{yz}$  (б) от числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах

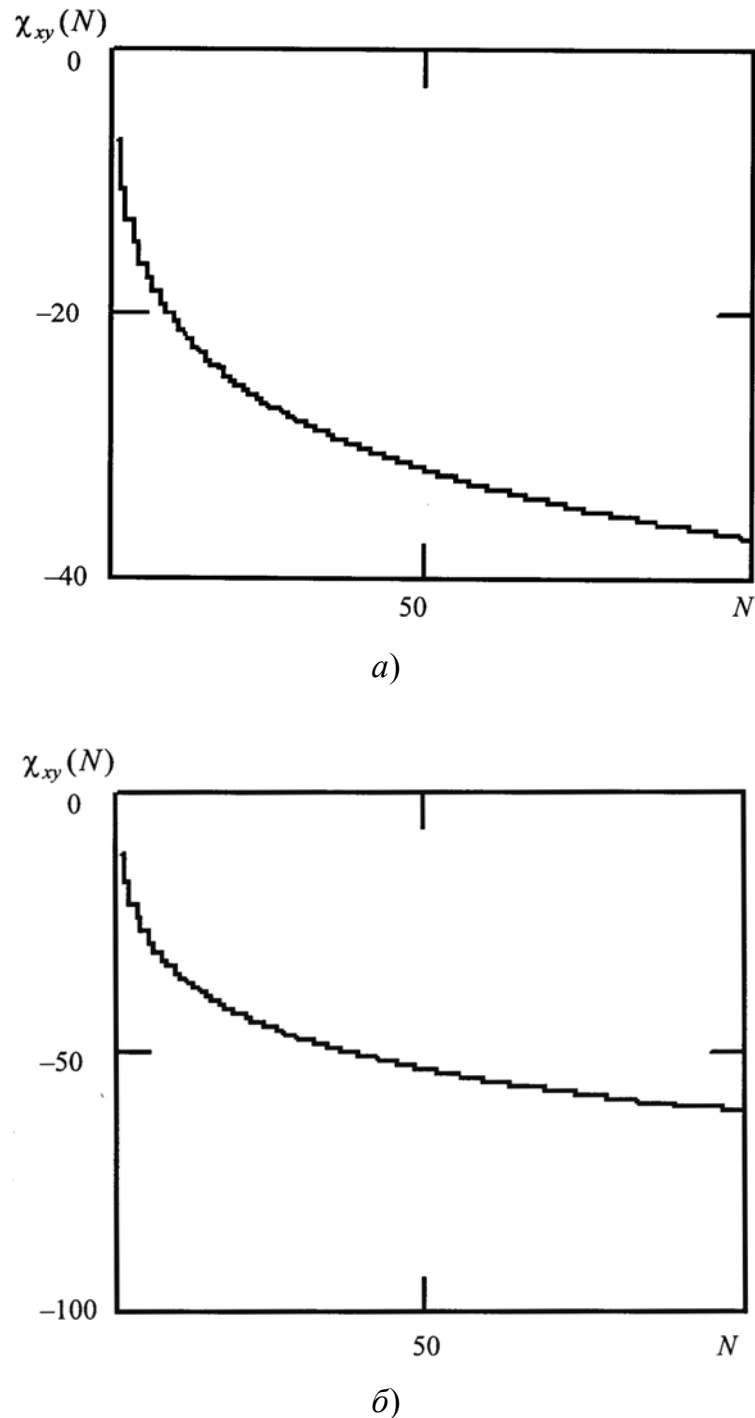


Рис. 2.35. Зависимости  $\chi_{xy}$  (а),  $\chi_{yz}$  (б) от числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах

При расчете значения параметров  $d$ ,  $h$  и  $v$  в расчетных формулах (2.52) и (2.53) принимались такие же, как и выше. Видно, что с ростом  $N$  рассматриваемые напряжения и деформации по модулю монотонно возрастают. При больших значениях  $N$  скорость роста величины напряжений и деформаций уменьшается. Это связано с тем, что растет

длина двойника, а вместе с ней увеличивается расстояние от вершины двойника до прибавляемых к его устью дислокаций, которые начинают вносить свой суммарный вклад в напряженное и деформационное состояние в вершине двойника благодаря дальнедействующим напряжениям и деформациям, величина которых ниже, чем у близкодействующих.

При  $N \neq M$  напряжения  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$ ,  $\sigma_{xz}$  и деформации  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$ ,  $u_{xz}$  будут зависеть от параметра

$$\Delta = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m}. \quad (2.54)$$

Причем при  $N < M$   $\Delta < 0$ . Это значит, что если на границе  $OB$  (рис. 2.20) дислокаций больше, чем на границе  $OA$ , то напряжения  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$ ,  $\sigma_{xz}$  и деформации  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$ ,  $u_{xz}$  будут менять знак своей величины на противоположный.

Анализируя зависимости напряжений и деформаций у вершины клиновидного двойника от параметров  $d$  и  $h$ , рассмотрим зависимости

$$\frac{\eta_{ij}(d, h)}{\Delta}, \quad \frac{\eta_{ij}(d, h)}{\Sigma}, \quad \frac{\chi_{ij}(d, h)}{\Delta}, \quad \frac{\chi_{ij}(d, h)}{\Sigma}, \quad (2.55)$$

где

$$\Sigma = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m}. \quad (2.56)$$

Зависимости (2.55) графически представлены на рис. 2.36–2.46.

Напряжения  $\sigma_{xx}$  у вершины двойника увеличиваются по модулю с уменьшением расстояния между дислокациями (рис. 2.36). Скорость роста напряжений при этом увеличивается при меньших расстояниях между дислокациями. Значение напряжения принимают максимальным при  $d$  и  $h$ , которые приблизительно равны единице.

Совершенно иначе ведут себя напряжения  $\sigma_{yy}$  в зависимости от параметров  $d$  и  $h$ . Следует отметить, что данные напряжения меняют свой знак не только от дисбаланса плотности двойникующих дислокаций на противоположных двойниковых границах, но и от соотношения между параметрами  $d$  и  $h$ . При  $d < 2$  мкм напряжения  $\sigma_{yy}$  отрицательны, а при  $d > 2$  мкм – положительны (рис. 2.37).

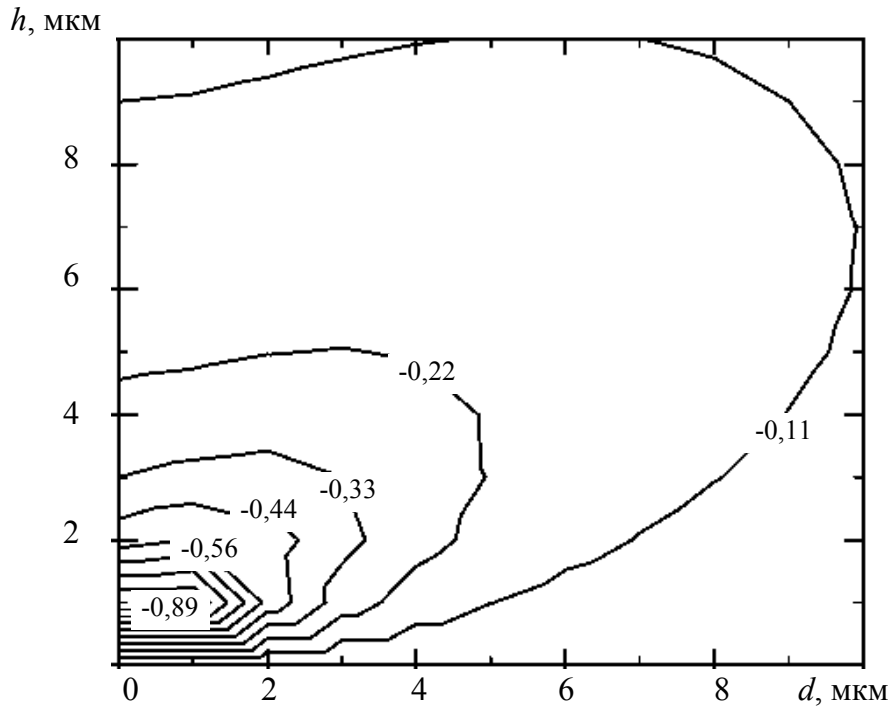


Рис. 2.36. Распределение  $\frac{\eta_{xx}(d, h)}{\Delta}$

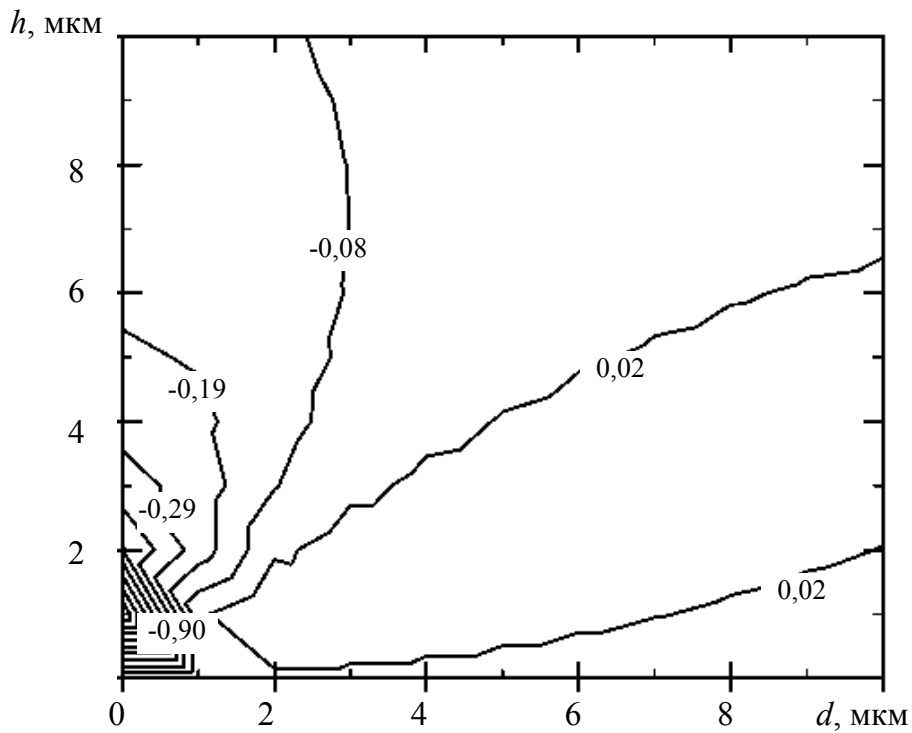


Рис. 2.37. Распределение  $\frac{\eta_{yy}(d, h)}{\Delta}$

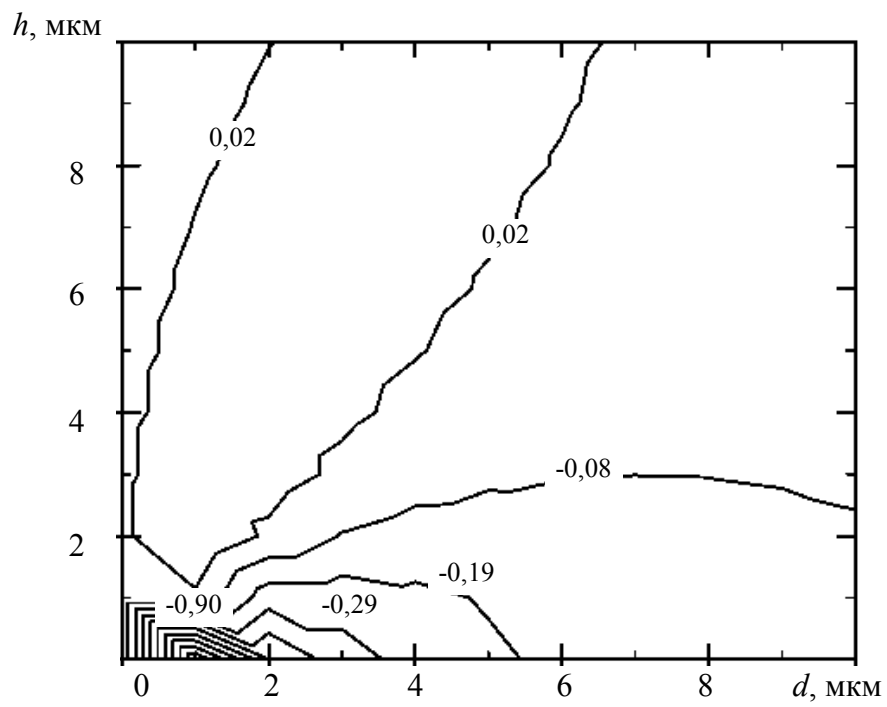


Рис. 2.38. Распределение  $\frac{\eta_{xy}(d, h)}{\Sigma}$

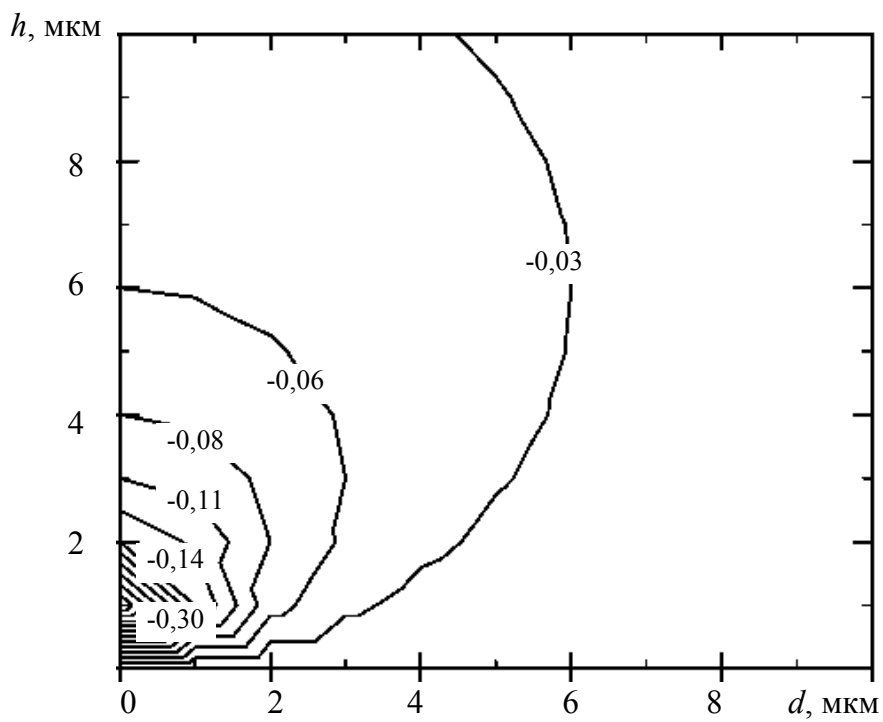


Рис. 2.39. Распределение  $\frac{\eta_{zz}(d, h)}{\Delta}$

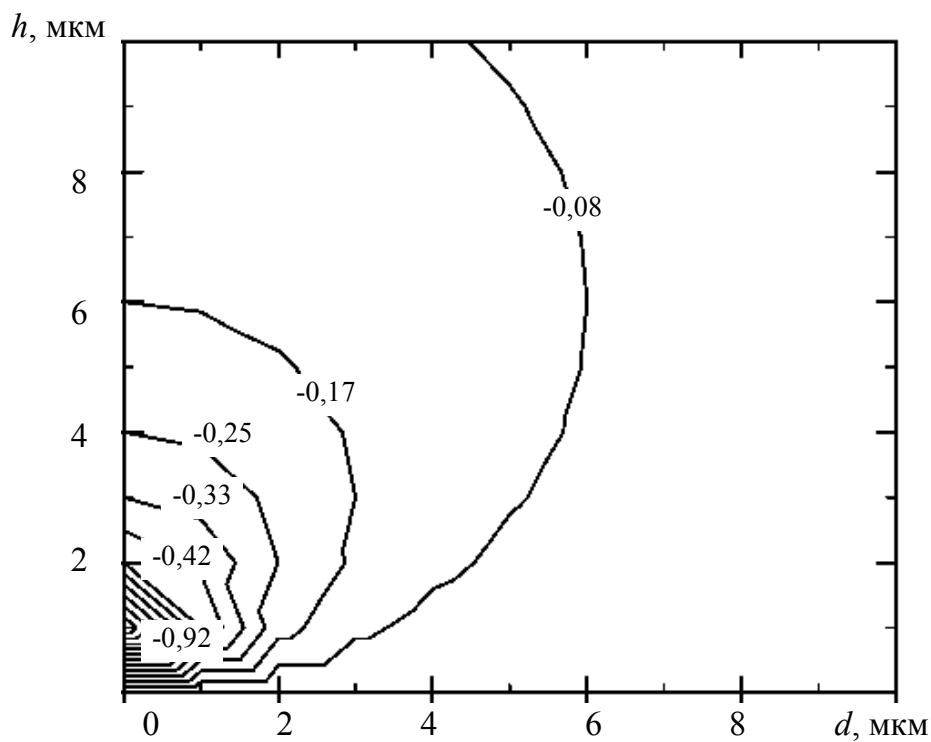


Рис. 2.40. Распределение  $\frac{\eta_{xz}(d, h)}{\Delta}$

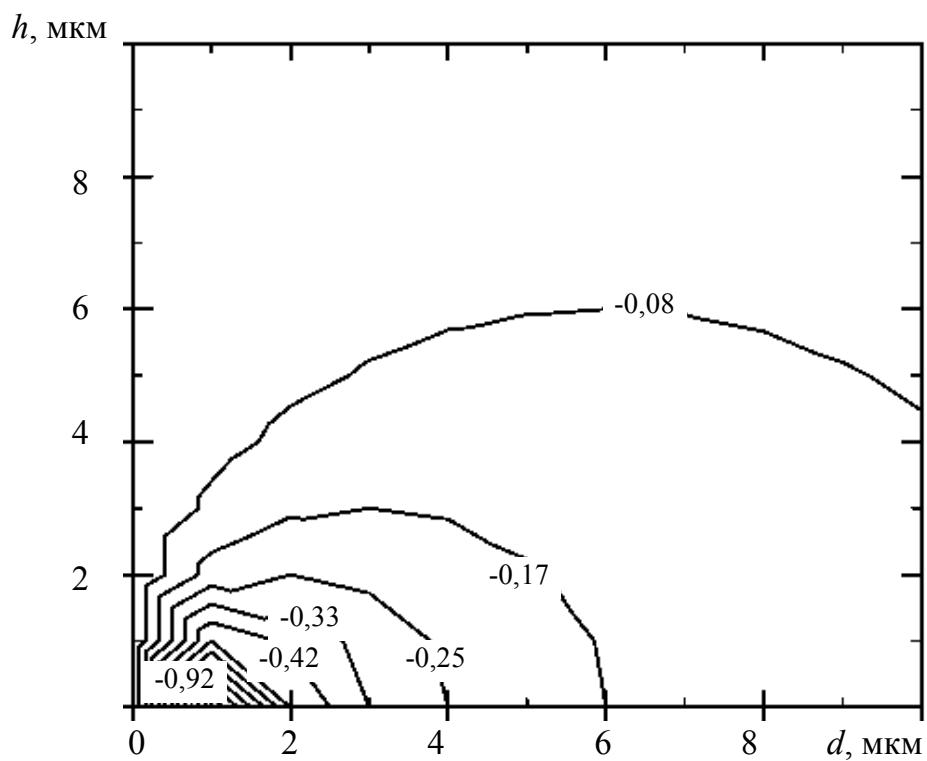


Рис. 2.41. Распределение  $\frac{\eta_{yz}(d, h)}{\Sigma}$



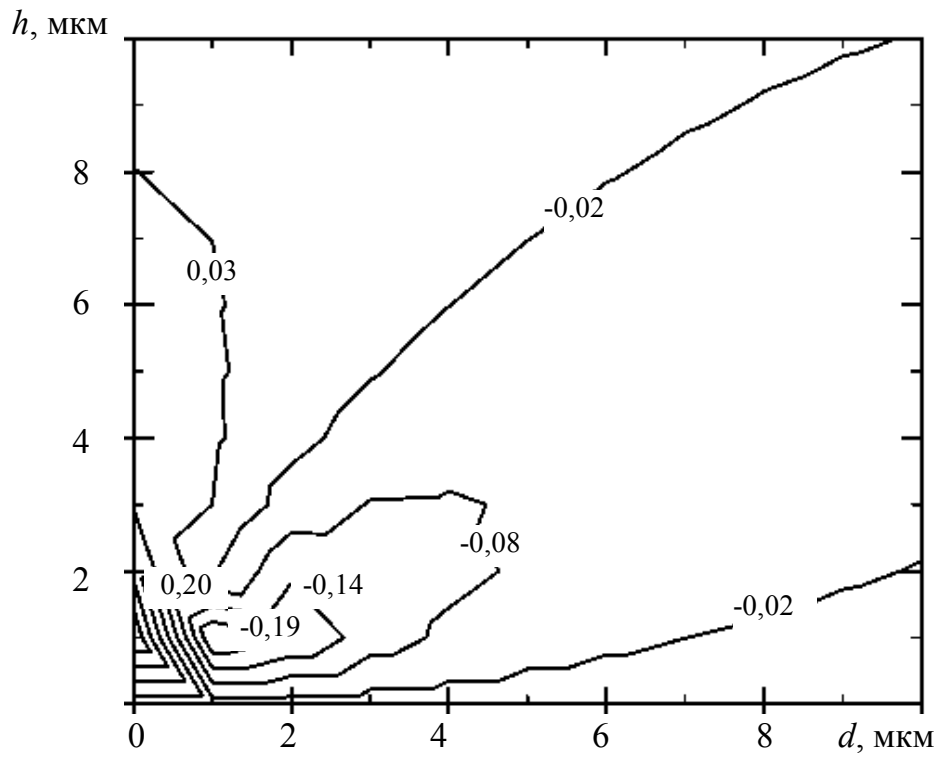


Рис. 2.42. Распределение  $\frac{\chi_{xx}(d, h)}{\Delta}$

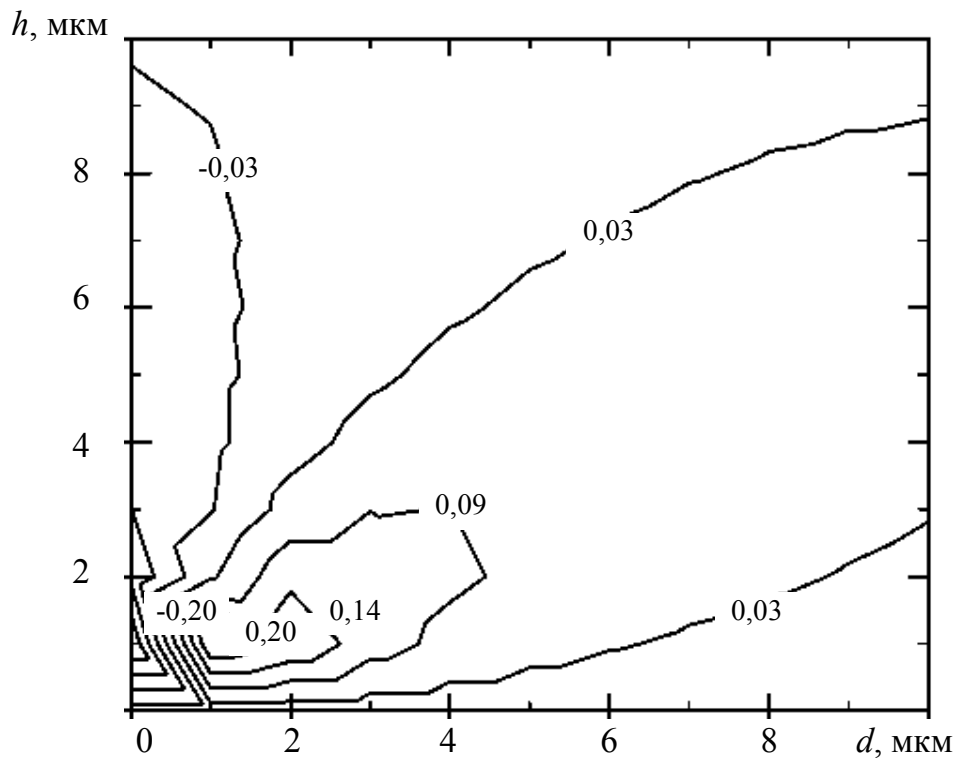


Рис. 2.43. Распределение  $\frac{\chi_{yy}(d, h)}{\Delta}$

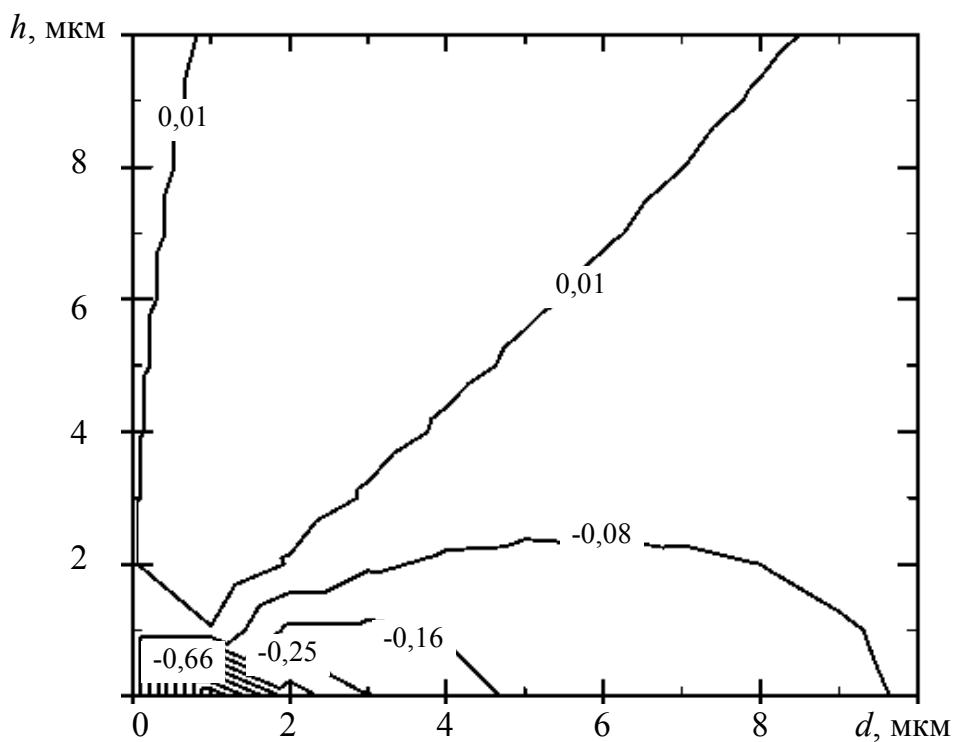


Рис. 2.44. Распределение  $\frac{\chi_{xy}(d, h)}{\Sigma}$

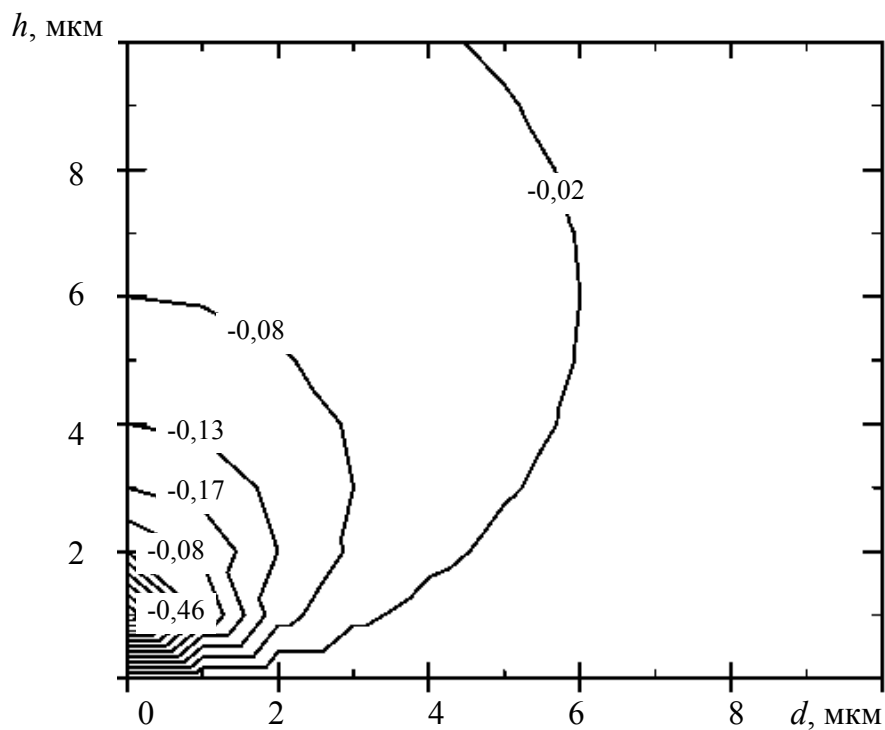


Рис. 2.45. Распределение  $\frac{\chi_{xz}(d, h)}{\Delta}$

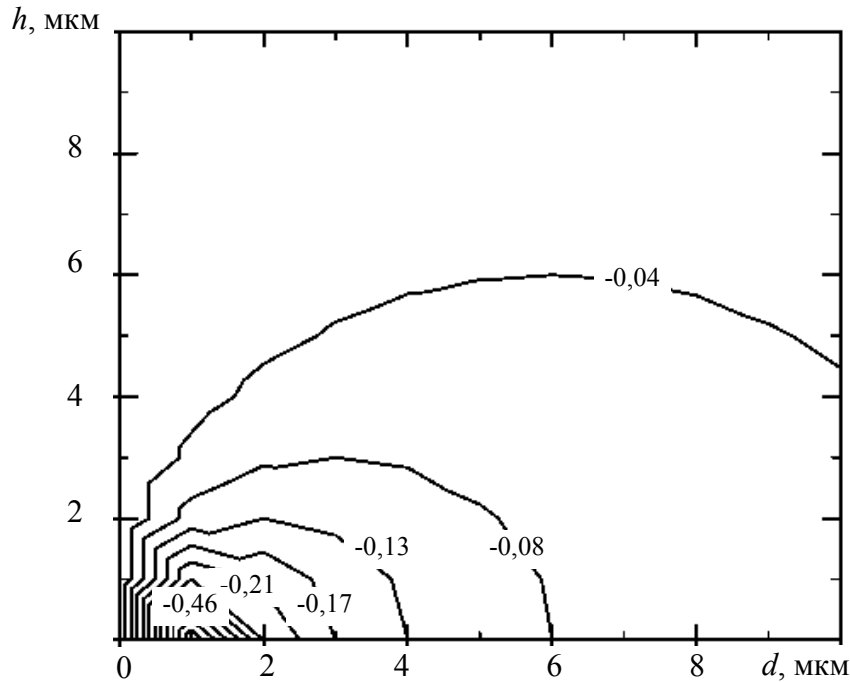


Рис. 2.46. Распределение  $\frac{\chi_{yz}(d, h)}{\Sigma}$

Касательные напряжения  $\sigma_{xy}$  так же, как и напряжения  $\sigma_{yy}$ , знакопеременны по отношению к параметрам  $d$  и  $h$ . Однако в этом случае при  $d < 2$  мкм напряжения  $\sigma_{xy}$  положительны, а при  $d > 2$  мкм – отрицательны (рис. 2.38).

Напряжения  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$  в зависимости от параметров  $d$  и  $h$  имеют схожий вид (рис. 2.39, 2.40). Отличие наблюдается в численных значениях изолиний в одинаковых областях зависимостей от  $d$  и  $h$ . При малых значениях этих параметров напряжения больше по величине, чем при больших значениях  $d$  и  $h$ . Напряжения  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$  в рассматриваемом интервале значений  $d$  и  $h$  не меняют знак.

Конфигурация напряжений  $\sigma_{yz}$  (рис. 2.41) такая же, как и у напряжений  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$ , но, в отличие от них, контуры изолиний напряжений  $\sigma_{yz}$  замыкаются на оси  $d$ , в то время как у напряжений  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$  – на оси  $h$ .

Как видно из рис. 2.42–2.46, деформации  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$  и  $u_{xy}$  знакопеременны, а деформации  $u_{xz}$  и  $u_{yz}$  знак своей величины не меняют. Конфигурации полей деформаций у вершины двойника в зависимости от параметров  $d$  и  $h$  имеют очень схожий вид с конфигурациями полей напряжений.

## 2.4. Влияние дисбаланса количества дислокаций на двойниковых границах на напряженное состояние у клиновидного двойника

Рассмотренная ранее ситуация, когда на двойниковых границах находится одинаковое количество двойникующих дислокаций, на практике встречается крайне редко. Как правило, число двойникующих дислокаций на противоположных границах клиновидного двойника различно. Это связано с тем, что скорость генерации двойникующих дислокаций на разных двойниковых границах меняется из-за отличий условий генерирования дислокаций в различных точках деформируемого твердого тела. В этом случае расстояние между двойникующими дислокациями, находящимися на противоположных двойниковых границах, не будет одинаковым. Зададим его проекциями отрезка, соединяющего две соседние дислокации, как  $d_1$  и  $d_2$  (проекции на ось  $OX$ ),  $h_1$  и  $h_2$  (проекции на ось  $OY$ ). Индексы 1 и 2 различают проекции данных расстояний для дислокаций разных двойниковых границ. В результате соотношение (2.40) примет вид

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sum_n \sigma_{ij}(x - nd_1, y + nh_1) + \sum_m \sigma_{ij}(x - md_2, y - mh_2). \quad (2.57)$$

Из данного соотношения получим

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(x, y) = & -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(y + nh_1)[3(x - nd_1)^2 + (y + nh_1)^2]}{[(x - nd_1)^2 + (y + nh_1)^2]^2} + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(y - mh_2)[3(x - md_2)^2 + (y - mh_2)^2]}{[(x - md_2)^2 + (y - mh_2)^2]^2} \right\}, \\ \sigma_{yy}(x, y) = & \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(y + nh_1)[(x - nd_1)^2 - (y + nh_1)^2]}{[(x - nd_1)^2 + (y + nh_1)^2]^2} + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(y - mh_2)[(x - md_2)^2 - (y - mh_2)^2]}{[(x - md_2)^2 + (y - mh_2)^2]^2} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy}(x, y) &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(x - nd_1)[(x - nd_1)^2 - (y + nh_1)^2]}{[(x - nd_1)^2 + (y + nh_1)^2]^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(x - md_2)[(x - md_2)^2 - (y - mh_2)^2]}{[(x - md_2)^2 + (y - mh_2)^2]^2} \right\}, \\
\sigma_{zz}(x, y) &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y + nh_1}{(x - nd_1)^2 + (y + nh_1)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y - mh_2}{(x - md_2)^2 + (y - mh_2)^2} \right\}, \\
\sigma_{xz}(x, y) &= -\frac{\mu b_{\text{B}}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y + nh_1}{(x - nd_1)^2 + (y + nh_1)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y - mh_2}{(x - md_2)^2 + (y - mh_2)^2} \right\}, \\
\sigma_{yz}(x, y) &= \frac{\mu b_{\text{B}}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{x - nd_1}{(x - nd_1)^2 + (y + nh_1)^2} + \right. \\
&\quad \left. \sum_{m=1}^M \frac{x - md_2}{(x - md_2)^2 + (y - mh_2)^2} \right\}. \tag{2.58}
\end{aligned}$$

Результаты расчетов распределения величины  $\eta_{ij}(x, y)$  в случае микродвойника приведены на рис. 2.47–2.56. Принималось:  $-15 < x < 15$ ,  $-15 < y < 15$  (в мкм). На рис. 2.47–2.51 показаны результаты, когда  $N = 200$ ,  $M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,075$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,025$  мкм, а на рис. 2.52–2.56, когда  $N = 50$ ,  $M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,3$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,1$  мкм.

Из рис. 2.47–2.56 видно, что при дисбалансе плотностей двойникующих дислокаций на двойниковых границах наблюдается антисимметрия в распределении напряжений  $\sigma_{ij}(x, y)$  (эквивалент  $\eta_{ij}(x, y)$ ) относительно оси  $OX$ . Известно [12], [32], что изменение баланса плотностей двойникующих дислокаций на двойниковых границах способствует искривлению границ двойника. В случае избыточной плотности дислокаций граница становится выпуклой, а при уменьшении плотности дислокаций – вогнутой. Поэтому рассматриваемые ситуации дисбаланса плотностей двойникующих дислокаций на двойниковых границах можно принимать как состояния, предшествующие изменению формы границы двойника.

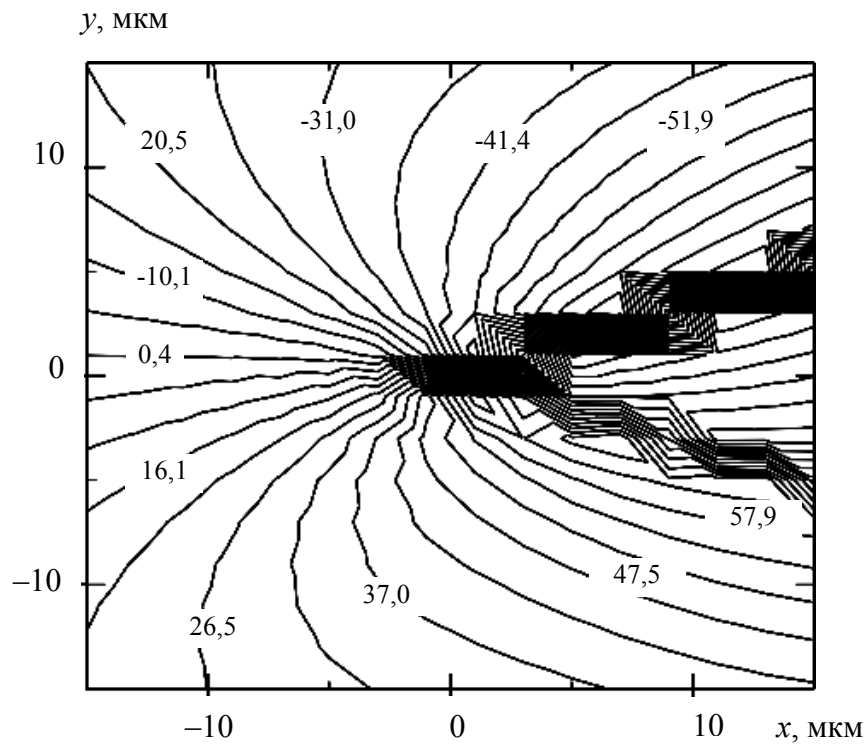


Рис. 2.47. Распределение  $\eta_{xx}(x, y)$  при  $N = 200, M = 99$ ;  $d_1 = 0,15 \text{ мкм}, d_2 = 0,075 \text{ мкм}; h_1 = 0,05 \text{ мкм}, h_2 = 0,025 \text{ мкм}$

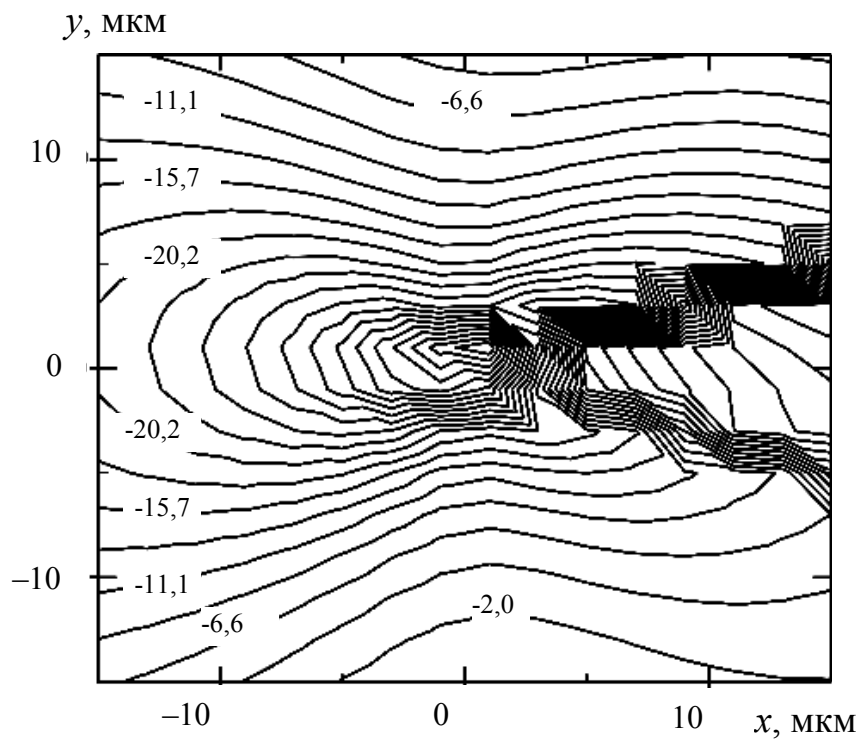


Рис. 2.48. Распределение  $\eta_{xy}(x, y)$  при  $N = 200, M = 99$ ;  $d_1 = 0,15 \text{ мкм}, d_2 = 0,075 \text{ мкм}; h_1 = 0,05 \text{ мкм}, h_2 = 0,025 \text{ мкм}$

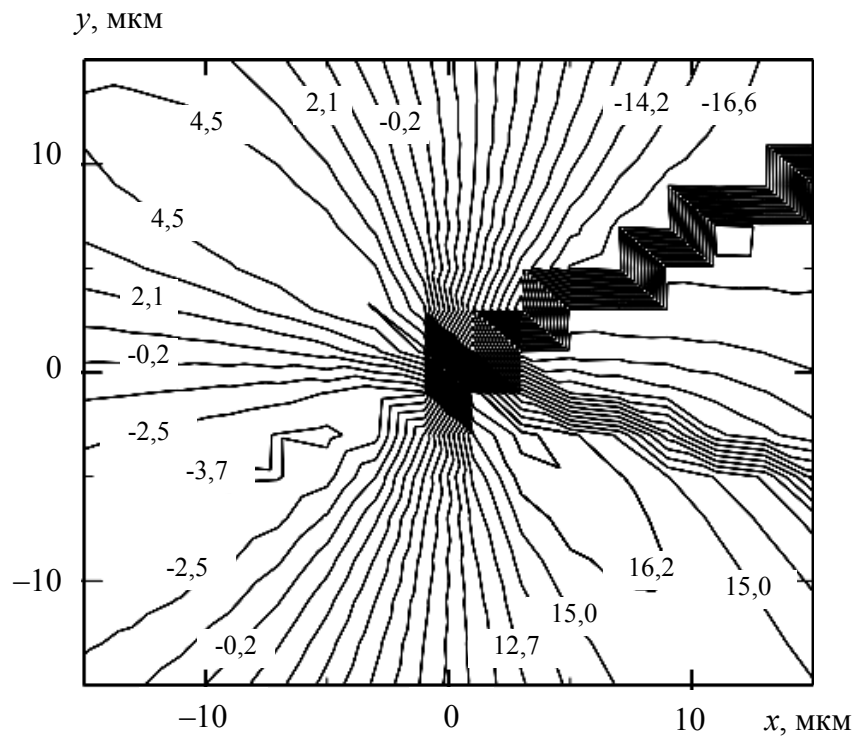


Рис. 2.49. Распределение  $\eta_{yy}(x, y)$  при  $N = 200$ ,  $M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,075$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,025$  мкм

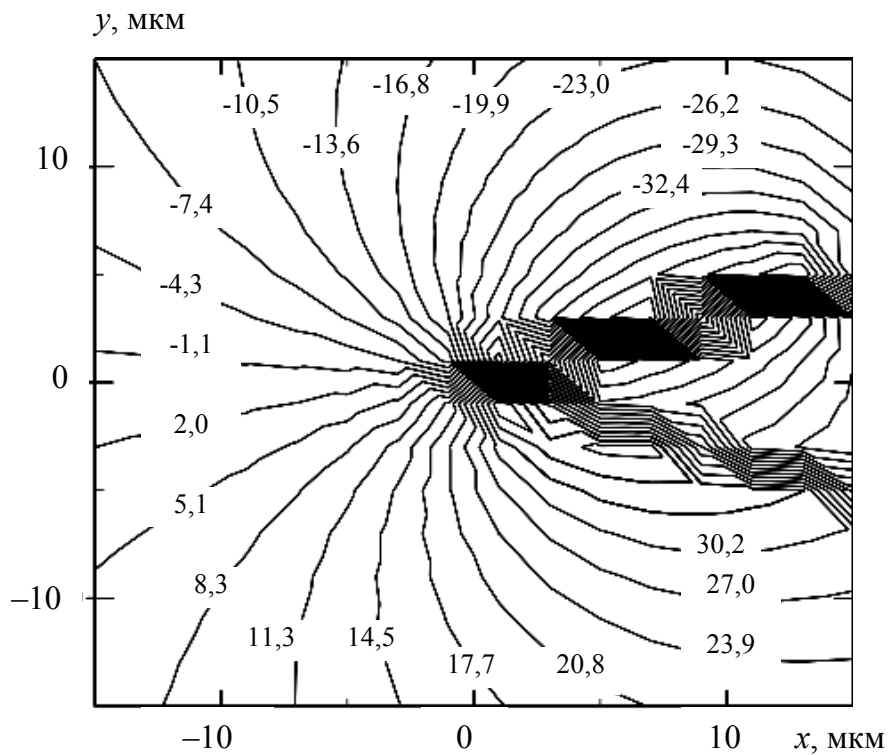


Рис. 2.50. Распределения  $\eta_{xz}(x, y)$  и  $\eta_{zz}(x, y)$  при  $N = 200$ ,  $M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,075$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,025$  мкм

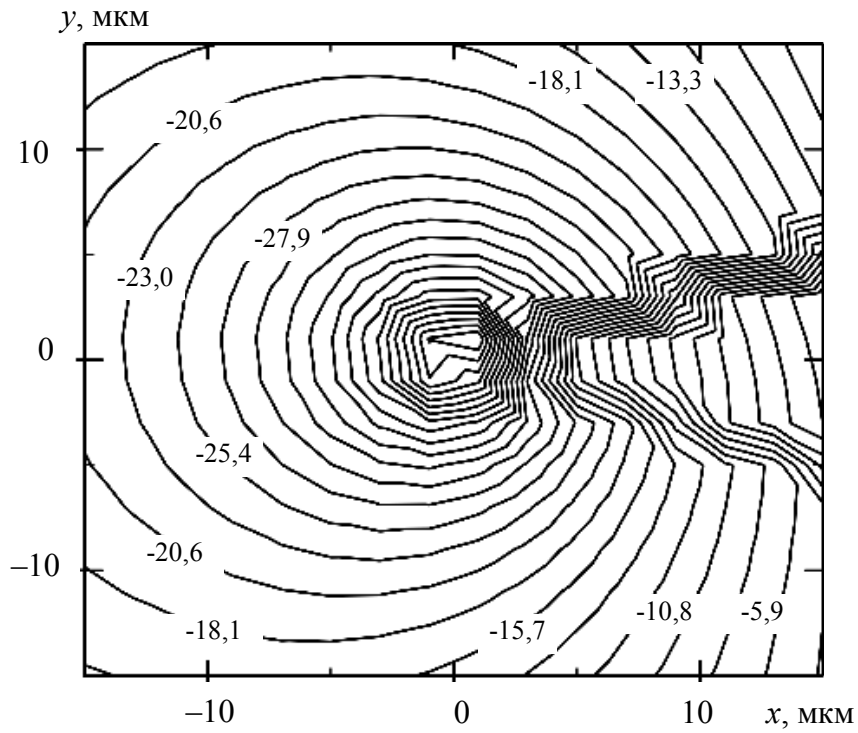


Рис. 2.51. Распределение  $\eta_{yz}(x, y)$  при  $N = 200, M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,075$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,025$  мкм

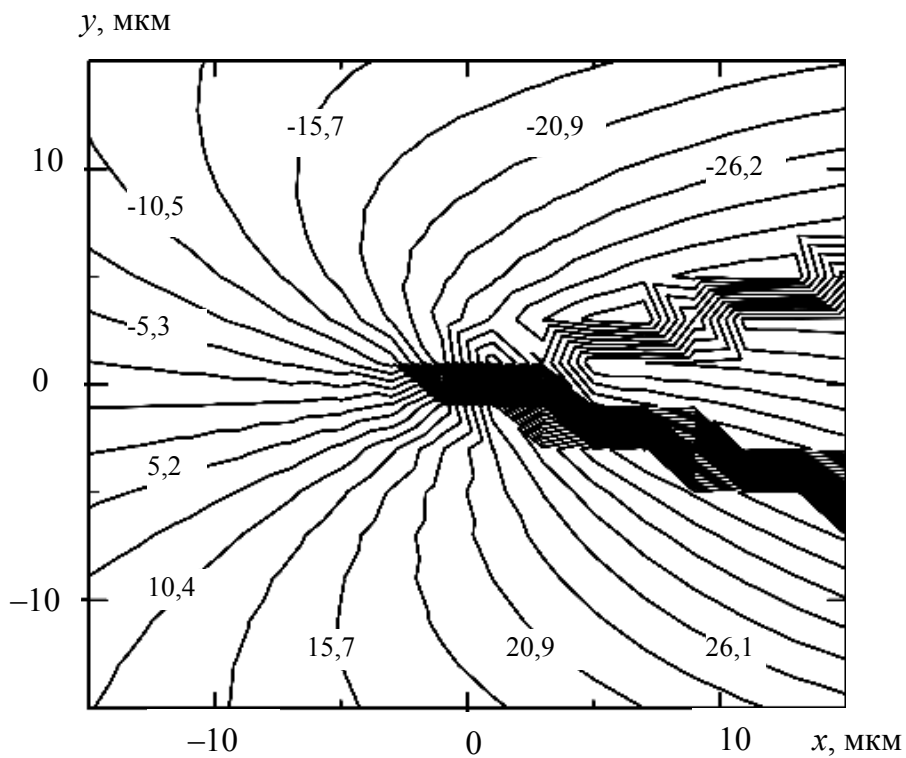


Рис. 2.52. Распределение  $\eta_{xz}(x, y)$  при  $N = 50, M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,3$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,1$  мкм



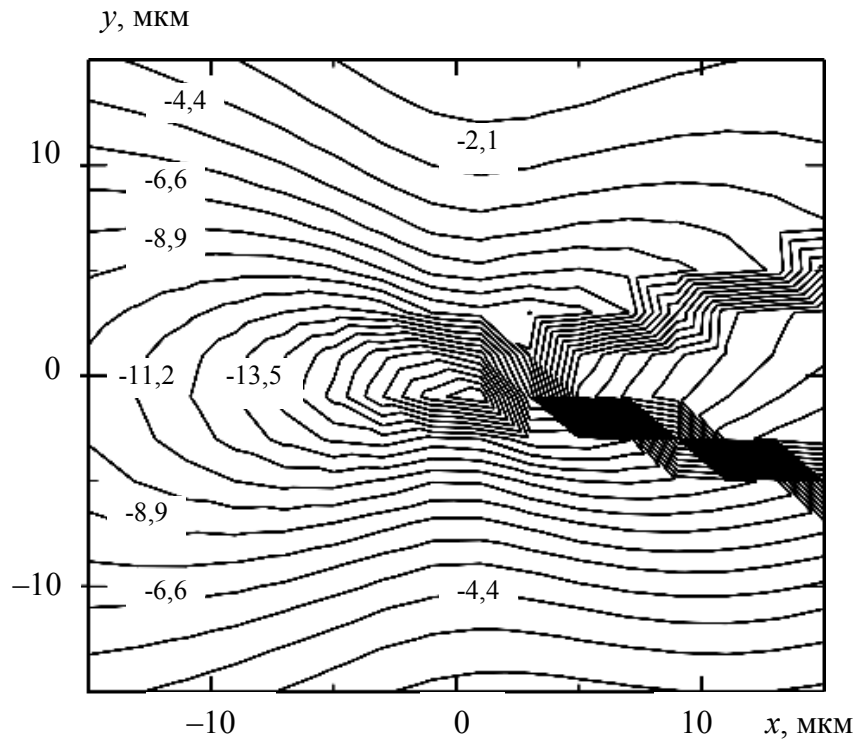


Рис. 2.53. Распределение  $\eta_{xy}(x, y)$  при  $N = 50, M = 99$ ;  $d_1 = 0,15 \text{ мкм}, d_2 = 0,3 \text{ мкм}; h_1 = 0,05 \text{ мкм}, h_2 = 0,1 \text{ мкм}$

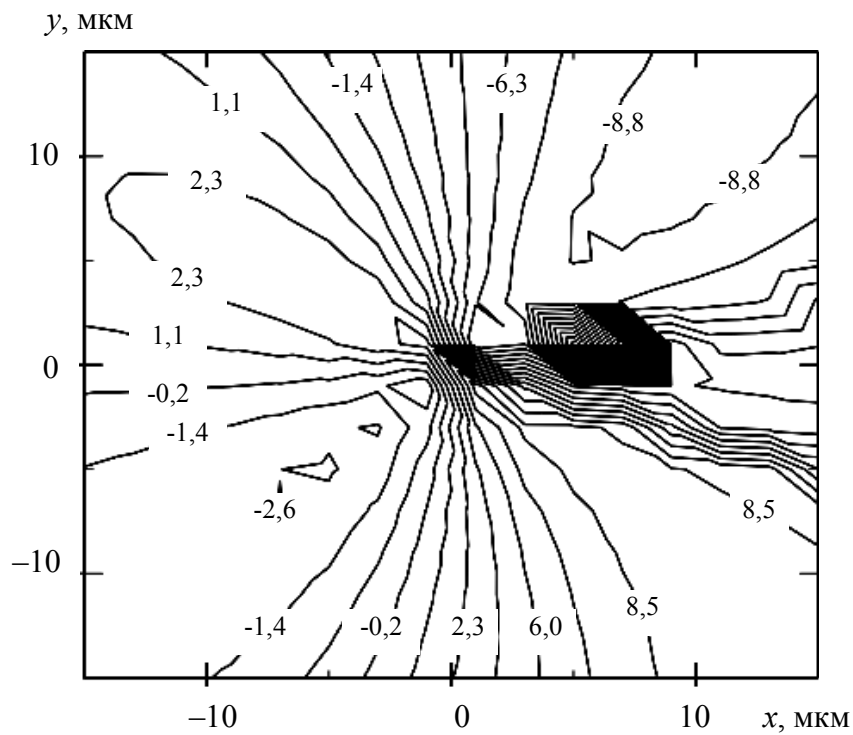


Рис. 2.54. Распределение  $\eta_{yy}(x, y)$  при  $N = 50, M = 99$ ;  $d_1 = 0,15 \text{ мкм}, d_2 = 0,3 \text{ мкм}; h_1 = 0,05 \text{ мкм}, h_2 = 0,1 \text{ мкм}$

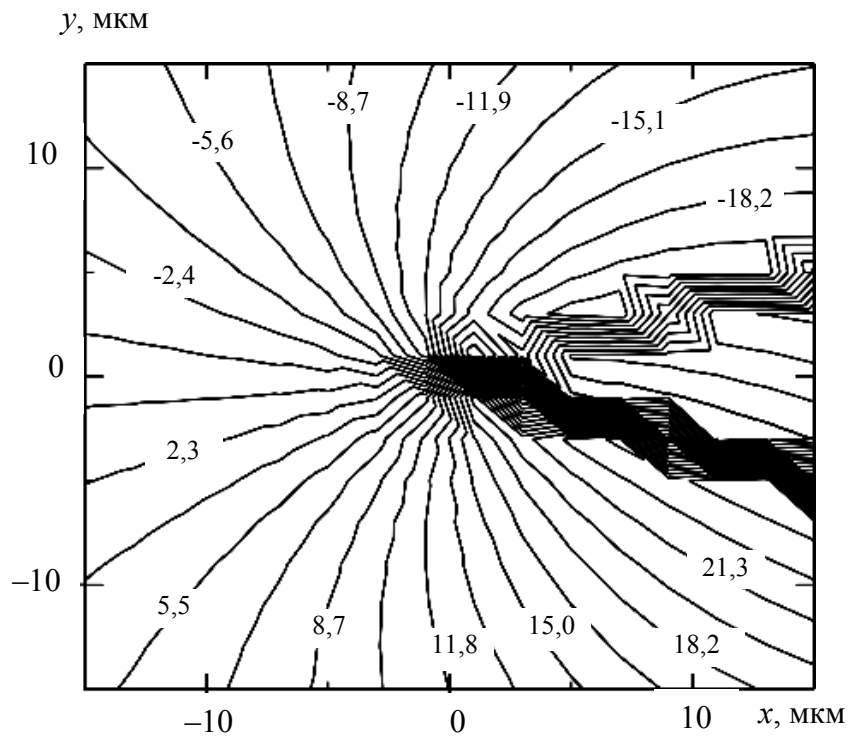


Рис. 2.55. Распределения  $\eta_{xz}(x, y)$  и  $\eta_{zz}(x, y)$  при  $N = 50$ ,  $M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,3$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,1$  мкм

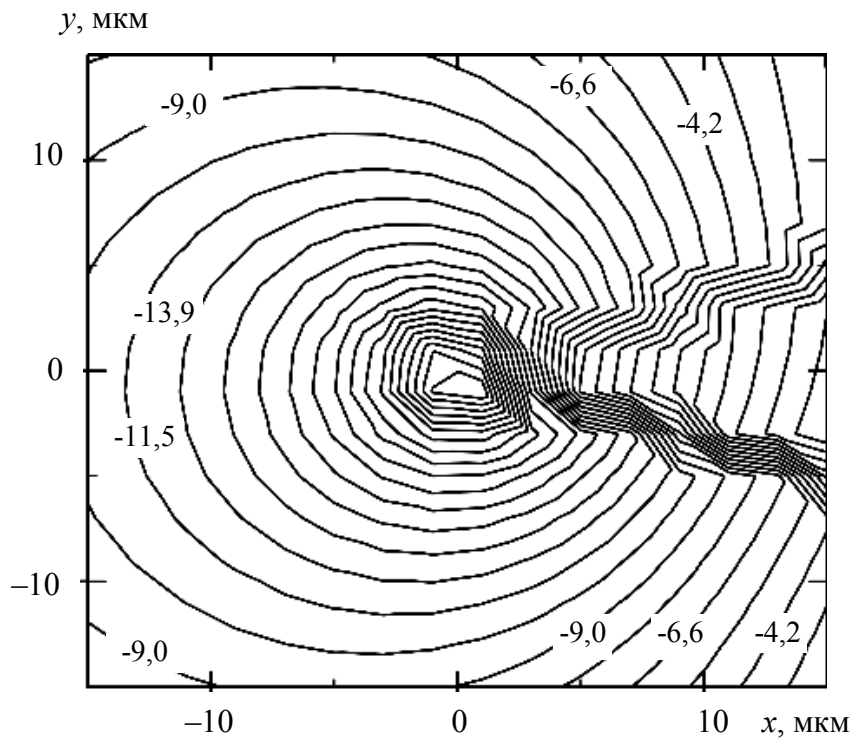


Рис. 2.56. Распределение  $\eta_{zz}(x, y)$  при  $N = 50$ ,  $M = 99$ ;  $d_1 = 0,15$  мкм,  $d_2 = 0,3$  мкм;  $h_1 = 0,05$  мкм,  $h_2 = 0,1$  мкм

При формировании выпуклой двойниковой границы уровень напряжений в ее окрестности растет, а в случае образования вогнутой двойниковой границы их уровень падает (см. рис. 2.47–2.56). Это указывает на то, что для изменения формы границ клиновидного двойника не обязательно наличие концентратора напряжений [12]. Изменение уровня напряжений у двойниковой границы может быть инициировано несогласованностью зарождения новых двойникующих дислокаций на противоположных двойниковых границах клиновидного двойника.

Важную роль в междислокационном взаимодействии играют сдвиговые напряжения. В плоскости  $XOY$  взаимодействие между дислокациями регулируют напряжения  $\sigma_{xy}$ . Данные напряжения увеличиваются у той двойниковой границы, на которой большее количество двойникующих дислокаций (рис. 2.48). Это приводит к активации взаимодействия данной двойниковой границы с полными дислокациями, находящимися в области данной границы, что, в свою очередь, может активировать расщепление полных дислокаций на частичные двойникующие дислокации и привести к ветвлению двойника, т. е. зарождению на его границе нового двойника, развивающегося в другом кристаллографическом направлении по сравнению с материнским двойником [13].

## **2.5. Роль поверхности в формировании напряженно-деформированного состояния у клиновидного двойника**

Клиновидные двойники чаще образуются у поверхности кристалла при его деформировании инденторами и штампами различного вида, поэтому изучение роли поверхности в формировании напряженно-деформированного состояния у клиновидного двойника имеет важное практическое значение.

Напряженное состояние у клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла, может быть найдено сложением напряжений клиновидного двойника и двойника-изображения, состоящего из дислокаций противоположного знака (рис. 2.57). Схематическое изображение взаимного расположения двойникующих дислокаций в такой совокупности двойников представлено на рис. 2.58.

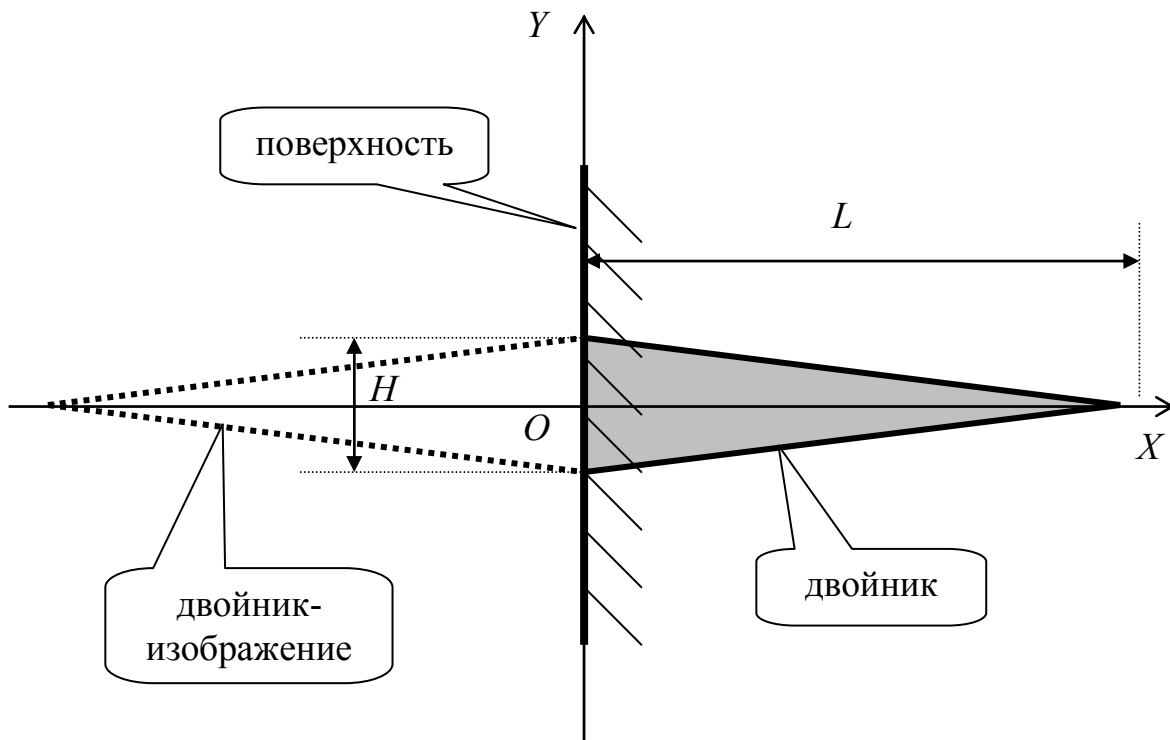


Рис. 2.57. Схематическое изображение взаимного расположения клиновидного механического двойника, поверхности и двойника-изображения

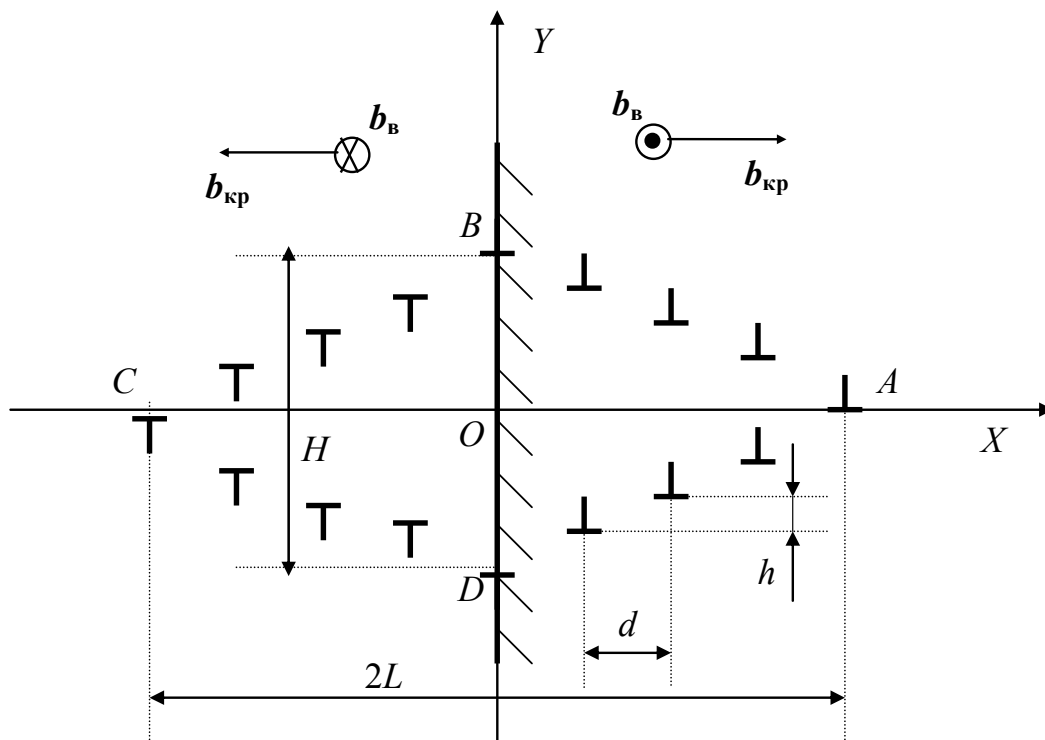


Рис. 2.58. Схематическое изображение распределения дислокаций в системе двойник и двойник-изображение

В этом случае напряжения у клиновидного двойника могут быть найдены из соотношений [28]:

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

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \left( \sum_{n=0}^N \frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} - \right. \\
&\quad - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \\
&\quad + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]^2} - \\
&\quad \left. - \sum_{n=1}^N \frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]^2} \right), \\
\sigma_{xz} &= -\frac{\mu b_B}{2\pi} \left( \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \right. \\
&\quad - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{y+nh}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \\
&\quad \left. + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{y-nh}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \sum_{n=1}^N \frac{y-nh}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right), \\
\sigma_{yz} &= \frac{\mu b_B}{2\pi} \left( \sum_{n=0}^N \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \right. \\
&\quad - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \\
&\quad \left. + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \sum_{n=1}^N \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right). \quad (2.59)
\end{aligned}$$

В суммах (2.59) учтено, что в точках  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  (рис. 2.58) может находиться только одна дислокация. В данном случае принималось, что параметры  $d$  и  $h$  одинаковы для всех границ двойника и двойника-изображения.

Результаты расчетов представлены на рис. 2.59–2.63. При расчетах принималось:  $N = 100$ ;  $d = 0,15$  мкм;  $h = 0,05$  мкм.

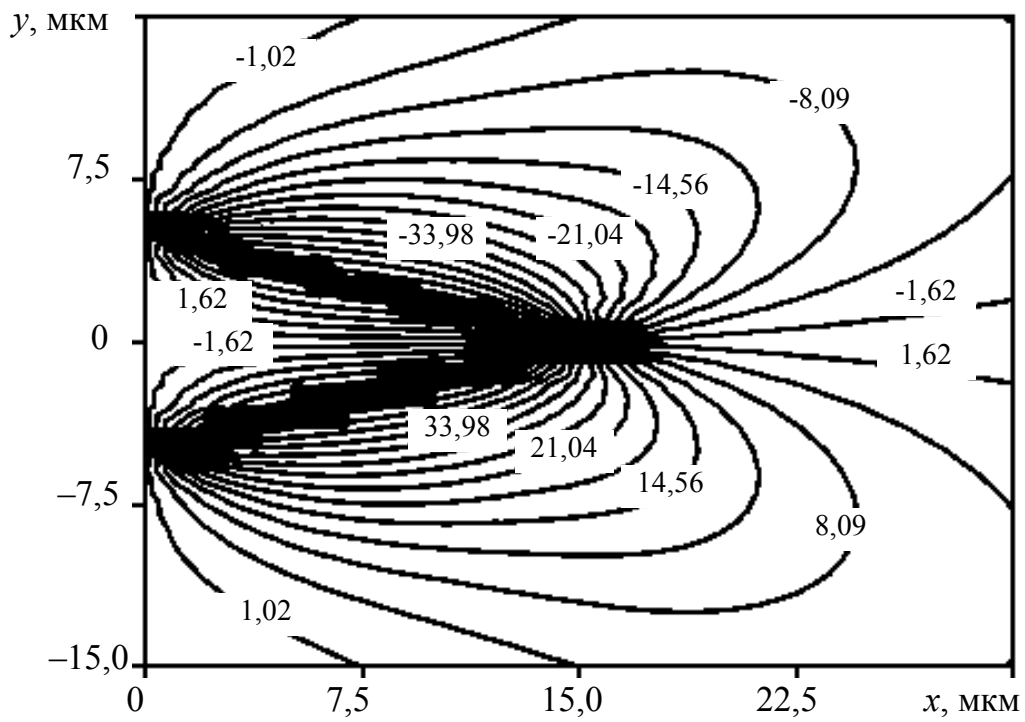


Рис. 2.59. Распределение  $\eta_{xx}$  вблизи клиновидного двойника у поверхности

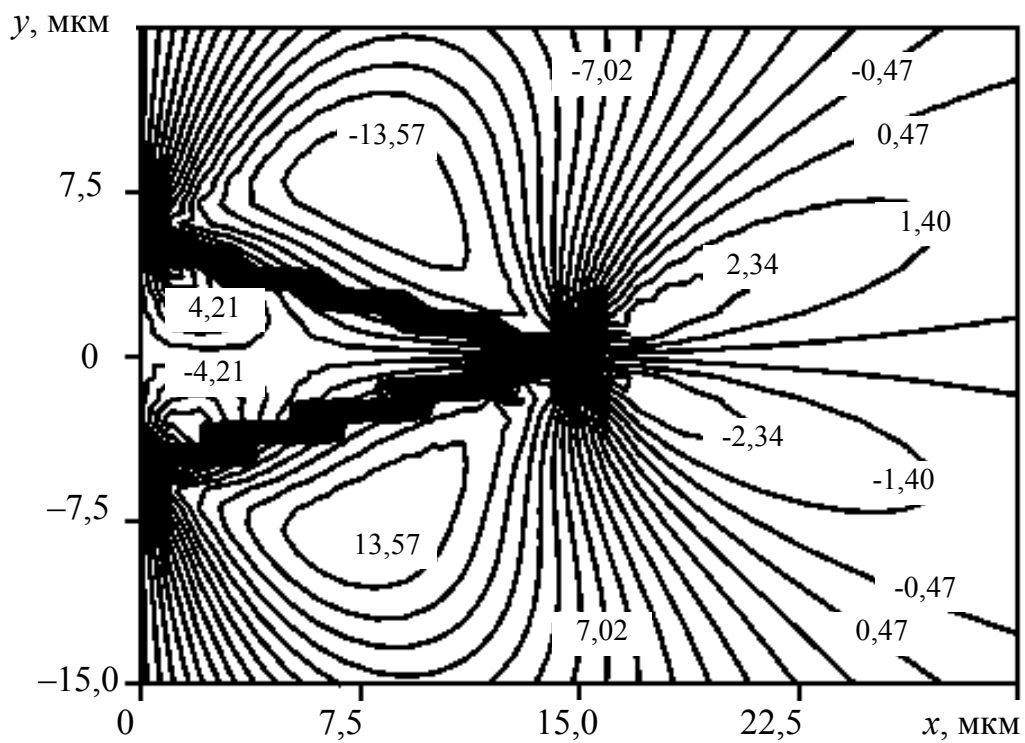


Рис. 2.60. Распределение  $\eta_{yy}$  вблизи клиновидного двойника у поверхности

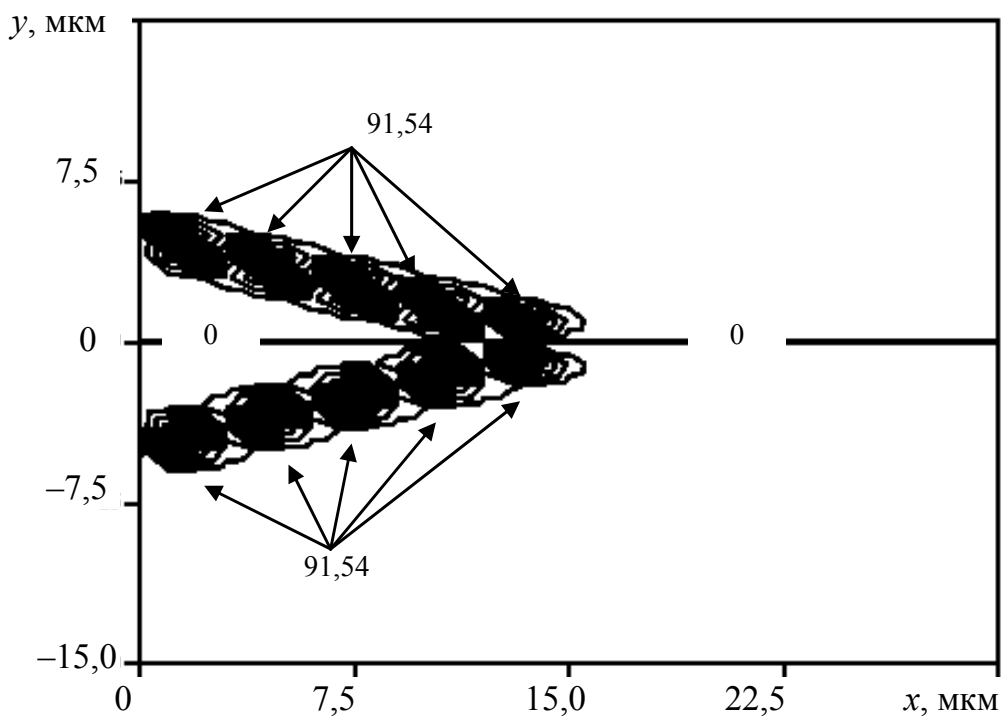


Рис. 2.61. Распределения  $\eta_{zz}$  и  $\eta_{xz}$  вблизи клиновидного двойника у поверхности

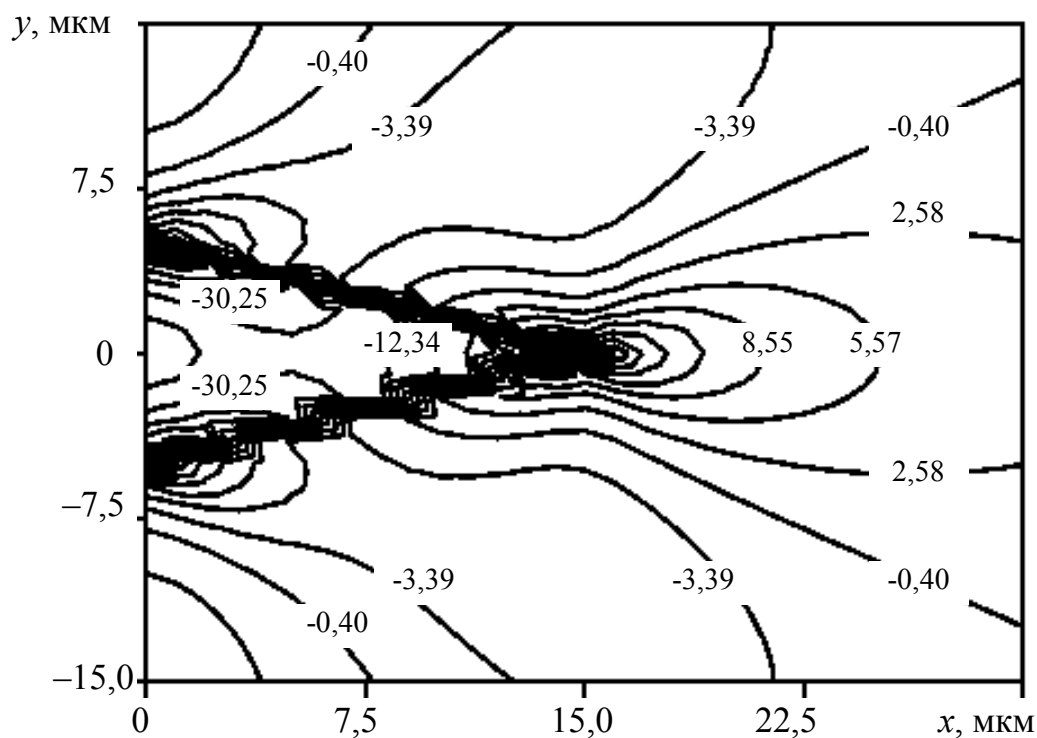


Рис. 2.62. Распределение  $\eta_{xy}$  вблизи клиновидного двойника у поверхности



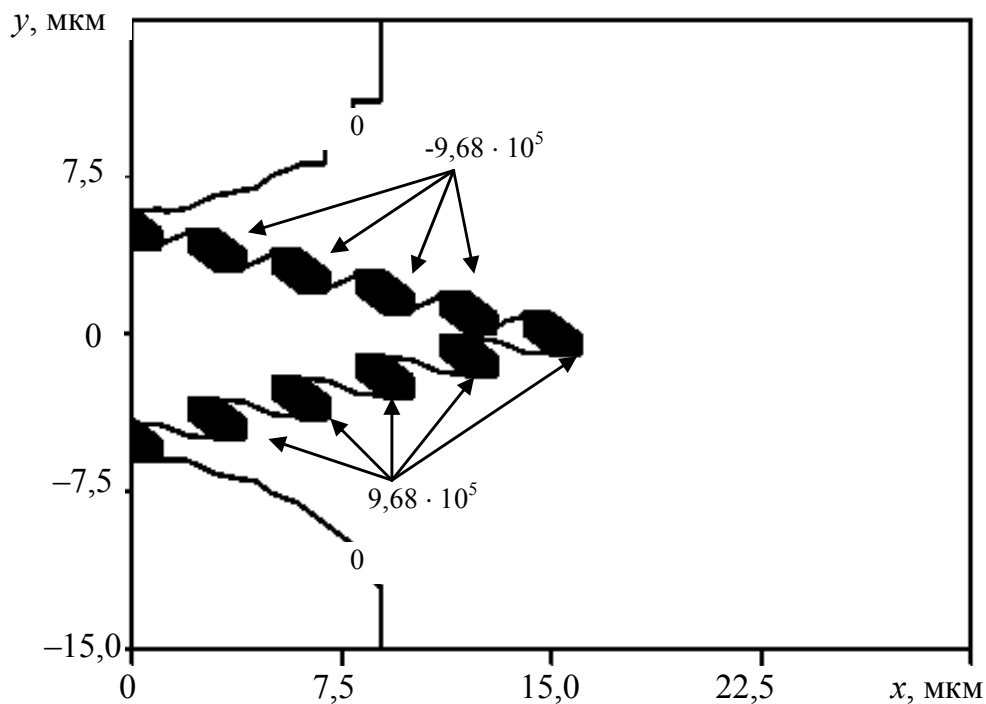


Рис. 2.63. Распределение  $\eta_{yz}$  вблизи клиновидного двойника у поверхности

Как видно из рис. 2.59–2.63, максимальные напряжения локализованы на двойниковых границах. Нормальные напряжения  $\sigma_{xx}$  знакопеременны относительно оси  $Ox$  (рис. 2.59). Данные напряжения также знакопеременны и относительно двойниковых границ. У границы двойника напряжения внутри двойника имеют противоположный знак по отношению к напряжениям с наружной стороны границы клиновидного двойника. При сравнении конфигурации напряжений  $\sigma_{xx}$  у двойников, находящихся у поверхности и вдали от нее, следует отметить, что поверхность на данные напряжения существенного влияния не оказала.

Напряжения  $\sigma_{yy}$  знакопеременны не только относительно оси  $Ox$ , границ двойника, но и относительно вершины двойника (рис. 2.60). На данные напряжения, как и в предыдущем случае, поверхность существенного влияния не оказывает.

Заметно влияние поверхности на напряжения  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$  (рис. 2.61). В этом случае, по сравнению с двойником, находящимся вдали от поверхности, напряжения локализуются у двойникоующих дислокаций, не компенсируясь дальнедействующими напряжениями. Численные значе-

ние этих напряжений на порядок отличается от значений напряжений у двойника вдали от поверхности. Общим в этом случае можно считать то, что у двойника у поверхности и вдали от нее, напряжения  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{xz}$  знакопеременны относительно оси  $OX$  и вдоль нее равны нулю.

У поверхности также появляются изменения в конфигурации полей скалывающих напряжений  $\sigma_{xy}$  и  $\sigma_{yz}$  (рис. 2.62, 2.63). Напряжения  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника вдали от поверхности положительны внутри двойника и отрицательны снаружи, в то время как поверхность способствует перераспределению скалывающих напряжений  $\sigma_{xy}$  таким образом, что они положительны только у вершины двойникового клина. В случае напряжений  $\sigma_{yz}$  наблюдается их существенная локализация на двойниковых границах. При этом роль далекодействующих напряжений  $\sigma_{yz}$  в общей картине напряжений снижается.

В случае клиновидного двойника, находящегося у поверхности, компоненты тензора деформации находятся по аналогичному принципу из соотношений:

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

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

$$u_{zz}(x, y) = 0,$$

$$\begin{aligned}
u_{xy}(x, y) = & \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} + \right. \right. \\
& + \frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2 - 3(y+nh)^2]}{4(1-\nu)[(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} \Big) - \sum_{n=0}^{N-1} \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \right. \\
& + \frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2 - 3(y+nh)^2]}{4(1-\nu)[(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]^2} \Big) + \sum_{n=1}^{N-1} \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} + \right. \\
& + \frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2 - 3(y-nh)^2]}{4(1-\nu)[(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]^2} \Big) - \\
& - \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} + \right. \\
& \left. \left. + \frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2 - 3(y-nh)^2]}{4(1-\nu)[(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]^2} \right) \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 u_{xz}(x, y) = & -\frac{b_B}{4\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{y+nh}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \right. \\
 & \left. + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{y-nh}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \sum_{n=1}^N \frac{y-nh}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right], \\
 u_{yz}(x, y) = & \frac{b_B}{4\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \right. \\
 & - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \\
 & \left. + \sum_{n=1}^{N-1} \frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \sum_{n=1}^N \frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right]. \quad (2.60)
 \end{aligned}$$

Результаты расчетов представлены на рис. 2.64–2.68. Параметры для расчетов брались такие же, как и в предыдущем случае.

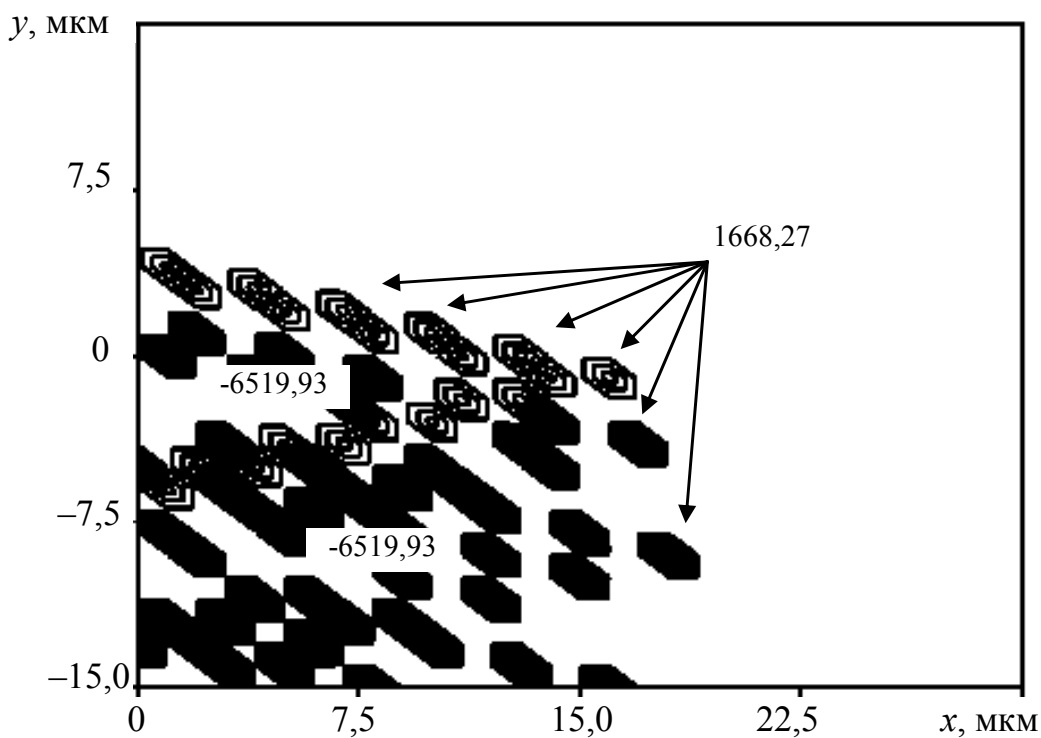


Рис. 2.64. Распределение безразмерной деформации  $\chi_{xx}(x, y)$  вблизи клиновидного двойника, находящегося у поверхности

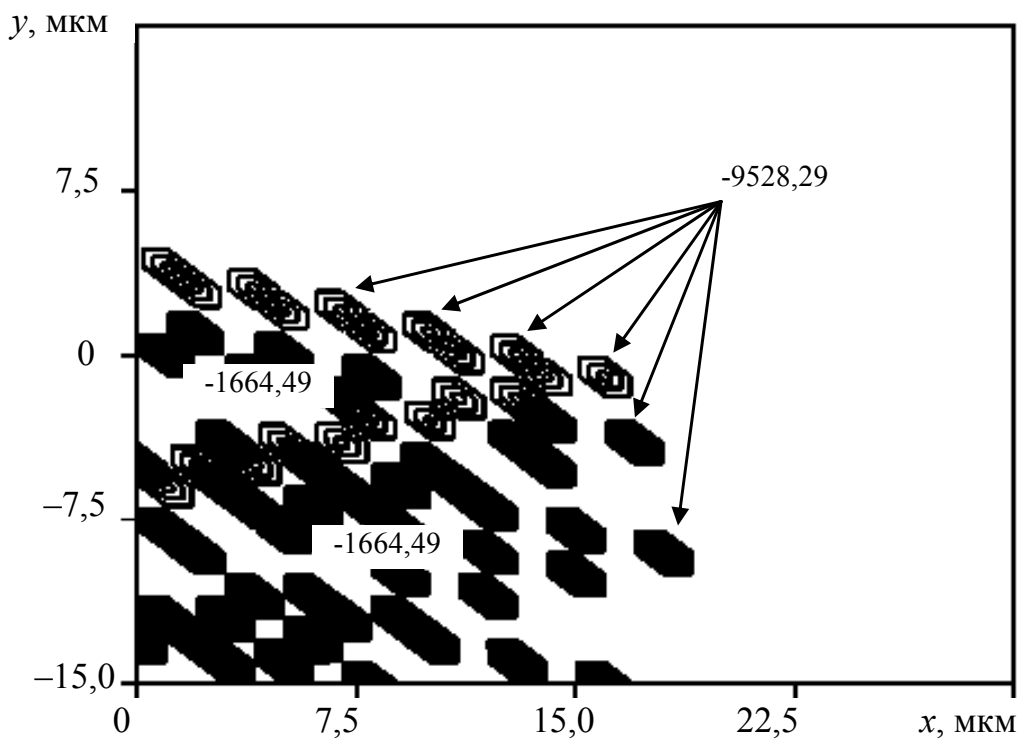


Рис. 2.65. Распределение безразмерной деформации  $\chi_{yx}(x, y)$  вблизи клиновидного двойника, находящегося у поверхности

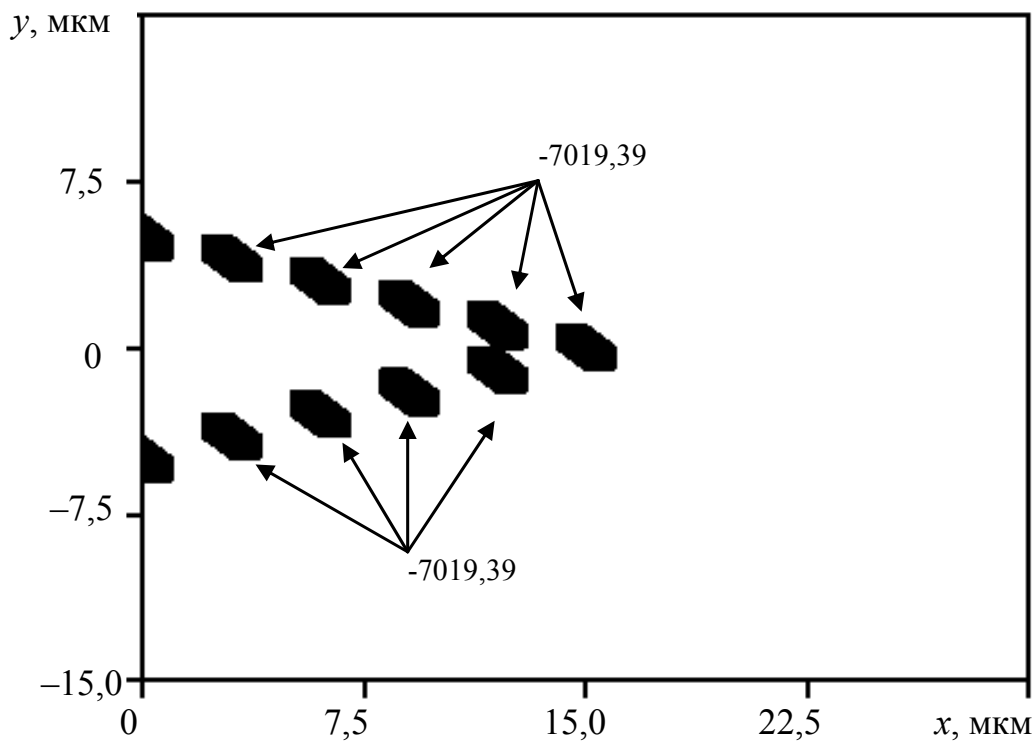


Рис. 2.66. Распределение безразмерной деформации  $\chi_{xy}(x, y)$  вблизи клиновидного двойника, находящегося у поверхности

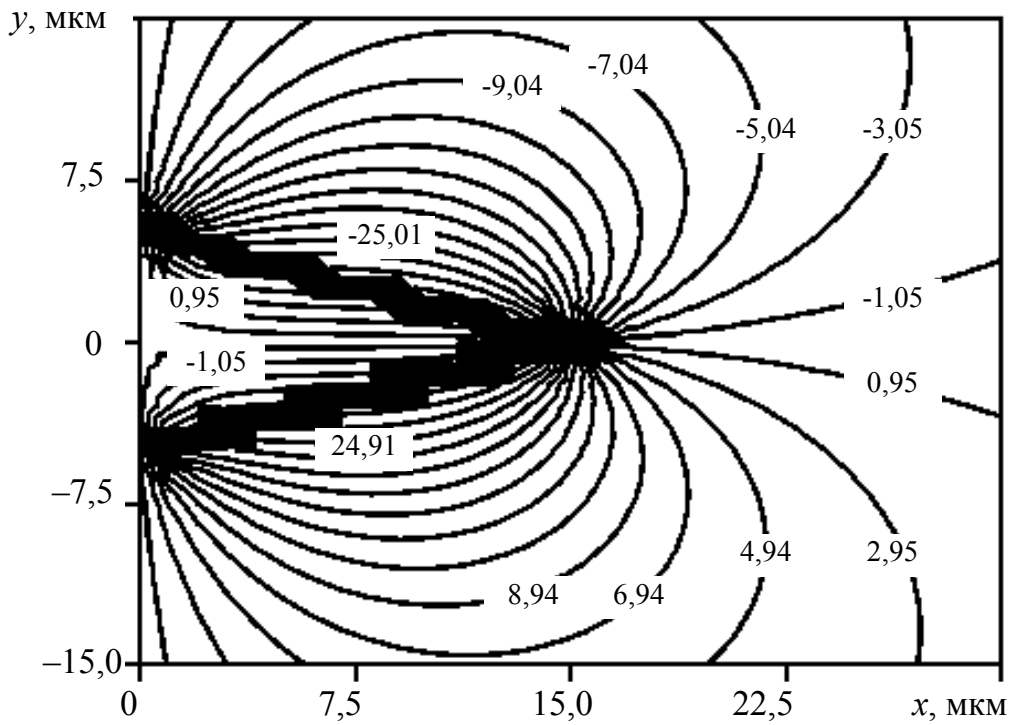


Рис. 2.67. Распределение безразмерной деформации  $\chi_{xz}(x, y)$  вблизи клиновидного двойника, находящегося у поверхности

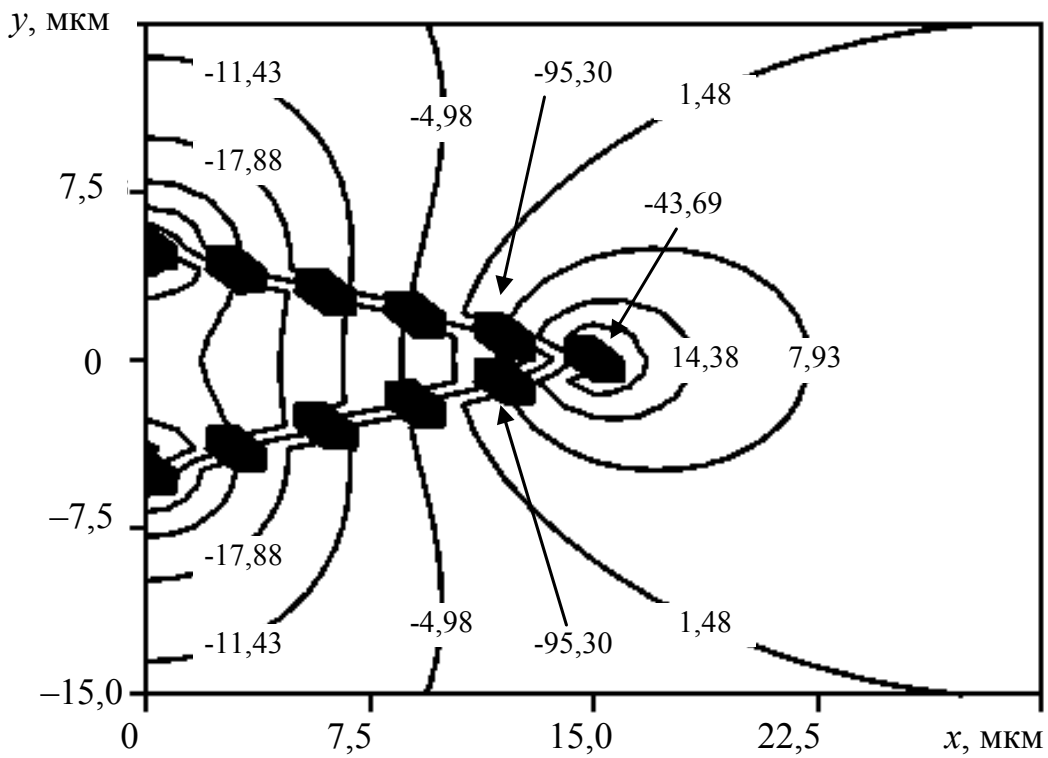


Рис. 2.68. Распределение безразмерной деформации  $\chi_{yz}(x, y)$  вблизи клиновидного двойника, находящегося у поверхности

Деформации  $u_{xx}$  и  $u_{yy}$  (безразмерный эквивалент  $\chi_{xx}$  и  $\chi_{yy}$  соответственно) локализованы не только у границ клиновидного двойника, но и в ограниченных областях внутри двойника и за его пределами (рис. 2.64, 2.65). В тоже время деформации  $u_{xy}$  сосредоточены на двойниковых границах (рис. 2.66).

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. Однако изменились почти на порядок значения данных деформаций в областях их локализации.

В случае деформаций  $u_{xx}$  и  $u_{yy}$  влияние поверхности выразилось в создании распределенных у двойника областей локализации деформаций, величина которых возросла на два порядка.

Конфигурация распределения деформаций  $u_{xz}$  и  $u_{yz}$  (рис. 2.67, 2.68) у двойника, находящегося у поверхности, такая же, как и у двойника, удаленного от поверхности. При этом деформации  $u_{xz}$  в обоих случаях имеют одинаковые значения в идентичных областях относительно двойника. Величина деформаций  $u_{yz}$  уменьшилась на четыре порядка.

## 2.6. Расчет энергии клиновидного двойника на основании мезоскопической дислокационной модели

Энергия клиновидного двойника на единицу длины всех составляющих его дислокаций состоит из упругой энергии двойникующих дислокаций  $\left(\frac{W_y}{\sum L_d}\right)$ , энергии взаимодействия между двойникующими дислокациями  $\left(\frac{W_{вз}}{\sum L_d}\right)$  и энергии дефектов упаковки  $\left(\frac{\gamma}{\sum L_d}\right)$ , так как двойникующие дислокации являются частичными дислокациями Шокли. Поэтому можно записать следующее соотношение [25]:

$$\frac{W}{\sum L_d} = \frac{W_y}{\sum L_d} + \frac{W_{вз}}{\sum L_d} + \frac{\gamma}{\sum L_d}. \quad (2.61)$$

Если рассматривать частичную дислокацию как состоящую из совокупности двух дислокаций, краевой и винтовой, линии которых совпадают друг с другом, то упругую энергию двойникующей дислокации можно определить из соотношения

$$\frac{W_y}{\sum L_d} = \frac{W_y^{кр}}{\sum L_d} + \frac{W_y^в}{\sum L_d}, \quad (2.62)$$

где  $\frac{W_y^{кр}}{\sum L_d}$  и  $\frac{W_y^в}{\sum L_d}$  – упругие энергии рассматриваемых краевых и винтовых составляющих двойникующих дислокаций соответственно.

Упругая энергия единичной краевой дислокации на единицу ее длины определяется из соотношения [40]:

$$\frac{(W_y^{кр})_i}{L_d} = \frac{\mu b_{кр}^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{\alpha R_i}{b_{кр}}, \quad (2.63)$$

где  $\alpha$  – безразмерный параметр (для большинства металлов  $\alpha = 4$ );  $R_i$  – расстояние от  $i$ -й двойникующей дислокации до поверхности (рис. 2.69). Примем  $R_i = L - id$ .

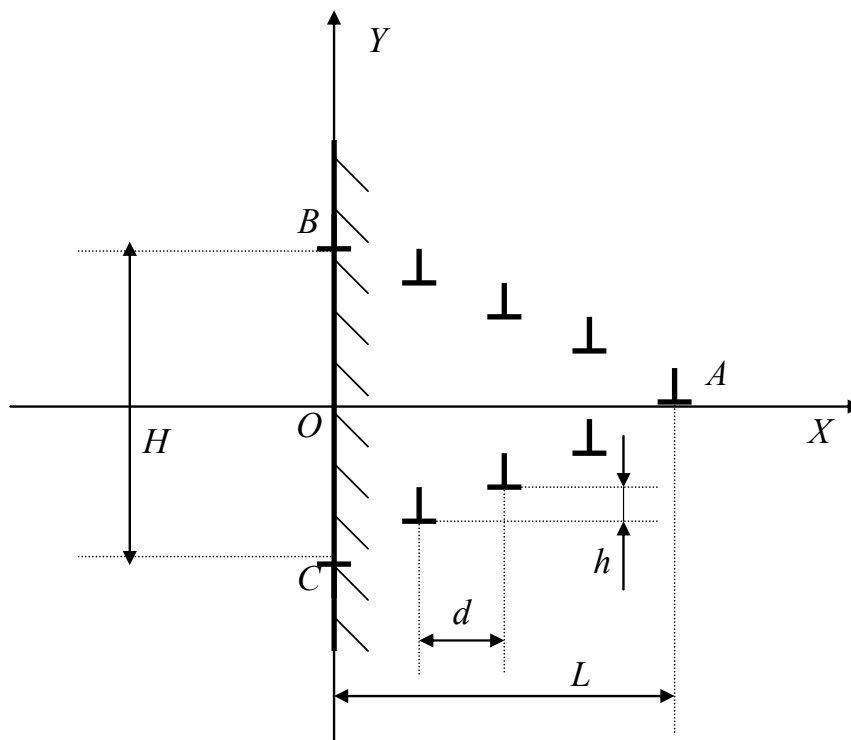


Рис. 2.69. Схематическое изображение взаимного расположения двойникующих дислокаций для расчета энергии клиновидного двойника



В случае винтовой дислокации справедливо выражение для упругой энергии [40]:

$$\frac{(W_y^B)_i}{L_d} = \frac{\mu b_B^2}{4\pi} \ln \frac{\alpha R_i}{b_B}. \quad (2.64)$$

Тогда, представляя двойник состоящим из совокупности двойнивающих дислокаций, расположенных так, как показано на рис. 2.69, учитывая (2.63) и (2.64), для клиновидного двойника можно записать [29]:

$$\begin{aligned} \frac{W_y}{\sum L_d} = & \frac{\mu}{2\pi} \sum_{i=1}^{N-1} \left( b_B^2 \ln \frac{\alpha(L-id)}{b_B} + \frac{b_{кр}^2}{(1-\nu)} \ln \frac{\alpha(L-id)}{b_{кр}} \right) + \\ & + \frac{\mu}{4\pi} \left( b_B^2 \ln \frac{\alpha L}{b_B} + \frac{b_{кр}^2}{(1-\nu)} \ln \frac{\alpha L}{b_{кр}} \right). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Второе слагаемое в этом выражении подразумевает, что в вершине двойника находится только одна двойнивающая дислокация. В первом слагаемом выражения (2.65) от  $L$  отнимается  $id$ , тем самым каждая дислокация двойниковой границы удаляется от вершины на расстояние  $id$  и на такое же расстояние приближается к поверхности.

Следует отметить, что в соотношении (2.65) отсутствует параметр  $h$ . Это обусловлено тем, что собственная упругая энергия отдельных дислокаций зависит от расстояния от дислокаций до поверхности, но не зависит от расстояния между дислокациями. Однако собственная энергия клиновидного двойника косвенно зависит от расстояния между дислокациями, а точнее, от проекции этого расстояния на ось  $OX$  (параметра  $d$ ).

На рис. 2.70 и 2.71 представлены результаты расчетов для упругой энергии клиновидных двойников в железе. При расчетах принималось:  $b_B = b_{кр} = 0,124$  нм [3];  $\mu = 81$  ГПа [19];  $\nu = 0,29$  [3]. Упругая энергия клиновидных двойников в железе при постоянной плотности дислокаций на двойниковых границах (при  $d = \text{const}$ ) линейно растет с увеличением длины двойников в расчетном интервале длин  $L$  от 1 до 100 мкм (рис. 2.70). С уменьшением расстояния между двойнивающими дислокациями скорость роста энергии клиновидного двойника увеличивается, что проявляется в увеличении угла наклона

зависимости упругой энергии двойника от его длины (рис. 2.70). Причем прирост данного угла наклона при  $d = 5$  нм по сравнению с углом наклона графика при  $d = 10$  нм значительно меньше, чем при  $d = 1$  нм. Это говорит о том, что в плане упругой энергии клиновидного двойника энергетически выгодно увеличение расстояния между двойникующими дислокациями, т. е. выгоден рост клиновидного двойника за счет увеличения расстояния между двойникующими дислокациями.

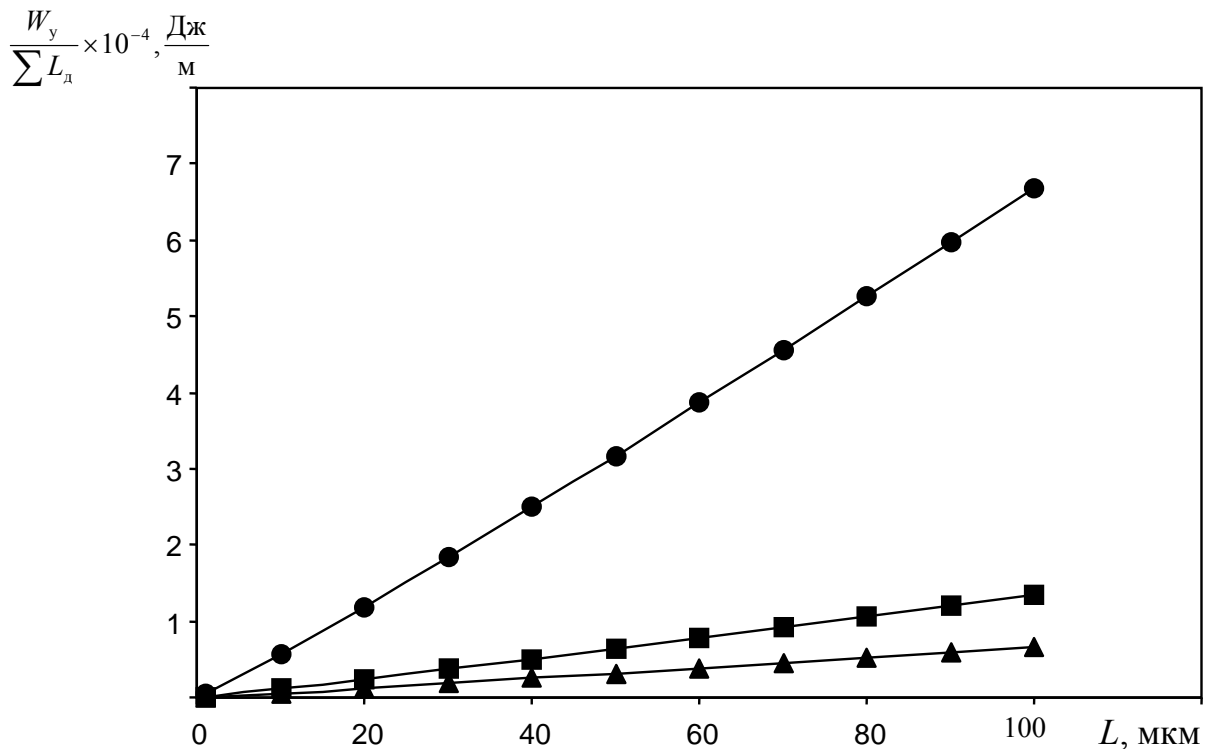


Рис. 2.70. Расчетные зависимости упругой энергии клиновидного двойника, отнесенной к длине всех двойникующих дислокаций, от длины двойника в железе при различных значениях параметра  $d$ :  
 ● —  $d = 1$  нм; ■ —  $d = 5$  нм; ▲ —  $d = 10$  нм

Представляет интерес ситуация, когда длина двойников меньше 1 мкм (рис. 2.71). Данные двойники характеризуют начальную стадию развития двойника [2] и названы в работах [11] нанодвойниками. В случае  $d = 1$  нм при малых длинах двойника (от 0,1 мкм до 1 мкм) зависимость упругой энергии от длины двойника, как и в предыдущем случае линейная (рис. 2.71). При  $d = 0,5$  нм наблюдается незначительное отклонение зависимости  $\frac{W_y}{\sum L_d}$  от линейного вида.

Скорость роста энергии от длины двойника в этом случае значительно выше, чем во всех рассмотренных случаях. Это также подтверждает, что для уменьшения упругой энергии клиновидный двойник развивается таким образом, чтобы расстояние между двойникующими дислокациями увеличивалось.

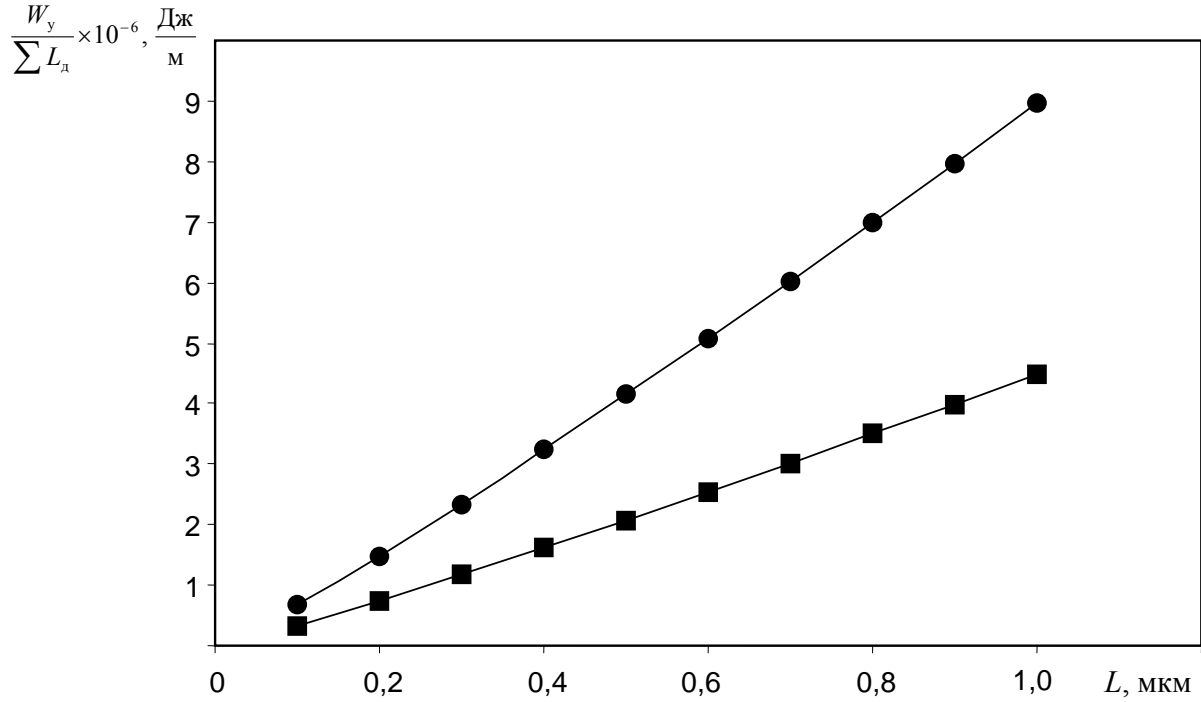


Рис. 2.71. Расчетные зависимости упругой энергии клиновидного двойника, отнесенной к длине всех двойникующих дислокаций, от длины двойника в железе при различных значениях параметра  $d$  в случае малой длины двойников:  
 ● —  $d = 0,5$  нм; ■ —  $d = 1$  нм

Согласно формуле Набарро энергия взаимодействия между двумя дислокациями с векторами Бюргерса  $\vec{b}_1$  и  $\vec{b}_2$  может быть определена следующим образом [40], [51]:

$$\begin{aligned} \frac{(W_{вз})_i}{L_d} = & - \frac{\mu(\vec{b}_1 \cdot \vec{\xi})(\vec{b}_2 \cdot \vec{\xi})}{2\pi} \ln \frac{R}{R_\alpha} - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} [(\vec{b}_1 \times \vec{\xi}) \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{\xi})] \ln \frac{R}{R_\alpha} - \\ & - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)R^2} [(\vec{b}_1 \times \vec{\xi}) \cdot \vec{R}][(\vec{b}_2 \times \vec{\xi}) \cdot \vec{R}]. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Здесь  $\vec{\xi}$  – вектор, направленный вдоль линии дислокации;  $R$  – расстояние между дислокациями;  $R_\alpha$  – некоторый малый параметр размерности длины.

Нетрудно показать, что в нашем случае выражение (2.66) для двух взаимодействующих двойникующих дислокаций примет вид

$$\frac{(W_{ВЗ}^{кр})}{L_d} = -\frac{\mu b_{кр}^2}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{R_\alpha}; \quad (2.67)$$

$$\frac{(W_{ВЗ}^в)}{L_d} = -\frac{\mu b_v^2}{2\pi} \ln \frac{R}{R_\alpha}. \quad (2.68)$$

Энергию взаимодействия двойникующих дислокаций будем искать в виде совокупности энергий взаимодействия дислокаций друг с другом на каждой из двойниковых границ  $\left( \frac{W_{ВЗ}^{кр(1)}}{\sum L_d} + \frac{W_{ВЗ}^в(1)}{\sum L_d} \right)$  и на противоположных границах  $\left( \frac{W_{ВЗ}^{кр(2)}}{\sum L_d} + \frac{W_{ВЗ}^в(2)}{\sum L_d} \right)$ . Таким образом, получим

$$\frac{W_{ВЗ}}{\sum L_d} = \frac{W_{ВЗ}^{кр(1)}}{\sum L_d} + \frac{W_{ВЗ}^{кр(2)}}{\sum L_d} + \frac{W_{ВЗ}^в(1)}{\sum L_d} + \frac{W_{ВЗ}^в(2)}{\sum L_d}. \quad (2.69)$$

Принимая  $R_\alpha = b_{кр}$ , из (2.67) будем иметь:

$$\begin{aligned} \frac{W_{ВЗ}^{кр(1)}}{\sum L_d} = -\frac{\mu b_{кр}^2}{\pi(1-\nu)} & \left\{ \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_{кр}} + \sum_{i=1}^{N-2} \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_{кр}} + \dots + \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^{N-M} \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_{кр}} \right\}; \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\frac{W_{ВЗ}^{кр(2)}}{\sum L_d} = -\frac{\mu b_{кр}^2}{2\pi(1-\nu)} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \ln \frac{2jh + \sqrt{(id)^2 + ((2j+i)h)^2}}{b_{кр}}. \quad (2.71)$$

Принимая в (2.68)  $R_\alpha = b_B$ , получим

$$\frac{W_{B3}^{B(1)}}{\sum L_d} = -\frac{\mu b_B^2}{\pi} \left\{ \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_B} + \sum_{i=1}^{N-2} \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_B} + \dots + \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^{N-M} \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_\theta} \right\}; \quad (2.72)$$

$$\frac{W_{B3}^{B(2)}}{\sum L_d} = -\frac{\mu b_B^2}{2\pi} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \ln \frac{2jh + \sqrt{(id)^2 + ((2j+i)h)^2}}{b_B}. \quad (2.73)$$

Очевидно, что в данных выражениях  $M = N - 1$ , а  $R = \sqrt{d^2 + h^2}$ .

Соотношения (2.70) и (2.72) могут быть преобразованы к более удобному для анализа виду:

$$\frac{W_{B3}^{кр(1)}}{\sum L_d} = -\frac{\mu b_{кр}^2}{\pi(1-\nu)} \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_{кр}}; \quad (2.74)$$

$$\frac{W_{B3}^{B(1)}}{\sum L_d} = -\frac{\mu b_B^2}{\pi} \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_B}. \quad (2.75)$$

Тогда выражение (2.69) примет вид

$$\frac{W_{B3}}{\sum L_d} = -\left[ \frac{\mu}{\pi} \left( \frac{b_{кр}^2}{1-\nu} \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}{b_{кр}(N-1)} + b_B^2 \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}{b_B(N-1)} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\mu}{2\pi} \left( \frac{b_{кр}^2}{1-\nu} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{jH + \sqrt{(iL)^2 + \left(\frac{2j+i}{2}H\right)^2}}{b_{кр}(N-1)} + \right. \right. \\ \left. \left. + b_B^2 \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{jH + \sqrt{(iL)^2 + \left(\frac{2j+i}{2}H\right)^2}}{b_\theta(N-1)} \right) \right]. \quad (2.76)$$

В данном соотношении учтено, что

$$d = \frac{L}{N-1} \quad \text{и} \quad h = \frac{H}{2(N-1)}. \quad (2.77)$$

Обычно в эксперименте наблюдаются клиновидные двойники, для которых справедливо соотношение:  $H < L$ . Однако на начальных стадиях развития двойников возможна ситуация, когда  $H > L$ .

Расчеты проводились для железа. Учитывалось, что количество дислокаций на двойниковой границе определяли по формуле

$$N = \frac{H}{2a}, \quad (2.78)$$

где  $a$  – межатомное расстояние в плоскости двойникования (в расчетах принималось  $a = 0,25$  нм [3]).

Результаты расчетов показаны на рис. 2.72–2.74.

Следует обратить внимание на то, что с ростом длины двойника на начальной стадии его развития ( $L < 100$  нм) энергия взаимодействия двойникующих дислокаций увеличивается незначительно (рис. 2.72). В показанных на рис. 2.72 результатах расчета также представлена ситуация, когда  $H > L$ , что свойственно нанодвойникам, рассмотренным в работе [11]. На этих стадиях развития двойника, когда  $H > L$ , скорость роста энергии выше, чем на стадиях при  $H < L$ . Это проявляется в несколько большем угле наклона графика зависи-

мости  $\left| \frac{W_{вз}(L)}{\sum L_d} \right|$  на стадиях при  $H > L$ , чем при  $H < L$  (рис. 2.72).

На рис. 2.73 показаны результаты расчета энергии взаимодействия для микродвойников, часто наблюдаемых в эксперименте [12]–[16], [53]–[55]. Следует отметить, что увеличение ширины двойника у устья на три порядка приводит к увеличению суммарной энергии взаимодействия двойникующих дислокаций на шесть порядков (рис. 2.72, 2.73). Как и для нанодвойников, энергия взаимодействия двойникующих дислокаций клиновидных микродвойников в зависимости от их длины возрастает. С ростом длины двойников эта зависимость приобретает все более ярко выраженный нелинейный характер. С ростом ширины двойника у устья энергия взаимодействия двойникующих дислокаций резко возрастает (рис. 2.74), а зависимость энергии взаимодействия от ширины двойника имеет вид близкий к параболическому. Длина двойников на величину расхождения графиков зависимости, представленных на рис. 2.74, оказывает заметное влияние лишь при больших значениях (порядка 300 мкм).

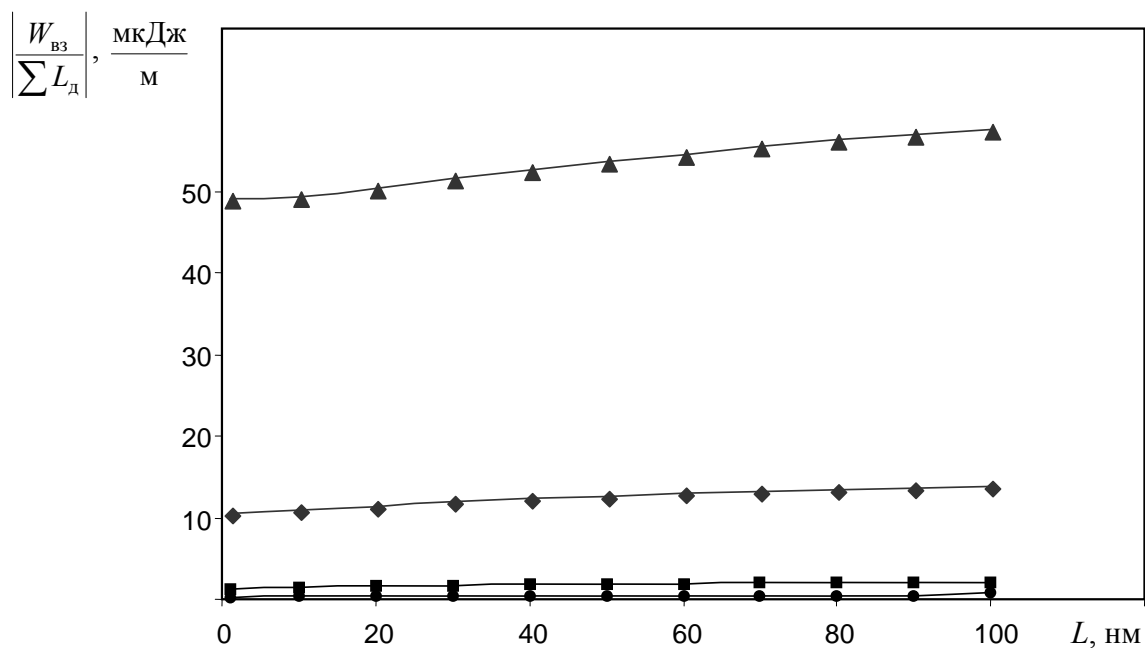


Рис. 2.72. Зависимость энергии взаимодействия дислокаций клиновидного нанодвойника от его длины:  
 ● –  $H = 5$  нм,  $N = 10$ ; ■ –  $H = 10$  нм,  $N = 20$ ;  
 ◆ –  $H = 25$  нм,  $N = 50$ ; ▲ –  $H = 50$  нм,  $N = 100$

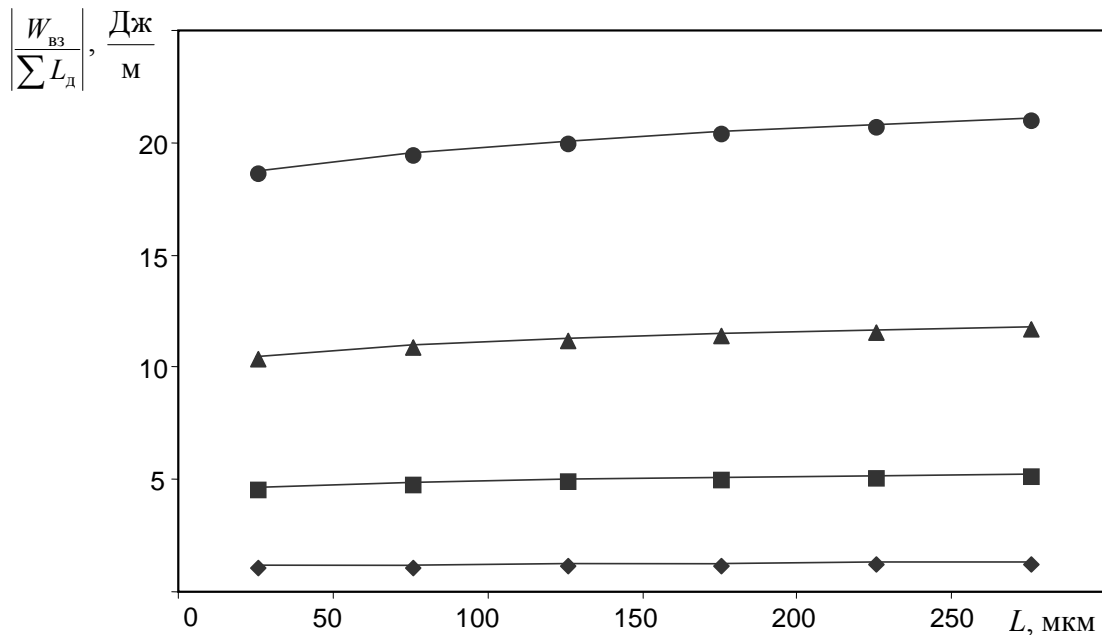


Рис. 2.73. Зависимость энергии взаимодействия дислокаций клиновидного микродвойника от его длины:  
 ◆ –  $H = 5$  мкм,  $N = 1 \cdot 10^4$ ; ■ –  $H = 10$  мкм,  $N = 2 \cdot 10^4$ ;  
 ▲ –  $H = 15$  мкм,  $N = 3 \cdot 10^4$ ; ● –  $H = 20$  мкм,  $N = 4 \cdot 10^4$

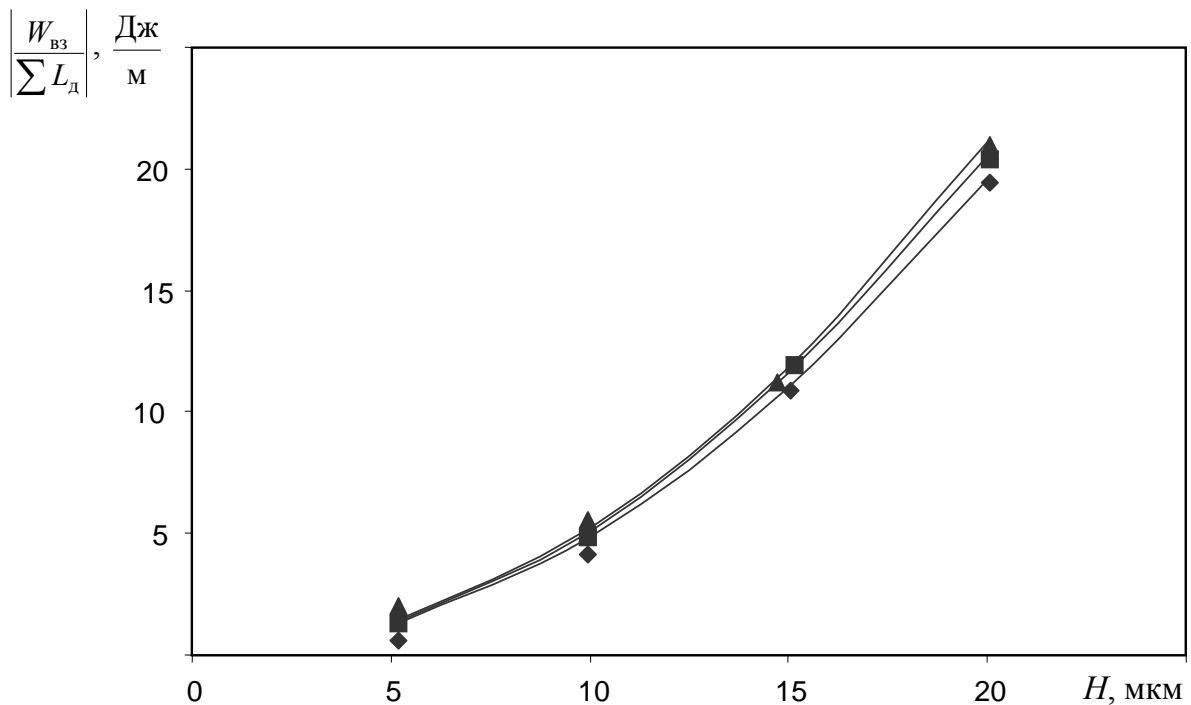


Рис. 2.74. Зависимость энергии взаимодействия дислокаций клиновидного микродвойника от его ширины:  
 ◆ –  $L = 100$  мкм; ■ –  $L = 200$  мкм; ▲ –  $L = 300$  мкм

Доля энергии клиновидного двойника, связанная с наличием у двойникующих дислокаций дефекта упаковки, может быть найдена из формулы [3]:

$$\frac{\gamma}{\sum L_d} = \frac{\mu(b_{кр}^2 + b_v^2) N \sqrt{d^2 + h^2}}{2\pi(1-\nu) d_0} = \frac{\mu(b_{кр}^2 + b_v^2) N}{2\pi(1-\nu) d_0 (N-1)} \sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}, \quad (2.79)$$

где  $d_0$  – равновесная ширина расщепленной дислокации.

В соотношении (2.79) учтено, что число дефектов упаковки у дислокаций границы клиновидного двойника в два раза меньше, чем количество дислокаций на ней.

Осуществляя подстановку (2.65), (2.76) и (2.79) в (2.61), учитывая для (2.65) замену (2.77), получим выражение для полной энергии заклинившего двойника клиновидной формы в виде зависимости

$$\frac{W}{\sum L_d}(L, H).$$

Результаты расчета полной энергии в зависимости от длины клиновидного двойника при заданной его ширине представлены на рис. 2.75 и 2.76.



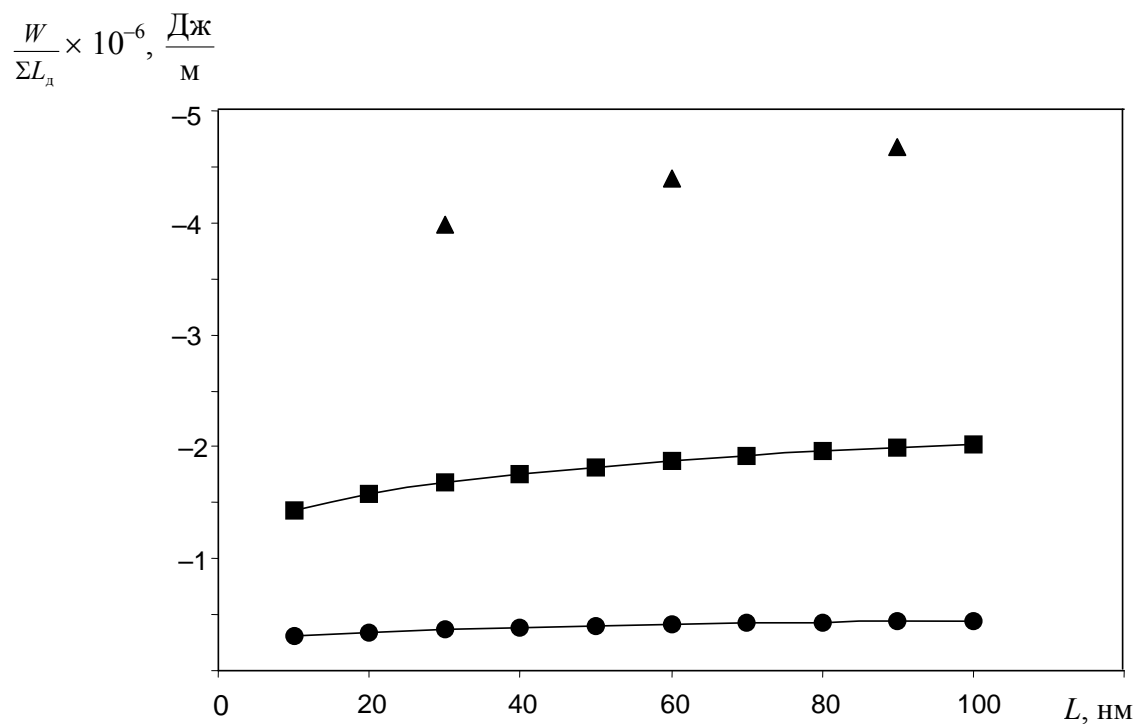


Рис. 2.75. Зависимость полной энергии нанодвойника от его длины: ● –  $H = 5$  нм,  $N = 10$ ; ■ –  $H = 10$  нм,  $N = 20$ ; ▲ –  $H = 15$  нм,  $N = 30$

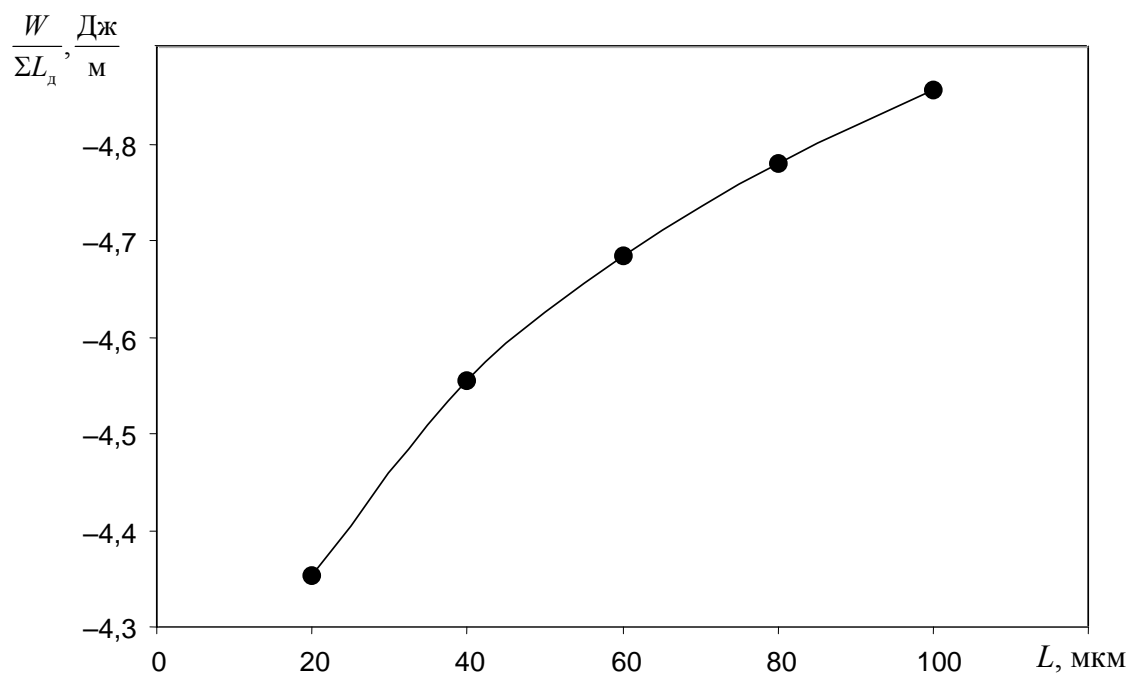


Рис. 2.76. Зависимость полной энергии микродвойника от его длины при ширине ( $H$ ) двойника у устья 10 мкм

Число двойникующих дислокаций на двойниковой границе рассчитывалось по формуле (2.78). При постоянной ширине двойника рост его длины возможен только за счет увеличения расстояния между двойникующими дислокациями. При этом

$$L = Nd . \quad (2.80)$$

Поэтому представленная на рис. 2.75 и 2.76 величина параметра  $L$  в расчетных задачах регулировалась величиной  $d$  при фиксированном  $N$ . Численные значения  $d$  при различных длинах клиновидных нанодвойников заданной ширины у устья приведены в табл. 2.2.

Таблица 2.2

**Связь между длиной нанодвойников и расстоянием между двойникующими дислокациями при различных параметрах ширины двойников у устья**

$L$ , нм	$d$ , нм		
	при $H = 5$ нм	при $H = 10$ нм	при $H = 15$ нм
10	1,0	0,5	–
20	2,0	1,0	–
30	3,0	1,5	1,0
40	4,0	2,0	–
50	5,0	2,5	–
60	6,0	3,0	2,0
70	7,0	3,5	–
80	8,0	4,0	–
90	9,0	4,5	3,0
100	10,0	5,0	–

В случае тонкого двойника плотность двойникующих дислокаций на двойниковых границах определяется из соотношения [4]:

$$\rho = \frac{N}{L} . \quad (2.81)$$

На мезоскопическом уровне, используемом в данной работе, необходим учет ширины двойника. При этом плотность двойникующих дислокаций на двойниковых границах находится как отношение числа двойникующих дислокаций на двойниковой границе к длине двойниковой границы, а не длине двойника, как в (2.81). Тогда получим

$$\rho = \frac{N}{\sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}. \quad (2.82)$$

Расчетные значения плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах для двойника с  $H = 10$  мкм представлены в табл. 2.3, где также представлена связь между длиной микродвойника и расстоянием между двойникующими дислокациями при фиксированной (10 мкм) ширине двойника у устья.

Таблица 2.3

**Связь между длиной двойника с расстоянием между двойникующими дислокациями и их плотностью при  $H = 10$  мкм в кристалле железа**

$L$ , мкм	$d$ , нм	$\rho$ , $10^{-8} \text{ м}^{-1}$
20	1	9,701
40	2	4,961
60	3	3,322
80	4	2,495
100	5	1,998

Расчеты показали, что вклад упругой энергии и энергии дефектов упаковки соизмерим с энергией взаимодействия двойникующих дислокаций лишь в случае нанодвойников, когда количество двойникующих дислокаций на двойниковой границе не превышает 20. В случае микродвойников доминирующим вкладом в суммарную энергию клиновидного двойника обладает энергия взаимодействия двойникующих дислокаций, которая по модулю превосходит упругую энергию на пять, а энергию дефектов упаковки – на шесть порядков. Поэтому нельзя согласиться с мнением о том, что энергия дефектов упаковки полностью определяет процесс двойникования кристаллов. Данная энергия всегда ниже энергии взаимодействия двойникующих дислокаций и вносит соизмеримый вклад лишь на этапах зарождения двойников. Процессы развития двойников существенным образом контролируются взаимодействием двойникующих дислокаций.

Как видно из рис. 2.75 и 2.76, с ростом длины двойника при фиксированной его ширине (т. е. при уменьшении плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах, но при фиксирован-

ном количестве двойникующих дислокаций) модуль полной энергии двойника клиновидной формы растет. Скорость роста этой энергии выше в случае малых длин двойников при фиксированной их ширине. Это указывает на то, что интенсивности увеличения энергии двойника способствует рост плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах. Особенно это заметно при сопоставлении результатов, представленных на рис. 2.76 и в табл. 2.3.

Увеличение модуля полной энергии клиновидного двойника при увеличении длины двойника и уменьшении плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах при фиксированном количестве двойникующих дислокаций указывает на то, что плотность двойникующих дислокаций не всегда является определяющей в процессах развития двойников. Полученные результаты показывают высокую роль в развитии двойников дальнедействующих полей напряжений двойникующих дислокаций, обеспечивающих высокую энергию их взаимодействия.

Таким образом, с использованием дислокационной мезоскопической модели произведен расчет полной энергии клиновидного двойника. Показано, что на начальном этапе развития двойника и его зарождении важную роль играют упругая энергия двойника, энергия взаимодействия и энергия дефектов упаковки. В процессе развития микродвойника доминирующую роль играет характер взаимодействия двойникующих дислокаций. С ростом длины двойника при фиксированной его ширине модуль полной энергии клиновидного двойника растет. Это указывает на важную роль дальнедействующих полей напряжений двойникующих дислокаций в процессе развития клиновидных двойников.

## **2.7. Условие равновесия клиновидного двойника на мезоскопическом уровне при отсутствии внешних напряжений**

Определение равновесных параметров двойников является важной задачей, решение которой позволит прогнозировать развитие пластической деформации двойникованием при различных условиях деформирования двойникующихся материалов [56]. Величина напряжений, локализованных на двойниковых границах, зависит от плотности двойникующих дислокаций, которая в свою очередь определяется

числом двойникующих дислокаций и расстоянием между ними [2]. Большая локализация напряжений на двойниковых границах приводит к образованию трещин, что способствует активизации процессов разрушения двойникующихся материалов [57]. Поэтому с практической точки зрения определение равновесной плотности двойникующих дислокаций и равновесного расстояния между ними при заданных внешних напряжениях и известных силах внутреннего трения 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.

На рис. 2.77 схематически представлен клиновидный двойник, направление развития которого совпадает с положительным направлением оси  $OX$ . Условие равновесия такого двойника будем искать, исходя из необходимости в этом случае равенства нулю сил, действующих на вершинную дислокацию клиновидного двойника. Пусть вершина двойника находится в точке с координатами  $x = L$ ,  $y = 0$ . В этой точке на вершинную двойникующую дислокацию действует сила  $F$  со стороны двойникующих дислокаций границ двойника и сила  $S$  сопротивления движению вершинной дислокации вдоль положительного направления оси  $OX$  (рис. 2.77). В этом случае справедливо соотношение

$$F - S = 0. \quad (2.83)$$

С учетом результатов работы [20] данное соотношение может быть представлено в виде

$$b_{кр} \sigma_{xy}(L, 0) + b_{в} \sigma_{yz}(L, 0) - S(L, 0) = 0, \quad (2.84)$$

где  $\sigma_{xy}(L, 0)$  и  $\sigma_{yz}(L, 0)$  – сдвиговые компоненты тензора напряжений, определяемые по формулам:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(L, 0) = & \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{(L - nd_1)[(L - nd_1)^2 - (nh_1)^2]}{[(L - nd_1)^2 + (nh_1)^2]^2} + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(L - md_2)[(L - md_2)^2 - (mh_2)^2]}{[(L - md_2)^2 + (mh_2)^2]^2} \right\}; \end{aligned} \quad (2.85)$$

$$\sigma_{yz}(L,0) = -\frac{\mu b_B}{2\pi} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{L - nd_1}{(L - nd_1)^2 + (nh_1)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{L - md_2}{(L - md_2)^2 + (mh_2)^2} \right\}. \quad (2.86)$$

Здесь  $d_1, d_2$  и  $h_1, h_2$  – проекции соответственно на ось  $OX$  и  $OY$  отрезка  $r$ , соединяющего две соседние дислокации границы двойника (рис. 2.77). Индексы 1 и 2 указывают принадлежность параметра к противоположным границам двойника.

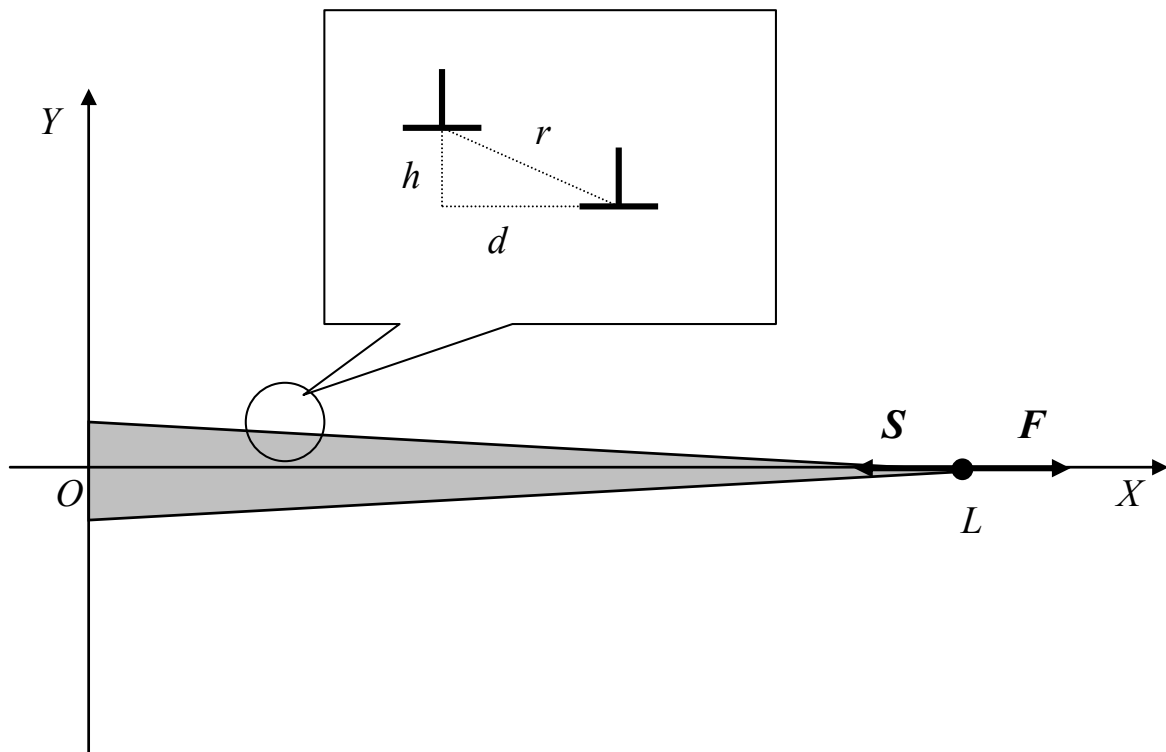


Рис. 2.77. Схематическое изображение сил, действующих на вершинную дислокацию клиновидного двойника

В тех случаях, когда число двойникующих дислокаций на каждой двойниковой границе одинаково ( $N = M$ ) и одинаково расстояние между двойникующими дислокациями ( $d_1 = d_2 = d$ ;  $h_1 = h_2 = h$ ), соотношения (2.85) и (2.86) принимают вид

$$\sigma_{xy}(L,0) = \frac{\mu b_{кр}}{\pi(1-\nu)} \sum_{n=1}^N \frac{(L - nd)[(L - nd)^2 - (nh)^2]}{[(L - nd)^2 + (nh)^2]^2}; \quad (2.87)$$

$$\sigma_{yz}(L,0) = -\frac{\mu b_B}{\pi} \sum_{n=1}^N \frac{L - nd}{(L - nd)^2 + (nh)^2}. \quad (2.88)$$

При этом в (2.85) и (2.86) индекс суммирования  $m$  был заменен на индекс  $n$ .

Для перехода от мезоскопических параметров  $d$  и  $h$  к имеющим важное практическое значение макроскопическим параметрам  $L$  и  $H$  (где  $H$  – ширина двойника у устья) воспользуемся следующими соотношениями:

$$d = L/N; \quad (2.89)$$

$$h = H/2N. \quad (2.90)$$

Тогда из (2.84), (2.87) и (2.88) получим

$$\frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{\pi(1-\nu)} \sum_{n=1}^N \frac{NL(N-n) \left[ L^2(N-n)^2 - \frac{1}{4}n^2H^2 \right]}{\left[ L^2(N-n)^2 + \frac{1}{4}n^2H^2 \right]^2} - \frac{\mu b_{\text{в}}^2}{\pi} \sum_{n=1}^N \frac{NL(N-n)}{L^2(N-n)^2 + \frac{1}{4}n^2H^2} = S. \quad (2.91)$$

Наличие знака минус во втором слагаемом (2.91) позволяет предположить наличие равновесной длины и ширины двойника при  $S = 0$ . Это означает, что равновесная форма клиновидного двойника может обеспечиваться только силами междислокационного взаимодействия, предполагая наличие отрицательных значений  $S$ , что может трактоваться необходимостью действия внешних сил для обеспечения равновесной формы двойника. Этот случай в данной работе рассматривать не будем.

Учитывая, что

$$N = H/2a, \quad (2.92)$$

где  $a$  – межатомное расстояние в плоскости, перпендикулярной плоскости двойникования, принимая для железа  $a = 0,25$  нм;  $\mu = 81$  ГПа;  $\nu = 0,29$ ;  $b_{\text{в}} = b_{\text{кр}} = 0,124$  нм [3]; для  $H$ , равного 5, 10, 15 и 20 мкм, получим зависимости, представленные на рис. 2.78.

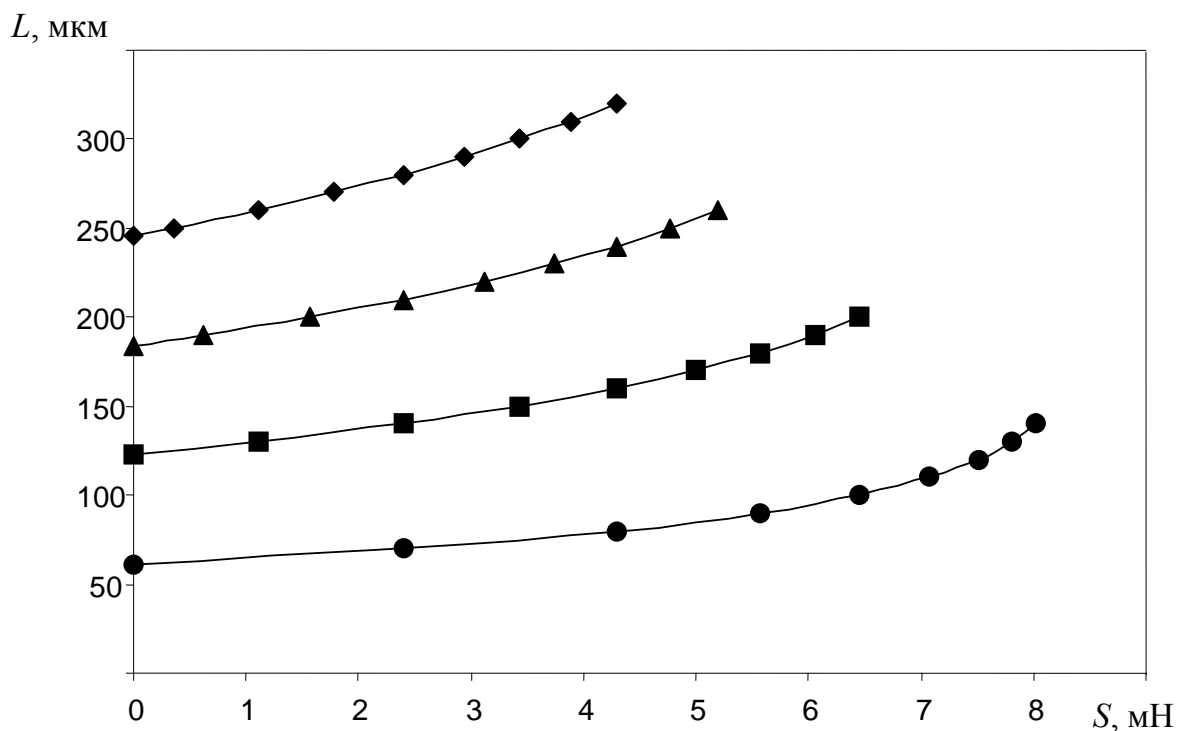


Рис. 2.78. Зависимость длины клиновидного двойника от силы  $S$  в случае равного количества двойникующих дислокаций на двойниковых границах: ● –  $H = 5$  мкм; ■ –  $H = 10$  мкм; ▲ –  $H = 15$  мкм; ◆ –  $H = 20$  мкм

Из рис. 2.78 видно, что для достижения большей равновесной длины клиновидного двойника необходимо более высокая по величине сила  $S$ . При  $S = 0$  с ростом ширины двойника у устья увеличивается и равновесная длина двойника. С увеличением  $S$  увеличивается скорость роста длины двойника при фиксированной его ширине. Это указывает на то, что с увеличением длины двойника возрастает сила отталкивания между двойникующими дислокациями. Данный вывод согласуется с результатами расчетов энергии взаимодействия двойникующих дислокаций, представленными на рис. 2.72 и 2.73. Как видно из этих рисунков, с ростом длины двойника растет модуль энергии взаимодействия двойникующих дислокаций, а следовательно, растет сила отталкивания двойникующих дислокаций, что приводит к увеличению скорости роста равновесной длины двойника при увеличении  $S$ . Это указывает на то, что в сторону действия силы  $F$  (рис. 2.77) действует дополнительная сила со стороны сил междислокационного взаимодействия дислокаций двойниковых границ.



В случае неравного количества двойникующих дислокаций на двойниковых границах двойника ( $N \neq M$ ) имеют место следующие соотношения:

$$L = Nd_1 = Md_2; \quad (2.93)$$

$$H = Nh_1 + Mh_2. \quad (2.94)$$

При этом (2.84) примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{(L - nd_1)[(L - nd_1)^2 - (nh_1)^2]}{[(L - nd_1)^2 + (nh_1)^2]^2} + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(L - md_2)[(L - md_2)^2 - (mh_2)^2]}{[(L - md_2)^2 + (mh_2)^2]^2} \right\} - \\ & - \frac{\mu b_{\text{в}}^2}{2\pi} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{L - nd_1}{(L - nd_1)^2 + (nh_1)^2} + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^M \frac{L - md_2}{(L - md_2)^2 + (mh_2)^2} \right\} = S. \quad (2.95) \end{aligned}$$

Для перехода в (2.95) к макроскопическим параметрам введем равенство

$$d_1 = \alpha d_2. \quad (2.96)$$

Тогда из (2.92) и (2.95) получим

$$M = \alpha N; \quad (2.97)$$

$$d_1 = L/N, \quad d_2 = L/\alpha N. \quad (2.98)$$

Так как расстояние между двойникующими дислокациями вдоль оси  $OY$  одинаково ( $h_1 = h_2 = h$ ) и равно межатомному расстоянию в плоскости, перпендикулярной направлению двойникования, то из (2.94) получим

$$h = \frac{H}{(1 + \alpha)N}. \quad (2.99)$$

Подставляя (2.98) и (2.99) в (2.95), окончательно получим

$$\begin{aligned} & \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{NL(N-n) \left[ L^2(N-n)^2 - \left( \frac{nH}{1+\alpha} \right)^2 \right]}{\left[ L^2(N-n)^2 + \left( \frac{nH}{1+\alpha} \right)^2 \right]^2} + \right. \\ & \left. + \sum_{n=1}^{\alpha N} \frac{\frac{NL}{\alpha}(\alpha N - n) \left[ \frac{L^2}{\alpha^2}(\alpha N - n)^2 - \left( \frac{nH}{1+\alpha} \right)^2 \right]}{\left[ \frac{L^2}{\alpha^2}(\alpha N - n)^2 + \left( \frac{nH}{1+\alpha} \right)^2 \right]^2} \right\} - \\ & - \frac{\mu b_{\text{в}}^2}{2\pi} \left\{ \sum_{n=1}^N \frac{NL(N-n)}{L^2(N-n)^2 + \left( \frac{nH}{1+\alpha} \right)^2} + \sum_{n=1}^{\alpha N} \frac{\frac{NL}{\alpha}(\alpha N - n)}{\frac{L^2}{\alpha^2}(\alpha N - n)^2 + \left( \frac{nH}{1+\alpha} \right)^2} \right\} = S. \quad (2.100) \end{aligned}$$

На рис. 2.79 представлены результаты расчетов для двойника в железе шириной у устья 10 мкм в соответствии с выражением (2.100) при  $\alpha$ , равном 0,5; 1,5 и 2. Случай, где  $\alpha = 1$  при  $H = 10$  мкм, показан на рис. 2.78. Из рис. 2.79 видно, что при  $S = 0$  равновесная длина двойника мало зависит от  $\alpha$  и определяется числом двойникующих дислокаций на двойниковых границах, зависящим от ширины двойника у устья.

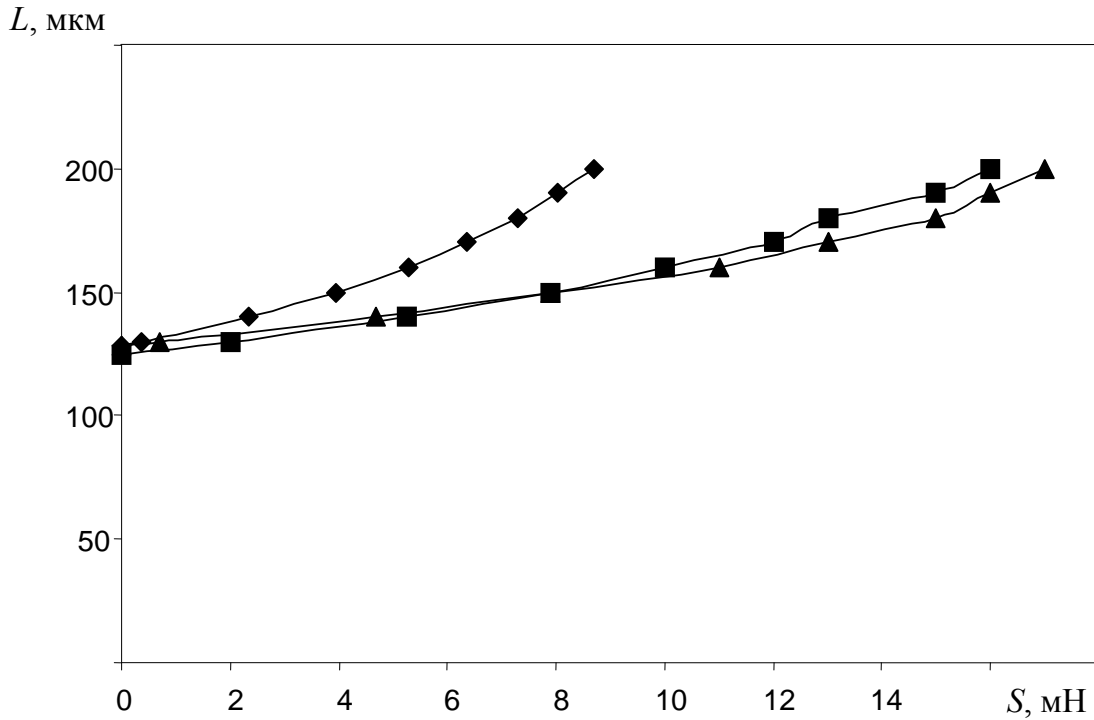


Рис. 2.79. Зависимость длины клиновидного двойника от силы  $S$  в случае разного количества двойникующих дислокаций на двойниковых границах при  $H = 10$  мкм:  
 ◆ –  $\alpha = 0,5$ ; ■ –  $\alpha = 1,5$ ; ▲ –  $\alpha = 2$

## 2.8. Мезоскопическая дислокационная модель развивающегося клиновидного двойника

В качестве исходных данных для решения задачи по расчету напряжений у развивающегося клиновидного двойника, в рамках дислокационной модели двойника, будем использовать известные соотношения для расчета полей напряжений у движущейся дислокации [40]:

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b_{\text{кр}} c_t^2}{2\pi v^2} \left[ \frac{(1 + \gamma_t^2)^2 (x - vt)}{\gamma_t [(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2]} - \frac{4\gamma_t (x - vt)}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2} \right],$$

$$\sigma_{xx} = \frac{b_{\text{кр}} \gamma c_t^2}{\pi v^2} \left[ \frac{\gamma_t (\lambda + 2\mu - \gamma_t^2 \lambda)}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2} - \frac{\mu \gamma_t (1 + \gamma_t^2)}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2} \right],$$

$$\sigma_{yy} = \frac{b_{\text{кр}} \gamma c_t^2}{\pi v^2} \left[ \frac{\gamma_t (\lambda - \gamma_t^2 (\lambda + 2\mu))}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2} + \frac{\mu \gamma_t (1 + \gamma_t^2)}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2} \right],$$

$$\sigma_{zz} = \nu (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}),$$

$$\begin{aligned}\sigma_{xz} &= -\frac{\mu b_B}{2\pi} \frac{\gamma_t y}{(x-vt)^2 + \gamma_t^2 y^2}, \\ \sigma_{yz} &= \frac{\mu b_B}{2\pi} \frac{\gamma_t (x-vt)}{(x-vt)^2 + \gamma_t^2 y^2},\end{aligned}\quad (2.101)$$

где  $\mu$  – модуль сдвига;  $\nu$  – коэффициент Пуассона;  $b_{кр}$  и  $b_B$  – краевая и винтовая составляющие вектора Бюргера частичной двойникующей дислокации;  $v$  – скорость движения дислокации;  $t$  – время;  $c_t$  и  $c_l$  – скорости распространения поперечной и продольной звуковых волн, определяемые по формулам [40]:

$$c_t = \left(\frac{\mu}{\rho_0}\right)^{1/2}, \quad c_l = \left(\frac{\lambda + 2\mu}{\rho_0}\right)^{1/2}, \quad (2.102)$$

где  $\rho_0$  – плотность среды, в которой движется дислокация, а  $c_t$  и  $c_l$  связаны с  $\gamma_t$  и  $\gamma_l$  соотношениями [40]:

$$\gamma_t = \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)^{1/2}, \quad \gamma_l = \left(1 - \frac{v^2}{c_l^2}\right)^{1/2}. \quad (2.103)$$

На рис. 2.80 схематически представлен клиновидный двойник в виде совокупности двойникующих дислокаций. Пусть краевая и винтовая составляющие двойникующих дислокаций будут направлены так, как это показано на рис. 2.80. Для такой движущейся с постоянной скоростью системы дислокаций можно записать следующие соотношения для определения компонент тензора напряжений:

$$\begin{aligned}\sigma_{xy}(x, y) &= \frac{\mu b_{кр} c_t^2}{2\pi v^2} \left\{ \sum_{n=0}^N \left[ \frac{(1 + \gamma_t^2)^2 (x - L + nd_1 - vt)}{\gamma_t [(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2]} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{4\gamma_l (x - L + nd_1 - vt)}{(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_l^2 (y + nh_1)^2} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^M \left[ \frac{(1 + \gamma_t^2)^2 (x - L + md_2 - vt)}{\gamma_t [(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y - mh_2)^2]} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{4\gamma_l (x - L + md_2 - vt)}{(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_l^2 (y - mh_2)^2} \right] \right\},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}(x, y) &= \frac{b_{\text{кр}} c_t^2}{\pi v^2} \left\{ \sum_{n=0}^N \left[ \frac{\gamma_t (\lambda + 2\mu - \gamma_t^2 \lambda) (y + nh_1)}{(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2} - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\mu \gamma_t (1 + \gamma_t^2) (y + nh_1)}{(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2} \right] + \sum_{m=1}^M \left[ \frac{\gamma_t (\lambda + 2\mu - \gamma_t^2 \lambda) (y - mh_2)}{(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y - mh_2)^2} - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\mu \gamma_t (1 + \gamma_t^2) (y - mh_2)}{(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y - mh_2)^2} \right] \right\}, \\
\sigma_{yy}(x, y) &= \frac{b_{\text{кр}} c_t^2}{\pi v^2} \left\{ \sum_{n=0}^N \left[ \frac{\gamma_t (\lambda - \gamma_t^2 (\lambda + 2\mu)) (y + nh_1)}{(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\mu \gamma_t (1 + \gamma_t^2) (y + nh_1)}{(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2} \right] + \sum_{m=1}^M \left[ \frac{\gamma_t (\lambda - \gamma_t^2 (\lambda + 2\mu)) (y - mh_2)}{(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y - mh_2)^2} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\mu \gamma_t (1 + \gamma_t^2) (y - mh_2)}{(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y - mh_2)^2} \right] \right\}, \\
\sigma_{zz}(x, y) &= v(\sigma_{xx}(x, y) + \sigma_{yy}(x, y)), \\
\sigma_{xz}(x, y) &= -\frac{\mu b_B}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\gamma_t (y + nh_1)}{(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{\gamma_t (y - mh_2)}{(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y - mh_2)^2} \right\}, \\
\sigma_{yz}(x, y) &= \frac{\mu b_B}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\gamma_t (x - L + nd_1 - vt)}{(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{\gamma_t (x - L + md_2 - vt)}{(x - L + md_2 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y - mh_2)^2} \right\}, \tag{2.104}
\end{aligned}$$

где  $N$  и  $M$  – число двойникующих дислокаций на каждой из двойниковых границ;  $d_i$  и  $h_i$  – проекции соответственно на ось  $OX$  и  $OY$  отрезка, соединяющего две соседние двойникующие дислокации на одной из двойниковых границ (индекс  $i$  принимает значение 1 или 2 и определяет принадлежность дислокации той или иной двойниковой границе);  $L$  – длина двойника.

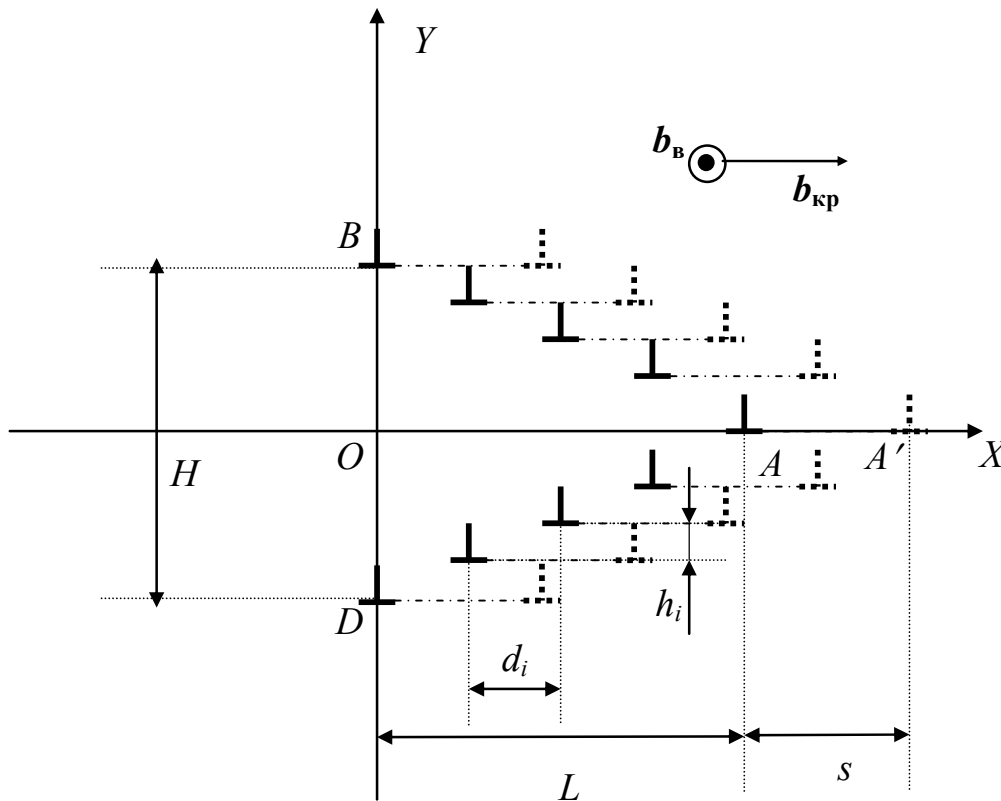
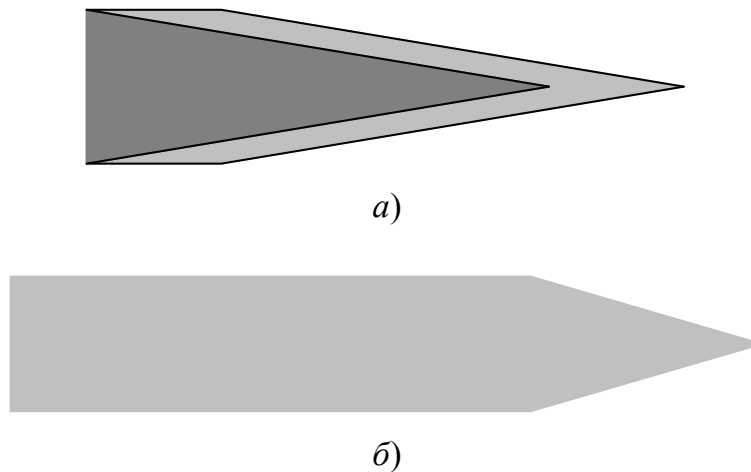


Рис. 2.80. Схематическое изображение клиновидного двойника в виде совокупности двойникующих дислокаций

Простейшей задачей, которую позволяют решать соотношения (2.104), является расчет напряжений у развивающегося двойника, у которого прекратилась генерация двойникующих дислокаций. При этом в (2.104)  $N$  и  $M$  остаются постоянными в любой, отличный от нуля момент времени (если за нулевое значение принято время начала развития двойника). Схематически данный процесс представлен на рис. 2.81. В эксперименте такой случай наблюдается, например, при пропускании через электропроводящий кристалл с двойниками импульсного электрического тока [36], [38], [53], [54], [58]. При этом электрический ток приводит к увеличению длины двойников, что может происходить и без генерации новых двойникующих дислокаций.

В этом случае, как показали расчеты, проведенные в данной работе, фронт напряжений, концентраторами которых выступают двойниковые границы, мигрирует вместе с движущимися двойникующими дислокациями.



*Рис. 2.81.* Схематическое изображение процесса роста клиновидного двойника в условиях отсутствия генерации дополнительных двойникующих дислокаций:  
*а* – исходное состояние и начальный этап роста двойника;  
*б* – конечная стадия развития двойника

В рассмотренном примере увеличения длины двойников под действием электрического тока скорость движения двойникующих дислокаций, как правило, невысокая. Поэтому фронт напряжений перемещается за дислокациями без существенной трансформации своей конфигурации. Однако в ситуации, когда под действием внешних напряжений была сгенерирована лишь порция двойникующих дислокаций, а дальнейший рост двойника обеспечивался лишь движением этого количества дислокаций, скорость двойникования соизмерима со скоростью звука в кристалле [2]. В этом случае можно принять допущение  $v \approx c_l \approx c_t$ . Тогда из (2.103) следует, что  $\gamma_l \rightarrow 0$  и  $\gamma_t \rightarrow 0$ . Из соотношений (2.104) следует, что у движущегося с такой скоростью двойника напряжения значительно возрастают. При остановке двойника происходит релаксация энергии данных напряжений, что часто сопровождается звуковыми сигналами, свойственными процессу двойникования.

В эксперименте чаще реализуется ситуация, когда рост двойника сопровождается генерацией двойникующих дислокаций, что проявляется в увеличении ширины двойника [12]–[14]. За время  $t_r$  гене-

рации двух двойникующих дислокаций (по одной на каждой из двойниковых границ) длина двойника возрастет на величину  $s$  (рис. 2.80). В этом случае очевидно

$$s = vt_r. \quad (2.105)$$

Изменение числа двойникующих дислокаций может быть задано соотношением

$$N(t) = \left( N_0 + D\left(\frac{t}{t_r}\right) \right), \quad (2.106)$$

где  $N_0$  – число двойникующих дислокаций на двойниковых границах до начала повторного развития двойника;  $D\left(\frac{t}{t_r}\right)$  – так называемая возрастающая функция антье [59] (рис. 2.82).

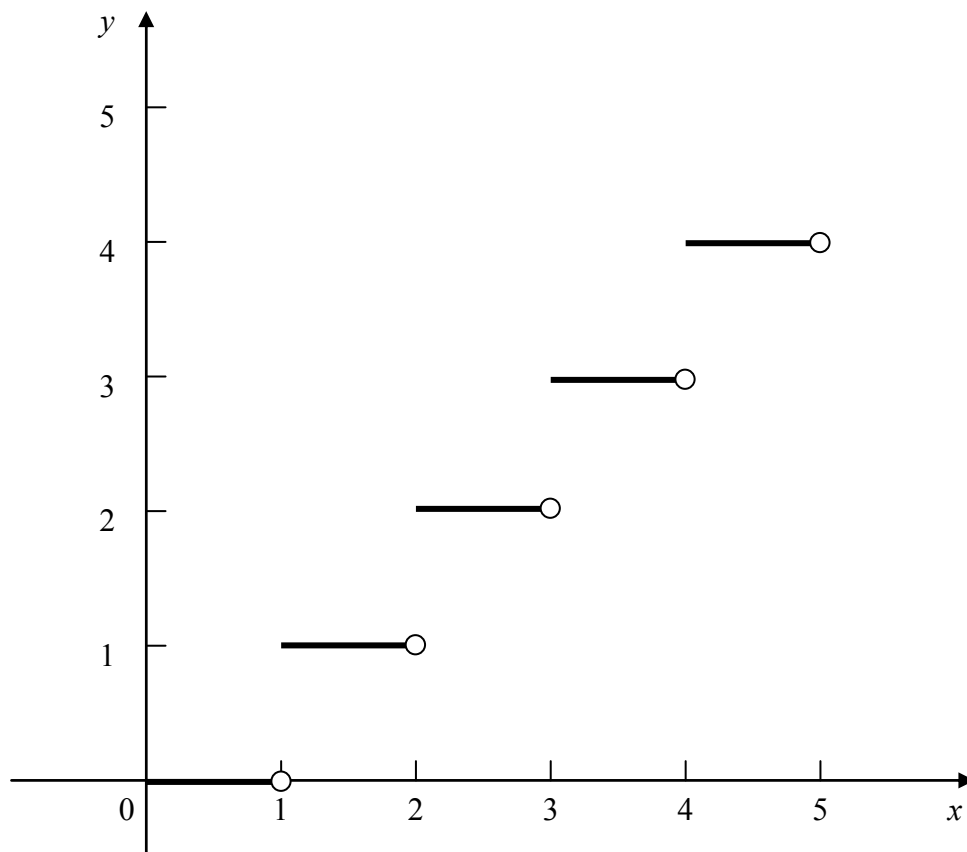


Рис. 2.82. Вид функции, описывающей рост числа двойникующих дислокаций



В этом случае развитие двойника будет происходить по схеме, представленной на рис. 2.83.

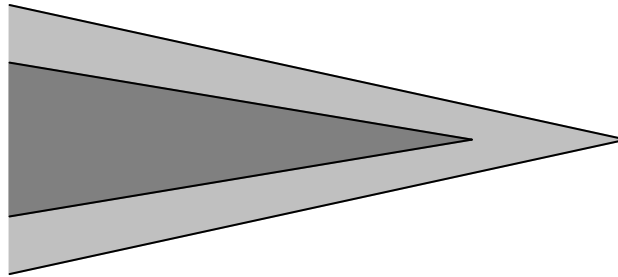


Рис. 2.83. Схематическое изображение роста клиновидного двойника с одновременной генерацией двойнивающих дислокаций (темный цвет – начальная стадия; светлый – конечная)

Так как в большинстве случаев процесс развития двойников является высокоскоростным, то зависимость  $N(t)$  можно задать непрерывной в виде

$$N(t) = v_r t. \quad (2.107)$$

Здесь  $v_r$  – скорость генерации двойнивающих дислокаций, определяющая количество двойнивающих дислокаций, генерируемых в единицу времени. Эта скорость связана со скоростью роста ширины двойника или с его нормальной скоростью ( $v_n$ ), направленной перпендикулярно движению вершины двойника, исходя из следующих соотношений

$$v_n = \frac{H}{t} = \frac{Nh_1 + Mh_2}{t} = 2h \frac{N}{t} = 2hv_r. \quad (2.108)$$

Здесь принималось:  $h_1 = h_2 = h$ ,  $N = M$ .

Расчеты показали, что фронт высокого уровня напряжений в этом случае не только увлекается за движущейся вершиной двойника, но и сохраняет высокий уровень и у устья двойника.

# Глава 3

## МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИСЛОКАЦИОННАЯ МО- ДЕЛЬ ЗАКЛИНИВШИХСЯ ДВОЙ- НИКОВ КЛИНОВИДНОЙ ФОРМЫ

Приведенная в работе [4] дислокационная модель механического двойникового обладает существенным недостатком, который заключается в том, что модель позволяет рассматривать механизм двойникового кристаллов лишь в приближении тонкого двойника, когда его границы представляются как простое линейное скопление дислокаций в виде дислокационной цепочки. При этом нет возможности рассматривать поля напряжений внутри двойника и изучать роль формы двойниковой границы на напряженное состояние и физические процессы в областях кристалла, приближенных к двойниковым границам.

В работах [25], [27]–[32] двойниковая граница рассматривалась на таком масштабном уровне, на котором возможен учет расстояния между двойникующими дислокациями. Однако в этом случае возникают трудности моделирования далекодействующих напряжений у наиболее часто встречающихся на эксперименте двойников, так как затруднительно суммирование напряжений от большого числа дислокаций, составляющих двойниковую границу. Частично этого недостатка лишена модель, приведенная в [26], так как в ней осуществлен

переход от дискретного к непрерывному распределению дислокаций вдоль двойниковой границы. Использование моделей, разрабатываемых в [25], [27]–[32], также затруднительно и в случае двойников со сложной формой их границ.

Таким образом, в настоящее время в дислокационной теории двойникования существует проблема разработки такой модели двойника, которая при непрерывном распределении двойникоующих дислокаций вдоль двойниковых границ с заданной плотностью распределения не ограничивалась бы рамками приближения тонкого двойника. Решение этой проблемы представляется актуальным и целесообразным.

### 3.1. Метод расчета полей напряжений, смещений и деформаций у клиновидного двойника на основании макроскопической дислокационной модели

Рассмотрим клиновидный двойник, находящийся вдали от поверхности двойникоующегося материала. Такие двойники обычно зарождаются у концентратора напряжений, который в нашем случае пусть находится в точке  $O$  (рис. 3.1). Не учитываются напряжения, которые создает данный концентратор напряжений, рассмотрим только те напряжения, которые создает сам двойник. В общем случае в плоскости  $XOY$  форма границ клиновидного двойника описывается функциями  $f_1(x_0)$  и  $f_2(x_0)$  (рис. 3.1). Пусть дислокации на данных границах параллельны друг другу и оси  $OZ$ , перпендикулярной плоскости рис. 3.1. Плотность двойникоующих дислокаций на границах клиновидного двойника равна  $\rho_1$  и  $\rho_2$ . Тогда напряжения, создаваемые рассматриваемым клиновидным двойником, могут быть определены из формулы [26]:

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(2)}(x, y), \quad (3.1)$$

где

$$\sigma_{ij}^{(1)} = \int_{L_{AB}} \rho_1 \sigma_{ij}^{(1,0)} ds; \quad (3.2)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)} = \int_{L_{CB}} \rho_2 \sigma_{ij}^{(2,0)} ds. \quad (3.3)$$

Здесь  $\sigma_{ij}^{(1)}$  и  $\sigma_{ij}^{(2)}$  – напряжения, создаваемые каждой из границ клиновидного двойника и определяемые с помощью криволинейного интеграла вдоль профилей двойниковых границ  $L_{AB}$  и  $L_{CB}$  соответственно (рис. 3.1);  $\sigma_{ij}^{(1,0)}$  и  $\sigma_{ij}^{(2,0)}$  – напряжения, создаваемые на двойниковых границах отдельными дислокациями.

Криволинейные интегралы (3.2) и (3.3) сводятся к определенным интегралам типа [26]:

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) dx_0 ; \quad (3.4)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0) dx_0 , \quad (3.5)$$

где  $L$  – длина двойника, равная длине отрезка  $OB$  (рис. 3.1).

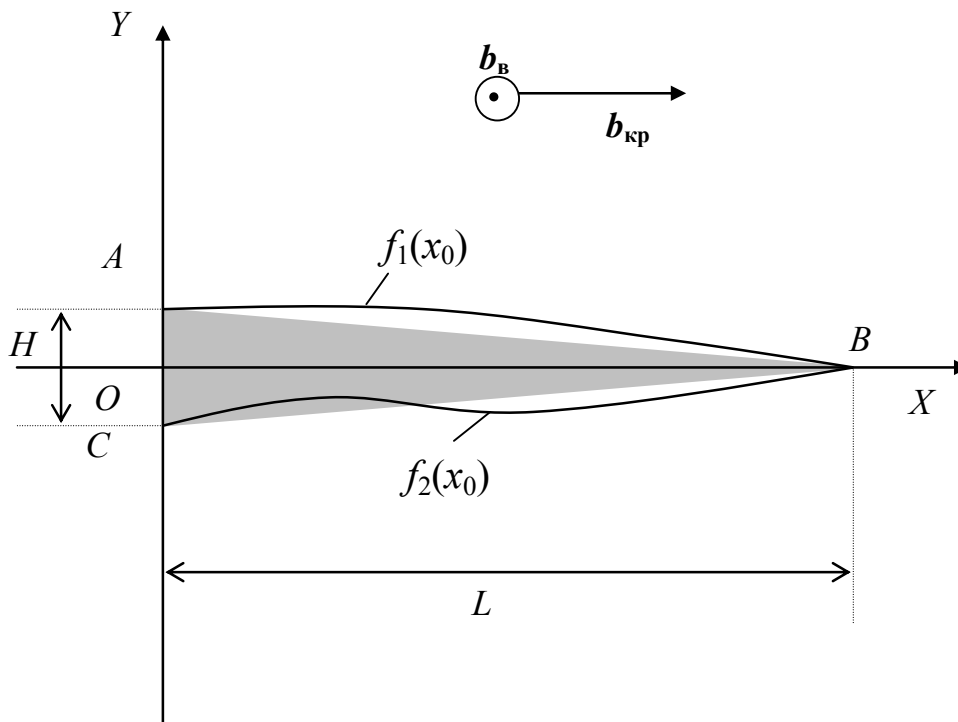


Рис. 3.1. Схематическое изображение клиновидного двойника и направления компонент вектора Бюргерса двойникующих дислокаций

Выражения (3.4) и (3.5) в совокупности с (3.1) полностью определяют напряжения, создаваемые клиновидным двойником с формами границ, описываемых функциями  $f_1(x_0)$  и  $f_2(x_0)$  на масштабном

уровне, когда распределение двойникующих дислокаций на двойниковых границах можно считать непрерывным с плотностями  $\rho_1(x_0)$  и  $\rho_2(x_0)$ .

Напряжения, создаваемые единичной двойникующей дислокацией, находящейся на одной или другой двойниковой границе соответственно, при условии нахождения двойника вдали от поверхности, могут быть определены из соотношений:

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}^{(1,0)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y-f_1(x_0))[3(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]^2}, \\
\sigma_{yy}^{(1,0)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y-f_1(x_0))[(x-x_0)^2-(y-f_1(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]^2}, \\
\sigma_{xy}^{(1,0)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x-x_0)[(x-x_0)^2-(y-f_1(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]^2}, \\
\sigma_{zz}^{(1,0)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2}, \\
\sigma_{zx}^{(1,0)} &= -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2}, \\
\sigma_{zy}^{(1,0)} &= \frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2}; \tag{3.6} \\
\sigma_{xx}^{(2,0)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y-f_2(x_0))[3(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]^2}, \\
\sigma_{yy}^{(2,0)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y-f_2(x_0))[(x-x_0)^2-(y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]^2}, \\
\sigma_{xy}^{(2,0)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x-x_0)[(x-x_0)^2-(y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]^2}, \\
\sigma_{zz}^{(2,0)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y-f_2(x_0)}{(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{zx}^{(2,0)} &= -\frac{\mu b_B}{2\pi} \frac{y - f_2(x_0)}{(x - x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2}, \\ \sigma_{zy}^{(2,0)} &= \frac{\mu b_B}{2\pi} \frac{x - x_0}{(x - x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2}.\end{aligned}\quad (3.7)$$

Здесь принималась представленная на рис. 3.1 ориентировка винтовой и краевой составляющих вектора Бюргерса.

Рассмотрим случай, когда  $\rho_1 = \rho_2 = \rho = \text{const}$ . Примем также допущение, касающееся формы границ двойника. Пусть границы двойника будут прямолинейными и двойник будет иметь форму равнобедренного треугольника  $ABC$  (рис. 3.1) с шириной  $u$  устья (длина отрезка  $AC$ ), равной  $H$ . Такие двойники часто встречаются в эксперименте (рис. 2.19) и, как правило, характеризуют начальную стадию развития клиновидных двойников в бездефектной области кристалла. Данные двойники также могут образовываться у концентратора напряжений в объеме материала, например, при пропускании через него импульса электрического тока, приводящего к разрядке напряжений у концентратора напряжений путем образования двойника [53]. В рассматриваемом случае будем иметь [60], [61]:

$$f_1(x_0) = \frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L}\right); \quad (3.8)$$

$$f_2(x_0) = -\frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L}\right). \quad (3.9)$$

При этом выражения (3.4) и (3.5) примут вид

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x, y) = \rho \sqrt{1 + \left(\frac{H}{2L}\right)^2} \int_0^L \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) dx_0; \quad (3.10)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x, y) = \rho \sqrt{1 + \left(\frac{H}{2L}\right)^2} \int_0^L \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0) dx_0. \quad (3.11)$$

Результаты расчетов представлены на рис. 3.2–3.6. При этом для удобства вычислялись безразмерные величины  $\eta_{ij}(x, y) = \frac{\sigma_{ij}(x, y)}{\sigma_{ij}^{(0)}}$ , где

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \left(\rho A_{ij} \sqrt{1 + (H/2L)^2}\right) / L. \quad (3.12)$$

Распределение  $\eta_{ij}(x, y)$  имеет такой же вид, как и  $\sigma_{ij}(x, y)$ . Различие заключается в численных значениях. Однако случай  $\eta_{ij}(x, y)$  является более общим для широкого класса двойнящихся материалов и не требующим учета численных значений констант  $A_{ij}$ , которые для физического анализа не дают существенной информации.

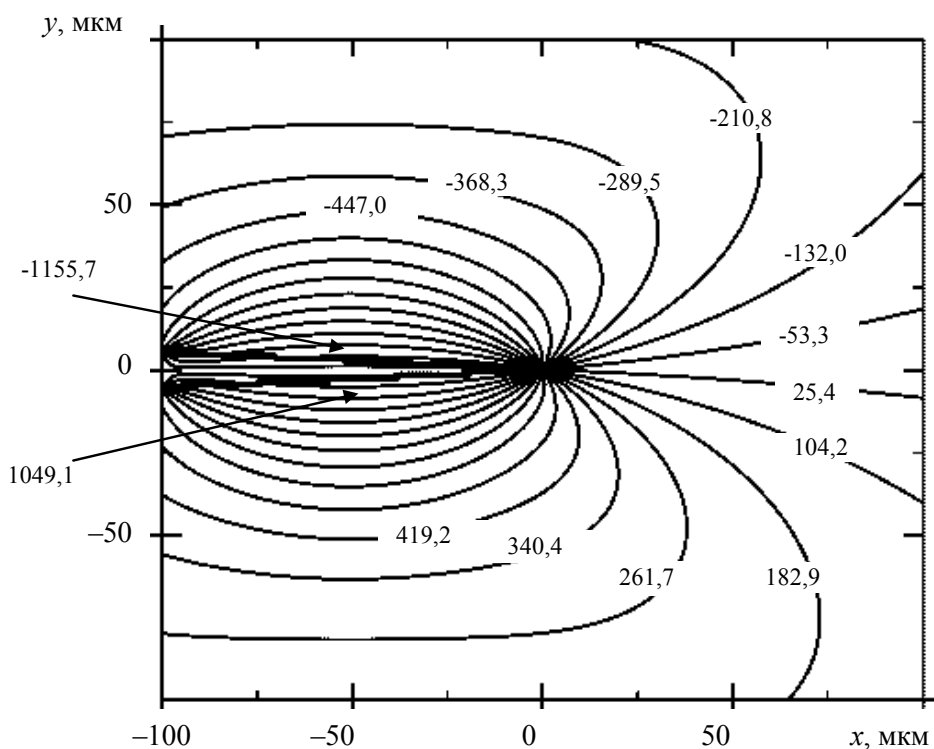


Рис. 3.2. Распределение  $\eta_{xx}(x, y)$  у клиновидного двойника, полученное на основании макроскопической дислокационной модели

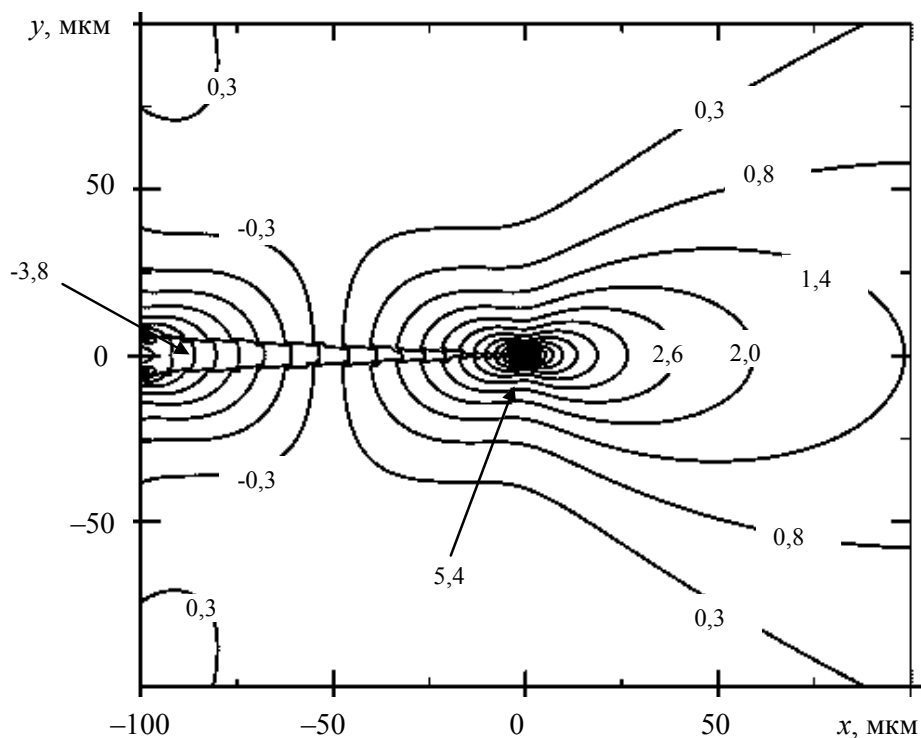


Рис. 3.3. Распределение  $\eta_{xy}(x, y)$  у клиновидного двойника, полученное на основании макропической дислокационной модели

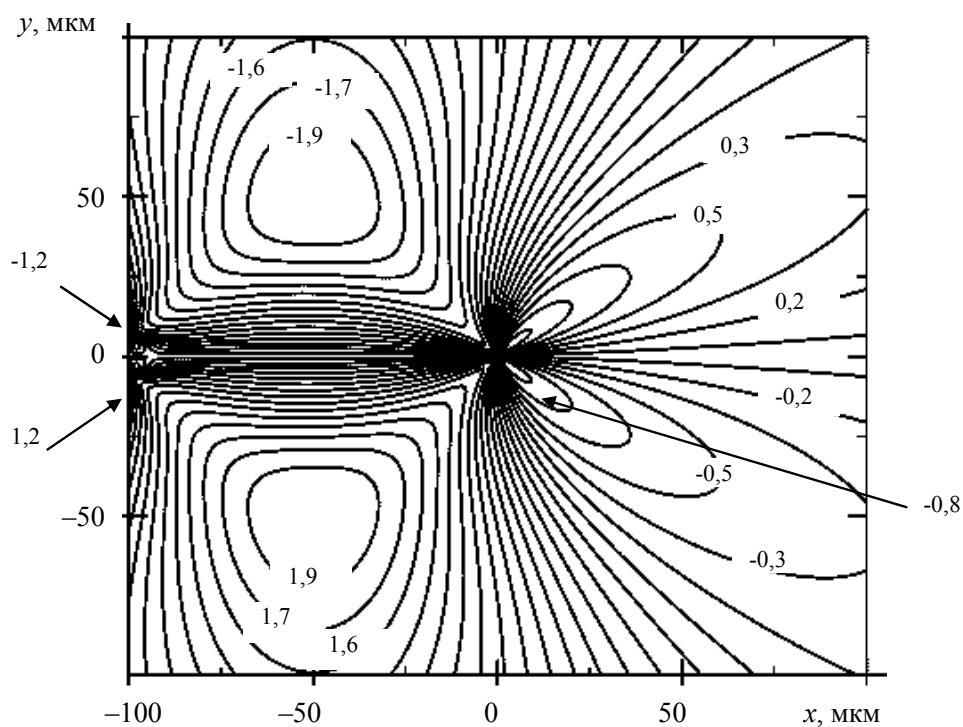


Рис. 3.4. Распределение  $\eta_{yy}(x, y)$  у клиновидного двойника, полученное на основании макропической дислокационной модели



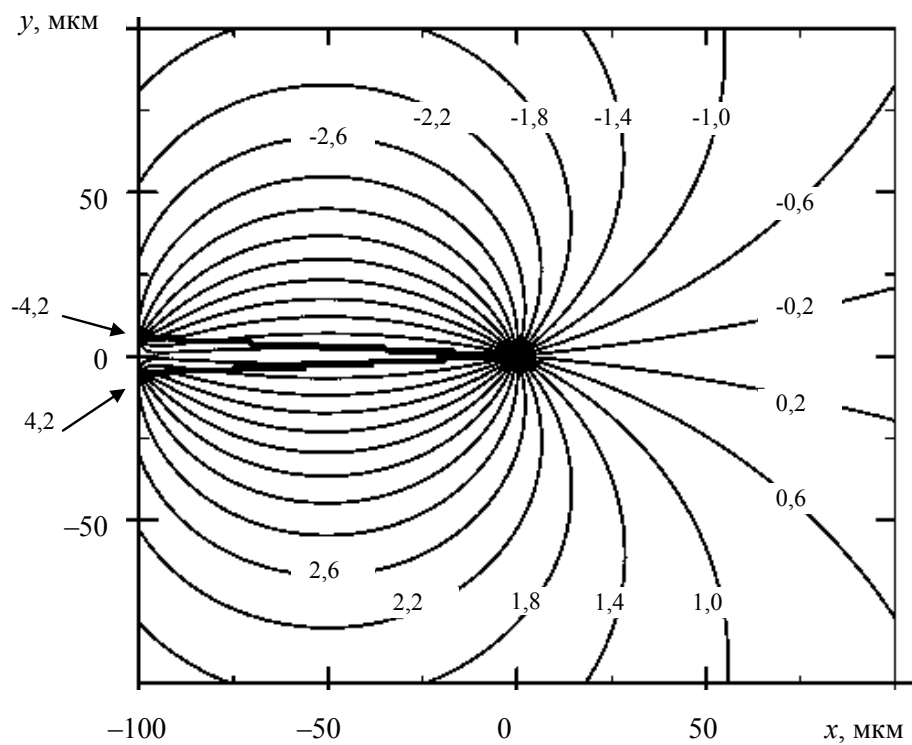


Рис. 3.5. Распределения  $\eta_{zz}(x, y)$  и  $\eta_{zx}(x, y)$  у клиновидного двойника, полученное на основании макроскопической дислокационной модели

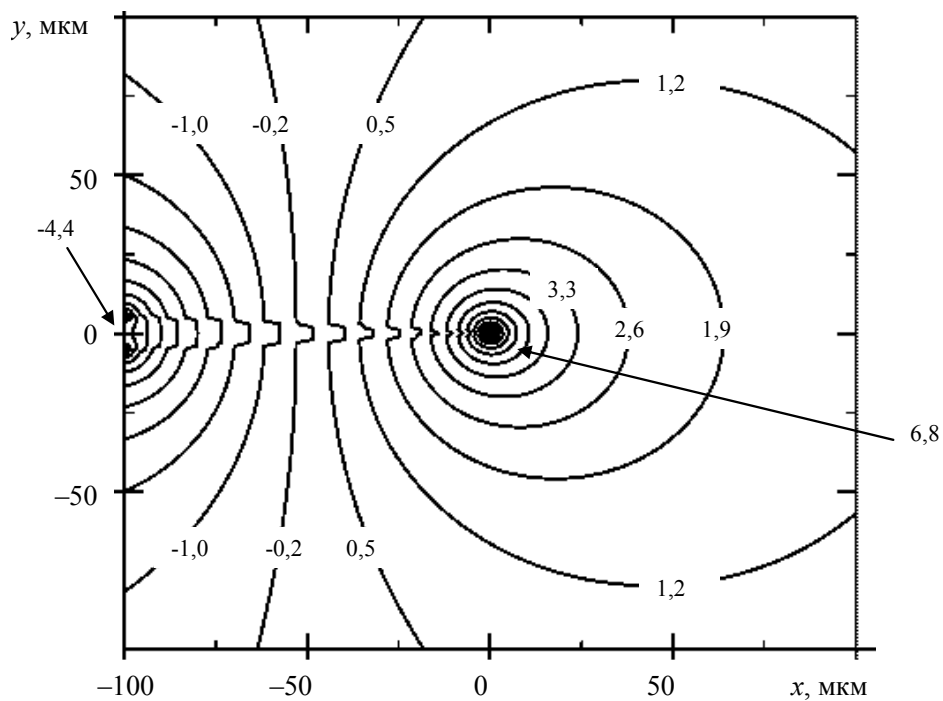


Рис. 3.6. Распределение  $\eta_{zy}(x, y)$  у клиновидного двойника, полученное на основании макроскопической дислокационной модели

На рис. 3.2–3.6 четко прослеживаются двойниковые границы, являющиеся концентраторами напряжений. Это указывает на правомерность используемого в модели подхода. В отличие от существующих в настоящее время дислокационных моделей, использующих приближение тонкого двойника, в нашем случае возможно детальное рассмотрение области внутри клиновидного двойника и возможен расчет в ней напряженного состояния.

Большая концентрация напряжений, в основном, наблюдается и у вершины клиновидного двойника. Численные значения этих напряжений могут быть найдены из соотношений (3.10), (3.11) и (3.1) при  $x = y = 0$ .

Нормальные напряжения  $\sigma_{xx}$  знакопеременны по отношению к направлению развития двойника, совпадающим с направлением оси  $OX$ . В положительном направлении оси  $OY$  данные напряжения отрицательны, а в отрицательном направлении оси  $OY$  – положительны (рис. 3.2). Таким образом, у одной из границ клиновидного двойника напряжения  $\sigma_{xx}$  сжимающие, а у другой – растягивающие. Максимальные значения  $\sigma_{xx}$  принимают на границах двойника, причем в большей степени в средней их части, чем у вершины двойника.

Сдвиговые напряжения  $\sigma_{xy}$  знакопеременны по отношению к оси, параллельной оси  $OY$  и проходящей через середину двойника (точку  $L/2$  на оси  $OX$ ). У вершины двойника данные напряжения положительны, а у устья – отрицательны (рис. 3.3). В средней части двойника напряжения  $\sigma_{xy}$  минимальны.

Распределение нормальных напряжений  $\sigma_{yy}$  представлено на рис. 3.4. Они положительны в первой и третьей четверти плоскости  $XOY$  и отрицательны – во второй и четвертой. Это приводит к балансировке напряжений у вершины двойника и сравнительно невысоким их значениям у устья (рис. 3.4).

Напряжения  $\sigma_{zz}$  и  $\sigma_{zx}$  имеют одинаковую конфигурацию (рис. 3.5) и отличаются лишь по величине. Данные напряжения отрицательны в первой и второй четвертях плоскости  $XOY$  и положительны – в третьей и четвертой. Это приводит к концентрации напряжений у границ двойника. В данном случае знак напряжений у границ двойника различен.

Напряжения  $\sigma_{zy}$  (рис. 3.6) меняют знак, как и напряжения  $\sigma_{xy}$ , однако у данных напряжений несколько различна конфигурация.

В качестве примера, демонстрирующего возможности разрабатываемой модели в рассмотрении напряжений внутри двойника, рассмотрим распределение  $\eta_{xx}(x, y)$  внутри клиновидного двойника с линей-

ными границами. Данное распределение представлено на рис. 3.7. Видно, что напряжения внутри клиновидного распределены неравномерно, однако они симметричны относительно оси  $OX$ .

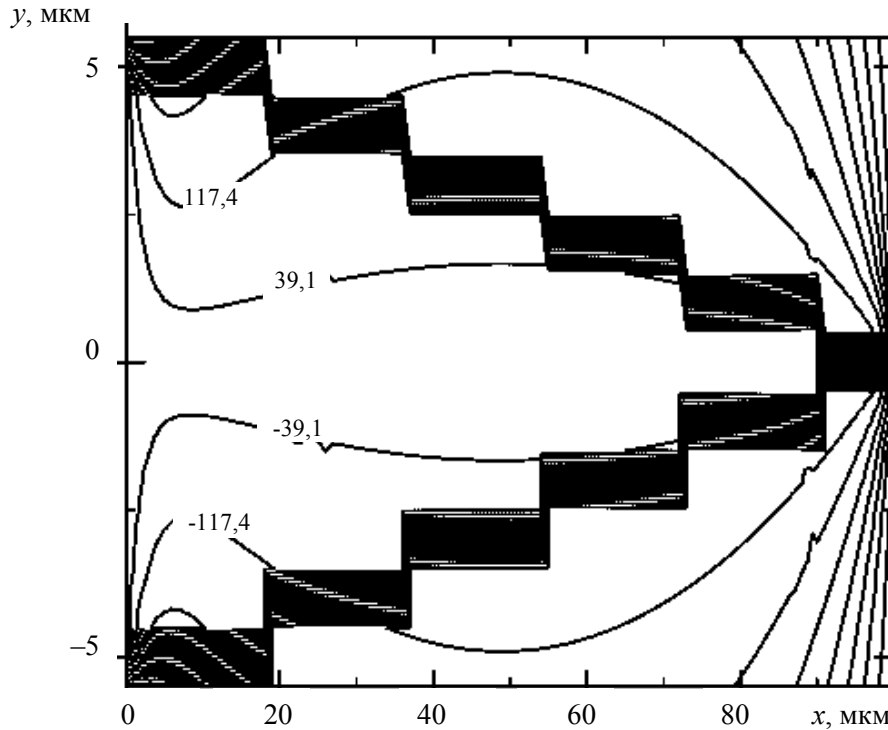


Рис. 3.7. Распределение  $\eta_{xx}(x, y)$  внутри клиновидного двойника

Поля смещений аналогично (3.1) могут быть определены из соотношения

$$u_i(x, y) = u_i^{(1)}(x, y) + u_i^{(2)}(x, y), \quad (3.13)$$

где  $i$  принимает значения  $x$ ,  $y$  или  $z$ ;  $u_i^{(1)}(x, y)$  и  $u_i^{(2)}(x, y)$  – смещения, создаваемые первой и второй двойниковыми границами соответственно, которые определяются из соотношений:

$$u_i^{(1)}(x, y) = \int_0^L \rho_1(x_0) u_i^{(1,0)}(x, y, x_0) \sqrt{1 + \left( \frac{df_1(x_0)}{dx_0} \right)^2} dx_0; \quad (3.14)$$

$$u_i^{(2)}(x, y) = \int_0^L \rho_2(x_0) u_i^{(2,0)}(x, y, x_0) \sqrt{1 + \left( \frac{df_2(x_0)}{dx_0} \right)^2} dx_0. \quad (3.15)$$

Учитывая (2.43), функции  $u_i^{(1,0)}(x, y, x_0)$  и  $u_i^{(2,0)}(x, y, x_0)$  можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned}
 u_x^{(1,0)}(x, y, x_0) &= \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{y - f_1(x_0)}{x - x_0} + \frac{(x - x_0)(y - f_1(x_0))}{2(1 - \nu)((x - x_0)^2 + (y - f_1(x_0))^2)} \right], \\
 u_y^{(1,0)}(x, y, x_0) &= -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \frac{1 - 2\nu}{2\pi} \ln((x - x_0)^2 + (y - f_1(x_0))^2) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x - x_0)^2 - (y - f_1(x_0))^2}{4(1 - \nu)((x - x_0)^2 + (y - f_1(x_0))^2)} \right], \\
 u_z^{(1,0)}(x, y, x_0) &= \frac{b_{\text{в}}}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y - f_1(x_0)}{x - x_0}; \tag{3.16}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 u_x^{(2,0)}(x, y, x_0) &= \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{y - f_2(x_0)}{x - x_0} + \frac{(x - x_0)(y - f_2(x_0))}{2(1 - \nu)((x - x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2)} \right], \\
 u_y^{(2,0)}(x, y, x_0) &= -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left[ \frac{1 - 2\nu}{2\pi} \ln((x - x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x - x_0)^2 - (y - f_2(x_0))^2}{4(1 - \nu)((x - x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2)} \right], \\
 u_z^{(2,0)}(x, y, x_0) &= \frac{b_{\text{в}}}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y - f_2(x_0)}{x - x_0}. \tag{3.17}
 \end{aligned}$$

Результаты расчетов показаны на рис. 3.8–3.10. Принималось:  $H = 11$  мкм;  $L = 100$  мкм (отношение ширины и длины двойника имеет порядок  $10^{-1}$ , как во многих экспериментах [2], [12], [62]–[75]);  $\rho_1 = \rho_2 = 10^5$  м $^{-1}$ ;  $\nu = 0,33$ .

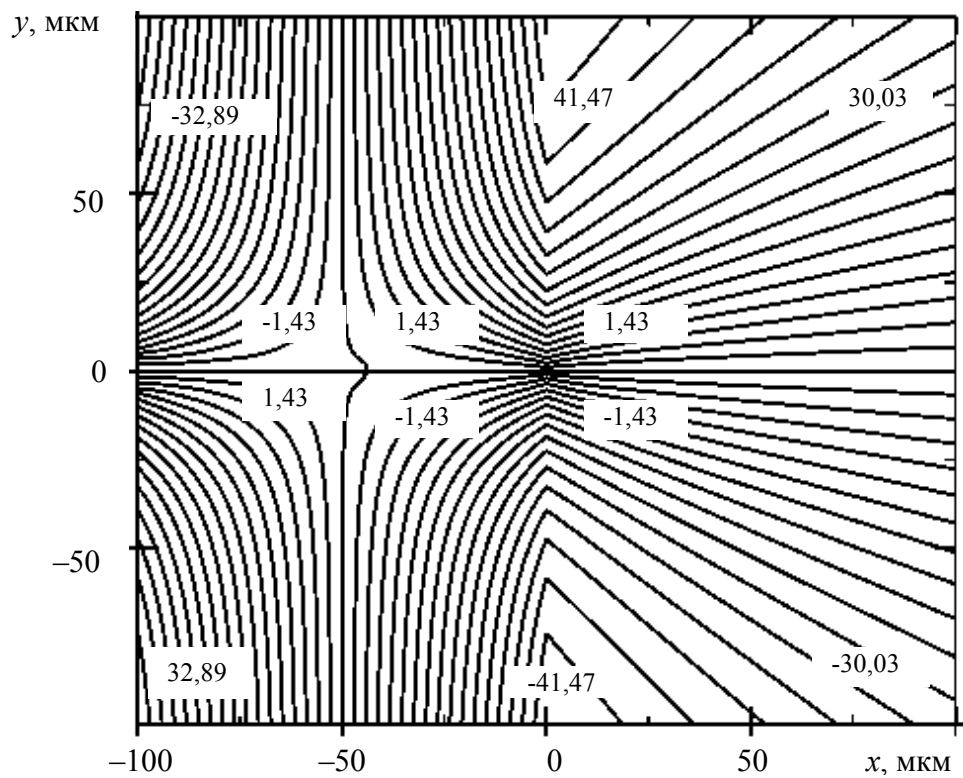


Рис. 3.8. Распределение  $\chi_x(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение  $u_x(x, y)$ )

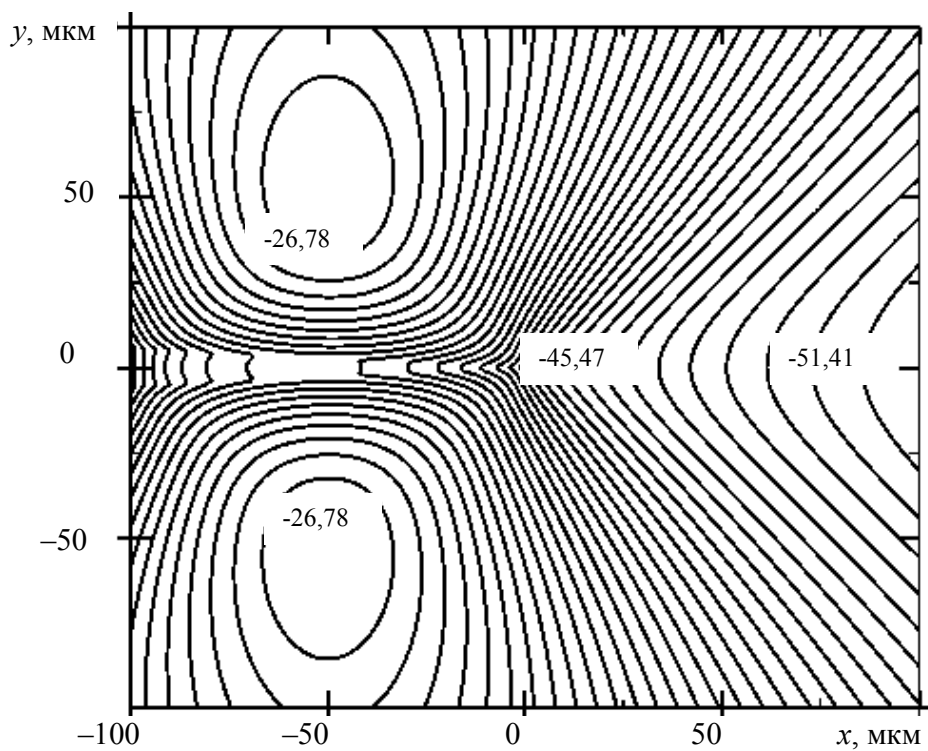


Рис. 3.9. Распределение  $\chi_y(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение  $u_y(x, y)$ )

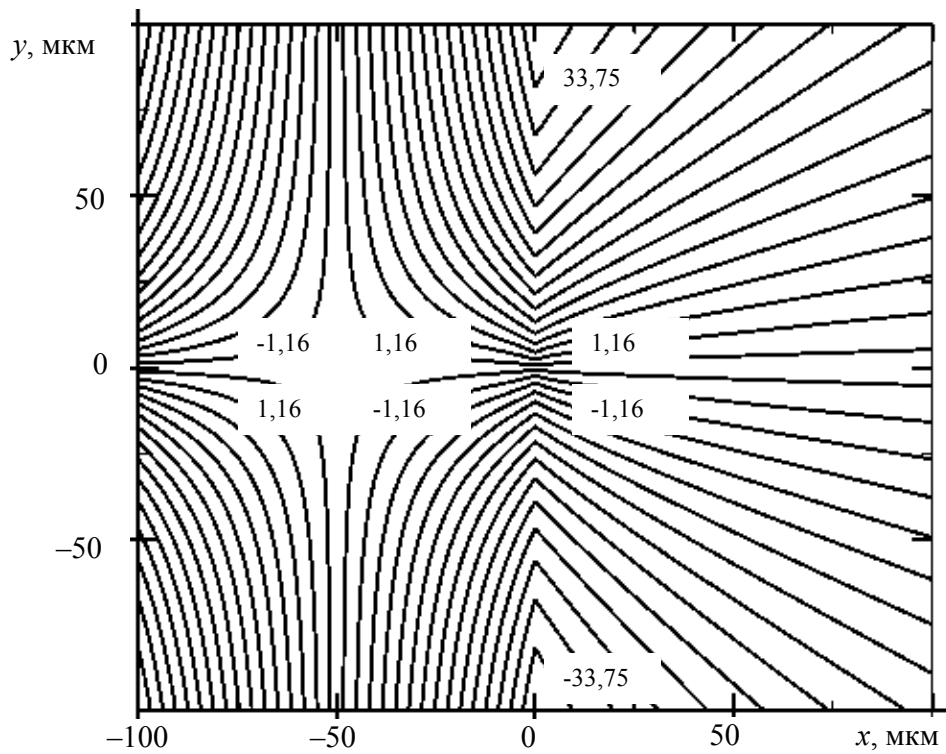


Рис. 3.10. Распределение  $\chi_z(x, y)$  (аналогичный вид имеет распределение  $u_z(x, y)$ )

Конфигурация распределения смещений  $u_x$  и  $u_z$  (рис. 3.8, 3.9) имеет схожий вид. Отличие заключается в значениях у изолиний в одних и тех же областях относительно клиновидного двойника. Следует отметить, что данные смещения знакопеременны относительно оси  $OX$  (рис. 3.8, 3.9), а также относительно оси, параллельной оси  $OY$ , и проходящей у устья двойника.

Смещения  $u_y$  отрицательны и имеют высокое численное значение также в удалении от вершины двойника (рис. 3.10).

Для компонент тензора деформации справедливо следующее соотношение:

$$u_{ij}(x, y) = u_{ij}^{(1)}(x, y) + u_{ij}^{(2)}(x, y), \quad (3.18)$$

где  $u_{ij}^{(1)}(x, y)$  и  $u_{ij}^{(2)}(x, y)$  – деформации, которые создают первая и вторая границы двойника соответственно. Данные деформации в соответствии с рис. 3.1 могут быть найдены из формул:

$$u_{ij}^{(1)} = \int_{L_{AB}} \rho_1 u_{ij}^{(1,0)} ds; \quad (3.19)$$

$$u_{ij}^{(2)} = \int_{L_{CB}} \rho_2 u_{ij}^{(2,0)} ds. \quad (3.20)$$

Здесь  $u_{ij}^{(1,0)}(x, y)$  и  $u_{ij}^{(2,0)}(x, y)$  – компоненты тензора деформаций, создаваемых дислокациями на одной и другой границах клиновидного двойника.

Криволинейные интегралы (3.19) и (3.20), как и в случае (3.2) и (3.3), преобразуются в определенные интегралы типа

$$u_{ij}^{(1)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) u_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) dx_0; \quad (3.21)$$

$$u_{ij}^{(2)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) u_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0) dx_0. \quad (3.22)$$

Нетрудно показать, что для компонент  $u_{ij}^{(1,0)}(x, y)$  и  $u_{ij}^{(2,0)}(x, y)$  справедливы следующие соотношения [40], [76]:

$$u_{xx}^{(1,0)}(x, y, x_0) = \frac{b_{кр}}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2} - \frac{1}{1-\nu} \frac{(x-x_0)^2 (y-f_1(x))}{((x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2)^2} \right),$$

$$u_{yy}^{(1,0)}(x, y, x_0) = -\frac{b_{кр}}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2} - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{(y-f_1(x_0))((x-x_0)^2 - (y-f_1(x_0))^2)}{((x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2)^2} \right),$$

$$u_{zz}^{(1,0)}(x, y, x_0) = 0,$$

$$u_{xy}^{(1,0)}(x, y, x_0) = \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{(x-x_0)((x-x_0)^2 - 3(y-f_1(x_0))^2)}{((x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2)^2} \right), \\ u_{xz}^{(1,0)}(x, y, x_0) = -\frac{b_{\text{B}}}{4\pi} \frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2}, \\ u_{yz}^{(1,0)}(x, y, x_0) = \frac{b_{\text{B}}}{4\pi} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2}; \quad (3.23)$$

$$u_{xx}^{(2,0)}(x, y, x_0) = \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-f_2(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2} - \right. \\ \left. - \frac{1}{1-\nu} \frac{(x-x_0)^2(y-f_2(x_0))}{((x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2)^2} \right),$$

$$u_{yy}^{(2,0)}(x, y, x_0) = -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-f_2(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{(y-f_2(x_0))((x-x_0)^2 - (y-f_2(x_0))^2)}{((x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2)^2} \right),$$

$$u_{zz}^{(2,0)}(x, y, x_0) = 0,$$

$$u_{xy}^{(2,0)}(x, y, x_0) = \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi} \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{(x-x_0)((x-x_0)^2 - 3(y-f_2(x_0))^2)}{((x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2)^2} \right),$$



$$u_{xz}^{(2,0)}(x, y, x_0) = -\frac{b_B}{4\pi} \frac{y - f_2(x_0)}{(x - x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2},$$

$$u_{yz}^{(2,0)}(x, y, x_0) = \frac{b_B}{4\pi} \frac{x - x_0}{(x - x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2}. \quad (3.24)$$

Результаты расчетов приведенных деформаций представлены на рис. 3.11–3.15. Принималось:  $\nu = 0,29$  [77];  $L = 100$  мкм,  $H = 11$  мкм. Приведенные деформации  $u_{ij}^*(x, y)$  определялись следующим образом:

$$u_{ij}^*(x, y) = u_{ij}(x, y) / u_{ij}^0, \quad (3.25)$$

где  $u_{xx}^0 = u_{yy}^0 = u_{xy}^0 = 2\pi / \rho b_{кр}$ ;  $u_{xz}^0 = u_{yz}^0 = 4\pi / \rho b_B$ . В данном случае плотность дислокаций принималась постоянной.

Как видно из рис. 3.11–3.15, деформации локализуются на двойниковых границах. Деформации  $u_{xx}(x, y)$  отрицательны в первой и третьей четверти плоскости  $XOY$  и положительны во второй и четвертой четвертях этой плоскости. Деформации же  $u_{yy}(x, y)$  в первой и четвертой четвертях меняют знак на противоположный. Данные деформации, как и деформации  $u_{xz}(x, y)$ , имеют разный знак у разных границ двойника. Деформации  $u_{xy}(x, y)$ , как и  $u_{yz}(x, y)$ , положительны у вершины двойника и отрицательны у его устья.

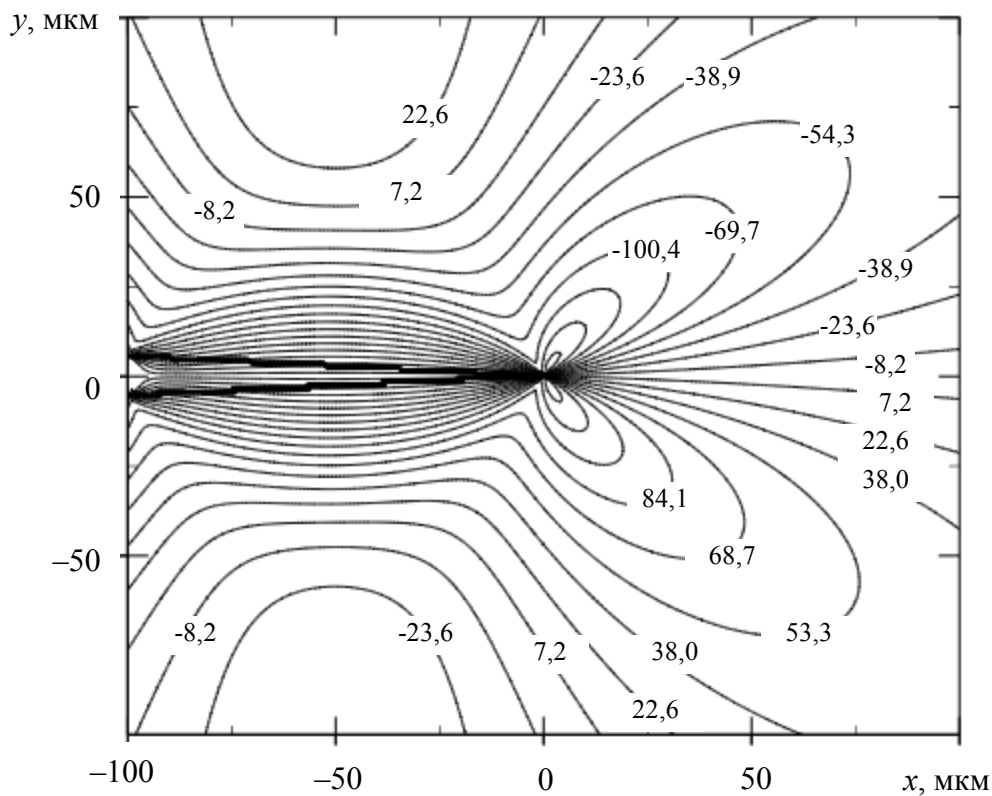


Рис. 3.11. Приведенные деформации  $u_{xx}^*(x, y)$

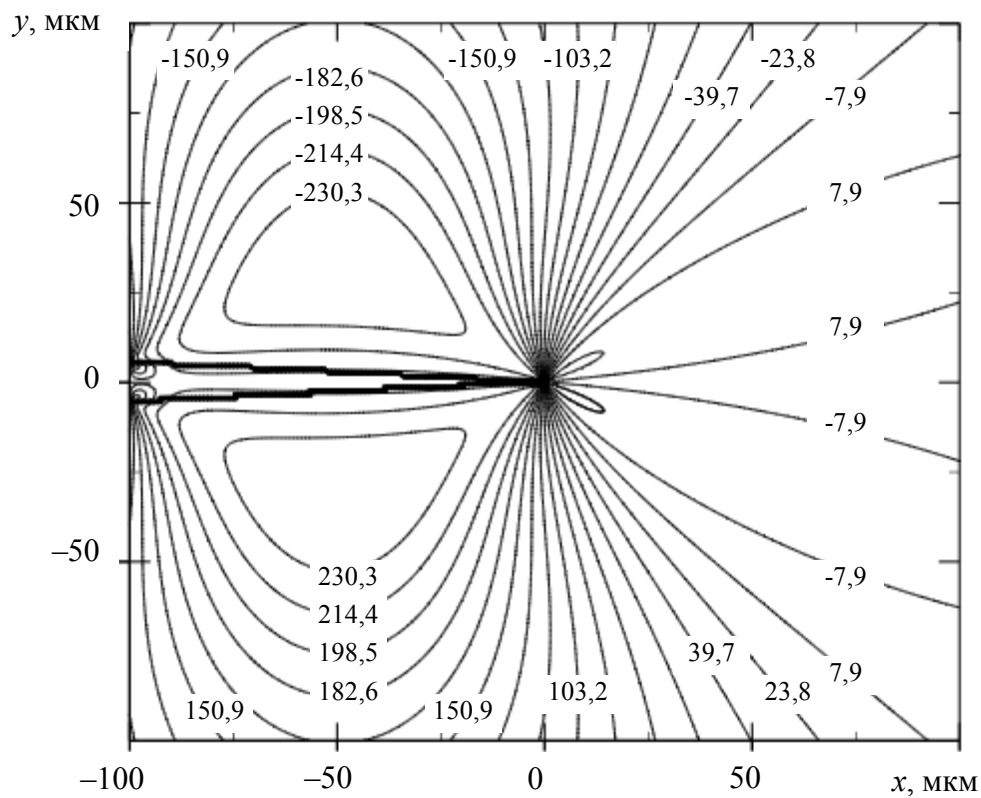


Рис. 3.12. Приведенные деформации  $u_{yy}^*(x, y)$

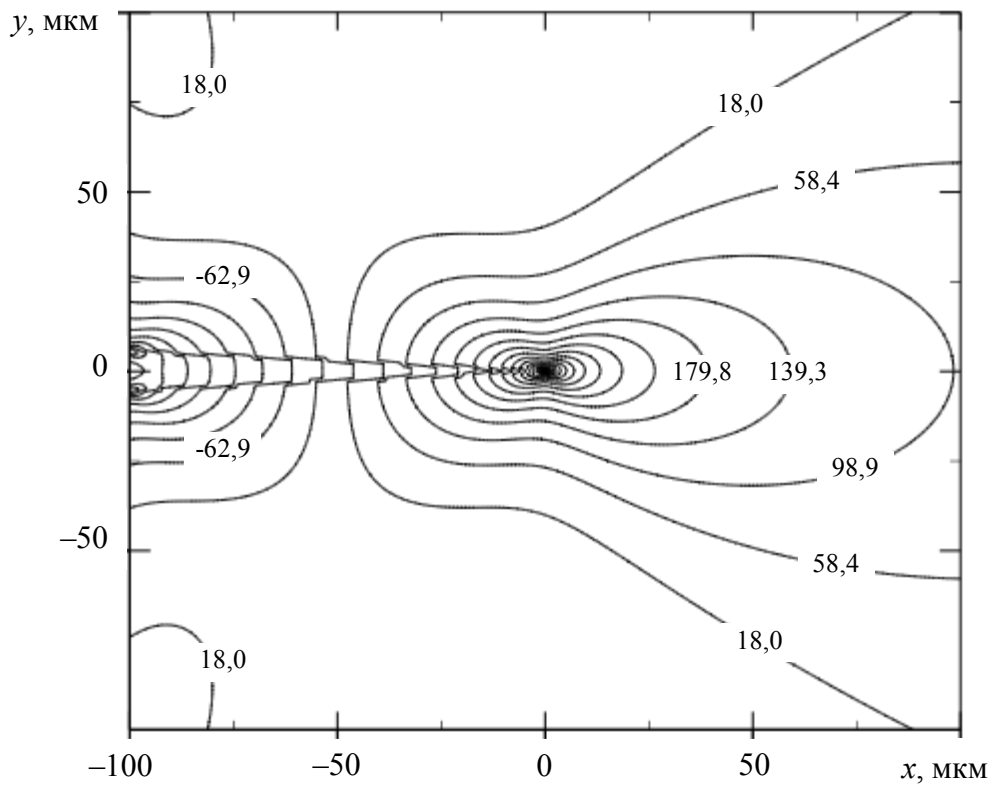


Рис. 3.13. Приведенные деформации  $u_{xy}^*(x, y)$

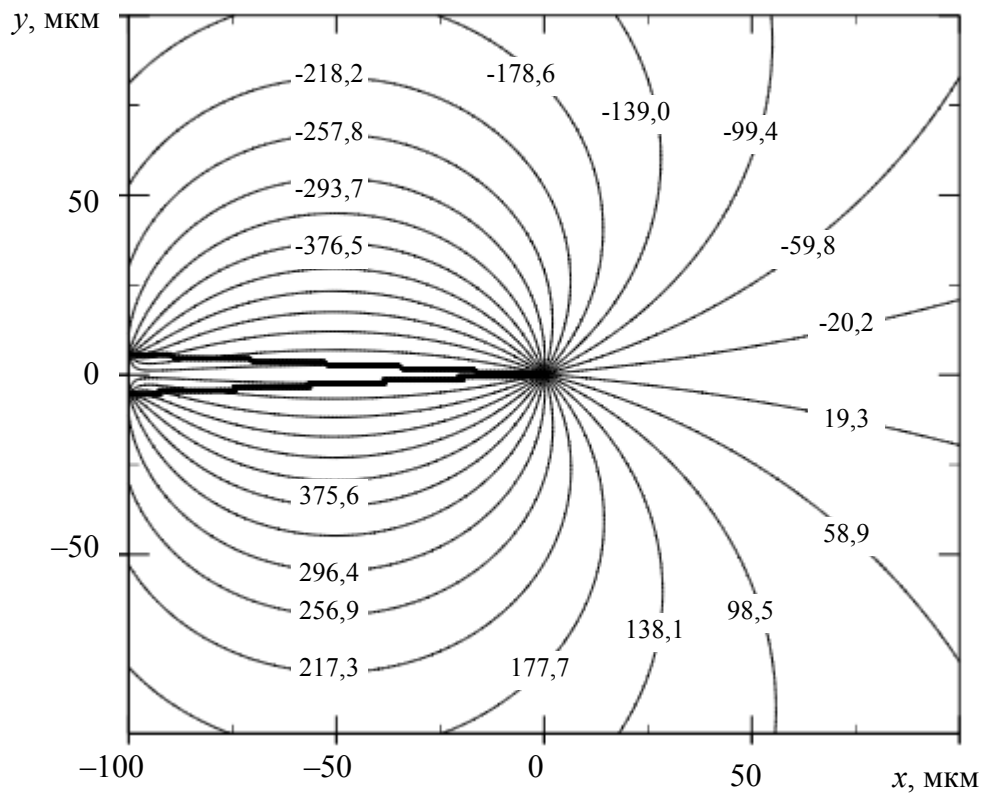


Рис. 3.14. Приведенные деформации  $u_{xz}^*(x, y)$

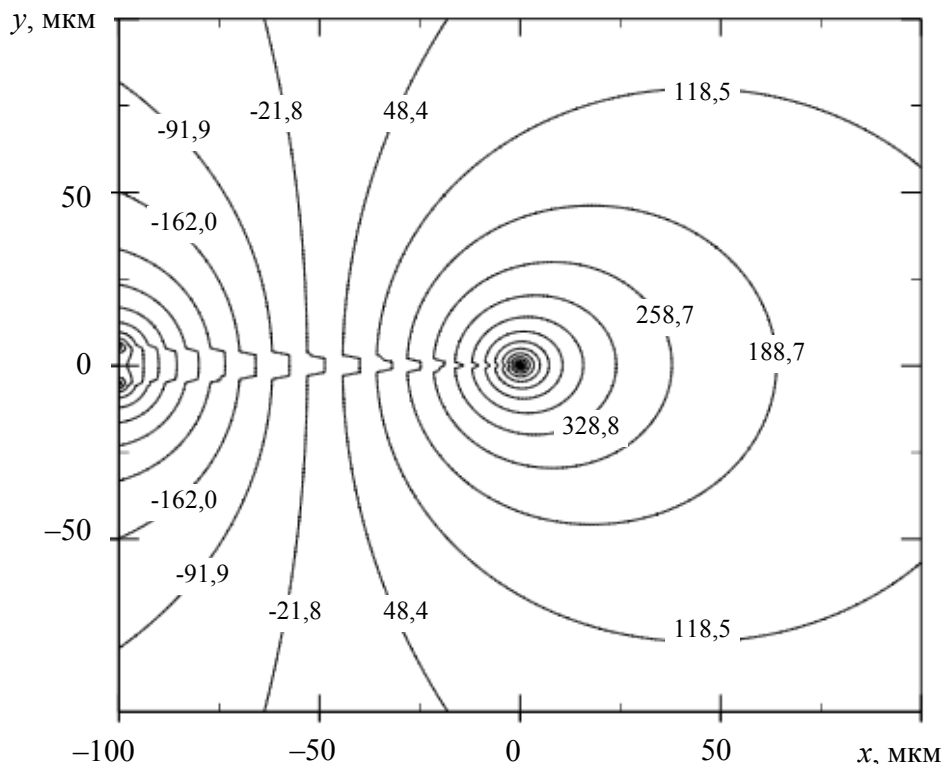


Рис. 3.15. Приведенные деформации  $u_{yz}^*(x, y)$

### 3.2. Учет формы границы и плотности двойникующих дислокаций у клиновидного двойника в макрокопической дислокационной модели

Форма двойников, возникающих у концентратора напряжений, во многом определяется дефектностью структуры кристаллической решетки и дислокационными процессами, происходящими на двойниковых границах и в прилегающих к ним областях [12]. По этой причине микродвойники могут выступать анализаторами дефектности деформируемого двойникующегося материала. Изучение формы двойников представляется перспективным и целесообразным в плане разработки метода исследования дефектности приповерхностных слоев двойникующихся кристаллов, используя в качестве анализаторов двойниковые прослойки.

Простейшая форма двойников, возникающих, например, при деформировании поверхности (111) монокристаллов висмута пирамидой Вика, имеет вид клина. Встречается ситуация, когда клиновидные двойники имеют прямые границы (рис. 2.19). По отношению к направлению двойникования на плоскости (111) двойниковые

границы у таких двойников ориентированы примерно под одним углом, и такой двойник имеет вид вытянутого равнобедренного треугольника. Двойники такой формы часто имеют приблизительно одинаковую плотность  $\rho$  двойникующих дислокаций на двух границах и эти дислокации, как правило, равномерно распределены на границах. Кроме того, для таких границ справедливо условие  $V'_n \approx V''_n$ , где  $V'_n$  и  $V''_n$  – нормальные скорости роста соответственно первой и второй границы. Лишь в частных случаях плотности двойникующих дислокаций на границах таких двойников существенно отличаются друг от друга, и  $V'_n \neq V''_n$ . Это бывает лишь при специфическом расположении дефектов в области развития двойника.

Следует отметить, что при развитии двойника тангенциальная скорость ( $V_\tau$ ) определяет скорость движения двойникующих дислокаций, а нормальная ( $V_n$ ) – скорость их генерации. Таким образом, у рассматриваемых двойников на обеих границах дислокации генерируются синхронно. В плане развития метода исследования дефектности материала по форме двойников можно отметить, что двойники с прямыми границами развиваются в малодефектной области с размером дефектной области, не превышающей 0,1 мкм. Кроме того, в этой области отсутствуют скопления полных дислокаций, способствующих ходу дислокационных реакций, изменяющих форму двойников [78].

При большом увеличении (рис. 3.16) можно заметить, что двойниковая граница не имеет вида прямой линии, а состоит из различного размера шероховатостей и неровностей, которые в оптическом микроскопе ( $\times 500$ ) практически не видны. Природа этих шероховатостей обусловлена дефектностью прилегающих к границе областей и неоднородностью распределения двойникующих дислокаций на двойниковой границе. Наличие, например, у двойниковой границы дислокации приводит к изменению у нее конфигурации полей напряжений, что сказывается на характере взаимодействия двойникующих дислокаций, приводя к отклонению их плотности от равномерного распределения. По величине и числу неровностей на двойниковой границе, а также по расстоянию между ними можно судить о плотности дефектов в матрице и об их размере.

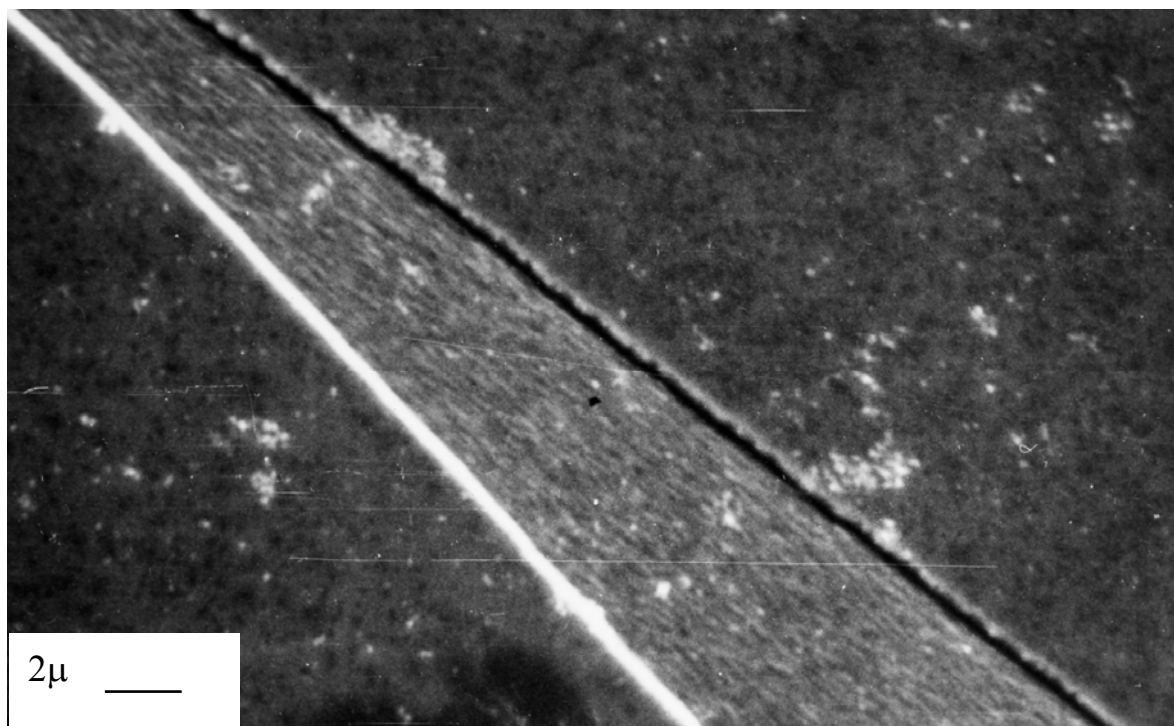


Рис. 3.16. Увеличенное изображение клиновидной двойниковой прослойки (растровая электронная микроскопия с использованием *NANOLAB-7*)

Следует обратить особое внимание на то, что при таком увеличении, как на рис. 3.16, заметны шероховатости и на самом двойнике. Причем эти шероховатости преимущественно имеют вид черточек, располагающихся вдоль направления развития двойника на плоскости скола (111). Такие неровности поверхности существуют благодаря наличию в сдвойникованном объеме дефектов размером порядка  $10\text{--}100 \text{ \AA}$ . Эти дефекты огибаются двойниковой прослойкой при ее развитии таким образом, что пространство за дефектом остается несдвойникованным как и в [2], но в случае более крупных дефектов. Эти несдвойникованные микрообласти образуют на двойниковой прослойке углубления в виде царапин.

Размер несдвойникованной области у дефекта гораздо больше размера самого дефекта. Поэтому для определения дефектности структуры при малом разрешении прибора можно рекомендовать подвергнуть двойникующийся материал двойникованию и вести наблюдение за имеющимися большим размер несдвойникованными областями на двойниковых прослойках.

Подобные области несдвойникованного материала за дефектами (включениями) наблюдались и в [79], однако в [79] размер дефектов

был больше на два-три порядка, чем в случае, рассмотренном в данной работе.

Таким образом, совместное использование растровой электронной микроскопии и введение в кристалл двойниковых прослоек позволяет значительно расширить возможности первой в плане использования ее для изучения дефектности структуры материала.

У двойника на рис. 3.17 границы выгнуты, причем кривизна границ разная. Причины выпуклости границ могут быть разные. Выгибание границы двойника происходит, например, при наличии на ней стопора (стопор на рис. 3.17 отмечен стрелкой 1), препятствующего процессу трансляции двойникующих дислокаций вдоль готовых двойниковых границ. В результате на определенном участке границы увеличивается плотность двойникующих дислокаций, что ведет к увеличению степени некогерентности границы, проявляющемся в увеличении в этих местах ширины двойника.

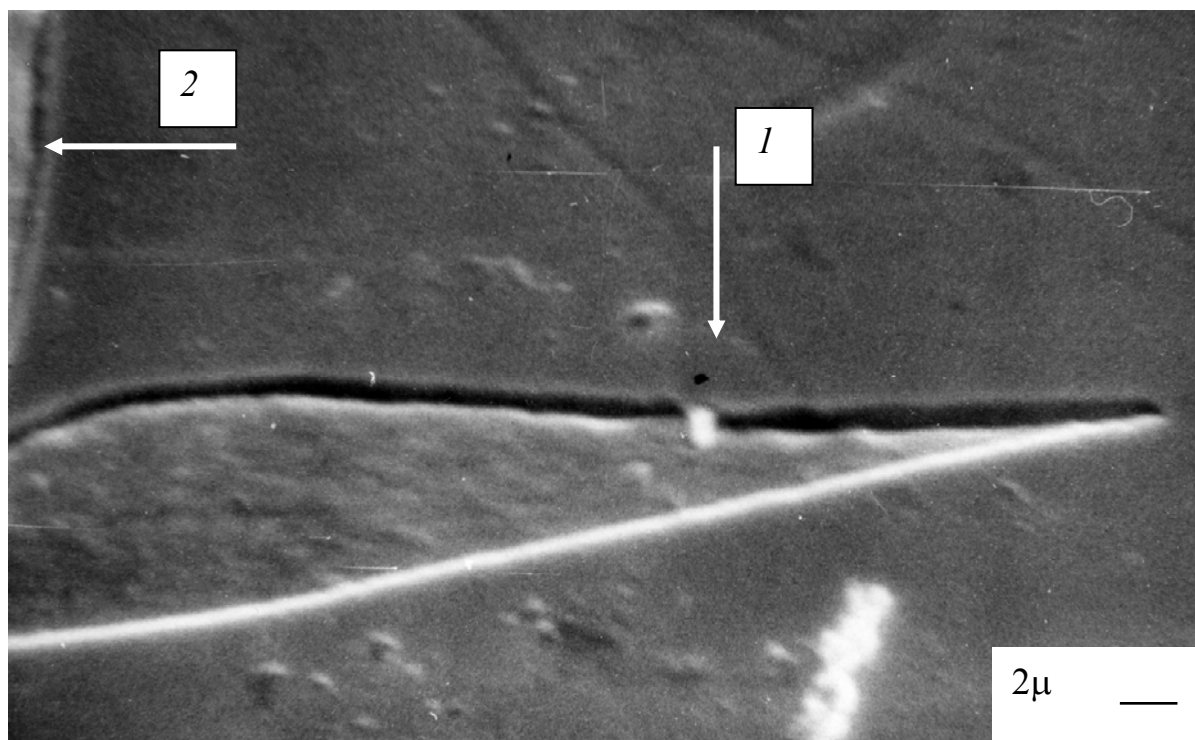


Рис. 3.17. Двойник с выпуклой двойниковой границей: стрелка 1 – стопор; стрелка 2 – граница другого двойника

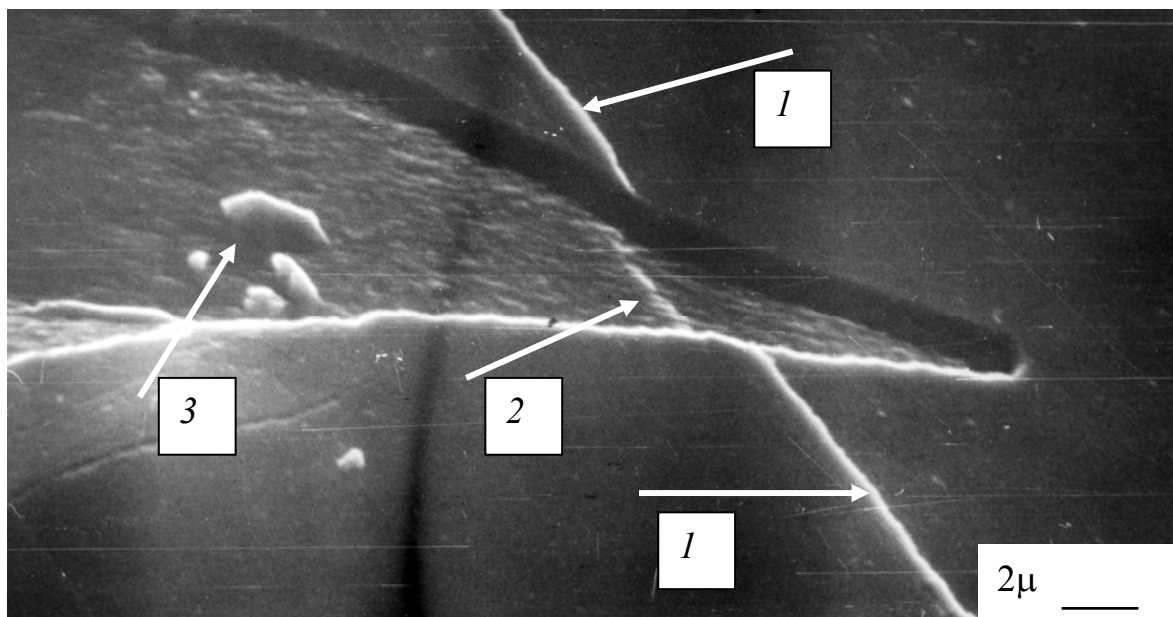
Различие кривизны двойниковых границ может быть обусловлено и различием скоростей генерации двойникующих дислокаций разных границ. Причиной этому может служить наличие у одной из границ факторов стимулирующих генерацию дислокаций. На рис. 3.17

в качестве такого фактора выступила другая двойниковая прослойка (на рис. 3.17 она отмечена стрелкой 2), создающая в области генерации двойникующих дислокаций дополнительные напряжения, активирующие работу источников дислокаций.

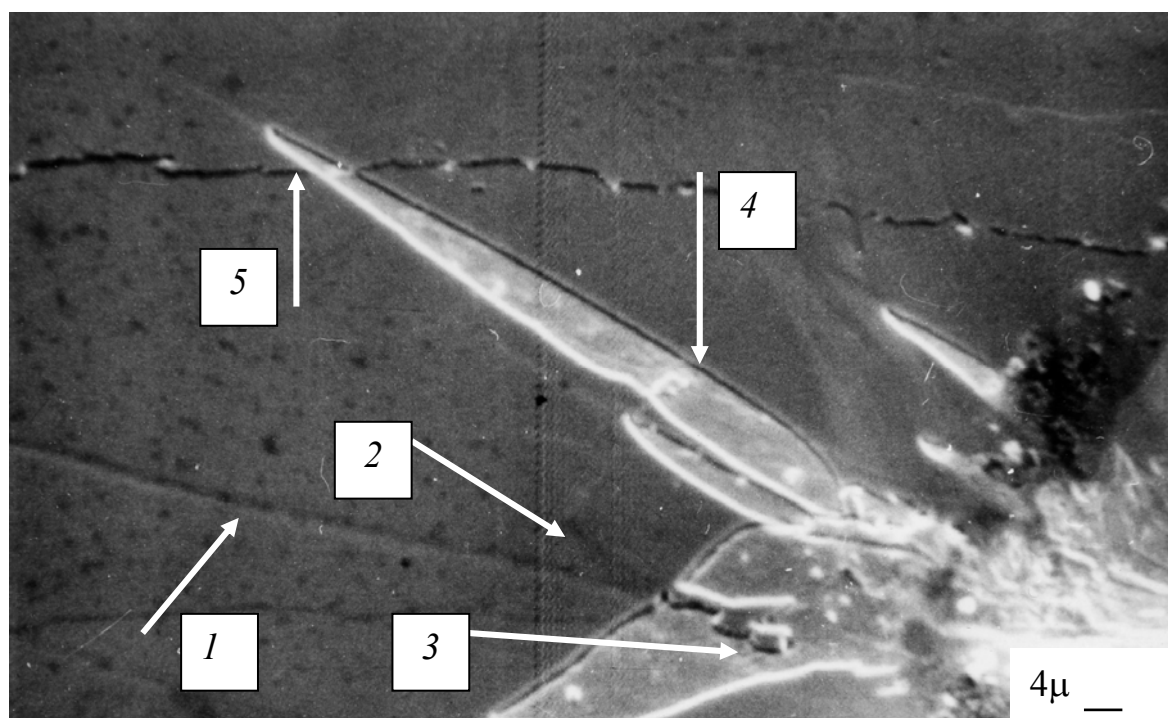
Часто возникают ситуации, когда двойники у вершины имеют угол раствора, близкий к нулю. Степень некогерентности границ таких двойников очень мала, мала и плотность двойникующих дислокаций на границах. Такой двойник по форме близок к модели тонкого двойника [4]. Согласно этой модели напряжения у двойника можно рассчитать как напряжения, возникающие у цепочки дислокаций конечной длины. Двойники с малым углом раствора у вершины характеризуют начальную стадию развития двойников, когда под действием внешних напряжений в направлении двойникования с большой скоростью образуется граница раздела двойник – материнский кристалл [12]. Нормальная скорость роста ( $V_n$ ) таких двойников близка к нулю. Слабо выражена у таких двойников и стадия генерации двойникующих дислокаций и практически отсутствует стадия трансляции двойникующих дислокаций вдоль готовых двойниковых границ. Двойники с близким к нулю углом раствора возникают в местах, где генерация дислокаций затруднена. Такой вид могут иметь и двойники, возникшие в момент окончания действия внешних напряжений, когда дальнейшее развитие двойников не имеет энергетической поддержки. Часто такие двойники могут возникать и в деформируемых кристаллах, через которые в момент действия нагрузки пропускаться электрический ток [38]. Упругая волна, возникающая при этом, способна «выбить» из источника небольшое количество двойникующих дислокаций, которые привели к появлению двойников рассматриваемой формы.

На рис. 3.18–3.20 представлен цикл фотоснимков, иллюстрирующих влияние на форму двойников неровностей скола поверхности и дислокационных сдвигов. Неровности скола заключаются в том, что раскалывание образца в реальной ситуации часто происходит не вдоль одной плоскости (111), а в определенных местах (рис. 3.18, стрелки 1 и 2; рис. 3.19, стрелка 5) смещается на некоторое число межплоскостных расстояний. При этом на поверхности скола образуется ступенька, в отдельных случаях проходящая через всю поверхность кристалла.





*Рис. 3.18.* Двойник, встретившийся на пути развития с неровностью скола: стрелка 1 – неровность скола; стрелка 2 – след неровности скола на двойниковой прослойке; стрелка 3 – несдвойникованные области на клиновидном двойнике



*Рис. 3.19.* Двойник, встретившийся на пути развития с неровностью скола: стрелка 1 – дислокационный сдвиг; стрелка 2 – слабо заметный дислокационный сдвиг; стрелка 3 – ярко выраженная несдвойникованная область, обусловленная взаимодействием двойниковой прослойки с дислокационной стенкой; стрелка 4 – слабо выраженная несдвойникованная область; стрелка 5 – неровность скола

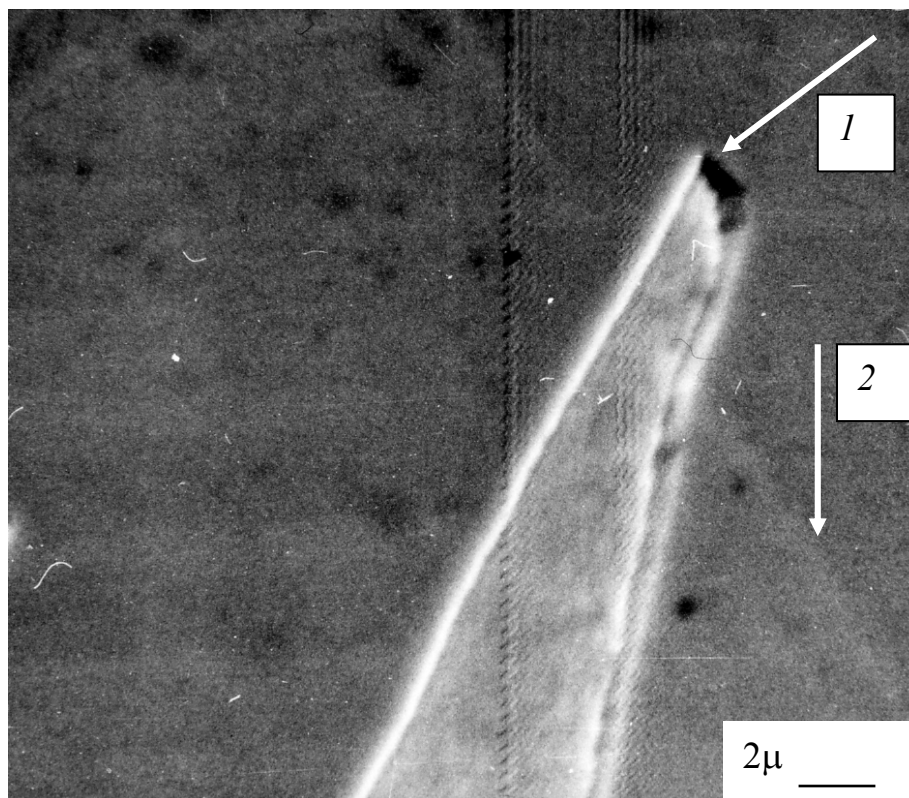


Рис. 3.20. Двойник с затупленной вершиной вершины:  
 стрелка 1 – затупление вершины двойника;  
 стрелка 2 – выход дислокаций типа  $\{11\bar{1}\}$  на поверхность

След этой ступеньки на двойниковой прослойке практически параллелен ступеньке на материнской части кристалла (рис. 3.18, стрелки 1 и 2). Это говорит о том, что при развитии двойника, характерного для двойникового поворота кристаллической решетки в плоскости (111) не происходит. Очевидно, этот поворот осуществляется в плоскости двойникового поворота, к которым в висмуте относятся плоскости  $\{101\}$ . Об этом говорит плоскопараллельное смещение ступеньки на двойниковой прослойке к устью двойника (рис. 3.18). Таким образом, в объеме двойника перестройка решетки происходит против направления развития двойника или против  $V_{\tau}$ .

Ступенька на поверхности двойника (рис. 3.18, стрелка 2) несколько размытая. Это происходит из-за локального выравнивания уровней частей двойника, расположенных по разные стороны ступеньки, что свидетельствует о наличии несдвоенных микрообластей.

Взаимодействие двойниковых прослоек с дислокационными сдвигами кристаллической решетки в висмуте наиболее легки в плоскостях  $\{11\bar{1}\}$ , пересекающихся с плоскостью скола (111). Такие мик-

росдвиги, а точнее, выходы дислокаций типа  $\{11\bar{1}\}$  на поверхность (рис. 3.19, обозначены стрелками 1 и 2, а на рис. 3.20 – стрелкой 2). Очевидно, что в указанных областях дислокации типа  $\{11\bar{1}\}$  образуют стенку и не все дислокации выходят на поверхность. Результатом взаимодействия движущихся двойникующих дислокаций с дислокациями стенки является образующаяся на двойниковой ламели область несдвойникового материала, вытянутая вдоль стенки (рис. 3.19, стрелки 3 и 4). При малой мощности стенки (при малом числе дислокаций в ней), как на рис. 3.20, наблюдается изгиб двойниковой границы.

Следы скольжения при оптической микроскопии не всегда бывают заметны. Однако об их наличии можно судить по видимым дефектам на двойниках. Этот факт интересен с точки зрения создания методики зондирования механическими двойниками кристаллов на предмет их дефектности.

Непосредственно наблюдать механизм взаимодействия двойника со стенкой дислокаций – весьма сложная задача, особенно в случае деформирования кристалла сосредоточенной нагрузкой с применением прибора ПМТ-3. Об этих механизмах можно судить лишь по остаточной картине двойникового материала, установившейся после снятия нагрузки. Рассмотрим возможные механизмы преодоления двойниковой прослойкой стенки дислокаций.

Перед двойниковой прослойкой движется фронт пластически деформированного материала (рис. 3.21). Этот фронт формирует базисное и пирамидальное скольжение. Достигая стенки дислокаций (рис. 3.21), рассматриваемый фронт увеличивает внутренние напряжения у стенки, что способствует активации дислокационных реакций. При взаимодействии дислокаций плоскости (111) фронта с дислокациями  $(11\bar{1})$  стенки могут образовываться двойникующие дислокации. Это происходит в ходе реакции [80]:



Направление  $[020]$  совпадает с направлением двойникового материала  $[010]$ . Эти дислокации при взаимодействии с дислокациями  $[0\bar{1}0]$  двойника аннигилируют, что приводит к образованию несдвойниковых областей на двойниковой прослойке.

Возможен и другой механизм, когда напряжения, создаваемые двойником у стенки, не успевают релаксировать за время двойнико-

вания. Тогда после завершения двойникования или в процессе его, стенка в противоположном развиту двойника направлении испускает микродвойники, которые способствуют раздвойникованию.

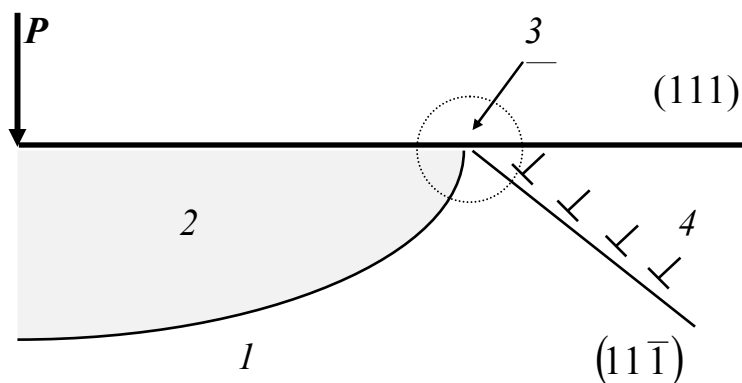


Рис. 3.21. Схематическое изображение развития под действием сосредоточенной нагрузки  $P$  двойниковой прослойки в монокристалле висмута: 1 - материнский кристалл; 2 - двойниковая прослойка; 3 - зона взаимодействия; 4 - дислокационная стенка

Если стенка состоит из малого количества дислокаций, как на рис. 3.19 (стрелка 2) или на рис. 3.20 (стрелка 2), то несдвойникованная область на двойнике либо малозаметна, либо отсутствует вообще. В этом случае, у дислокационной стенки наблюдается искривление двойниковой границы, что свидетельствует об уменьшении в этой области плотности двойниующих дислокаций.

Несдвойникованные области на двойниках, как и искривления двойниковых границ, в микроскопе видны лучше, чем микросдвиги. Поэтому изучение дефектов на двойниках расширяет возможности исследовательского оборудования, позволяя выявлять малозаметные детали в строении вещества. Так, например, на рис. 3.18 (стрелка 3) на двойниковой прослойке имеется несдвойникованная область, а дислокационного сдвига не наблюдается. Следовательно, при своем развитии двойник столкнулся с препятствием в виде скопления дислокаций, которые при отсутствии двойника в микроскоп не заметны.

На рис. 3.20 (стрелка 1) четко прослеживается затупление вершины двойника. Причиной такой формы двойника является наличие дислокационной стенки, но у вершины двойника, а не у его устья, как это рассматривалось ранее.

Выпуклость двойниковой границы обусловлена, как правило, избыточной плотностью двойниующих дислокаций. Это приводит

к локализации у такой границы напряжений, релаксация которых возможна путем зарождения на данной границе нового двойника, уносящего при своем развитии упругую энергию от материнской границы с избыточной плотностью двойникующих дислокаций.

На рис. 3.22 представлена типичная картина ветвления клиновидного двойника. Из данного рисунка видно, что устье одного из двойников расположено у отпечатка алмазной пирамидки Викерса индентора микротвердомера ПМТ-3. Назовем такой двойник материнским. Устье другого двойника (назовем его дочерним) находится на границе материнского двойника. Материнский и дочерний двойники, как правило, относятся к одной системе двойникования  $\{110\}\langle 001\rangle$ , но развитие этих двойников происходит в разных кристаллографических направлениях. Как отмечалось выше, чаще дочерний двойник (рис. 3.22) образуется на искривленной двойниковой границе. Искривление двойниковых границ вызывается избыточной концентрацией на них двойникующих дислокаций. Степень некогерентности таких границ высока. Определяемая из соотношения  $H/L$  степень некогерентности пропорциональна плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах. Сравнивая рассчитанные значения степени некогерентности для клиновидных двойников одинаковой длины  $L$ , но разной формы двойниковой границы, можно доказать выдвинутое утверждение о более высокой плотности двойникующих дислокаций на выпуклых двойниковых границах, так как параметр  $H$  для двойников с такой границей выше, чем у двойников с прямолинейной границей. Повышенная плотность дислокаций на двойниковой границе ведет к локализации на ней внутренних напряжений, источниками которых являются двойникующие дислокации. При этом в местах скопления дислокаций могут возникать напряжения, сравнимые по величине с порогом начала генерирования петли двойникующей дислокации. Релаксация данных напряжений происходит (рис. 3.22) через зарождение на двойниковой границе нового двойника. По всей видимости это происходит в случае торможения базисного скольжения локальными дефектами кристаллической решетки в областях, прилегающих к двойниковой границе. Можно предположить, что релаксация указанных выше напряжений может реализовываться и через генерирование полных дислокаций в плоскости спайности  $(111)$  или в дополнительной плоскости спайности  $(1\bar{1}\bar{1})$ , так как вектор Бюргерса таких дислокаций имеет наименьшее значение, что делает данный процесс энергетически выгодным.

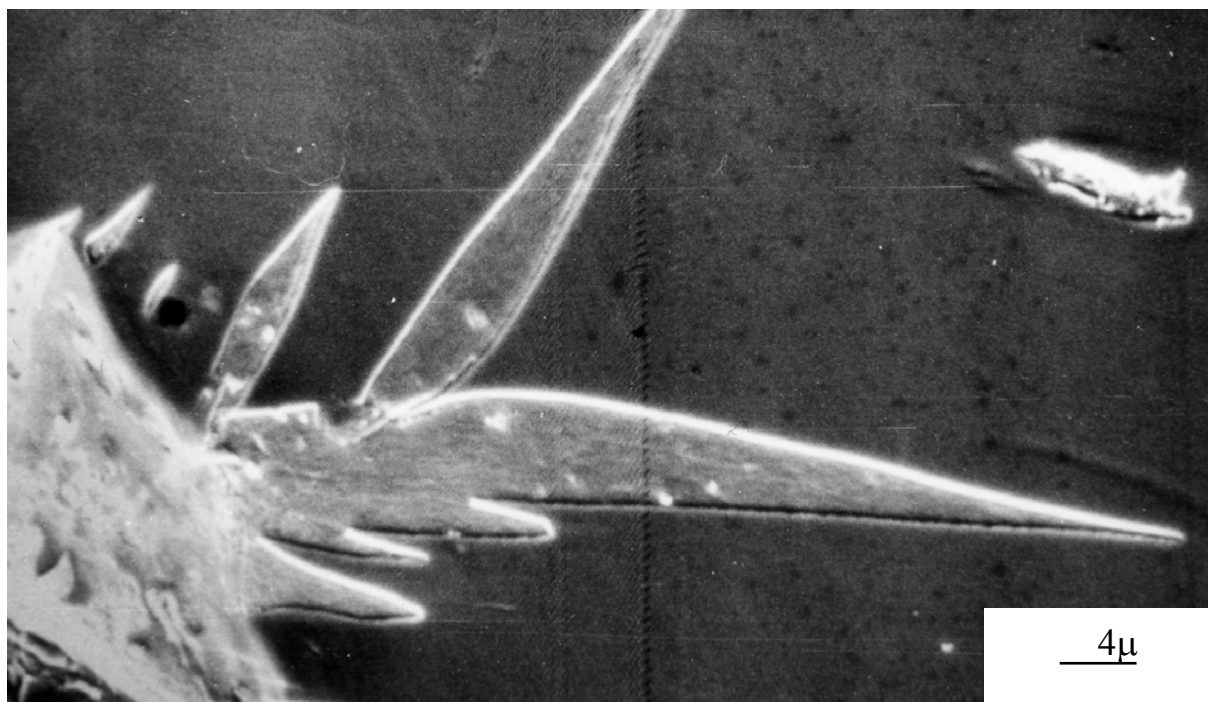
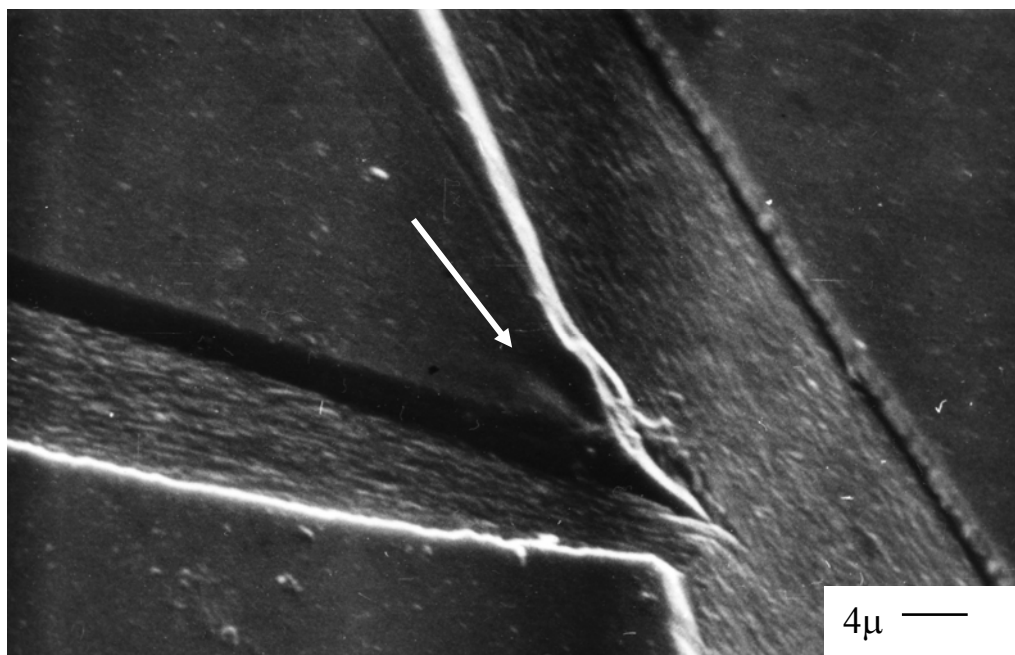


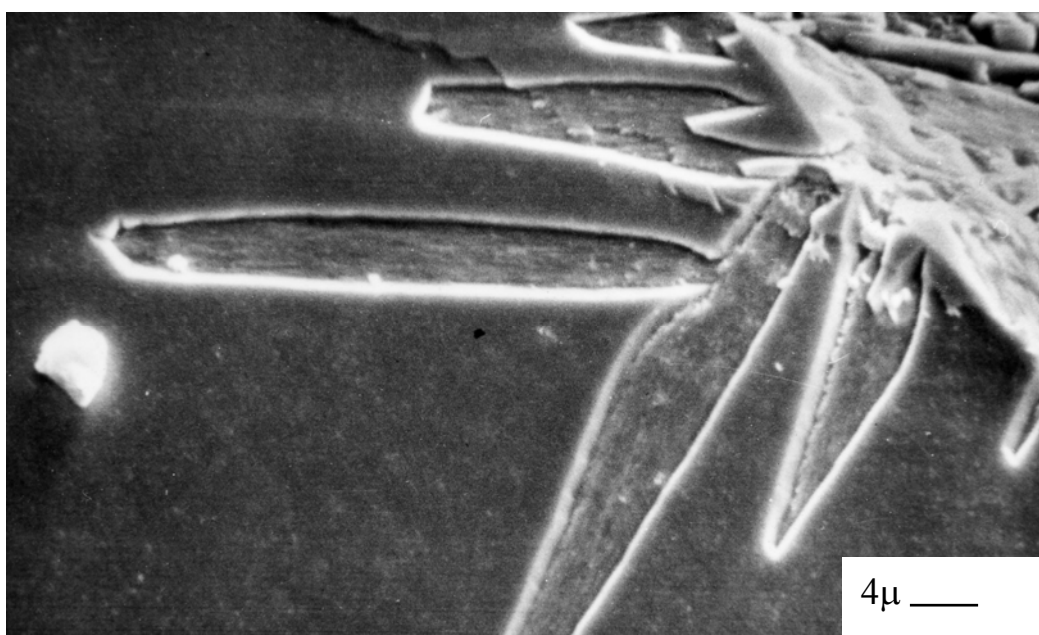
Рис. 3.22. Дочерний двойник на искривленной границе материнского двойника

Причиной избыточной концентрации частичных двойникующих дислокаций на определенных участках двойниковых границ могут служить стопоры в виде неоднородностей структуры кристаллической решетки, различных включений либо в виде скопления полных дислокаций. В последнем случае дочерний двойник может возникать в результате расщепления полных дислокаций на частичные двойникующие дислокации. Стопор не обязательно должен находиться на пути движения вершины клиновидного двойника. Он может располагаться, как это показано на рис. 3.23 (стопор отмечен стрелкой), у двойниковой границы, препятствуя ее нормальному росту. В результате можно предположить, что на некотором отрезке развития двойника трансляция двойникующих дислокаций вдоль готовых двойниковых границ затрудняется стопором, и это приводит к их скоплению у него и локализации больших внутренних напряжений, релаксация которых происходит путем появления нового дочернего двойника. Данный процесс может быть единственным способом уноса локализованной упругой энергии у границы двойника, так как стопор обычно препятствует не только трансляции двойникующих дислокаций вдоль готовых двойниковых границ, но и реализации базисного скольжения.



*Рис. 3.23.* Ветвление двойника, вызванное наличием стопора у двойниковой границы материнского двойника

Причиной избыточной плотности двойникующих дислокаций на границах двойников (рис. 3.24) явились стопоры, препятствующие процессу движения двойникующих дислокаций с образованием границы раздела двойник – материнский материал. Об этом свидетельствует затупление вершин клиновидных двойников.



*Рис. 3.24.* Ветвление двойников, встречающих препятствие на пути своего развития

В работе [2] указаны четыре процесса, наблюдаемых при двойниковании кристаллов: 1) возбуждение источников двойникующих дислокаций; 2) движение двойникующих дислокаций в плоскости двойникования с образованием поверхности раздела; 3) генерирование двойникующих дислокаций на готовых границах раздела; 4) трансляция двойникующих дислокаций вдоль двойниковых границ. К этим процессам можно добавить и процесс генерации двойниковой границей двойникующих дислокаций и их трансляции не вдоль готовых границ раздела, а вдоль другого направления двойникования. Для дочернего двойника свойственны процессы движения двойникующих дислокаций в плоскости двойникования с образованием поверхности раздела, генерирования двойникующих дислокаций на готовых границах раздела, трансляции двойникующих дислокаций вдоль двойниковых границ и процесс образования дочерних двойников на его границах.

На рис. 3.23 наблюдается граница, отделяющая материнский двойник от дочернего. Кроме того, ширина дочернего двойника в небольшом отдалении от материнского больше ширины этого двойника в непосредственной близости к границе материнского двойника. Это дает основание предположить несколько отличный от предыдущего механизм ветвления двойников. Суть этого механизма заключается в том, что дочерний двойник образуется не на границе материнского, а вблизи ее, и при своем росте останавливается на границе материнского двойника, образуя границу раздела.

Все разнообразие форм границ двойников можно разделить на четыре группы: 1) прямолинейная граница; 2) выпуклая граница; 3) вогнутая граница; 4) граница, сочетающая выпуклые и вогнутые участки.

Двойники первой группы были рассмотрены ранее, в том числе и в мезоскопической модели. Данные двойники изображены на рис. 2.19. Двойник с выпуклой границей показан на рис. 3.25, с вогнутой границей – на рис. 3.26, а двойник с границей, сочетающей выпуклые и вогнутые участки, – на рис. 3.27.

Наличие в выражениях (3.4) и (3.5) функций  $f_1(x_0)$  и  $f_2(x_0)$  позволяет учесть в макрокопической дислокационной модели практически любую форму двойниковых границ. Рассматривать все возможные варианты форм границ двойников нецелесообразно, так как они могут быть определены совокупностью вогнутых и выпуклых участков. Вариант прямолинейных границ ранее уже был рассмотрен. В этом случае форма границ двойника описывается функциями (3.8) и (3.9). На рис. 3.28 представлен вариант расчета сдвиговых напряжений  $\eta_{xy}$  у двойника



с прямолинейными границами при  $H = 31$  мкм. Это удобно для ведения дальнейшего сравнительного анализа со случаями криволинейных границ, так как, в отличие от ранее рассмотренного варианта при  $H = 11$  мкм, в данном случае расстояние между двойниковыми границами у устья достаточно для наглядного представления результатов.

Без ущерба общности полученных результатов примем границу, описываемую функцией  $f_2(x_0)$ , прямолинейной. Тогда для случая выпуклой границы, представленного на рис. 3.25, можно принять [59]–[61]:

$$f_1(x_0) = \frac{H}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{x_0}{L}\right)^2}. \quad (3.27)$$



Рис. 3.25. Двойник с выпуклой границей



Рис. 3.26. Двойник с вогнутой границей

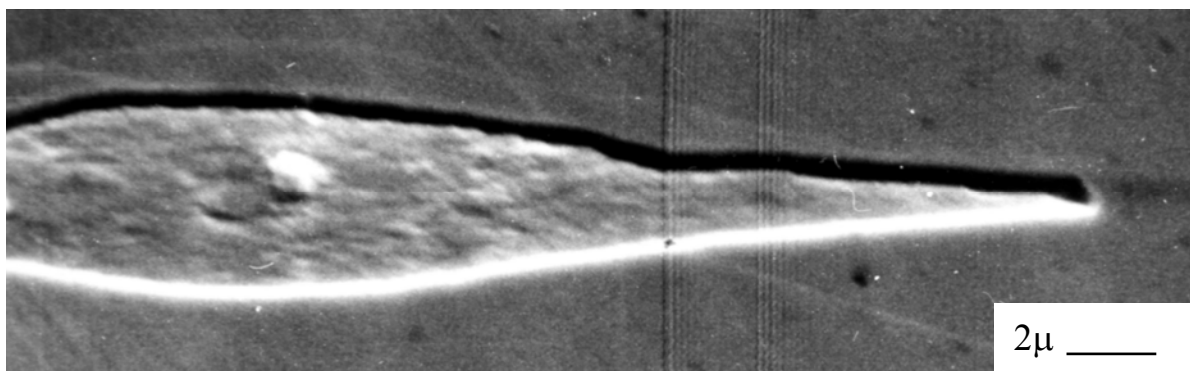


Рис. 3.27. Двойник с границей, сочетающей выпуклые и вогнутые участки

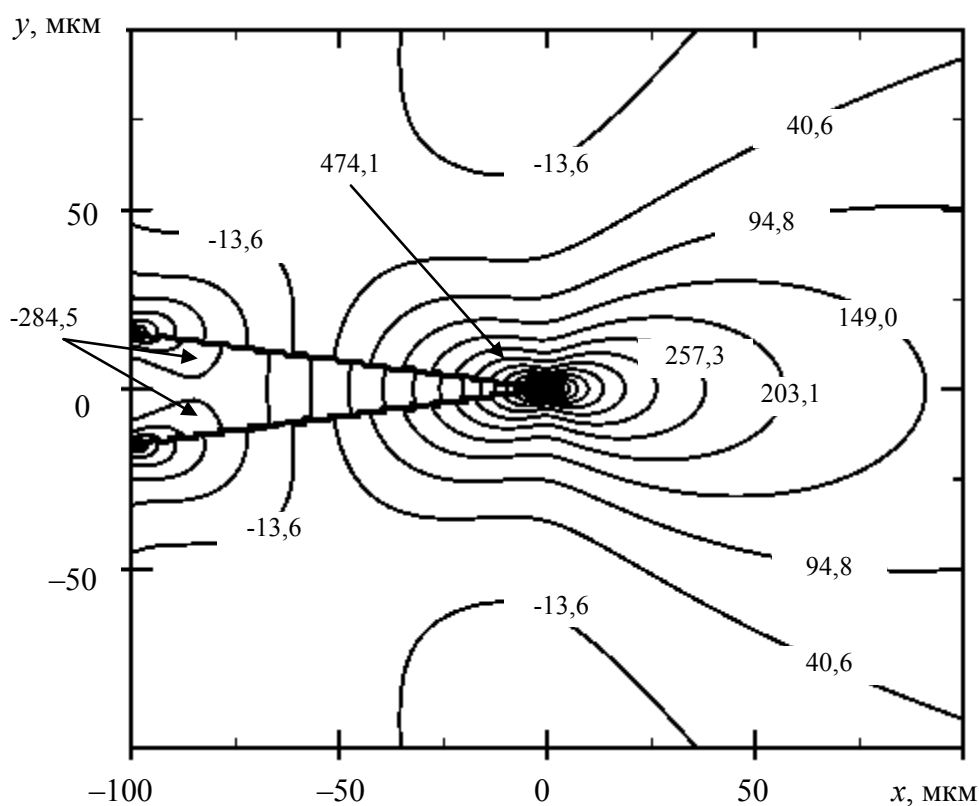


Рис. 3.28. Распределение сдвиговых напряжений  $\eta_{xy}$  у клиновидного двойника с прямолинейными границами при  $H = 31$  мкм

Данная функция описывает параболу, ветви которой ориентированы вдоль оси  $Ox$  в противоположном ее направлении. Взяв только часть ветви параболы, находящуюся в первой четверти плоскости  $HOY$ , получим результат, представленный на рис. 3.29. На данном рисунке четко прослеживается выгнутость одной из границ двойника. Из-за этого утратилась симметрия сдвиговых полей напряжений относительно оси  $Ox$ .

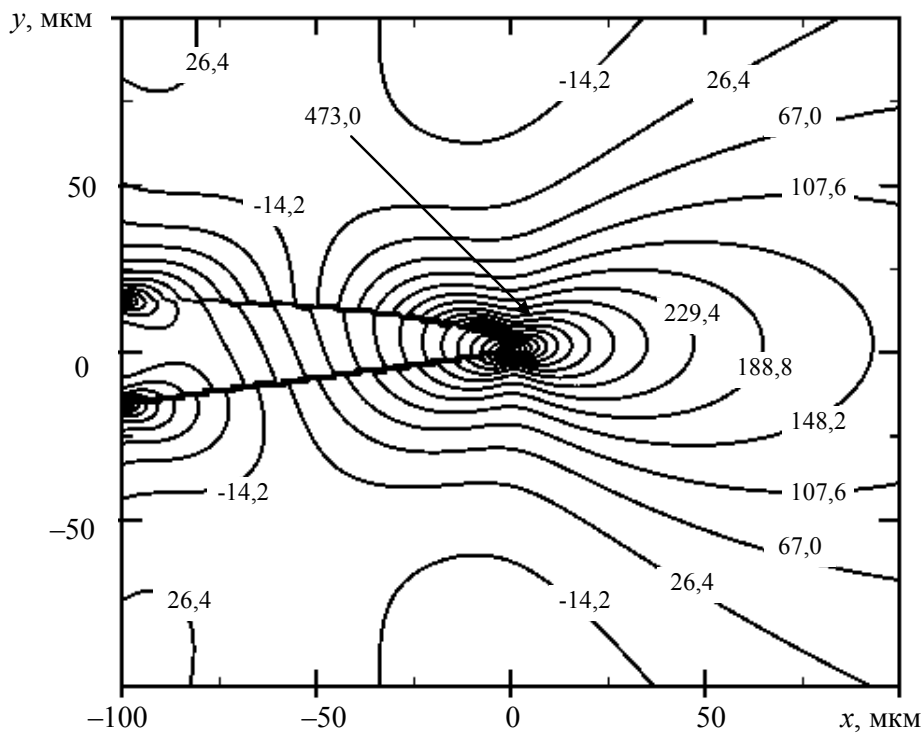


Рис. 3.29. Распределение сдвиговых напряжений  $\eta_{xy}$  у клиновидного двойника с выпуклой границей

Аналогично для вогнутой границы (рис. 3.26) примем [59]–[61]:

$$f_1(x_0) = \frac{H}{2} \left( \frac{x_0^2}{L^2} - \frac{2x_0}{L} + 1 \right). \quad (3.28)$$

В этом случае ветви параболы находятся в области положительных значений оси  $OY$ , а вершина параболы находится в вершине двойника.

Результаты расчета для данного случая показаны на рис. 3.30.

Не будем ставить задачу о рассмотрении всех вариантов распределения двойникующих дислокаций на двойниковых границах и всех вариантов форм этих границ. Данная задача весьма объемна. Поэтому целесообразно ограничиться задачами, интересными с точки зрения физического анализа накопленного в настоящее время экспериментального материала по изучению клиновидных двойников.

В первую очередь необходимо рассмотреть двойников с прямолинейными границами. Такие двойники имеют вид вытянутых равнобедренных треугольников и характеризуют промежуточные стадии развития двойников в малодефектной области кристалла [12]. Поэтому увеличение плотности двойникующих дислокаций на определенных участках границ таких двойников может рассматриваться, как стадия предшествующая искривлению границы двойника. Это связано с тем, что рост ширины двой-

ника увеличивает степень некогерентности двойниковой границы и, как следствие, ведет к росту плотности двойнивающих дислокаций в выпуклых участках двойниковых границ. И наоборот, уменьшение ширины двойника в случае, например, вогнутой двойниковой границы приводит к уменьшению плотности двойнивающих дислокаций на такой границе или ее участке. Поэтому, моделируя уменьшение или увеличение плотности двойнивающих дислокаций на прямолинейной двойниковой границе, на основании модели, разработанной в [26], можно рассматривать напряженное состояние у клиновидного двойника на стадии предшествовавшей искривлению его границы.

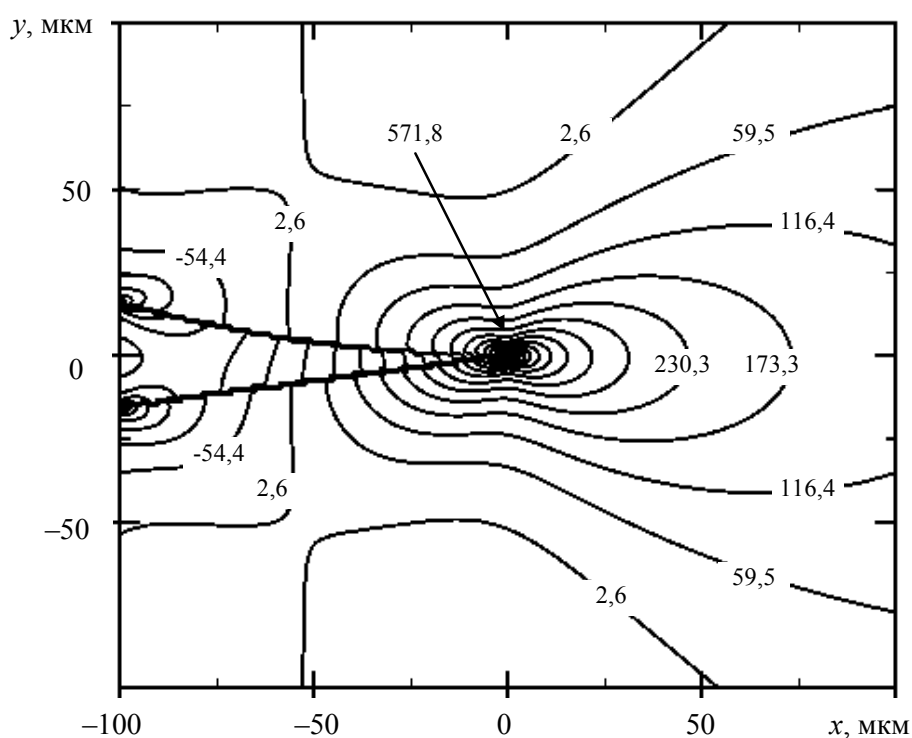


Рис. 3.30. Распределение сдвиговых напряжений  $\eta_{xy}$  у клиновидного двойника с вогнутой границей

Порядок величины плотности дислокаций оценивался по экспериментальным данным [12]–[14]. При этом использовалось расчетное соотношение:

$$\rho = \frac{N}{L} = \frac{H}{2aL}, \tag{3.29}$$

где  $N$  – число двойнивающих дислокаций на двойниковой границе;  $a$  – параметр кристаллической решетки в направлении, перпендикулярном плоскости двойнивания. Примем  $H = 31$  мкм;  $L = 100$  мкм;  $a = 0,31$  нм. Тогда получим  $\rho = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ .

Случай сдвиговых напряжений, когда на двух двойниковых границах одинаковая плотность двойникующих дислокаций и форма границ описывается функциями (3.8) и (3.9), представлен на рис. 3.31. Наблюдается симметрия в распределении полей сдвиговых напряжений относительно оси  $OX$ . У вершины двойника напряжения  $\sigma_{xy}$  положительны, а у устья – отрицательны. В средней части двойника сдвиговые напряжения близки к нулю.

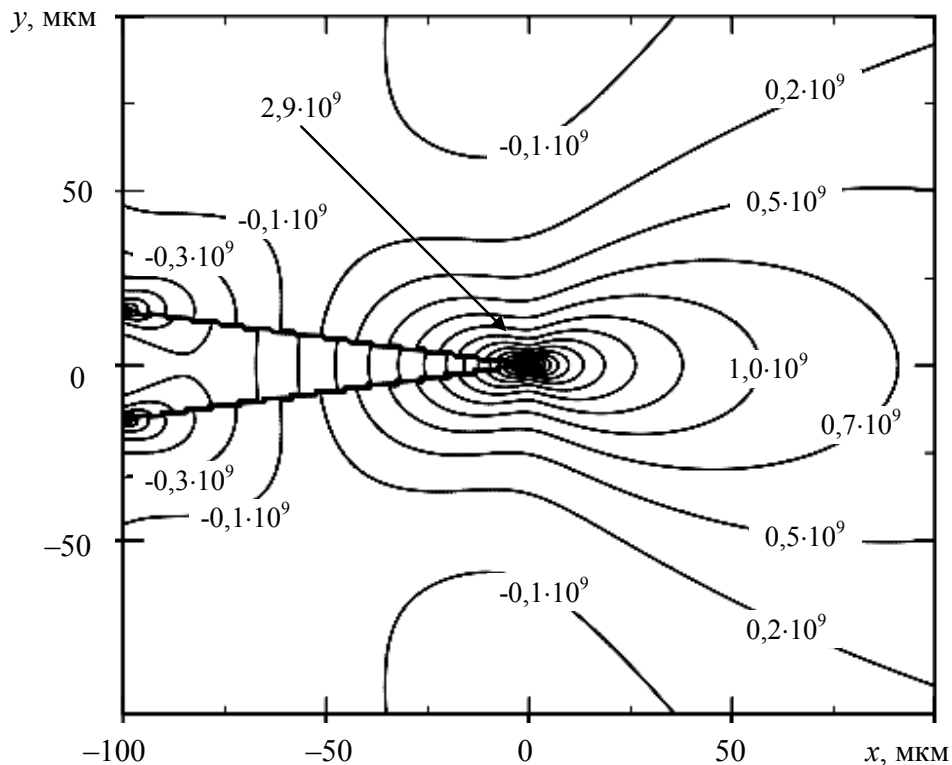


Рис. 3.31. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника с прямолинейными границами при  $\rho_1 = \rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$

В том случае, если на одной из границ плотность двойникующих дислокаций выше, чем на другой, наблюдается потеря симметрии в распределении рассматриваемых сдвиговых полей напряжений (рис. 3.32). Эта ситуация предшествует искривлению двойниковой границы, на которой наблюдается избыточная плотность двойникующих дислокаций. Такая граница становится выпуклой, и ее профиль может быть описан функцией (3.27). Результаты расчетов сдвиговых напряжений в случае выпуклой границы при избыточной плотности двойникующих представлены на рис. 3.33. На выпуклой границе при интенсивных деформациях кристалла часто возникают новые двойники, и наблюдается явление ветвления двойников [13].

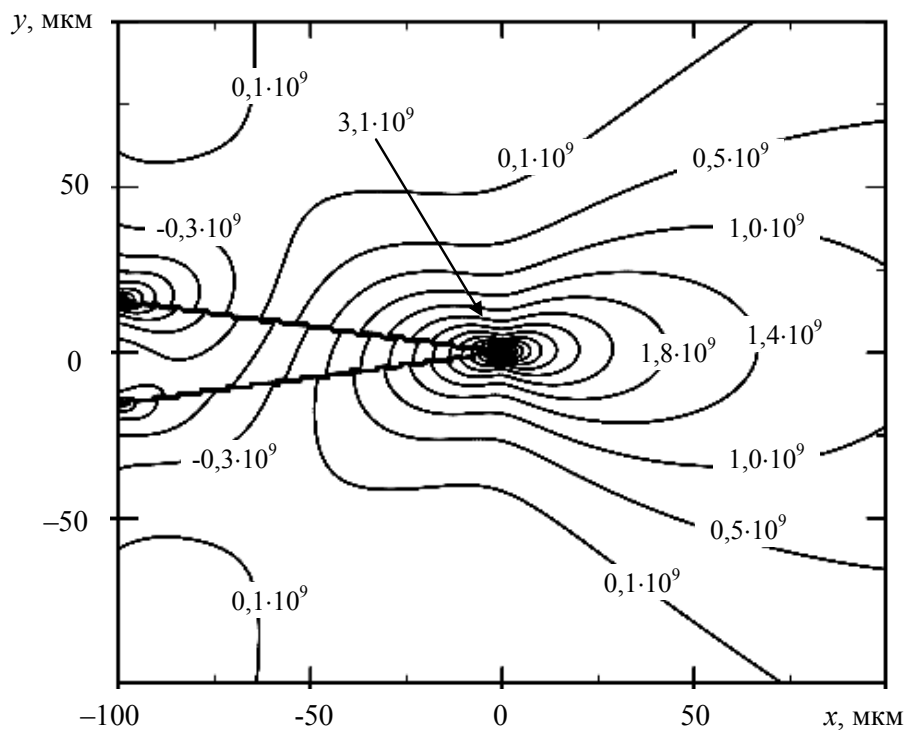


Рис. 3.32. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника с прямолинейными границами при  $\rho_1 = 1,0 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$

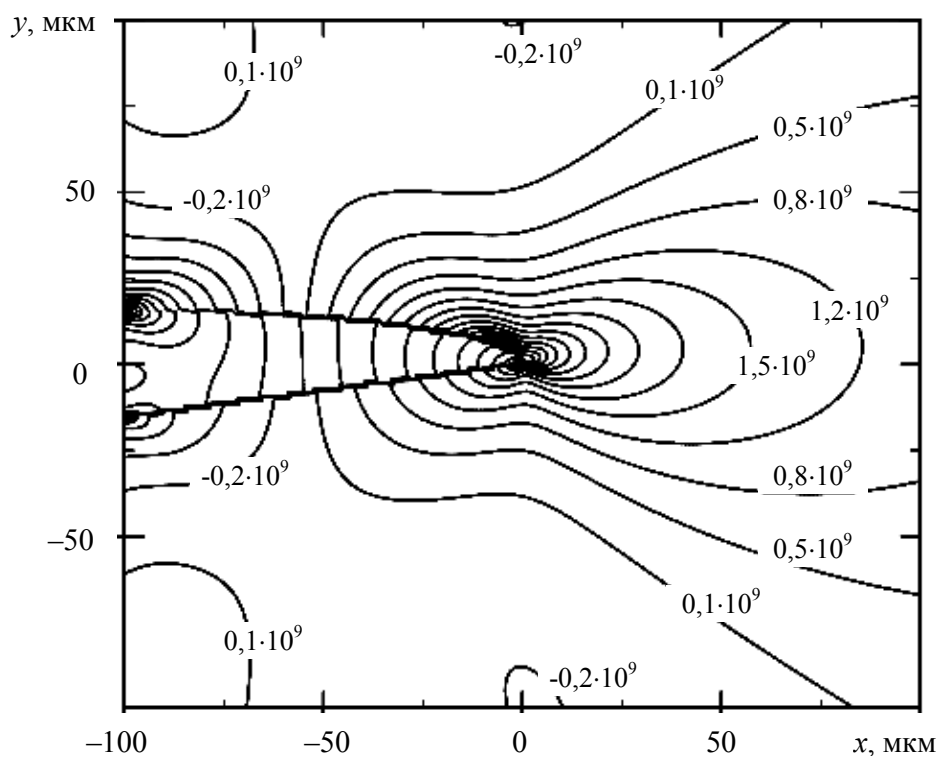


Рис. 3.33. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника с выпуклой границей при  $\rho_1 = 1,0 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$

Потеря симметрии в распределении напряжений  $\sigma_{xy}$  наблюдается и в случае уменьшения числа двойниующих дислокаций на двойниковой границе (рис. 3.34). Данная ситуация предшествует формированию вогнутой двойниковой границы, профиль которой может быть описан функцией (3.28). Расчеты сдвиговых напряжений у клиновидного двойника с вогнутой двойниковой границей при меньшей плотности двойниующих дислокаций на ней, по сравнению с другой границей представлены на рис. 3.35.

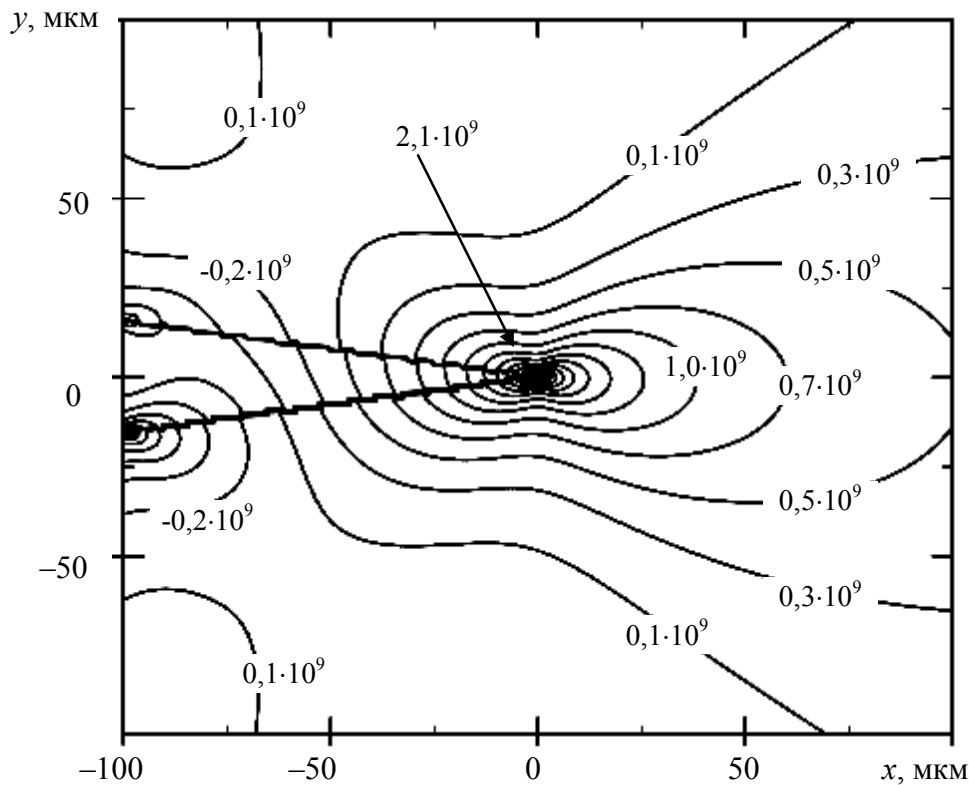


Рис. 3.34. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника с прямолинейными границами при  $\rho_1 = 0,25 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$

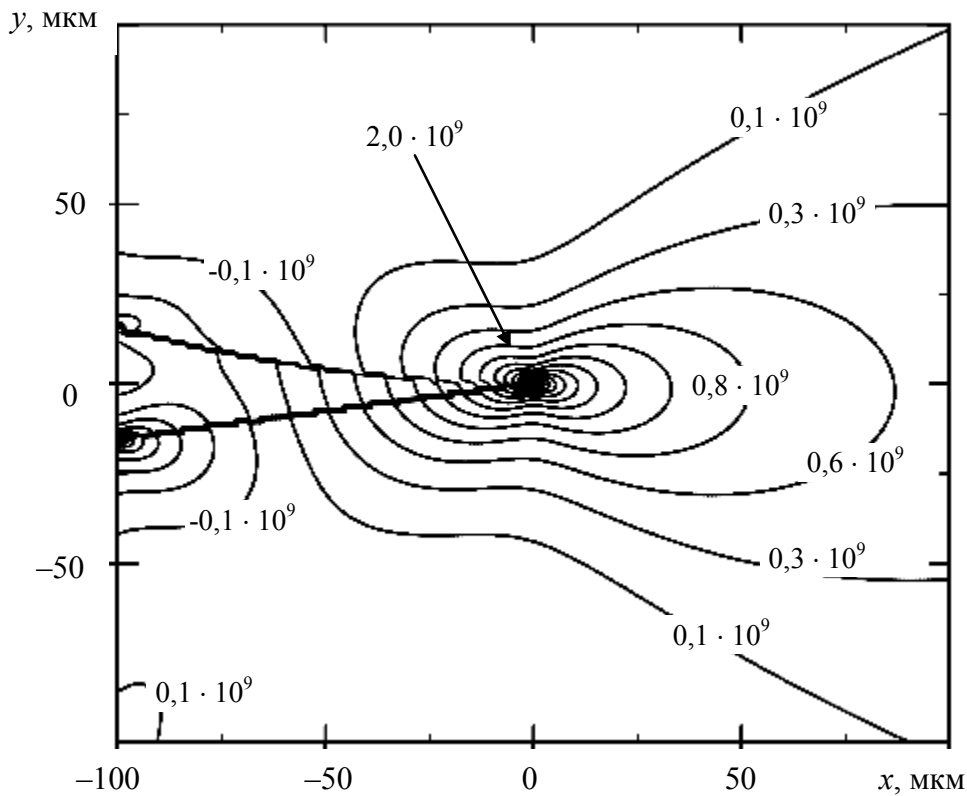


Рис. 3.35. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника с вогнутой границей при  $\rho_1 = 0,25 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$

### 3.3. Поля напряжений у клиновидного двойника, находящегося вблизи поверхности кристалла, при непрерывном распределении двойникующих дислокаций на границах

На рис. 3.36 схематически представлен клиновидный двойник, находящийся у поверхности кристалла, след которой совпадает с осью  $OX$ . Ось  $OY$  направим в направлении развития двойника, тогда соотношения (3.4) и (3.5) представляются в виде

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(y_0))^2} \rho_1(y_0) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, y_0) dy_0 ; \quad (3.30)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(y_0))^2} \rho_2(y_0) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, y_0) dy_0 . \quad (3.31)$$



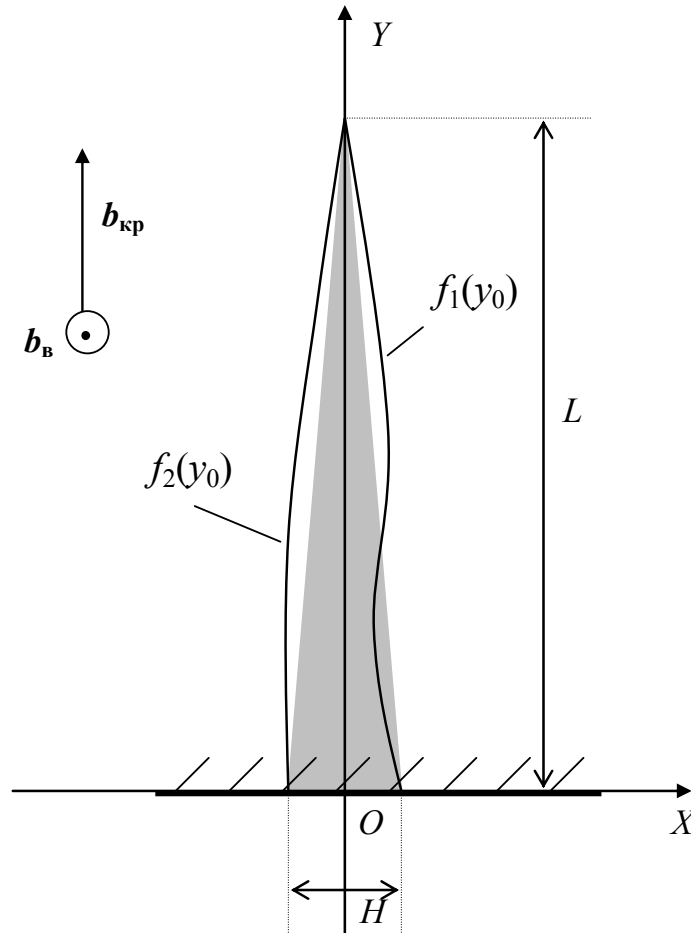


Рис. 3.36. Двойник длиной  $L$  и шириной у устья  $H$ , находящийся у поверхности кристалла

В случае двойника, находящегося у поверхности кристалла, из (1.98) можно получить

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{(1,0)} = & -D_1 \frac{(x - f_1(y_0))[(x - f_1(y_0))^2 - (y - y_0)^2]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} + \\ & + D_1 \frac{(x - f_1(y_0))[(x - f_1(y_0))^2 - (y + y_0)^2]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} + \\ & + 4D_1 \frac{(x - f_1(y_0))y_0[(x - f_1(y_0))^2(3y + 2y_0) - (y + y_0)^2(y - 2y_0)]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{yy}^{(1,0)} &= -D_1 \frac{(x - f_1(y_0))[(x - f_1(y_0))^2 + 3(y - y_0)^2]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} + \\
 &+ D_1 \frac{(x - f_1(y_0))[(x - f_1(y_0))^2 + 3(y + y_0)^2]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} - \\
 &- 4D_1 \frac{(x - f_1(y_0))y y_0 [(x - f_1(y_0))^2 - 3(y + y_0)^2]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \\
 \sigma_{xy}^{(1,0)} &= -D_1 \frac{(y - y_0)[(x - f_1(y_0))^2 - (y - y_0)^2]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} + \\
 &+ D_1 \frac{(y + y_0)[(x - f_1(y_0))^2 - (y + y_0)^2]}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} - \\
 &- 2D_1 y_0 \frac{(x - f_1(y_0))^4 - 6(x - f_1(y_0))^2 y (y + y_0) + (y - y_0)(y + y_0)^3}{[(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \\
 \sigma_{xz}^{(1,0)} &= D_2 \left[ \frac{y - y_0}{(x - f_1(y_0))^2 + (y - y_0)^2} - \frac{y + y_0}{(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2} \right], \\
 \sigma_{yz}^{(1,0)} &= -D_2 \left[ \frac{x - f_1(y_0)}{(x - f_1(y_0))^2 + (y - y_0)^2} - \frac{x - f_1(y_0)}{(x - f_1(y_0))^2 + (y + y_0)^2} \right]; \quad (3.32) \\
 \sigma_{xx}^{(2,0)} &= -D_1 \frac{(x - f_2(y_0))[(x - f_2(y_0))^2 - (y - y_0)^2]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} + \\
 &+ D_1 \frac{(x - f_2(y_0))[(x - f_2(y_0))^2 - (y + y_0)^2]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} + \\
 &+ 4D_1 \frac{(x - f_2(y_0))y_0 [(x - f_2(y_0))^2 (3y + 2y_0) - (y + y_0)^2 (y - 2y_0)]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{yy}^{(2,0)} &= -D_1 \frac{(x - f_2(y_0))[(x - f_2(y_0))^2 + 3(y - y_0)^2]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} + \\
&+ D_1 \frac{(x - f_2(y_0))[(x - f_2(y_0))^2 + 3(y + y_0)^2]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} - \\
&- 4D_1 \frac{(x - f_2(y_0))yy_0[(x - f_2(y_0))^2 - 3(y + y_0)^2]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \\
\sigma_{xy}^{(2,0)} &= -D_1 \frac{(y - y_0)[(x - f_2(y_0))^2 - (y - y_0)^2]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} + \\
&+ D_1 \frac{(y + y_0)[(x - f_2(y_0))^2 - (y + y_0)^2]}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} - \\
&- 2D_1 y_0 \frac{(x - f_2(y_0))^4 - 6(x - f_2(y_0))^2 y(y + y_0) + (y - y_0)(y + y_0)^3}{[(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \\
\sigma_{xz}^{(2,0)} &= D_2 \left[ \frac{y - y_0}{(x - f_2(y_0))^2 + (y - y_0)^2} - \frac{y + y_0}{(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2} \right], \\
\sigma_{yz}^{(2,0)} &= -D_2 \left[ \frac{x - f_2(y_0)}{(x - f_2(y_0))^2 + (y - y_0)^2} - \frac{x - f_2(y_0)}{(x - f_2(y_0))^2 + (y + y_0)^2} \right]. \quad (3.33)
\end{aligned}$$

Вклад величины упоминаемой в [4] ступеньки на поверхности кристалла в данном случае может быть учтен, например, в нижнем пределе интегрирования в (3.30) заменой нуля на  $a_0$ . Однако, как показали расчеты, этот вклад на конфигурацию полей напряжений незначительный.

На рис. 3.37–3.41 представлены результаты расчетов полей напряжений у клиновидного двойника с прямолинейными границами, находящегося у поверхности кристалла.

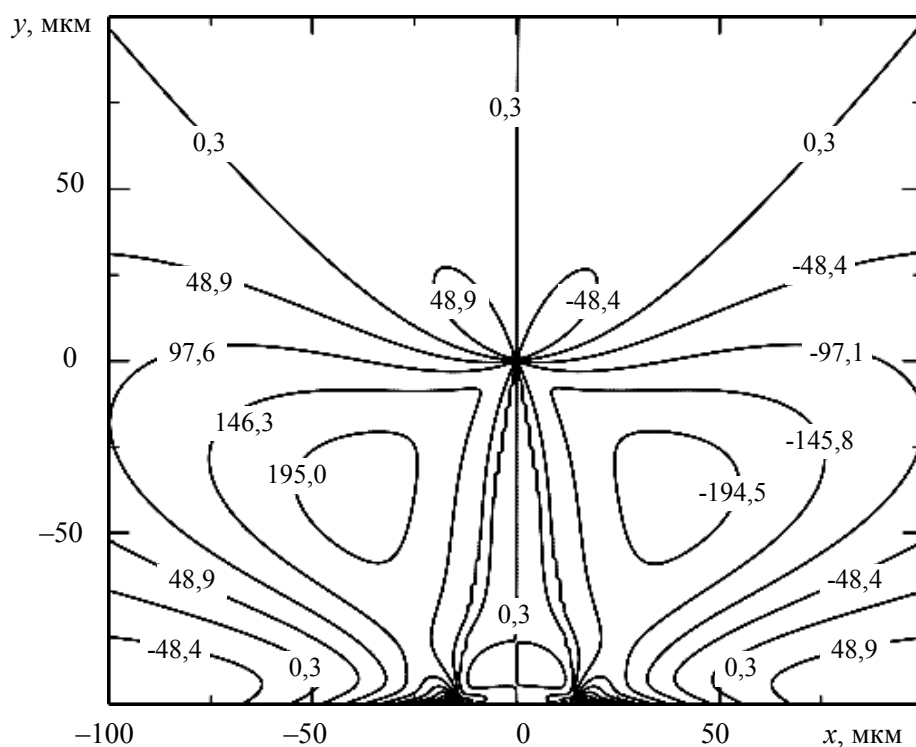


Рис. 3.37. Распределение напряжений  $\sigma_{xx}^*(x, y)$  у клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла

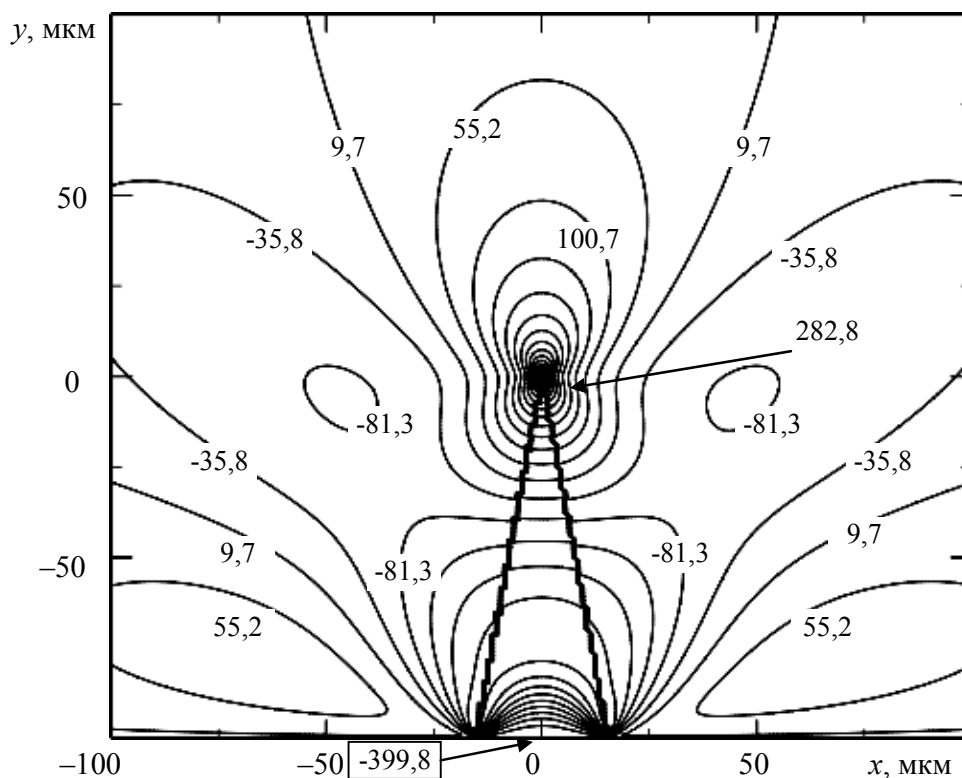


Рис. 3.38. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}^*(x, y)$  у клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла

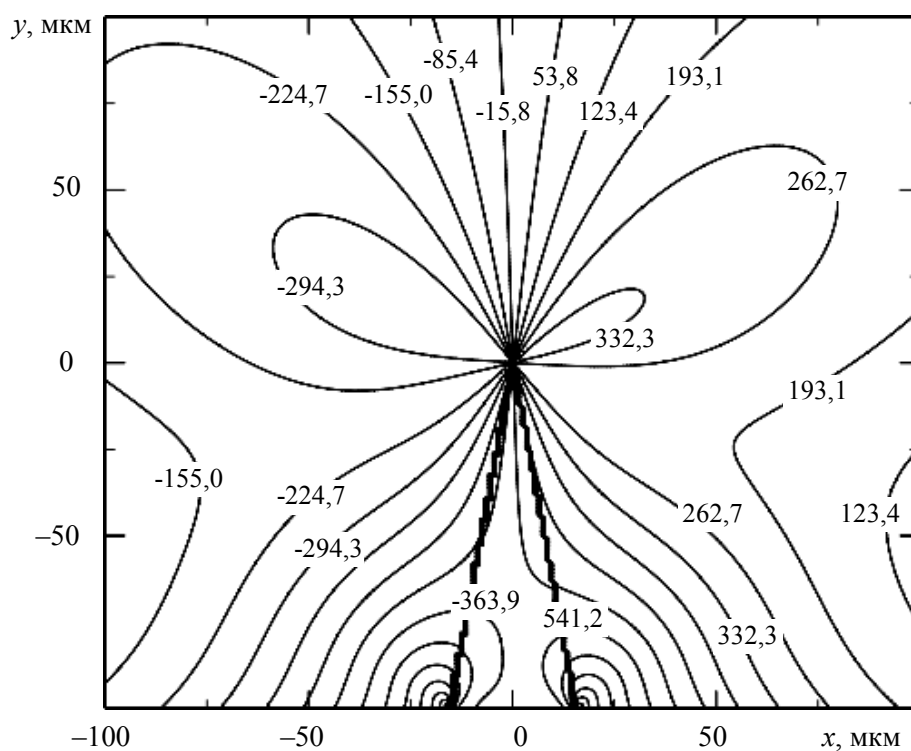


Рис. 3.39. Распределение напряжений  $\sigma_{yy}^*(x, y)$  у клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла

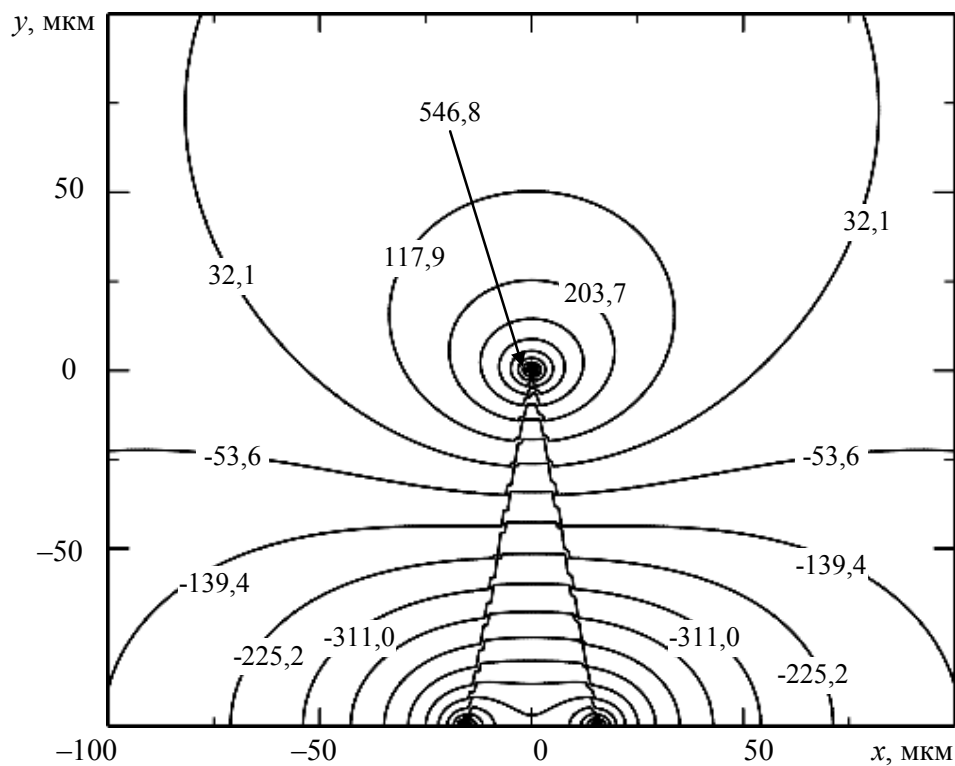


Рис. 3.40. Распределение напряжений  $\sigma_{xz}^*(x, y)$  у клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла

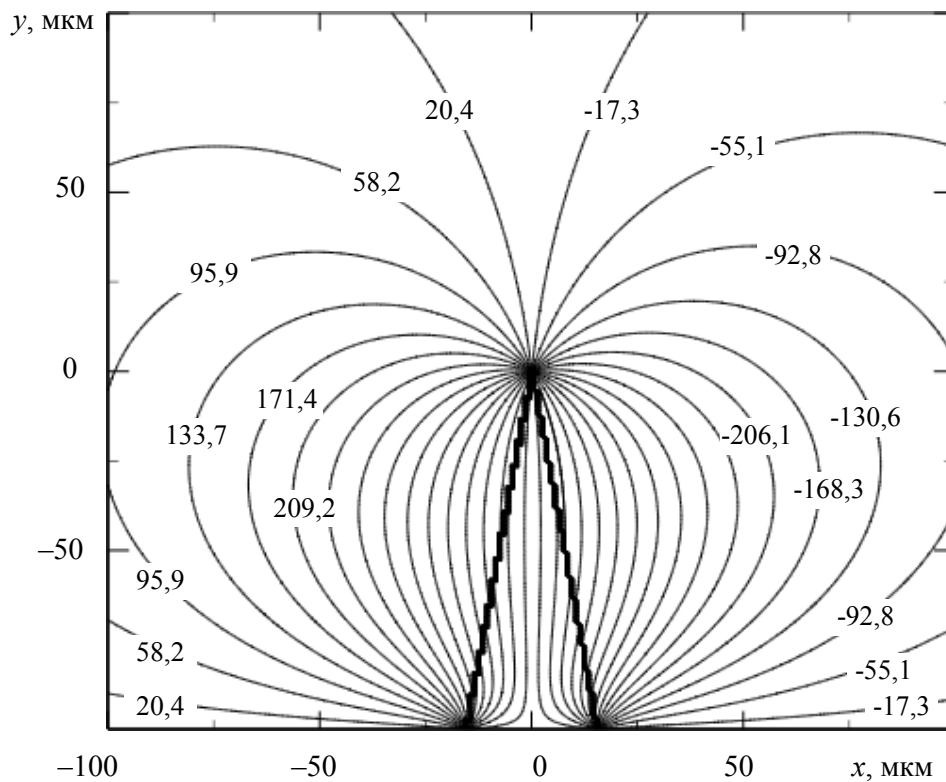


Рис. 3.41. Распределение напряжений  $\sigma_{yz}^*(x, y)$  у клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла

Для удобства ведения расчетов, без ущерба общности полученных результатов, рассчитывалась следующая приведенная величина:

$$\sigma_{ij}^*(x, y) = \sigma_{ij}(x, y)L/\rho A_{ij}, \quad (3.34)$$

где  $A_{xx} = A_{xy} = A_{yy} = D_1$ ;  $A_{xz} = A_{yz} = D_2$ .

Принималось:  $H = 31$  мкм,  $L = 100$  мкм.

Из рис. 3.37–3.41 видно, что напряжения локализуются преимущественно на границах двойника и у его вершины. Наблюдается симметрия в конфигурации полей напряжений относительно направления развития двойника. На поверхности кристалла у устья двойника напряжения отличны от нуля.

Нормальные напряжения  $\sigma_{xx}$  локализуются не только на границах двойника, но и в области половины длины двойника на расстоянии от него порядка 25 мкм (рис. 3.37). У вершины двойника наблюдается чередование областей сжатия и растяжения.

Сдвиговые напряжения  $\sigma_{xy}$  положительны у вершины и у устья двойника, а отрицательны у границ двойника и внутри него (рис. 3.38).

На поверхности кристалла данные напряжения в области, подвергнутой двойникованию отрицательны, а в остальной области положительны.

Напряжения  $\sigma_{yy}$  у одной из границ двойника положительны, а у другой – отрицательны (рис. 3.39). Такая же ситуация наблюдается и в случае скалывающих напряжений  $\sigma_{yz}$  (рис. 3.41). Напряжения  $\sigma_{xz}$  положительны у вершины двойника и отрицательны у его устья (рис. 3.40).

Проведенные в данной работе расчеты показали, что увеличение плотности двойникующих дислокаций на одной из границ двойника приводит к потере симметрии в конфигурации полей напряжений у клиновидного двойника. Растет локализация напряжений у границы с большей плотностью двойникующих дислокаций.

Представляет интерес учет формы границ клиновидного двойника в конфигурации полей напряжений. Результаты расчетов представлены на рис. 3.42 и 3.43 на примере скалывающих напряжений  $\sigma_{xy}$ .

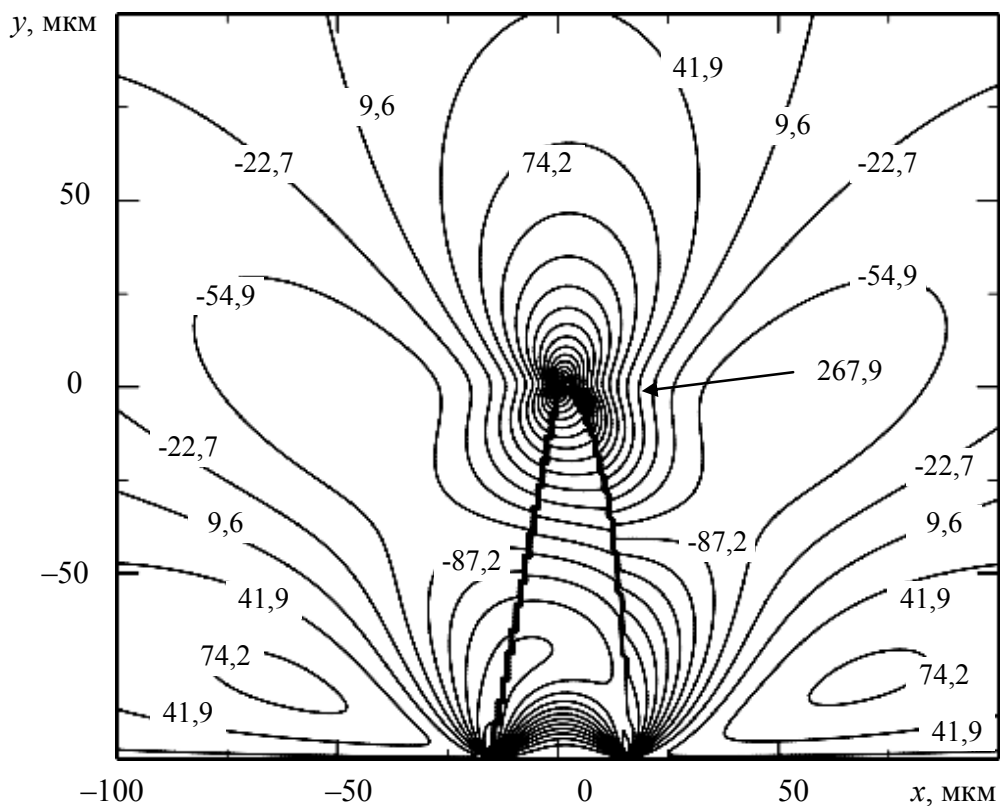


Рис. 3.42. Результаты расчета приведенных сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}^*(x, y)$  у клиновидного двойника у поверхности с выпуклой границей

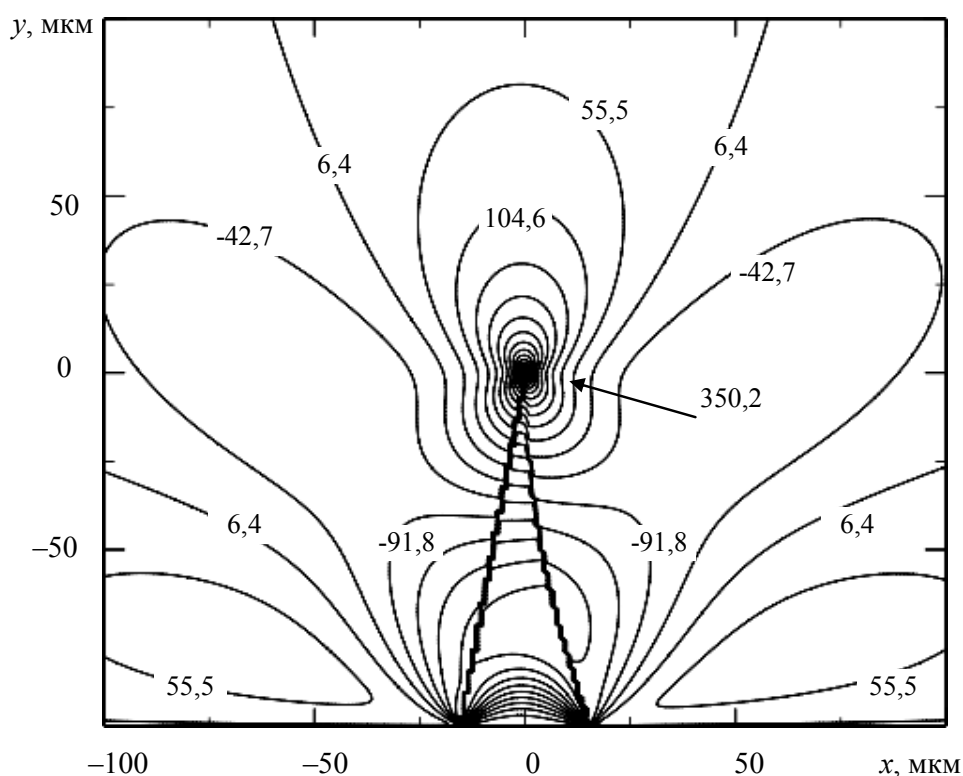


Рис. 3.43. Результаты расчета приведенных сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}^*(x, y)$  у клиновидного двойника у поверхности с вогнутой границей

### 3.4. Условие равновесия клиновидного двойника в его макрокопической дислокационной модели при отсутствии внешних напряжений

По аналогии с данными работы [20], условие равновесия клиновидного двойника, находящегося вдали от поверхности, при отсутствии внешних деформирующих напряжений запишем в виде

$$b_{кр}\sigma_{xy}(L, 0, x_0) + b_{в}\sigma_{yz}(L, 0, x_0) + S(x_0) = 0, \quad (3.35)$$

где  $S(x_0)$  – сила сопротивления движению вершинной дислокации клиновидного двойника.

Условие (3.35) получено из предположения о том, что в равновесном состоянии сумма сил, действующих на дислокацию в вершине двойника (вершина находится в точке  $x = L, y = 0$ ), должна быть равна нулю.



Подстановка выражения (3.1) в (3.35) дает

$$\int_0^L \sqrt{1+(f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(1,0)}(L,0,x_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(1,0)}(L,0,x_0)] dx_0 + \\ + \int_0^L \sqrt{1+(f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(2,0)}(L,0,x_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(2,0)}(L,0,x_0)] dx_0 = -S(x_0). \quad (3.36)$$

Таким образом, дифференцируя левые и правые части по  $dx_0$ , получим

$$\sqrt{1+(f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(1,0)}(L,0,x_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(1,0)}(L,0,x_0)] + \\ + \sqrt{1+(f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(2,0)}(L,0,x_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(2,0)}(L,0,x_0)] = -\frac{dS(x_0)}{dx_0}. \quad (3.37)$$

В том случае, если  $S(x_0) = \text{const}$ , соотношение (3.37) может быть представлено в виде

$$\eta(x_0) = \left| \frac{\rho_1(x_0)}{\rho_2(x_0)} \right| = \frac{b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(2,0)}(L,0,x_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(2,0)}(L,0,x_0)}{b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(1,0)}(L,0,x_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(1,0)}(L,0,x_0)} \sqrt{\frac{1+(f_2'(x_0))^2}{1+(f_1'(x_0))^2}}. \quad (3.38)$$

Учитывая соотношения (3.6) и (3.7), из выражения (3.38) можно сделать вывод о том, что баланс плотностей двойникующих дислокаций на противоположных границах клиновидного двойника при  $S(x_0) = \text{const}$  определяется формой данных границ. Рассмотрим случай прямолинейных границ клиновидного двойника, для которых  $\rho_1(x_0) = \rho_2(x_0)$ . В этом случае  $\eta(x_0) = 1$  (рис. 3.42), что означает равенство плотностей двойникующих дислокаций на противоположных двойниковых границах. Это подтверждает предположение о том, что двойники в виде вытянутых равнобедренных треугольников развиваются в малодефектных областях кристалла при синхронном генерировании двойникующих дислокаций на двух двойниковых границах [12], [81].

В случае выпуклой границы, описываемой функцией (3.27) и прямолинейной второй границы, форма которой описывается функцией (3.9), из представленных на рис. 3.44 результатов расчета видно, что плотность двойникующих дислокаций растет в области выпуклости двойниковой границы (рис. 3.44). Согласно (3.27) данная область

находится у вершины двойника, где на рисунке и увеличивается плотность дислокаций. Это согласуется с предположениями, высказанными в работе [12].

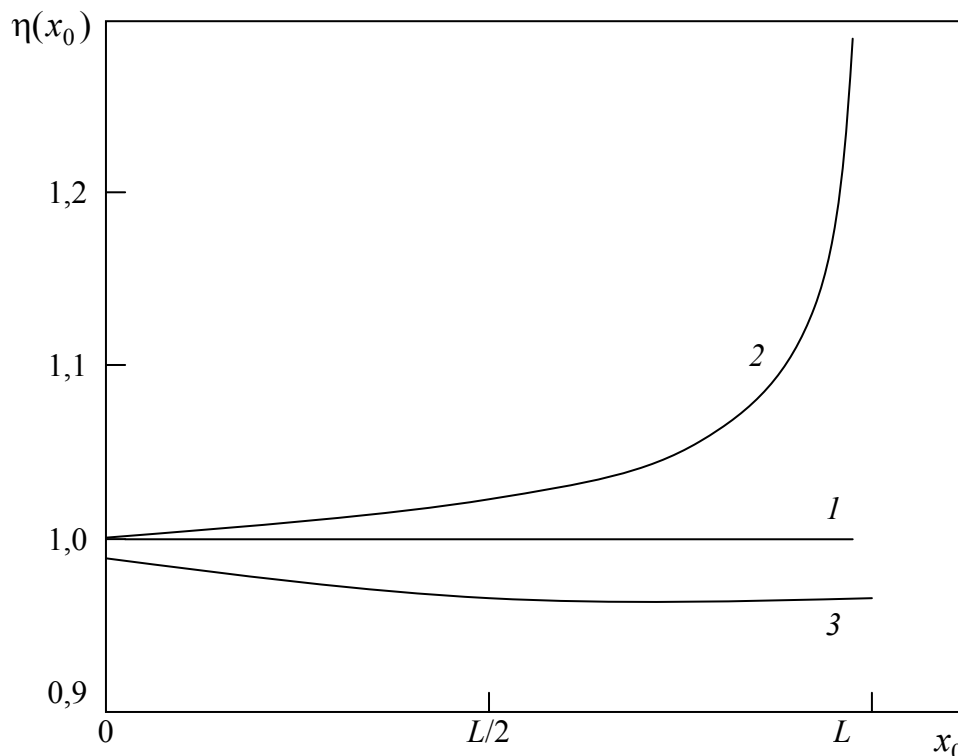


Рис. 3.44. Схематическое изображение зависимости модуля отношения плотностей двойникующих дислокаций на противоположных двойниковых границах от  $x_0$  при  $S(x_0) = \text{const}$  в случае: 1 – прямолинейная граница клиновидного двойника; 2 – выпуклая граница; 3 – вогнутая граница

В случае вогнутой границы повышенная плотность двойникующих дислокаций наблюдается у устья двойника (рис. 3.44). Следует обратить внимание, что на вогнутой двойниковой границе плотность двойникующих дислокаций ниже, чем на прямолинейной границе. В случае выпуклой двойниковой границы наблюдается обратная ситуация. В этом случае плотность двойникующих дислокаций выше на выпуклой границе.

Для двойника, находящегося у поверхности кристалла, условие равновесия примет вид [20]:

$$b_{\text{кр}} \sigma_{xy}(0, L, y_0) + b_{\text{в}} \sigma_{xz}(0, L, y_0) - \frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}}}{2y_0} + S(y_0) = 0. \quad (3.39)$$

Подстановка (3.1) в (3.39) дает

$$\begin{aligned} & \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(y_0))^2} \rho_1(y_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(1,0)}(0, L, y_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(1,0)}(0, L, y_0)] dy_0 + \\ & + \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(y_0))^2} \rho_2(y_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(2,0)}(0, L, y_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(2,0)}(0, L, y_0)] dy_0 = \\ & = \frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}}}{2y_0} - S(y_0). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Дифференцируя правую и левую часть данного соотношения по  $dy_0$ , получим

$$\begin{aligned} & \sqrt{1 + (f_1'(y_0))^2} \rho_1(y_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(1,0)}(0, L, y_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(1,0)}(0, L, y_0)] + \\ & + \sqrt{1 + (f_2'(y_0))^2} \rho_2(y_0) [b_{\text{кр}} \sigma_{xy}^{(2,0)}(0, L, y_0) + b_{\text{в}} \sigma_{yz}^{(2,0)}(0, L, y_0)] = \\ & = -\frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}}}{2y_0^2} - \frac{dS(y_0)}{dy_0}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

В случае прямолинейных двойниковых границ при  $\rho_1(y_0) = \rho_2(y_0) = \rho(y_0)$  и  $S(y_0) = \text{const}$  из (3.41) получим

$$\rho(y_0) = -\frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}}}{2y_0^2 K(0, L, y_0)}, \quad (3.42)$$

где

$$\begin{aligned} K(0, L, y_0) = & \sqrt{1 + \left(\frac{H}{2L}\right)^2} [b_{\text{кр}} (\sigma_{xy}^{(1,0)}(0, L, y_0) + \sigma_{xy}^{(2,0)}(0, L, y_0)) + \\ & + b_{\text{в}} (\sigma_{yz}^{(1,0)}(0, L, y_0) + \sigma_{yz}^{(2,0)}(0, L, y_0))]. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Расчеты показали, что при отсутствии внешних сил равновесная плотность дислокаций при  $S(y_0) = \text{const}$  принимает отрицательные значения. Это указывает на необходимость дополнительных сил для зарождения двойника равновесной формы либо на наличие на двойниковых границах двойникующих дислокаций разного знака, что не имеет физического смысла.

Такая же ситуация наблюдается и при  $S(y_0) \neq \text{const} > 0$ . Так, например, при  $S(y_0) = Ay_0 + B$  (здесь  $A$  и  $B$  – константы) получаем

$$\rho(y_0) = -\frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}} + 2Ay_0^2}{2y_0^2 K(0, L, y_0)}. \quad (3.44)$$

В этом случае  $\rho(y_0)$  всегда больше нуля, когда  $A < 0$ . Это означает, что сила сопротивления должна действовать в направлении развития двойника, что физически невозможно. Все это указывает на необходимость наличия дополнительных внешних сил, направленных на преодоление силы притяжения двойникующих дислокаций к поверхности и сил сопротивления развитию двойника.

### 3.5. Расчет распределения примеси и потоков ее миграции у клиновидного двойника

Атмосферы примесей у дислокаций во многом определяют их поведение при внешнем деформировании кристаллических материалов, изменяя динамические параметры дислокаций [40], [51], [77], [82]–[86]. Избыток примесных атомов в областях локализации напряжений повышает вероятность зарождения фазы, образование которой вдали от источников напряжений невозможно [87]. Это представляет интерес в плане разработки технологии целенаправленного формирования необходимых свойств материалов.

Согласно дислокационной модели двойников, двойниковые границы моделируются упорядоченно расположенно относительно друг друга совокупностью двойникующих дислокаций, являющимися частичными дислокациями Шокли [40]. При этом вопросы, связанные с определением характера развития двойниковых прослоек с учетом влияния примесей, в настоящее время остаются мало изученными. Не изучены и вопросы, касающиеся определения потоков миграции примесей у двойников. Решить данные задачи экспериментальными методами трудно. Поэтому целесообразно использование математических методов, рассмотренных в [40].

Распределение легирующего компонента у клиновидного двойника рассчитывается по формуле [40]:

$$C = C_0 \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \quad (3.45)$$

где  $C_0$  – концентрация примесей вдали от внутренних источников напряжений;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;

$U$  – энергия взаимодействия примесей с клиновидным двойником, которая находится по формуле [40]:

$$U = -\frac{4}{3}\pi r^3 \varepsilon (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}). \quad (3.46)$$

Здесь  $r$  – радиус атома матрицы;  $\varepsilon = (r - r_0)/r$  – малый параметр ( $r_0$  – радиус атома легирующего компонента);  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  – нормальные компоненты тензора напряжений, определяемые из (3.1).

Результаты расчетов распределения примеси у клиновидного двойника представлены на рис. 3.45. Принималось:  $L = 100$  мкм;  $H = 11$  мкм;  $T = 300$  К. Плотность двойникующих дислокаций на двойниковых границах в данной работе принималась постоянной. Профили распределения примесей у клиновидного двойника при  $r > r_0$  и  $r < r_0$  имеют одинаковый вид. Разница заключается в расположении областей минимальной и максимальной концентрации примесей. В том случае, когда  $r > r_0$ , примесь локализуется в областях сжатия (рис. 3.45), а при  $r < r_0$  – в областях растяжения, т. е. в тех областях, где для случая  $r > r_0$  наблюдается максимум концентрации примесей, в случае  $r < r_0$  имеет место ее минимум.

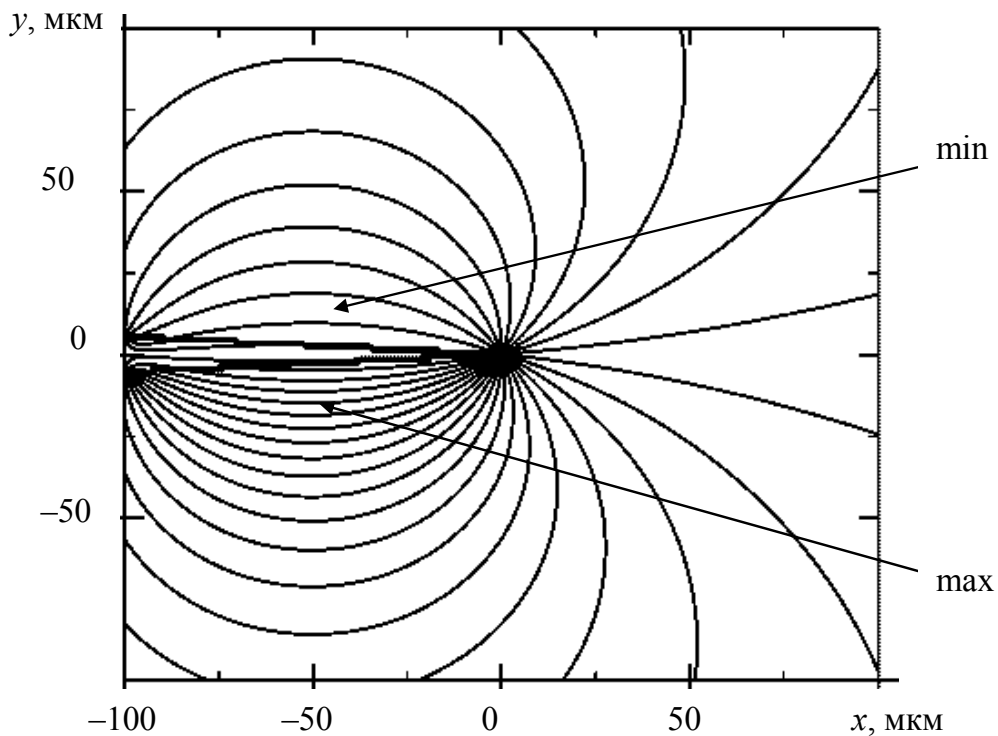


Рис. 3.45. Рассчитанные концентрационные профили распределения примеси у клиновидного двойника с постоянной плотностью двойникующих дислокаций на двойниковых границах

Для определения направления потоков миграции примесей необходимо построение эквипотенциальных поверхностей [40]. Согласно расчетам на основании (3.45), профиль поверхностей для рассматриваемого двойника имеет аналогичный вид, как и вид профилей распределения примесей на рис. 3.45. По данным работы [40] линии, перпендикулярные линиям профилей эквипотенциальных поверхностей, укажут поток миграции примеси. Схематически эти потоки для случая  $r > r_0$  показаны на рис. 3.46. Примесь, радиус которой больше радиуса атомов матрицы, мигрирует в противоположном направлении.

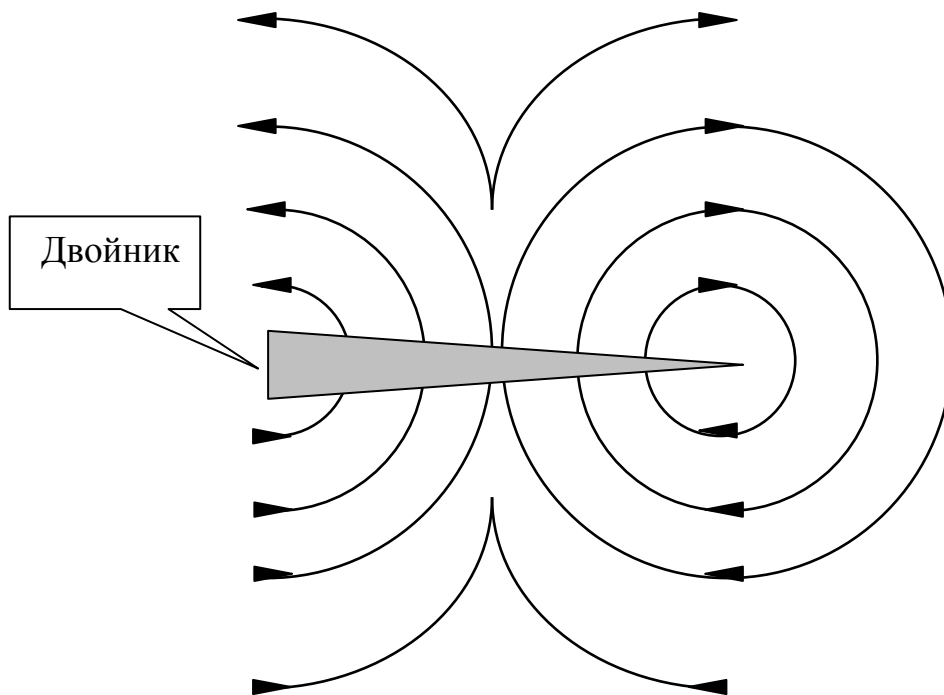


Рис. 3.46. Потоки миграции у клиновидного двойника примеси, радиус которой меньше радиуса атомов матрицы

Следует отметить, что дрейф примесных атомов происходит от области, близкой к вершине и устью двойника к его центральной части. При этом максимальная концентрация примеси наблюдается не только у двойниковых границ, но и в некотором удалении от них (для рассматриваемого двойника это удаление от границы составляет около 10 мкм).

Скорость дрейфа атомов примеси может быть определена из соотношения [40]:

$$\vec{V} = \frac{D}{kT} \vec{F} = -\frac{D}{kT} \text{grad}U, \quad (3.47)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии;  $F$  – сила, действующая на атом примеси в поле двойника. Модуль скорости дрейфа атомов примеси определяется из соотношения

$$V = \frac{D}{kT} \sqrt{\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)^2}. \quad (3.48)$$

Анализируя данное выражение, можно сказать, что частные производные по  $x$  и  $y$  от  $U$  равны нулю в точках максимального и минимального значений  $U = U(x, y)$  [40]. В этих точках  $V = 0$ . Такие области наблюдаются на двойниковых границах, у вершины двойника и в областях максимальной и минимальной концентрации примесей в удалении от средней части двойника. Сопоставляя данные, представленные на рис. 3.45 и 3.46, учитывая (3.47), можно сделать заключение, что в областях максимальной концентрации примеси у клиновидного двойника величина ее скорости стремится к нулю. Это связано с тем, что нормальные напряжения у клиновидного двойника распределены таким образом, что обеспечивают дрейф примеси к местам ее локализации (рис. 3.43) и способствуют ее торможению в этих областях.

## Глава 4

# ЛИНЗОВИДНЫЕ ДВОЙНИКИ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ ЗАРО- ДЫШИ ДВОЙНИКОВ

Линзовидные двойники и наноразмерные зародыши двойников представляют интерес с той точки зрения, что они характеризуют начальную стадию развития двойников. Теория этой стадии двойникования в настоящее время отсутствует. По данным работы [2] решение проблемы исследования начальных стадий двойникования является важной научной задачей, решение которой позволит прогнозировать процессы возникновения двойников и покажет пути управления этими процессами. Поэтому приведенное в данной главе рассмотрение элементов теории нанодвойникования в настоящее время представляется актуальным.

С практической точки зрения явление нанодвойникования, впервые описанное в [11], представляет интерес в области синтеза нанодвойниковых материалов [88].

### **4.1. Использование метода электростатической аналогии в модели линзовидного двойника**

Принцип электростатической аналогии широко используется в теории упругости. Это связано с тем, что потенциалы электрических полей схожи с потенциалами упругих деформаций в твердых телах [40]. В теории двойникования кристаллов принцип электростатической аналогии еще не нашел широкого применения, поэтому



теория двойникования теряет те преимущества, которые дает данный принцип.

Линзовидный двойник представляет собой такой двойник, который имеет форму линзы, используемой в оптических приборах. Такие двойники часто возникают в кристалле при его объемном деформировании [2], [89]–[92]. На рис. 4.1 показаны разрезы такого двойника плоскостями  $XOZ$  (рис. 4.1, *a*) и  $XOY$  (рис. 4.1, *б*) и заданы его параметры:  $L$  – половина длины двойника и  $H$  – половина его ширины. Форма такого двойника может быть получена областью пересечения двух шаров (рис. 4.2) радиусом  $R$ , задаваемых уравнениями [59]:

$$x^2 + y^2 + (z + R - H)^2 = R^2; \quad (4.1)$$

$$x^2 + y^2 + (z + H - R)^2 = R^2. \quad (4.2)$$

Очевидно, что проекция  $D$  области пересечения рассматриваемых шаров на плоскость  $XOY$  ( $z = 0$ ) может быть описана уравнением [59]:

$$x^2 + y^2 = L^2. \quad (4.3)$$

Из (4.3) и (4.1) или (4.2) следует необходимая для будущих расчетов связь  $R$  с  $H$  и  $L$ :

$$R = \frac{L^2 + H^2}{2H}, \quad (4.4)$$

при этом в (4.1) и (4.2) полагалось  $z = 0$ .

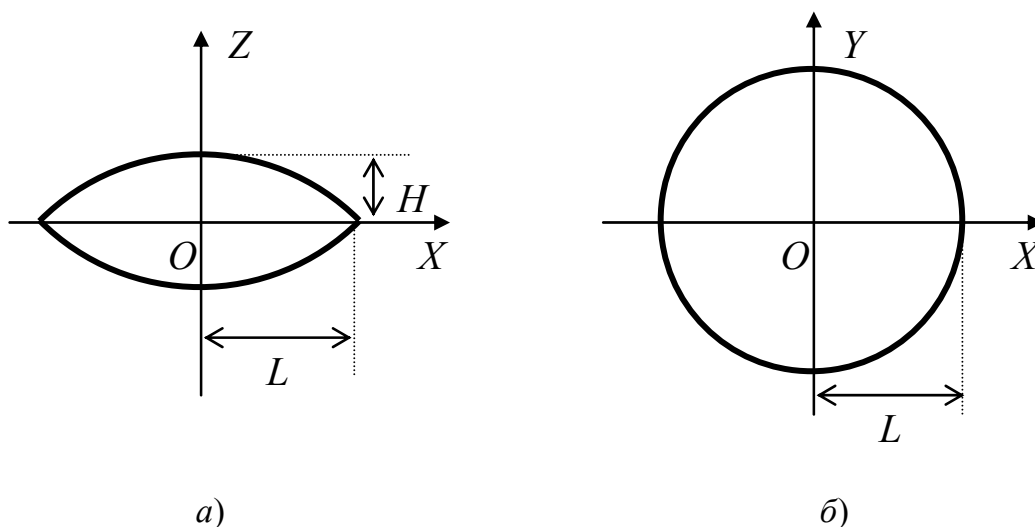


Рис. 4.1. Разрезы линзовидного двойника плоскостями:  
*a* –  $XOZ$ ; *б* –  $XOY$

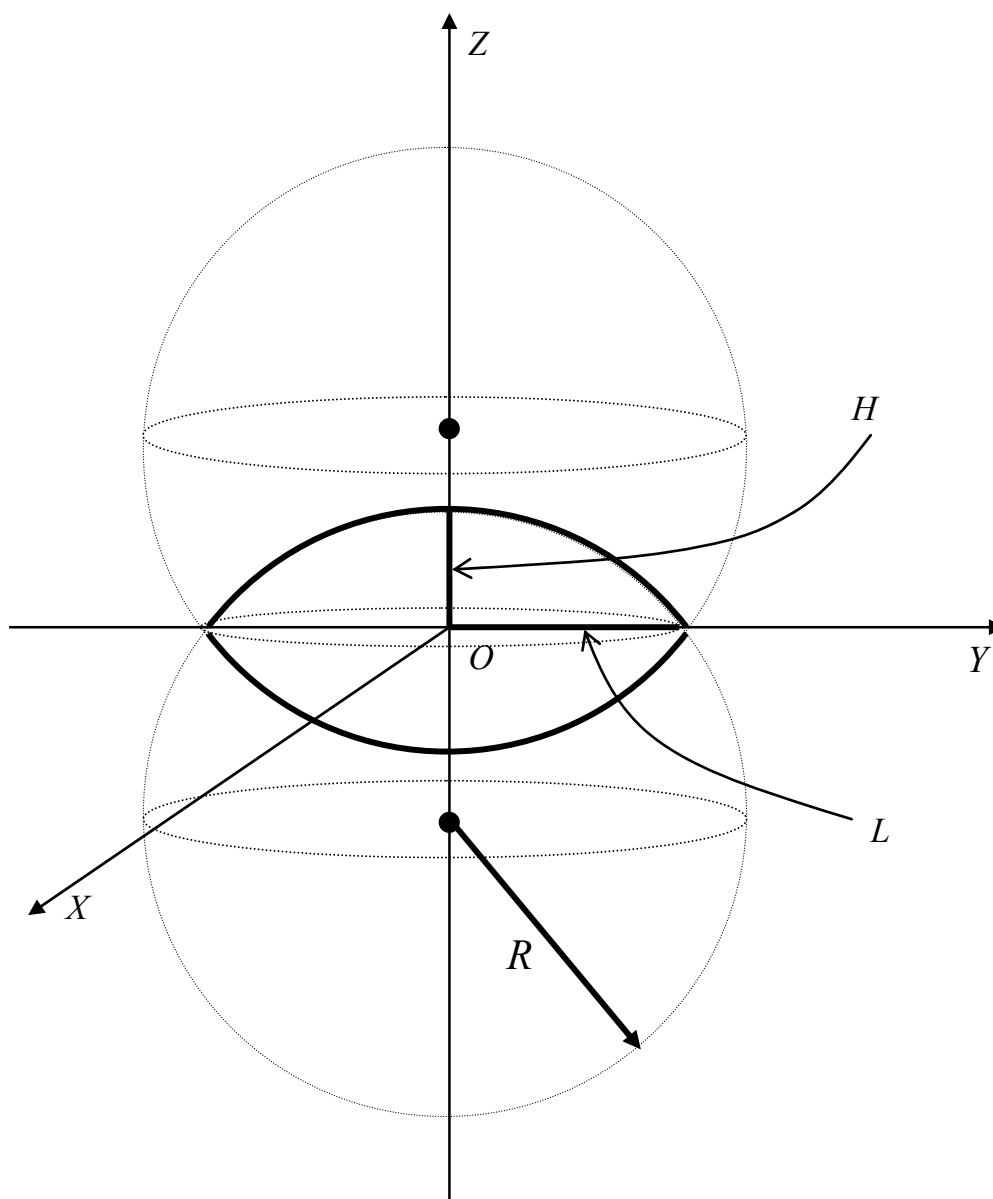


Рис. 4.2. Представление линзовидного двойника как область пересечения двух шаров

В общем виде потенциал  $\varphi(\vec{r})$  электростатического поля, создаваемого зарядом, распределенным с плотностью  $\sigma(\vec{r}')$  по поверхности  $S'$  линзовидного двойника (рис. 4.3), может быть представлен в виде [93], [94]:

$$\varphi(\vec{r}) = k \iint_{S'} \frac{\sigma(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS', \quad (4.5)$$

где  $k$  – постоянная;  $\vec{r}$  и  $(\vec{r} - \vec{r}')$  – радиус-векторы, определяемые по схеме, представленной на рис. 4.3.

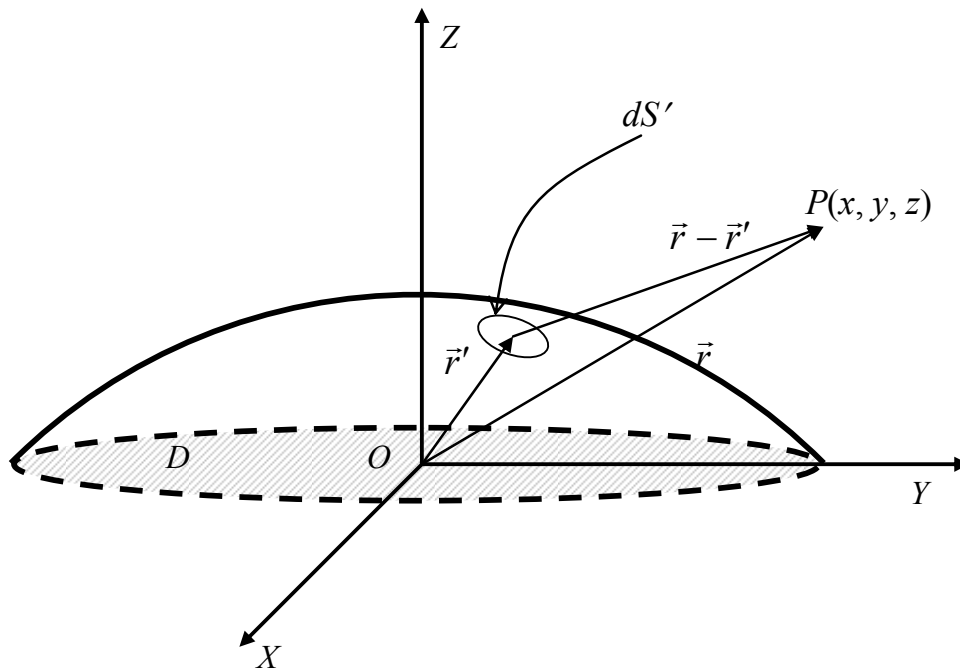


Рис. 4.3. Схема для расчета электростатического потенциала элементом линзовидного двойника

Ввиду симметричности решаемой задачи относительно плоскости  $XOY$ , рассмотрим вначале потенциал, создаваемый заряженной поверхностью двойника, находящейся в положительной по отношению к оси  $OZ$  области пространства (рис. 4.3). Данный потенциал имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi_1(x, y, z) &= k \iint_D \frac{\sigma(x', y', z') \sqrt{1 + \left(\frac{\partial z'}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial z'}{\partial y'}\right)^2} dx' dy'}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}} = \\ &= k \iint_D \frac{\sigma(x', y', z') \sqrt{1 + \left(\frac{\partial z'}{\partial x'}\right)^2 + \left(\frac{\partial z'}{\partial y'}\right)^2} dx' dy'}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + \left(z - (H - R) - \sqrt{R^2 - x'^2 - y'^2}\right)^2}}, \quad (4.6) \end{aligned}$$

где осуществлен переход от интегрирования в (4.5) по области  $S'$  к интегрированию в области  $D$  [95], описываемой уравнением (4.3). Учитывая (4.1), не трудно показать, что в (4.6)

$$\left(\frac{\partial z'}{\partial x'}\right)^2 = \frac{4x'^2}{R^2 - x'^2 - y'^2}; \quad (4.7)$$

$$\left(\frac{\partial z'}{\partial y'}\right)^2 = \frac{4y'^2}{R^2 - x'^2 - y'^2}. \quad (4.8)$$

Тогда (4.6) примет вид

$$\varphi_1(x, y, z) = k \iint_D \frac{\sigma(x', y', z') \sqrt{1 + \frac{4(x'^2 + y'^2)}{R^2 - x'^2 - y'^2}} dx' dy'}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + \left(z - (H - R) - \sqrt{R^2 - x'^2 - y'^2}\right)^2}}. \quad (4.9)$$

В данной работе рассмотрим случай, когда

$$\sigma(x', y', z') = \text{const} = \sigma_0. \quad (4.10)$$

Переходя к полярным координатам

$$x' = \rho \cos \varphi, \quad y' = \rho \sin \varphi, \quad dx' dy' = \rho d\rho d\varphi, \quad (4.11)$$

получим

$$\begin{aligned} \varphi_1(x, y, z) &= k\sigma_0 \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^L \frac{\sqrt{1 + \frac{4\rho^2}{R^2 - \rho^2}} \rho d\rho}{\sqrt{(x - \rho \cos \varphi)^2 + (y - \rho \sin \varphi)^2 + \left(z - (H - R) - \sqrt{R^2 - \rho^2}\right)^2}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Аналогично, используя (4.2), для другой поверхности получим

$$\begin{aligned} \varphi_2(x, y, z) &= k\sigma_0 \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^L \frac{\sqrt{1 + \frac{4\rho^2}{R^2 - \rho^2}} \rho d\rho}{\sqrt{(x - \rho \cos \varphi)^2 + (y - \rho \sin \varphi)^2 + \left(z - (R - H) + \sqrt{R^2 - \rho^2}\right)^2}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Очевидно, что суммарный потенциал  $\varphi(x, y, z)$  находится из соотношения

$$\varphi(x, y, z) = \varphi_1(x, y, z) \pm \varphi_2(x, y, z). \quad (4.14)$$

Результаты компьютерного расчета данного потенциала обобщены в виде схематических зависимостей, приведенных на рис. 4.4. В случае одноименного заряда (знак плюс в (4.14)) на поверхностях линзы максимальное значение потенциал принимает внутри линзы. Эта область максимальных значений потенциала вдоль осей  $OX$  и  $OY$  ограничена значениями  $(-L)$  и  $L$  (рис. 4.4, а), а вдоль оси  $OZ$  – значениями  $(-H)$  и  $H$  (рис. 4.4, б). В случае разноименного заряда (знак минус в (4.14)) на поверхностях симметричных относительно плоскости  $XOY$  потенциал  $\varphi(x, y, z)$  вдоль осей  $OX$  и  $OY$  имеет нулевые значения, а вдоль оси  $OZ$  – знакопеременные (рис. 4.4, в). Причем в точке  $O$  потенциал равен нулю.

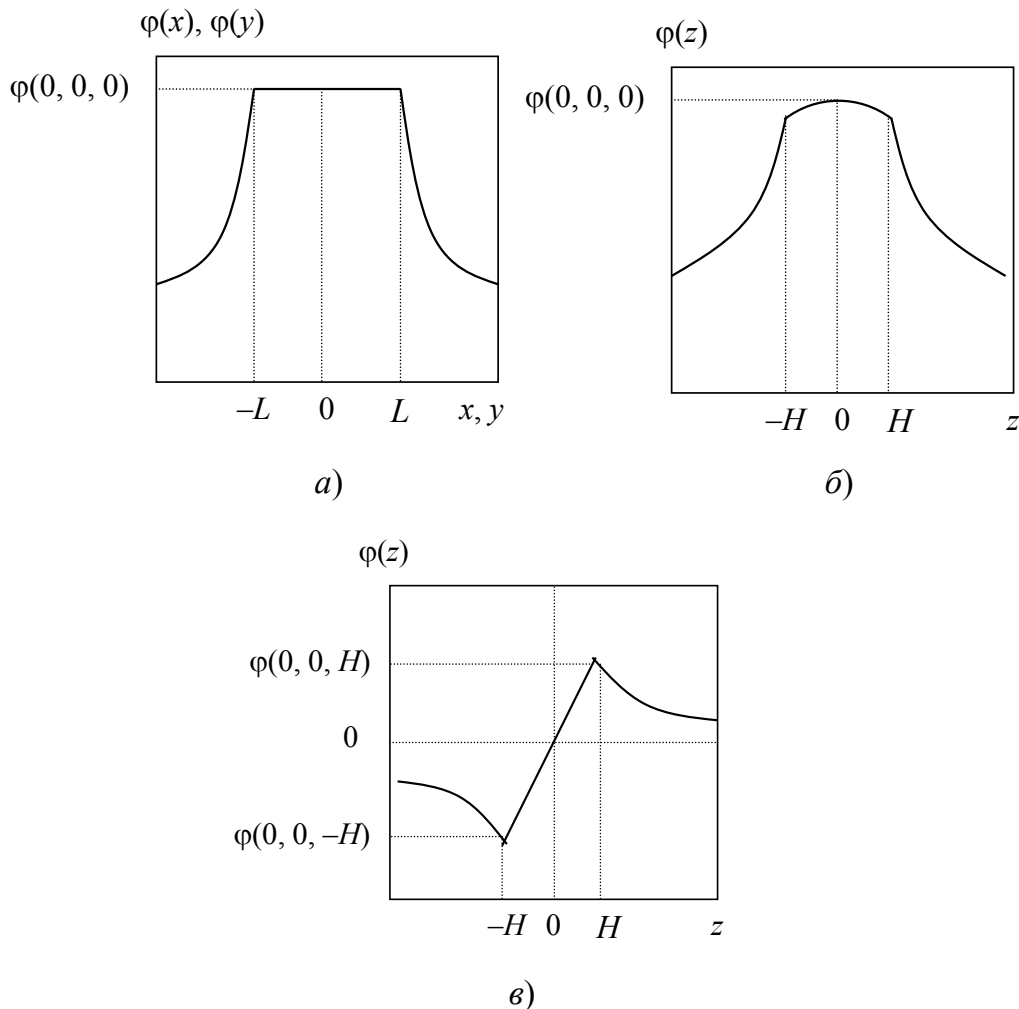


Рис. 4.4. Схематическое изображение вида потенциала  $\varphi(x, y, z)$  в направлениях оси  $OX$  и  $OY$  (а),  $OZ$  (б) в случае одноименного заряда на поверхностях линзы и вдоль оси  $OZ$  (в) в случае разноименного заряда

Зная распределение напряжений у винтовых и краевых двойников [57], можно ввести допущение, что случай одноименного заряда применим для моделирования напряженного состояния у винтового двойника (двойника, состоящего из винтовых двойникующих дислокаций), а случай разноименного заряда – для краевого двойника (двойника, состоящего из краевых двойникующих дислокаций). Такая ситуация справедлива и для двойников с одноименными и разноименными дислокациями на двух границах. Случаю одноименного заряда можно поставить в соответствие двойник с разноименными дислокациями на противоположных границах, а случаю разноименного заряда – двойник с одноименными дислокациями на границах.

Следует обратить внимание, что дислокационная модель и данная модель относятся к разным уровням абстрагирования. Здесь используется такой масштаб рассмотрения двойника, при котором расстояние между дислокациями считается пренебрежимо малым. Однако в отличие от модели, разработанной в [20], распределение дислокаций рассматривается не вдоль линий, а вдоль поверхностей.

Переход к задачам теории упругости осуществляется сопоставлением электростатическому потенциалу  $\varphi$  упругого смещения  $\vec{u}$  [40]. При этом при отсутствии вихревых полей связь между  $\vec{u}$  и  $\varphi$  находится из соотношения

$$\vec{u} = \text{grad}\varphi. \quad (4.15)$$

Отсюда получим

$$\vec{u} = u_x \vec{i} + u_y \vec{j} + u_z \vec{k}, \quad (4.16)$$

где

$$u_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad u_y = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad u_z = \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad (4.17)$$

а  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$ ,  $\vec{k}$  – ортонормированный базис, единичные векторы которого направлены вдоль осей декартовой системы координат.

Компоненты тензора деформации находятся из выражений [96], [97]:

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad \text{при } i = j; \quad (4.18)$$

$$\gamma_{ij} = 2u_{ij}, \quad \text{при } i \neq j. \quad (4.19)$$

Не трудно показать, что из (4.17), (4.18) и (4.19) следует:

$$u_{xx} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}; \quad u_{yy} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}; \quad u_{ij} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}; \quad (4.20)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y}; \quad \gamma_{xz} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial z}; \quad \gamma_{yz} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y \partial z}. \quad (4.21)$$

Данные выражения получены с использованием потенциала  $\varphi(x, y, z)$  без учета  $k$  ((4.12), (4.13)). При этом поверхностная плотность распределения заряда  $\varphi(x', y', z')$  заменялась плотностью упругих сил  $f(x', y', z')$  [98], имеющих место на поверхности линзовидного двойника.

Физические уравнения теории упругости, связывающие напряжения и деформации для линейно-упругих изотропных тел, к которым отнесем тело, в котором рассматривается линзовидный двойник, имеют вид [94]:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= 2\mu u_{xx} + \lambda(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}), \\ \sigma_{yy} &= 2\mu u_{yy} + \lambda(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}), \\ \sigma_{zz} &= 2\mu u_{zz} + \lambda(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}), \\ \tau_{xy} &= \mu \gamma_{xy}; \quad \tau_{xz} = \mu \gamma_{xz}; \quad \tau_{yz} = \mu \gamma_{yz}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

где  $\mu$  – модуль сдвига;  $\lambda = 2\mu\nu/(1 - 2\nu)$  – параметр Ляме (здесь  $\nu$  – коэффициент Пуассона).

Результаты расчета полей напряжений у линзовидного двойника, полученные на основе метода электростатических аналогий при  $f(x', y', z') = \text{const} = f_0$ , представлены на рис. 4.5–4.20. На рис. 4.5–4.8 показано распределение в плоскостях, параллельных плоскостям  $XOY$  (рис. 4.5, 4.6) и  $XOZ$  (рис. 4.7, 4.8) нормальных компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  (где  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ ) при  $z = 1$  (рис. 4.5, 4.6);  $y = 2,5$  (рис. 4.7, 4.8);  $L = 5$ ;  $H = 1$ ;  $f_0 = 1$ . Случай разноименных (рис. 4.5, 4.7) и одноименных (рис. 4.6, 4.8) дислокаций на противоположных границах двойника.

На рис. 4.9–4.20 представлено распределение в плоскостях, параллельных плоскостям  $XOY$  (рис. 4.9, 4.10) и  $XOZ$  (рис. 4.11, 4.12) сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xy}$  (рис. 4.9–4.12);  $\tau_{xz}$  (рис. 4.13–4.16) и  $\tau_{yz}$  (рис. 4.17–4.20) (где  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ;  $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ ;  $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ ) при  $z = 1$

(рис. 4.9, 4.10, 4.13, 4.14, 4.17, 4.18);  $y = 2,5$  (рис. 4.11, 4.12, 4.15, 4.16, 4.19, 4.20);  $L = 5$ ;  $H = 1$ . Случай разноименных (рис. 4.9, 4.11, 4.13, 4.15, 4.17, 4.19) и одноименных (рис. 4.10, 4.12, 4.14, 4.16, 4.18, 4.20) дислокаций на противоположных границах двойника.

$y$ , МКМ

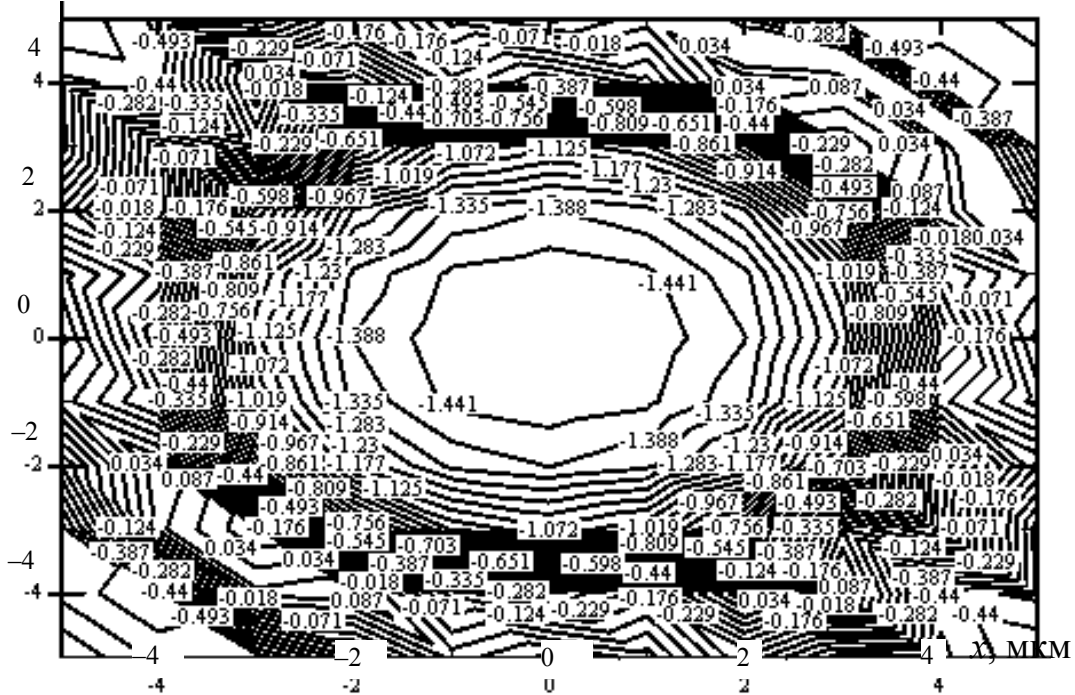


Рис. 4.5. Распределение нормальных компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  (где  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , при  $z = 1$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

$y$ , МКМ

$x$ , МКМ



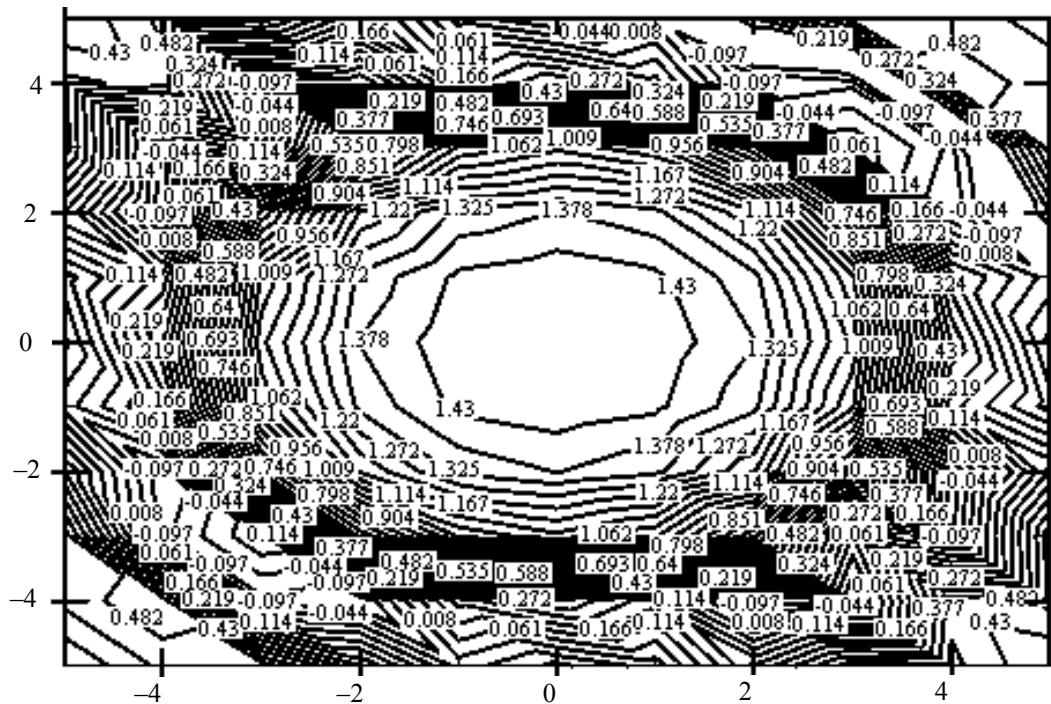


Рис. 4.6. Распределение нормальных компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  (где  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , при  $z = 1$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника

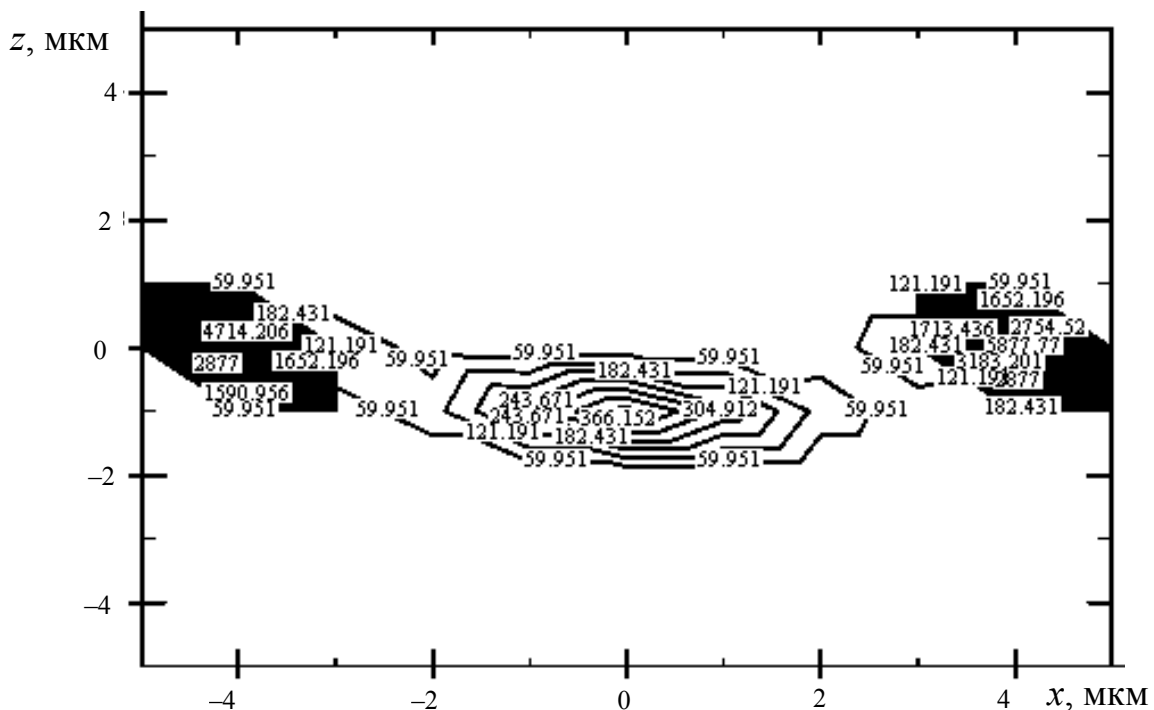


Рис. 4.7. Распределение нормальных компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  (где  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

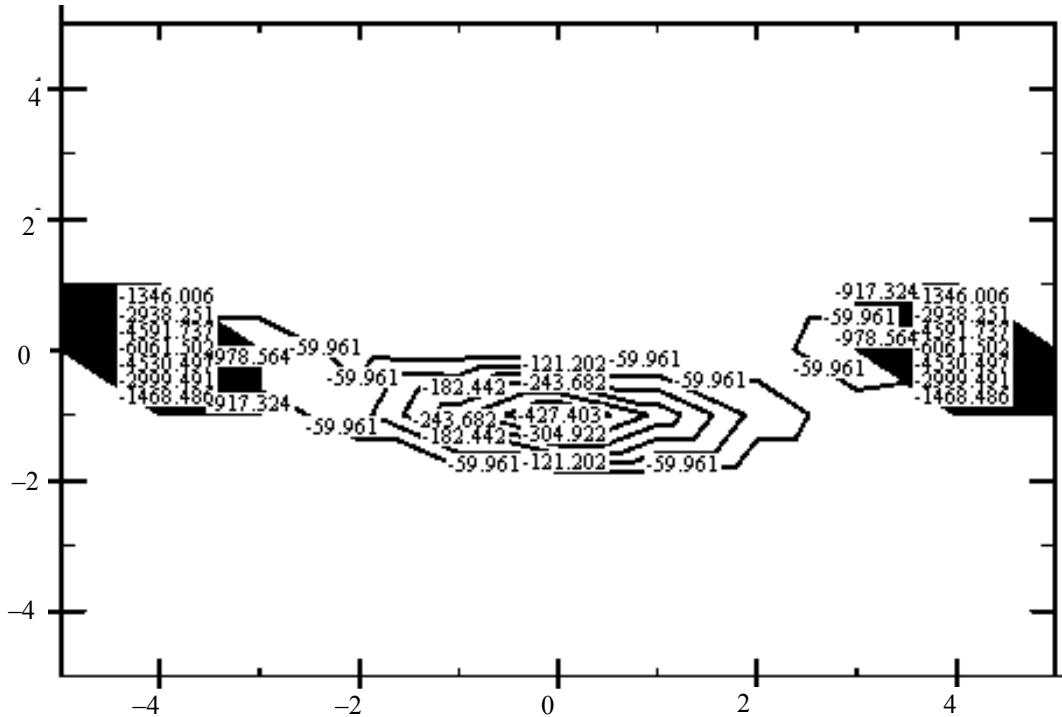


Рис. 4.8. Распределение нормальных компонент тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  (где  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5, L = 5, H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника

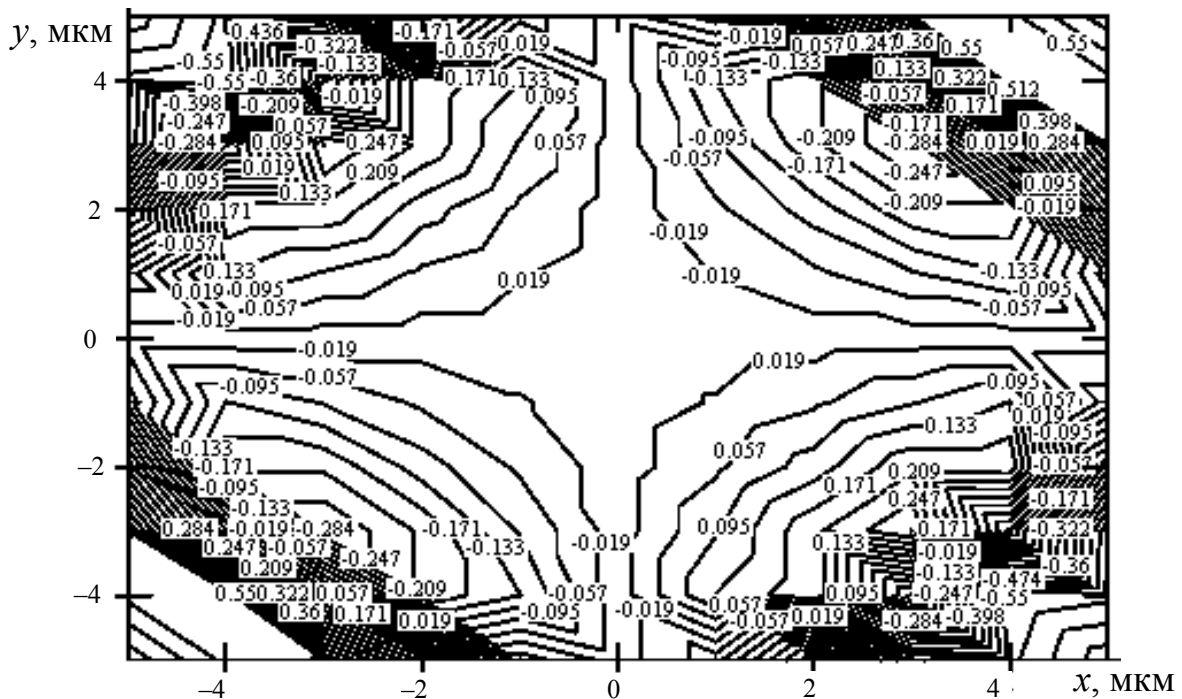


Рис. 4.9. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xy}$  (где  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , при  $z = 1, L = 5, H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

у, МКМ

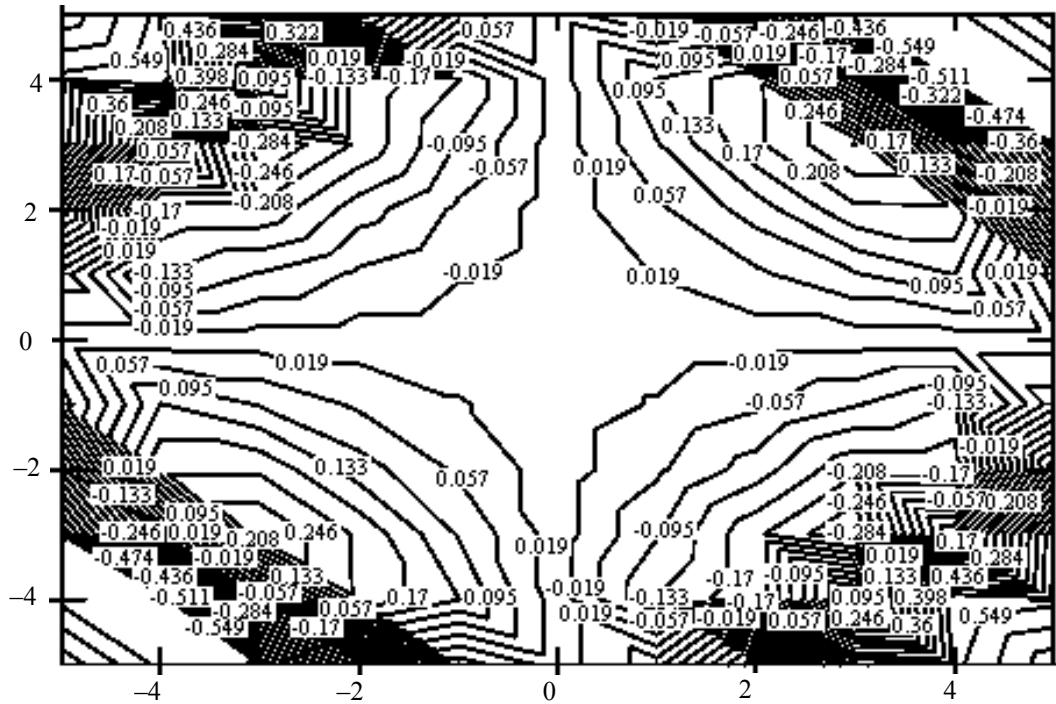


Рис. 4.10. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xy}$  (где  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , при  $z = 1$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника

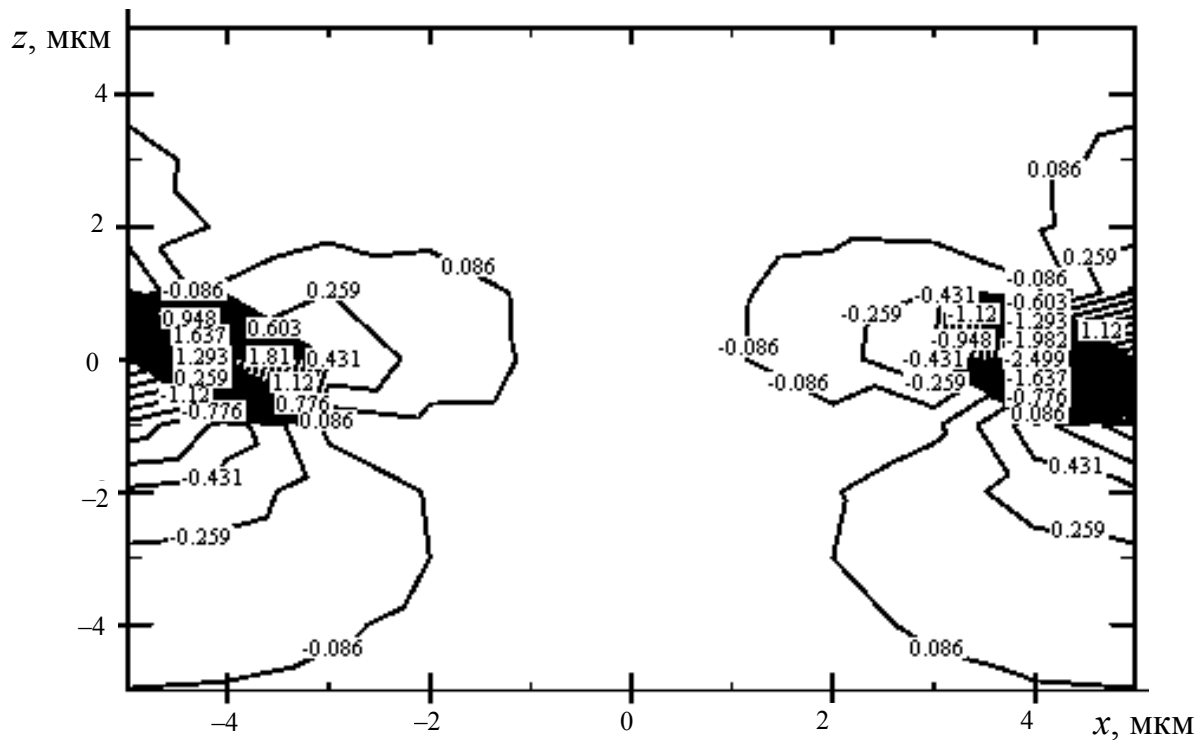


Рис. 4.11. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xy}$  (где  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ) в плоскости, параллельной

плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

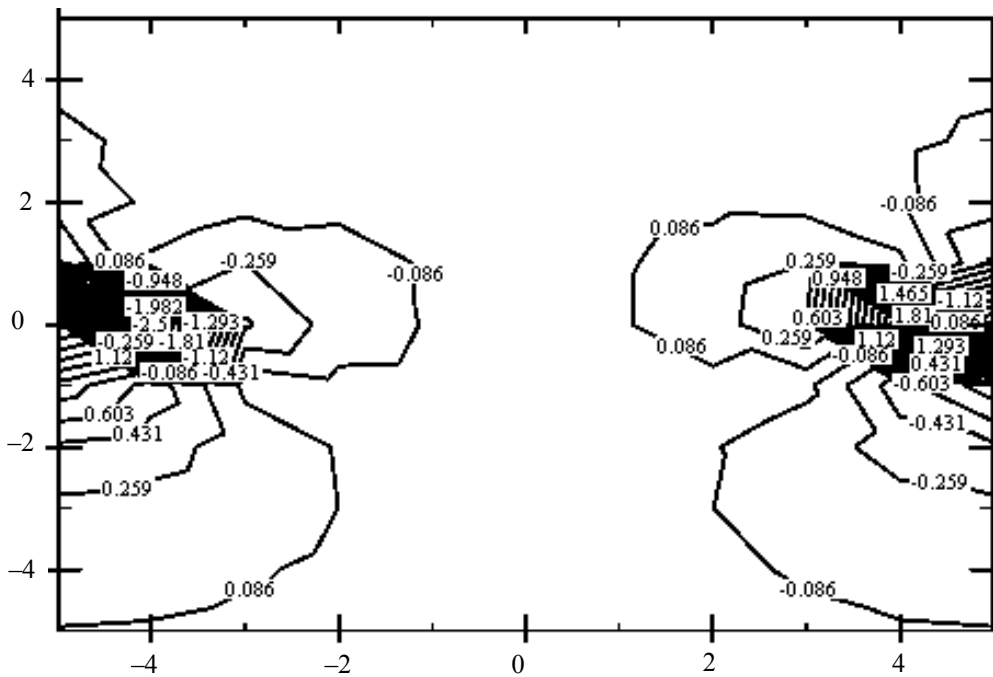


Рис. 4.12. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xy}$  (где  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника

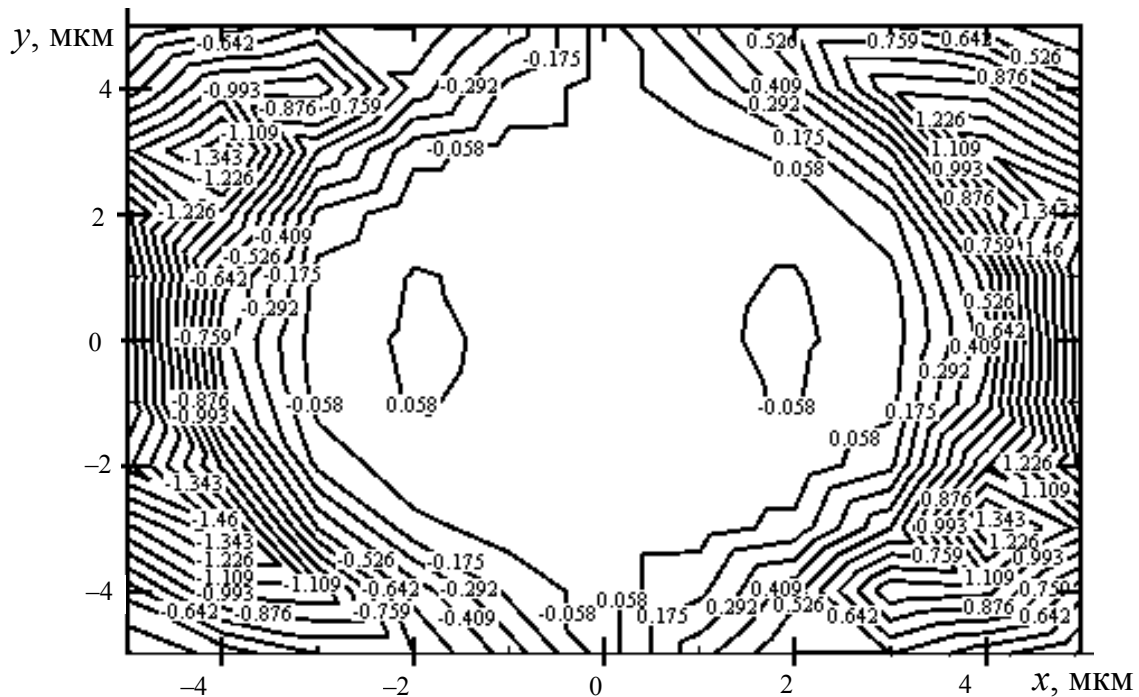


Рис. 4.13. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xz}$  (где  $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ ) в плоскости, параллельной

плоскости  $XOY$ , при  $z = 1, L = 5, H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

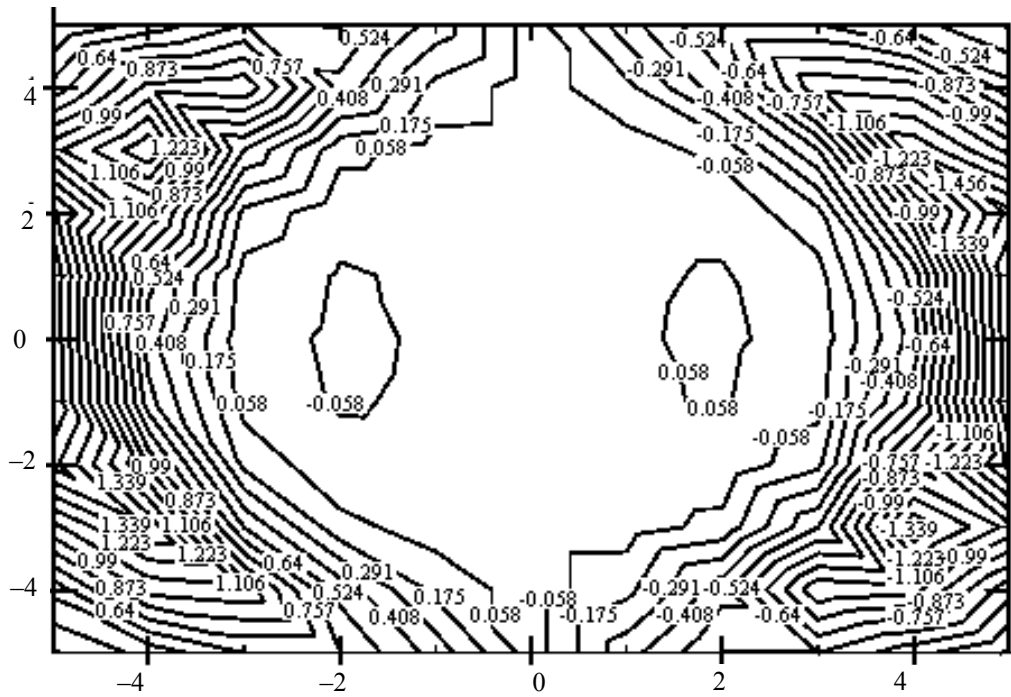


Рис. 4.14. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xz}$  (где  $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , при  $z = 1, L = 5, H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника

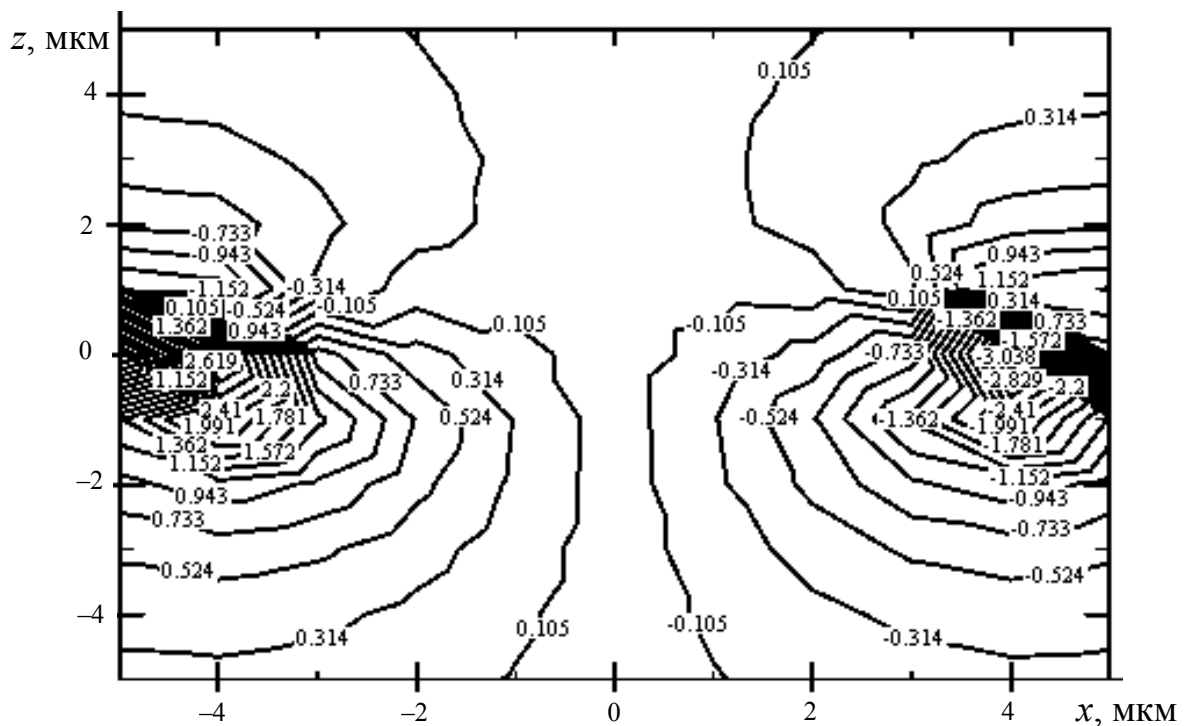


Рис. 4.15. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xz}$  (где  $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

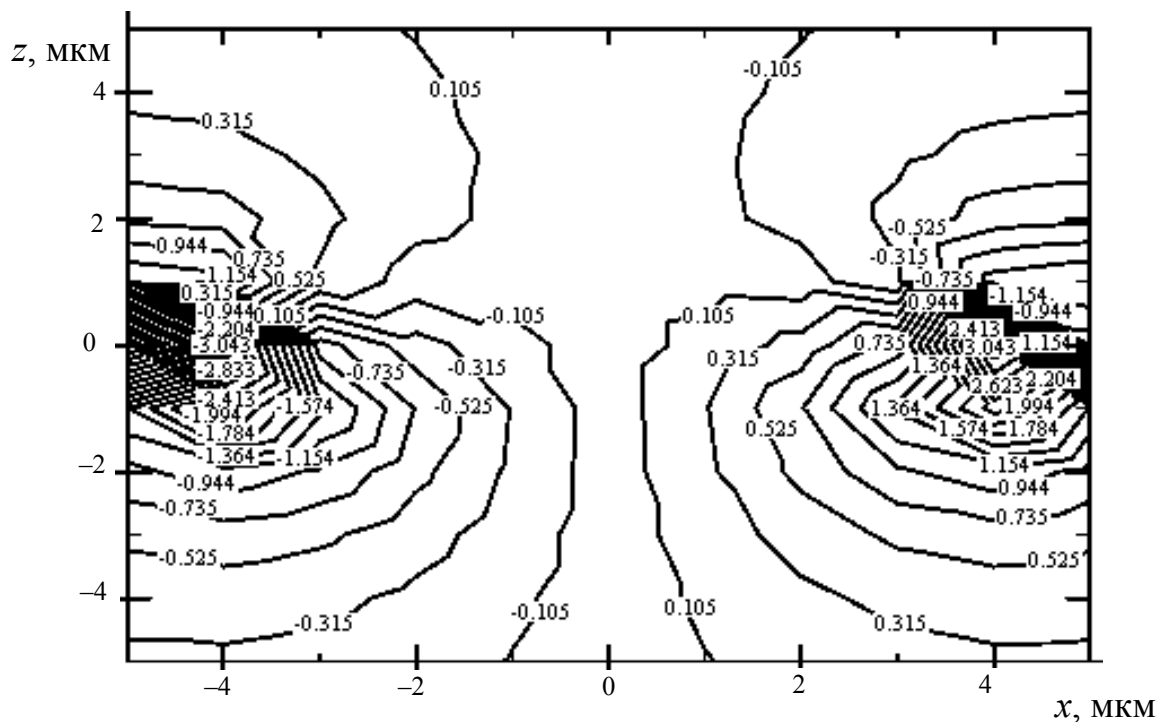


Рис. 4.16. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xz}$  (где  $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника

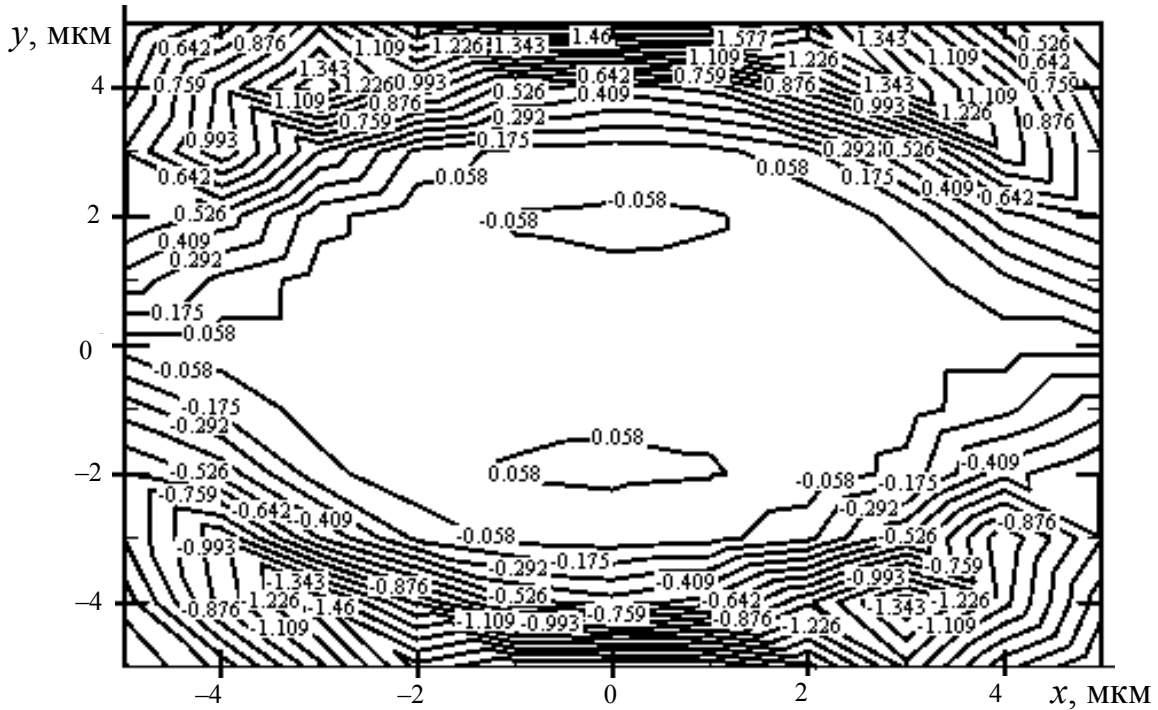


Рис. 4.17. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{yz}$  (где  $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $xOy$ , при  $z = 1$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

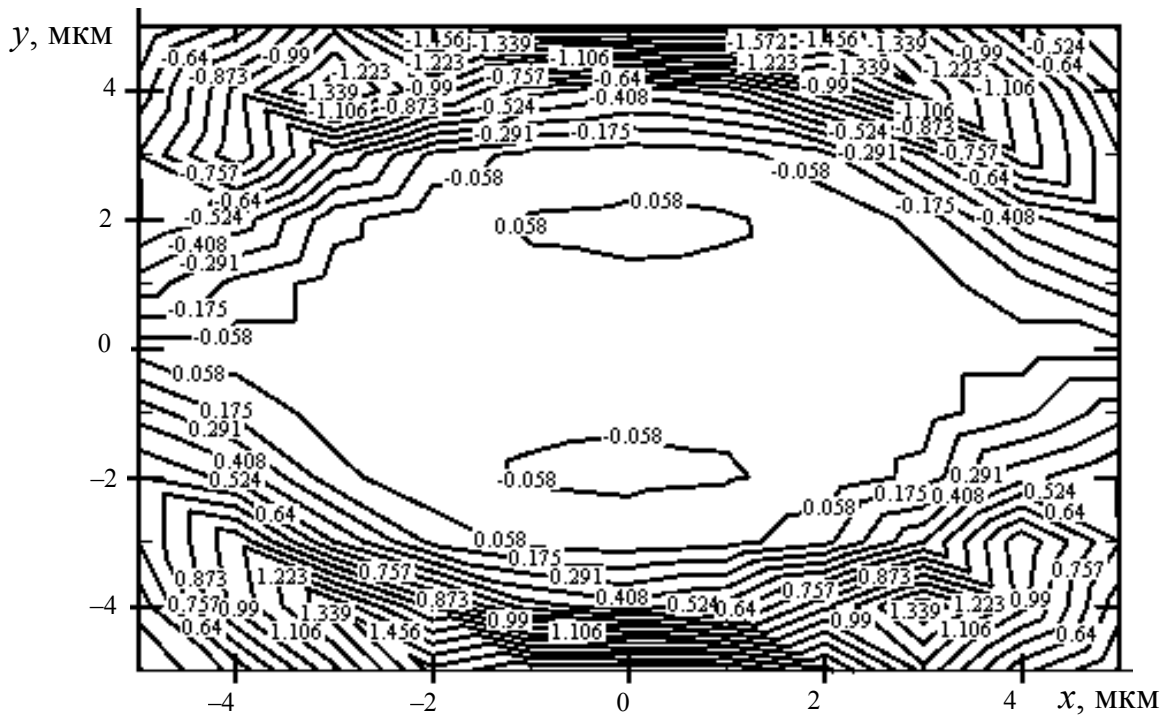


Рис. 4.18. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{yz}$  (где  $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $xOy$ , при  $z = 1$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника

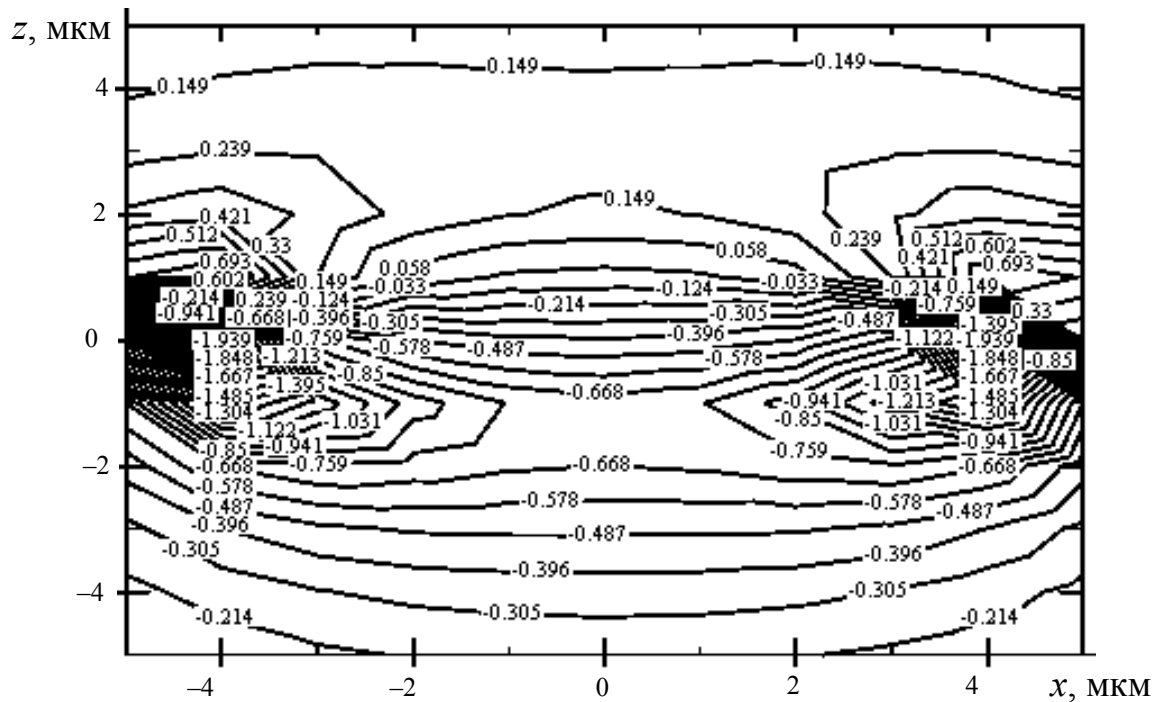


Рис. 4.19. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{yz}$  (где  $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай разноименных дислокаций на противоположных границах двойника

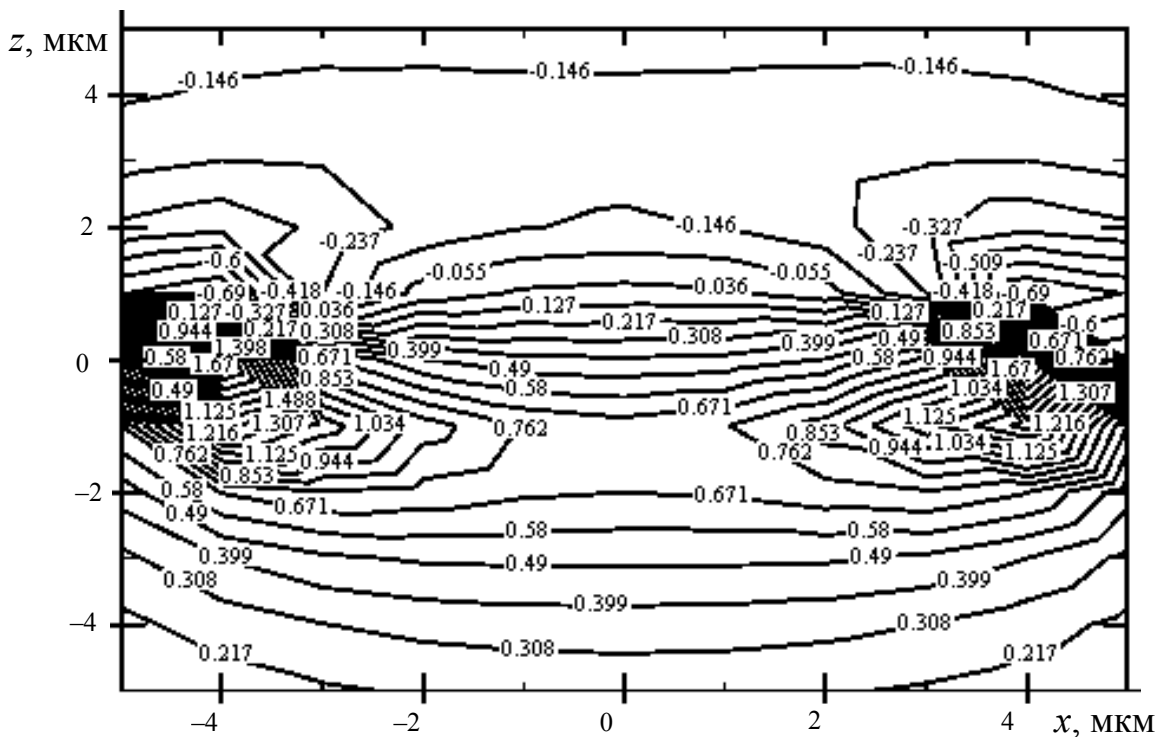


Рис. 4.20. Распределение сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{yz}$  (где  $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ ) в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , при  $y = 2,5$ ,  $L = 5$ ,  $H = 1$ . Случай одноименных дислокаций на противоположных границах двойника



Было установлено, что  $u_{xx} = u_{yy} = u_{zz}$  и  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ . Причем при  $i = j$  из (4.22) получаем

$$\sigma_{ij} = (2\mu + 3\lambda)u_{ij}. \quad (4.23)$$

Принимая во внимание данное соотношение, следует отметить, что у винтовых двойников нормальные напряжения равны нулю, так как они отсутствуют у винтовых дислокаций [40]. Поэтому из приведенных выше гипотез следует считать целесообразной ту, в которой рассматриваются одноименные и разноименные дислокации на двойниковых границах.

В результате расчетов было также установлено, что  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ,  $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ ,  $\tau_{yz} = \tau_{zy}$ . Это соответствует результатам, полученным с помощью дислокационных моделей [26], [31]. Ввиду наличия отличных от нуля всех сдвиговых компонент тензора напряжений рассматриваемого линзовидного двойника можно отметить, что это возможно в случае дислокаций, имеющих как винтовую, так и краевую составляющие вектора Бюргера. К таким дислокациям относятся частичные дислокации.

Нормальные напряжения (рис. 4.5, 4.6) в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , определены округлой формой двойника в данной плоскости, независимо от соотношения знаков дислокаций на противоположных сторонах двойника. Максимальные напряжения наблюдаются вдоль оси  $z$  при  $x = y = 0$ . В данной области при разноименных дислокациях на границах (рис. 4.5) нормальные напряжения отрицательны, а при одноименных – положительны (рис. 4.6). Следует отметить, что на рис. 4.5 и 4.6 приведены небольшие области, в которых величины нормальных компонент тензора напряжений меняют знак на противоположный. В плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$  (рис. 4.7, 4.8), в которой линзовидный двойник имеет эллиптическую форму, нормальные напряжения носят сложный характер. Независимо от знака дислокаций в данной плоскости нормальные напряжения имеют одинаковый знак во всей рассматриваемой области и локализованы внутри двойника и симметрично относительно оси  $OZ$  в удаленности от границ двойника. В случае разноименных дислокаций на противоположных границах двойника по отношению к плоскости  $XOY$  эти напряжения положительны (рис. 4.7), а в случае одноименных – отрицательны (рис. 4.8).

Сдвиговые напряжения  $\tau_{xy}$  в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , симметричны относительно плоскостей  $XOZ$  и  $YOZ$  (рис. 4.9, 4.10). Форма кривых равных напряжений в данном случае не зависит от знака дислокаций на границах двойника. В случае разноименных дислокаций в первой и третьей четвертях плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , напряжения  $\tau_{xy}$  отрицательны, а во второй и четвертой – положительны (рис. 4.9). При одноименных дислокациях на границах двойника эта знаковая картина противоположна предыдущему случаю (рис. 4.10).

При рассмотрении напряжений  $\tau_{xy}$  в плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , видна симметричность распределения данных напряжений по отношению к плоскости  $YOZ$  (рис. 4.11, 4.12). Максимальные напряжения в данном случае локализованы вдоль оси  $OX$  при  $z = 0$ ,  $y = 2,5$  мкм. Причем для плоскости  $XOY$  данные напряжения знакопеременны. В случае разноименных дислокаций на границе двойника в первой и четвертой четвертях плоскости  $XOZ$  напряжения  $\tau_{xy}$  преимущественно отрицательны, а во второй и третьей – положительны (рис. 4.11). В случае одноименных дислокаций картина противоположна (рис. 4.12). В каждой из рассматриваемых четвертей плоскости  $XOZ$  наблюдается изменение знака напряжений  $\tau_{xy}$  на противоположный.

Сдвиговые напряжения  $\tau_{xz}$  в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , симметричны относительно плоскости  $YOZ$  (рис. 4.13, 4.14). В случае разноименных дислокаций на границах двойника вне двойника в положительной области по отношению к оси  $OY$  рассматриваемые напряжения положительны, а в отрицательной – отрицательны (рис. 4.13). Внутри двойника данные напряжения имеют противоположное значение. В случае двойника с одноименными дислокациями на границах в отношении знака напряжений наблюдается противоположная картина (рис. 4.14) при сходстве конфигурации линий равных напряжений.

В плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$ , напряжения  $\tau_{xz}$  симметричны относительно плоскости  $YOZ$  (рис. 4.15, 4.16). В случае одноименных дислокаций данные напряжения положительны в первой и третьей четвертях рассматриваемой плоскости, а во второй и четвертой – отрицательны (рис. 4.15). Противоположная картина наблюдается у линзовидных двойников с разноименными дислокациями на их границах (рис. 4.16).

Конфигурация линий равных напряжений  $\tau_{yz}$  (рис. 4.17, 4.18) в плоскости, параллельной плоскости  $XOY$ , сходна с картиной напряжений  $\tau_{xz}$  (рис. 4.13, 4.14), однако в данном случае симметрия наблюдается относительно плоскости  $XOZ$ . В плоскости, параллельной плоскости  $XOZ$  напряжения  $\tau_{yz}$  в случае дислокаций разного знака на границах двойника положительны в первой и второй четвертях рассматриваемой плоскости (рис. 4.19). Противоположная картина наблюдается у двойников с одноименными дислокациями на границах (рис. 4.20).

## 4.2. Дислокационная мезоскопическая модель нанодвойниковых зародышей

Явление нанодвойникования при локальном деформировании монокристаллов впервые рассматривалось в работе [11]. При этом изучались нанодвойники длиной до 200 нм. В результате проведенных расчетов было показано, что такие двойники состоят из небольшого количества (около десяти) двойникоующих дислокаций. Согласно существующим теориям двойникования [2], проблема зародышей двойников является малоизученной. Это сдерживает развитие целостной теории двойникования кристаллов. Поэтому в настоящее время в целях углубления представлений о зарождении двойникования интерес к нанодвойникам обусловлен тем, что они дают информацию о зародышах двойников, так как нанодвойники являются зафиксированной начальной стадией формирования двойников.

Представим нанодвойник в виде совокупности краевых либо винтовых дислокаций, расположенных относительно друг друга так, как это показано на рис. 4.21. Степень некогерентности двойниковых границ нанодвойника, представленного на рис. 4.21, можно определить из соотношения  $\eta = H/L$ , или  $\eta = h/d$  [11]. Тогда в приближении изотропности среды из известных соотношений для расчета полей напряжений у единичной дислокации [40] нетрудно показать, что напряженное состояние у нанодвойника, представленного на рис. 4.21, может быть определено из выражений, имеющих вид (2.59), в которых  $L$  – половина длины нанодвойника.

У нанодвойника, представленного на рис. 4.21, отсутствует градиент напряжений вдоль оси  $OZ$  (данная ось перпендикулярна плос-

кости рис. 4.21). Это связано с тем, что линии дислокаций двойниковых границ параллельны оси  $OZ$ . Поэтому полученные с помощью (2.59) результаты расчета полей напряжений (рис. 4.22–4.26) справедливы для так называемых нанодвойниковых трубок, у которых геометрический параметр вдоль оси  $OZ$  значительно превосходит величины параметров  $L$  и  $H$ . Однако соотношения (2.59) и результаты, представленные на рис. 4.22–4.26, также могут использоваться для решения плоской задачи расчета полей напряжений в плоскости  $XOY$  у симметричного нанодвойника вдоль оси  $OZ$ .

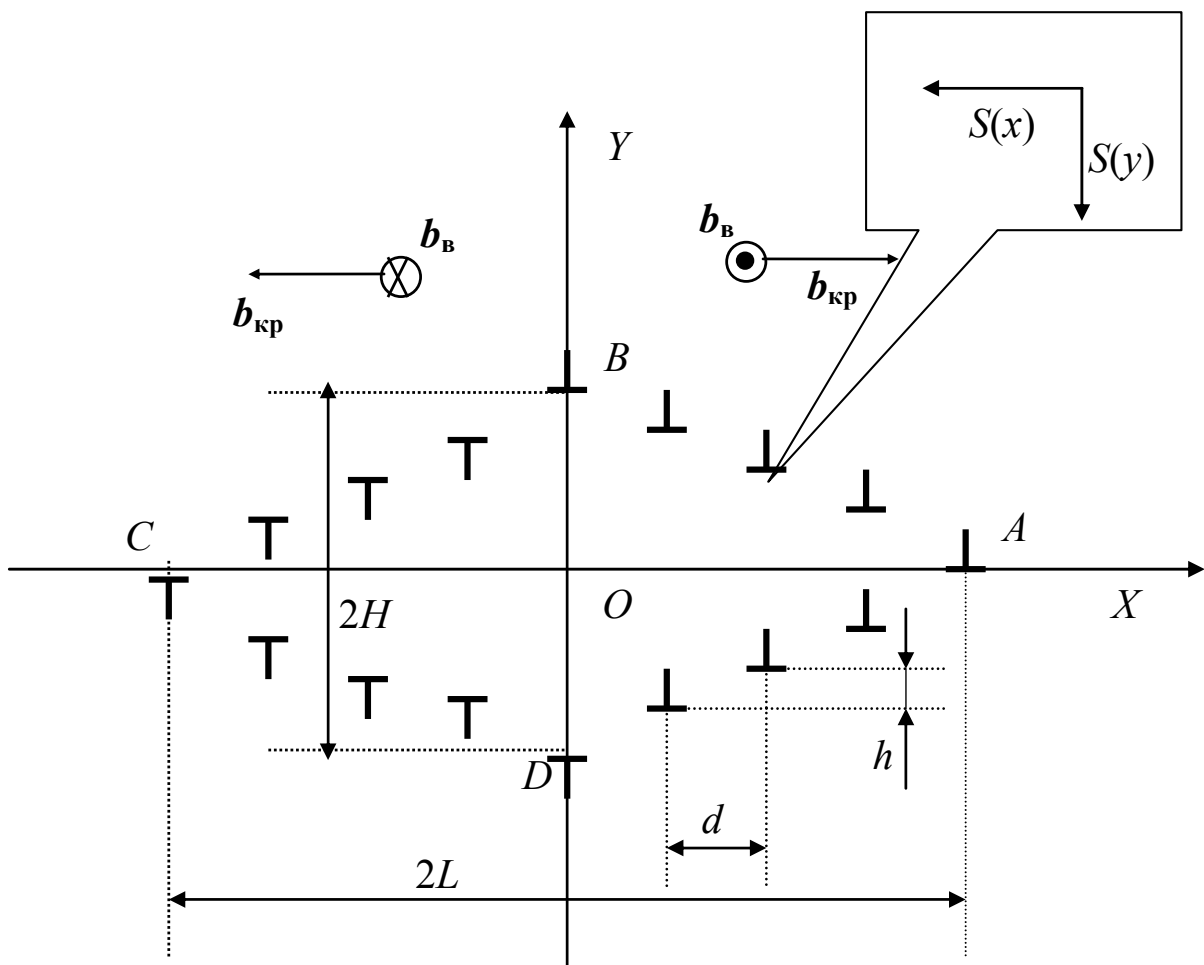


Рис. 4.21. Дислокационная модель нанодвойника

Форма двойника на рис. 4.21 близка к форме линзовидного двойника [2], который зарождается в кристалле при его объемной деформации. В работе [2] такой двойник назван когерентным, который растет за счет постепенного захвата плотноупакованных плоскостей по механизму Франка. Для рассмотренного выше случая результаты

расчета полей напряжений у нанодвойника, показанного на рис. 4.21, в соответствии с (2.59), представлены на рис. 4.22–4.26. При этом принималось:  $N = 10$ ,  $h = 15$  нм,  $d = 30$  нм. В данном случае двойник имеет длину 600 нм и ширину 300 нм при степени некогерентности границ  $\eta = 0,5$ . Как и в [26], рассчитывались приведенные напряжения  $\sigma_{ij}^* = f(x, y)$ , причем:  $\sigma_{xx}^* = -\sigma_{xx} / A$  (рис. 4.22),  $\sigma_{yy}^* = \sigma_{yy} / A$  (рис. 4.23),  $\sigma_{xy}^* = \sigma_{xy} / A$  (рис. 4.24),  $\sigma_{zz}^* = -\sigma_{zz} / B$  (рис. 4.25),  $\sigma_{xz}^* = -\sigma_{xz} / D$  (рис. 4.25),  $\sigma_{yz}^* = \sigma_{yz} / D$  (рис. 4.26). Здесь  $A = \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}$ ,  $B = \frac{\mu b_{кр} \nu}{\pi(1-\nu)}$  и  $D = \frac{\mu b_{в}}{2\pi}$ . Приведенные напряжения  $\sigma_{zz}^*$  и  $\sigma_{xz}^*$  идентичны (рис. 4.25).

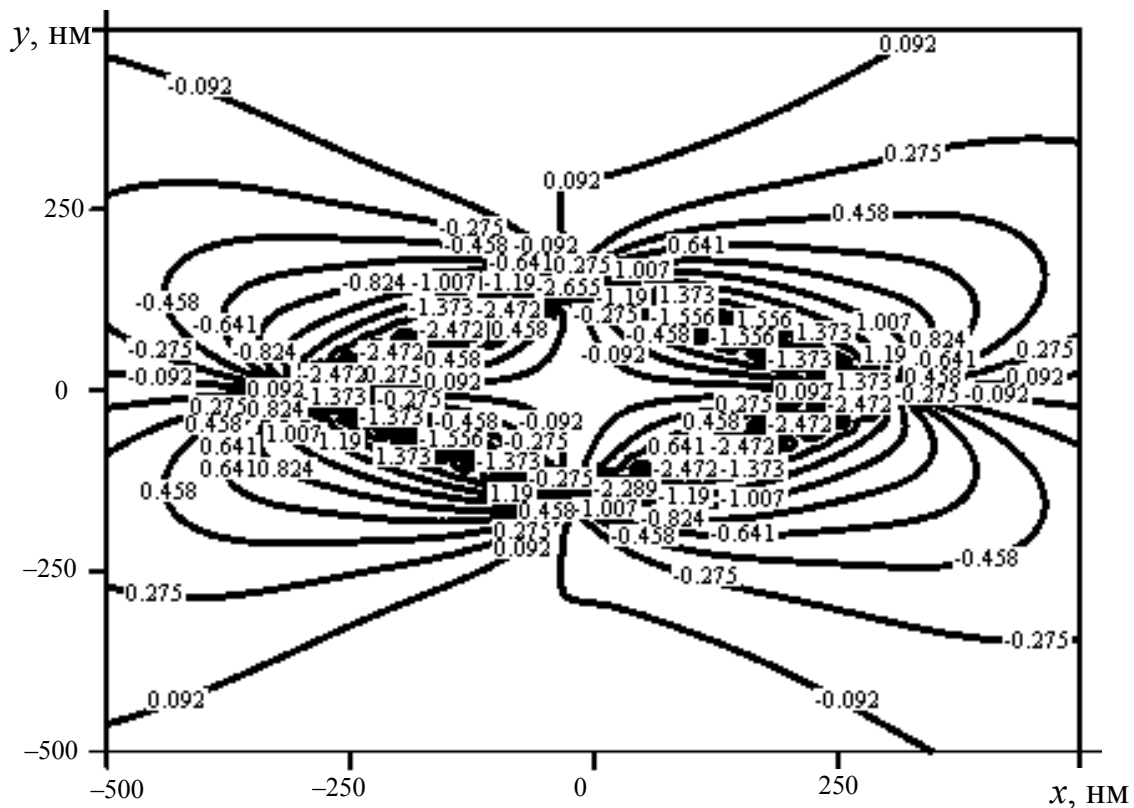


Рис. 4.22. Распределение напряжений  $\sigma_{xx}^*$  у нанодвойника

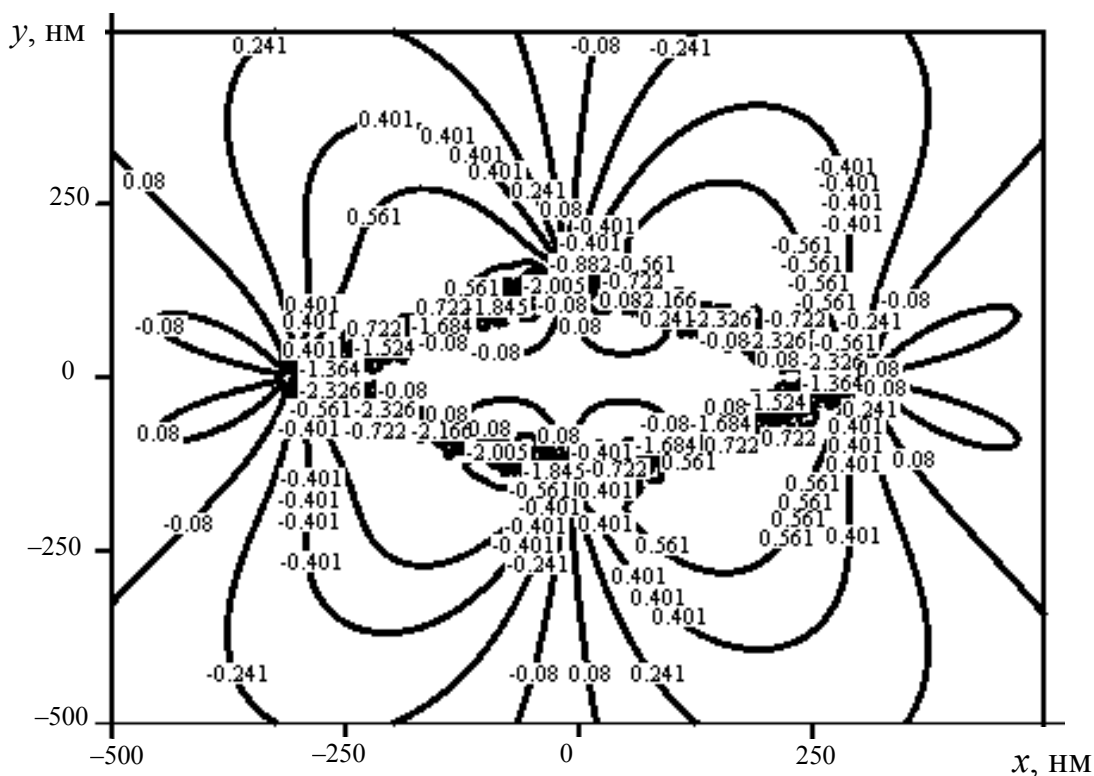


Рис. 4.23. Распределение напряжений  $\sigma_{yy}^*$  у нанодвойника

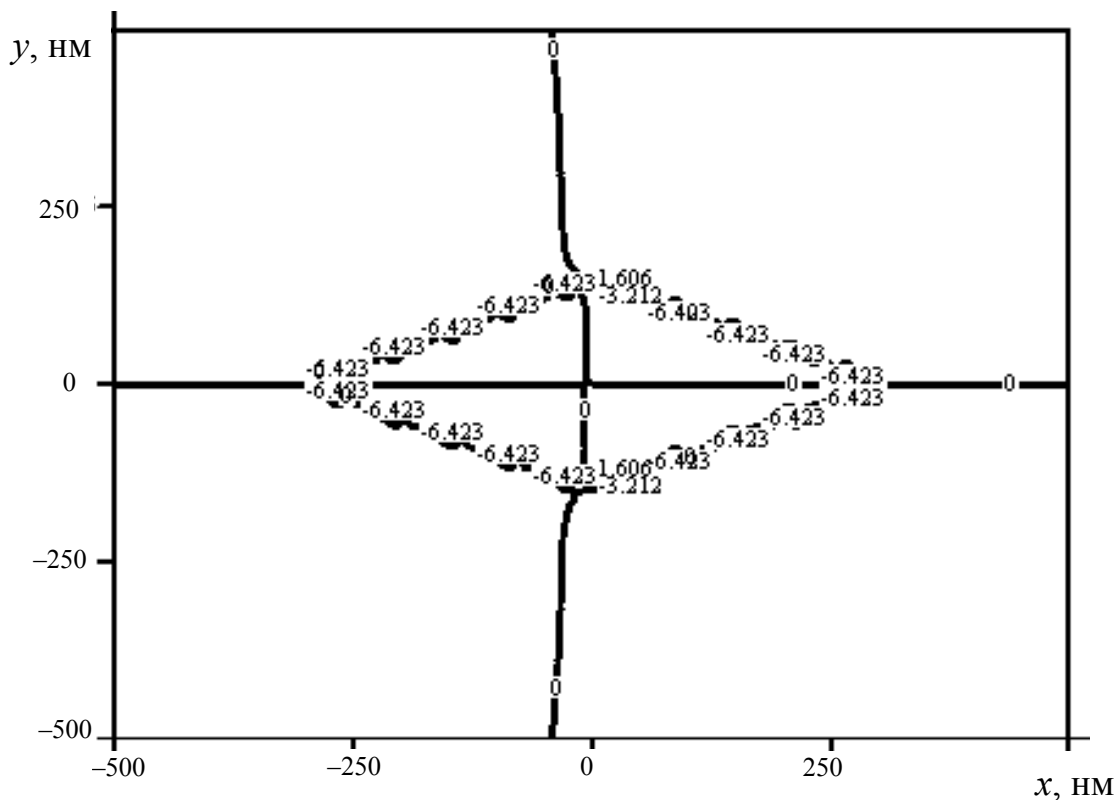


Рис. 4.24. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}^*$  у нанодвойника

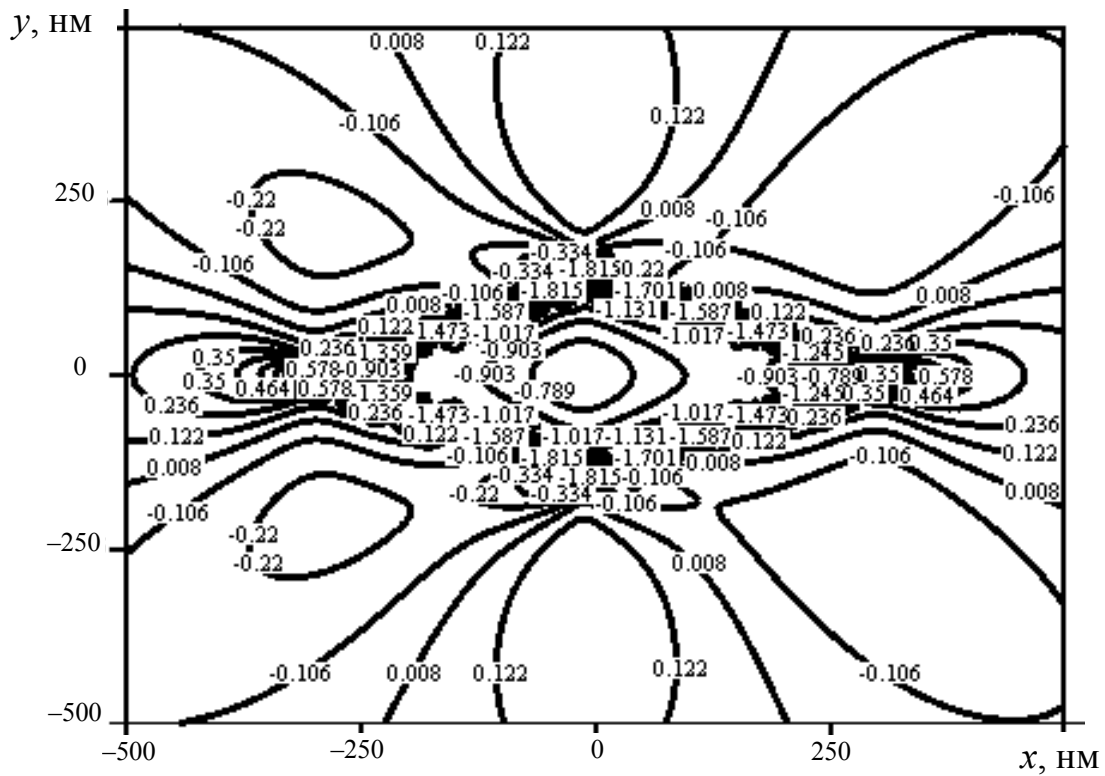


Рис. 4.25. Распределение напряжений  $\sigma_{zz}^*$  и  $\sigma_{xz}^*$  у нанодвойника

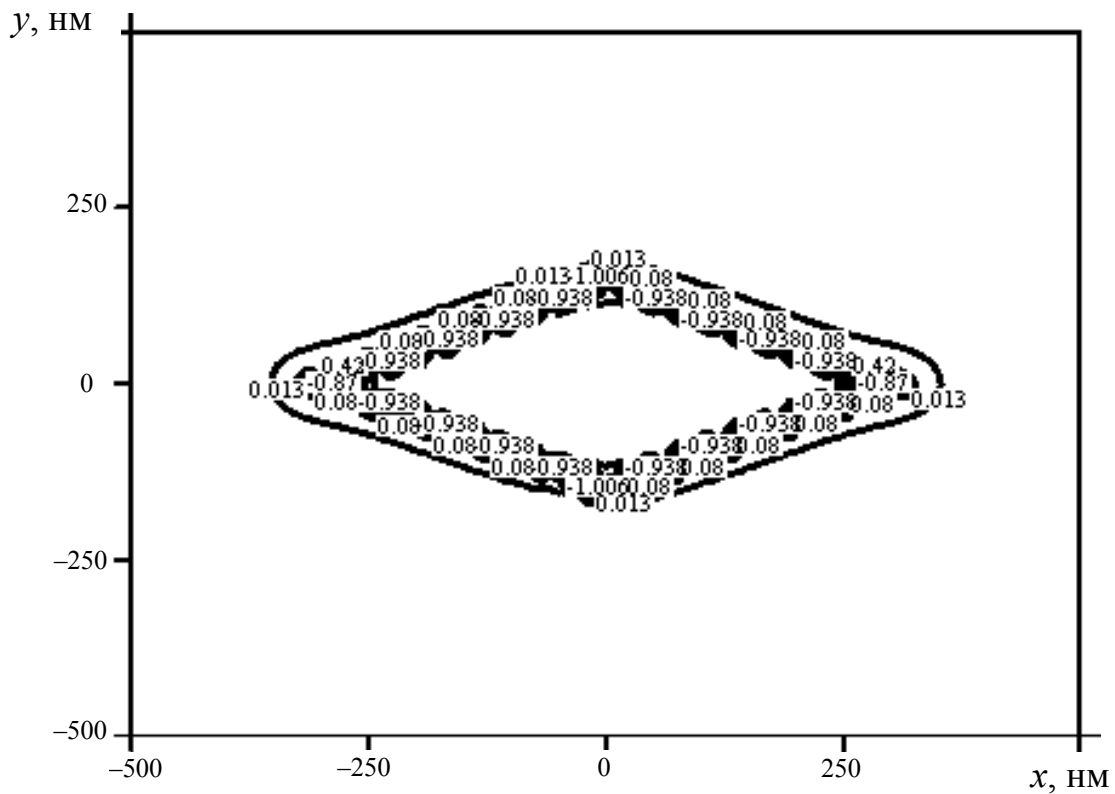


Рис. 4.26. Распределение напряжений  $\sigma_{yz}^*$  у нанодвойника

Как видно из рис. 4.22–4.26, напряжения локализованы на границах нанодвойника. Ввиду симметричности рассматриваемой задачи относительно начала координат в центре зародыша напряжения скомпенсированы. Максимальные напряжения наблюдаются в точках  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$ . Напряжения  $\sigma_{xx}^*$ , как и  $\sigma_{yy}^*$ , у границ  $AB$ ,  $CD$  и  $BC$ ,  $AD$  имеют разный знак (рис. 4.22, 4.23), в то время как у напряжений  $\sigma_{yz}^*$  (рис. 4.26) знак различен у границ  $AB$ ,  $AD$  и  $BC$ ,  $CD$ . Напряжения  $\sigma_{zz}^*$  и  $\sigma_{xz}^*$  у нанодвойника не знакопеременны (рис. 4.25). Неоднозначно ведут себя сдвиговые напряжения  $\sigma_{xy}^*$  (рис. 4.24).

Сдвиговые напряжения во многом определяют процессы междислокационного взаимодействия [6]. На рис. 4.27 в соответствии с рис. 4.24 схематически изображены области локализации напряжений  $\sigma_{xy}$ . Черными окружностями обозначены области положительных значений  $\sigma_{xy}$ , белыми – области отрицательные. Соответственно в данных областях будут скапливаться либо положительные, либо отрицательные дислокации. При этом нанодвойник выступает в качестве своеобразного сортировщика, который распределяет дислокации противоположного знака по разным областям. В случае сдвиговых напряжений  $\sigma_{xz}$  (рис. 4.25) и  $\sigma_{yz}$  (рис. 4.26) полные дислокации, с которыми взаимодействует нанодвойник, будут концентрироваться у его границ ввиду локализации у них соответствующих напряжений.

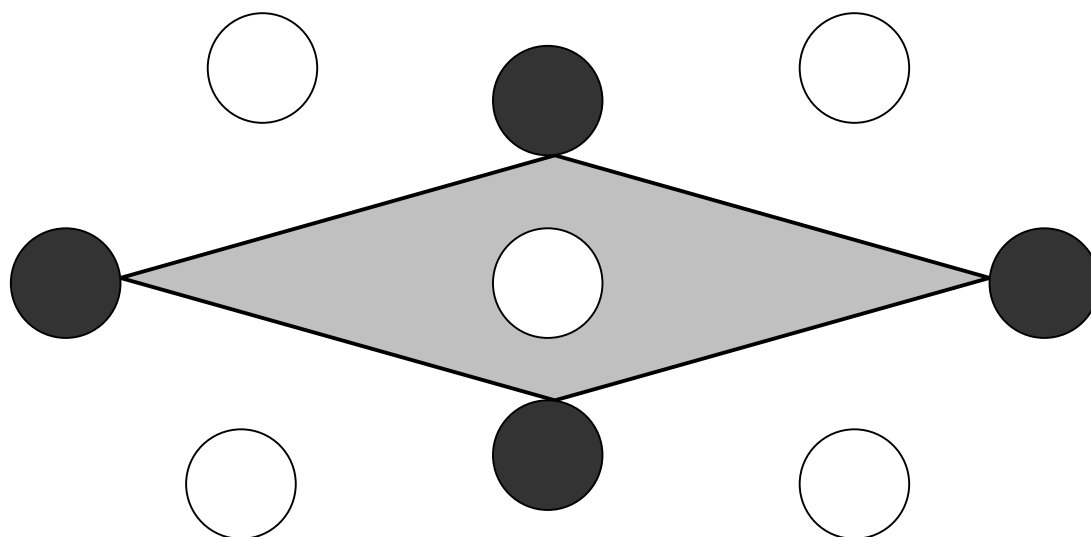


Рис. 4.27. Схематическое изображение областей локализации полей скалывающих напряжений у нанодвойника (черные круги – области положительных напряжений, белые – области отрицательных напряжений)



Нормальные напряжения  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  определяют активность процесса переползания краевых дислокаций. Судя по результатам, представленным на рис. 4.22, 4.23, 4.25 и 4.26, данные процессы активны у границ нанодвойника. С другой стороны, эти напряжения стимулируют переползание и двойникующих дислокаций и на двойниковой границе.

Напряжения в точках  $A$  и  $C$  (рис. 4.21) связаны с процессом движения двойникующих дислокаций, в то время как напряжения в точках  $B$  и  $D$  (рис. 4.21) определяют скорость генерации двойникующих дислокаций. На рис. 4.28 показана возможная схема генерации двойникующих дислокаций в точках  $B$  и  $D$ . При этом двойник изображен в виде ромба. Параллельные прямые – это следы плоскостей двойникования. Если предположить, что в точках  $B$  и  $D$  на атомы, лежащие в плоскости двойникования, со стороны напряжений нанодвойника действуют силы так, как это показано на выноске рис. 4.28, то при виде сбоку (вторая выноска на рис. 4.28), параллельном отрезку  $BD$ , наблюдается ситуация разделения плоскостей, перпендикулярных плоскости двойникования, на две дислокации противоположного знака. Эти дислокации и формируют границы краевого [3] двойника, как на рис. 4.21, когда на противоположных границах двойника расположены дислокации противоположного знака.

Согласно данной модели энергия генерации двойникующих дислокаций будет определяться энергией образования разноименных дислокаций по рассмотренному выше механизму.

Рост нанодвойника в длину осуществляется за счет перемещения дислокаций в точках  $A$  и  $C$  в направлении от центра нанодвойника, а также в результате согласованного движения дислокаций границ двойникового зародыша. Из рис. 4.27 видно, что данный процесс осуществляется на фоне наличия разного знака напряжений внутри двойника и у его вершины, в то время как напряжения по обе стороны двойниковой границы имеют один знак. Следовательно, в росте двойника в длину определяющее значение имеет движение дислокаций, находящихся в точках  $A$  и  $C$ .

Активация движения двойниковых границ согласно рассматриваемой модели, очевидно, обуславливается процессами генерации дислокаций и перераспределением их плотности под действием сил притяжения к дислокациям у вершин  $A$  и  $C$  (рис. 4.27) нанодвойника.

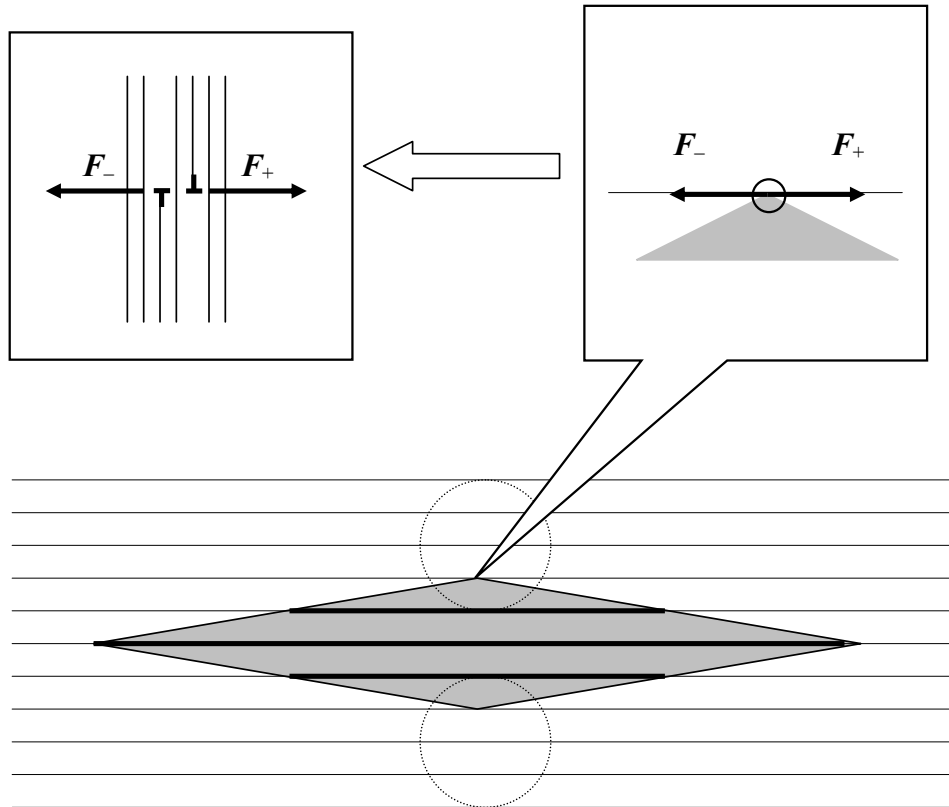


Рис. 4.28. Схема генерации двойниующих дислокаций в выделенных областях нанодвойника

Согласно данным работы [28] условие равновесия двойника можно представить в виде

$$b_{кр} \sigma_{xy}(x, 0) + b_{в} \sigma_{xz}(x, 0) + S(x) + b_{кр} \sigma_{xy}^e(x, 0) + b_{в} \sigma_{xz}^e(x, 0) = 0; \quad (4.24)$$

$$b_{кр} \sigma_{xy}(0, y) + b_{в} \sigma_{xz}(0, y) + S(y) + b_{кр} \sigma_{xy}^e(0, y) + b_{в} \sigma_{xz}^e(0, y) = 0, \quad (4.25)$$

где  $\sigma_{xy}$  и  $\sigma_{xz}$  берутся из (2.59);  $S(x)$  и  $S(y)$  – силы сопротивления соответственно вдоль оси  $OX$  и  $OY$  (рис. 4.21), величина и направление которых в состоянии равновесия зависят от направления движения двойниующих дислокаций, предшествовавшего равновесию;  $\sigma_{xy}^e(x, 0)$  и  $\sigma_{xz}^e(x, 0)$  – компоненты тензора внешних напряжений.

Результаты расчетов  $S(x)$  и  $S(y)$  при  $\sigma_{xy}^e(x, 0) = 0$  и  $\sigma_{xz}^e(x, 0) = 0$  представлены на рис. 4.29. Ход зависимостей  $S(x)$  и  $S(y)$  указывает на то, что силы сопротивления стремятся уменьшить параметры ( $L$  и  $H$ ) нанодвойника при росте двойника. В то же время эти силы препятствуют процессу уменьшения размеров двойниковых зародышей. Поэтому заклинившийся линзовидный двойниковый зародыш при от-

сутствии внешних воздействий является устойчивым. С другой стороны, при  $x \rightarrow \infty$  или  $y \rightarrow \infty$  сила  $S \rightarrow 0$ . Нетрудно видеть, что наибольшие энергетические затраты для роста двойников необходимы на начальном этапе роста двойниковых зародышей.

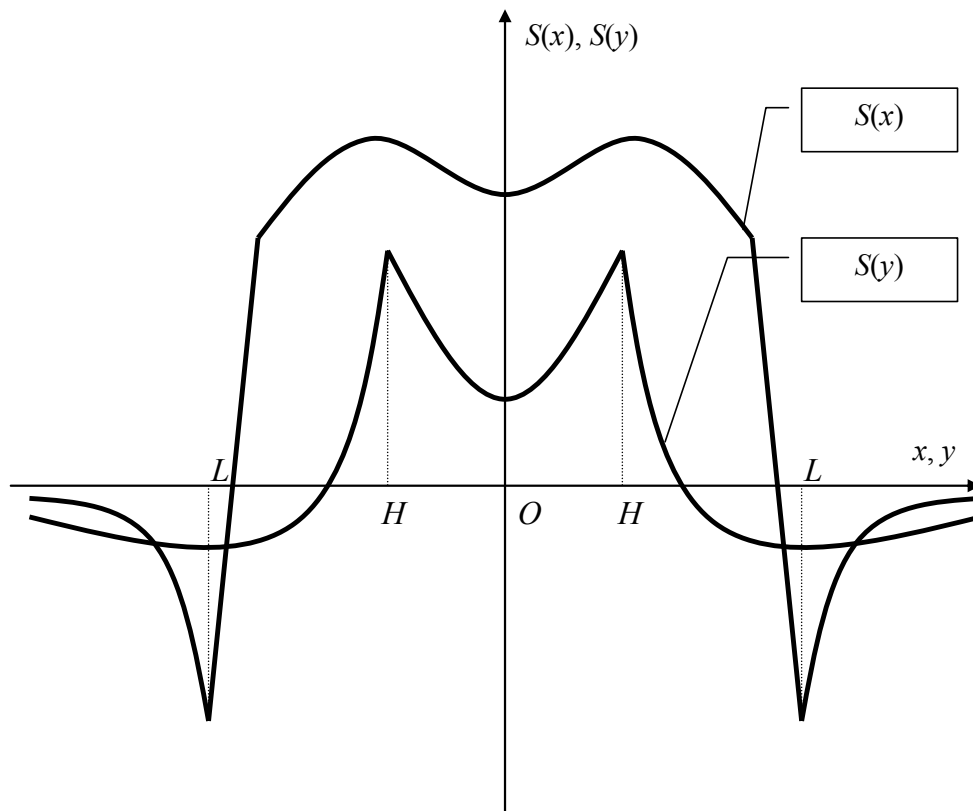


Рис. 4.29. Вид зависимостей  $S(x)$ ,  $S(y)$  при  $\sigma_{xy}^e(x, 0)=0$  и  $\sigma_{xz}^e(x, 0)=0$

Так как нанодвойники являются зародышами двойников, то интересна эволюция сил сопротивления в процессе роста двойникового зародыша. Расчеты показали, что конфигурация зависимостей  $S(x)$  и  $S(y)$  не изменяется с ростом числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах при сохранении величины параметров  $d$  и  $h$ . При увеличении данных параметров величина сил сопротивления стремится к нулю с уменьшением ширины представленных на рис. 4.29 пиков в положительной и отрицательной областях.

### 4.3. Зарождение наноразмерных фаз в нанодвойниках

Формирование наноразмерных фаз заданной плотности и элементного состава является важной прикладной задачей, например, в области создания полупроводниковых лазеров [99]–[102]. Известно [2],

что двойникованию при определенных условиях деформирования или термообработки подвержены материалы с ОЦК, ГЦК, ГПУ – структурами, к которым, в частности, относится подавляющее большинство кристаллов, используемых в кристаллооптике и электронике. Поэтому с практической точки зрения вопрос формирования наноразмерной фазы в нанодвойниках представляется весьма интересным, так как задание в кристалле определенной плотности нанодвойников контролируемо, например, внешними напряжениями [103]–[106].

С научной точки зрения данный вопрос также интересен, так как формирование нанофаз в полях напряжений двойниковых границ – малоизученная проблема.

Распределение легирующего компонента или примесей в материале, имеющем концентраторы напряжений, в качестве которых, в частности, могут выступать нанодвойники, рассчитывается по общеизвестной формуле (3.45), в которой нормальные компоненты тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  берутся из (2.59).

Результаты расчета распределения легирующего компонента в области зарождения нанодвойника представлены на рис. 4.30.

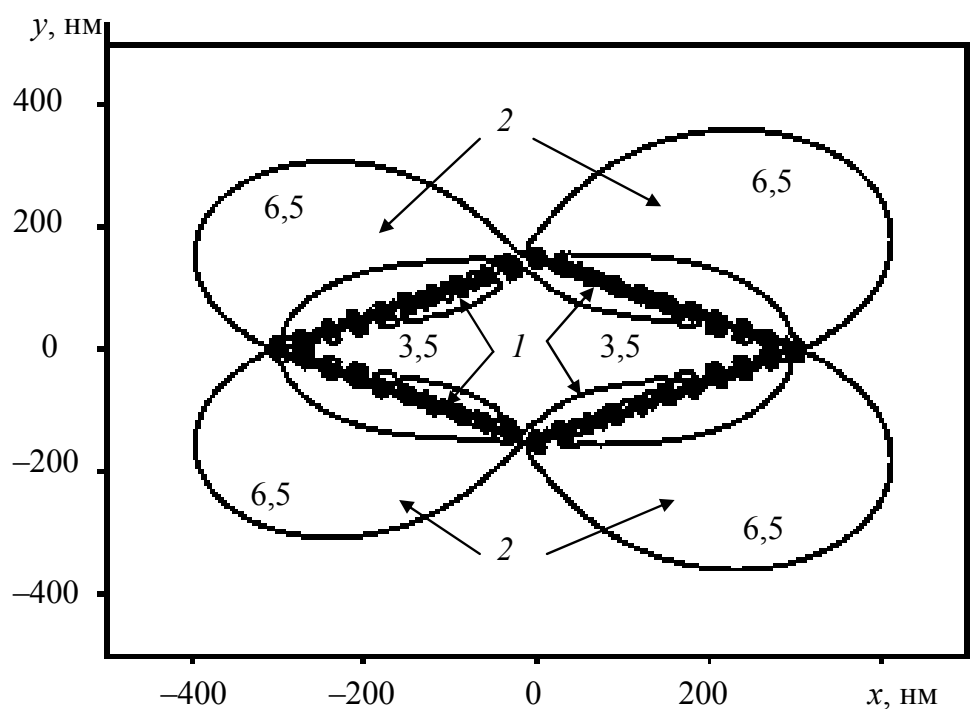


Рис. 4.30. Профили распределения легирующего компонента у нанодвойника: 1 и 2 – области локализации легирующего компонента

Можно выделить два типа областей локализации легирующего компонента у нанодвойника: внутри двойника (области 1 на рис. 4.30) и снаружи нанодвойника у его границ (области 2 на рис. 4.30). Разница между радиусами атомов матрицы и легирующего компонента оказывает незначительное влияние на величину максимального значения концентрации легирующего компонента в вышеперечисленных областях. Зарождение новой фазы у нанодвойника носит негомогенный характер. Энергетически выгодно образование зародышей на двойниковой границе [107]. Рассмотрим, например, ситуацию, когда матрицей является металл ( $Me$ ), а легирующим компонентом – металлоид ( $M$ ). Тогда в областях, отдаленных от концентраторов напряжений, энергетически выгодно зарождение фаз типа  $Me_xM_y$ , в областях 1 и 2 (рис. 4.30) благодаря избыточной концентрации металлоида создаются благоприятные условия для формирования новой фазы с повышенным значением  $y$  и заниженным  $x$  в формуле  $Me_xM_y$ .

## Глава 5

# ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКОЕ ДВОЙНИКОВАНИЕ

При деформировании двойникующихся монокристаллов и большом значении ориентационного фактора Шмида для развития двойникования [3], [108] двойники, как правило, возникают группами. Единичные двойники сравнительно легко удается получить в кристалле лишь при воздействии на него сосредоточенной нагрузкой. Группы двойников одного кристаллографического направления объединены под термином полисинтетического двойника [108]–[110]. Изучение эволюции полисинтетических двойников под действием внешних напряжений и в результате предварительной энергетической обработки монокристаллов является важной научной и практической задачей. Это связано с тем, что двойникование относится к основному каналу пластической деформации кристаллов [4], и знание его поведения в тех или иных условиях деформирования материалов позволит целенаправленно управлять их свойствами посредством воздействия на процессы зарождения и развития двойников.

### 5.1. Классификация полисинтетических двойников

Систематическое исследование полисинтетического двойникования невозможно без его классификации как по взаимному расположению в нем отдельных двойников, так и по их форме. Такая классификация позволит четко определить направление эволюции полисинтетических двойников при деформировании двойникующихся материалов, выявить влияние на закономерности эволюции пред-

варительной энергетической обработки. Ниже приведен пример предложенной в [108] классификации полисинтетических двойников.

На рис. 5.1 представлена схема для классификации полисинтетических двойников по их взаимному расположению относительно друг друга (обозначим ее как группу  $A$ ). В этой классификации будем учитывать наличие нарушения периодичности во взаимном расположении двойников в результате отсутствия в полисинтетическом двойнике одного или нескольких двойников (такой случай будем обозначать числом  $n_1$ , причем численное значение  $n_1$  указывает на количество отсутствующих двойников) либо за счет наличия дополнительных двойников, находящихся в области между двойниками полисинтетического двойника ( $n_2$ ). Числами  $n_3$  и  $n_4$  учтем наличие в полисинтетических двойниках двойников других кристаллографических направлений, не параллельных направлению развития двойников в полисинтетических двойниках (рис. 5.1). Причем двойники, обозначаемые  $n_3$  и  $n_4$ , также не являются параллельными. В результате в общем виде получим следующую запись группы  $A$ , учитывающую указанные выше параметры полисинтетических двойников:

$$AN(n_1n_2n_3n_4). \quad (5.1)$$

Здесь  $N$  – число двойников в полисинтетическом двойнике. При  $n_i > 0$  в (5.1) отмечается количество соответствующих отклонений от идеального расположения двойников относительно друг друга в полисинтетическом двойнике. При  $n_i = 0$  подразумевается отсутствие соответствующего нарушения. Под идеальным расположением будем подразумевать такое расположение двойников в полисинтетическом двойнике, когда при одинаковой их ширине ( $h$ ) расстояние между ними ( $H$ ) сохраняется в каждой периодичности отдельных двойников в полисинтетическом двойнике (рис. 5.1). Для идеального случая справедлива запись  $AN(0000)$ . Примеры использования (5.1) для описания различных подгрупп двойников представлены на рис. 5.1. Например, запись  $A10(2320)$  означает, что в полисинтетическом двойнике, занимающем область, принадлежащую десяти равноудаленным друг от друга двойникам, отсутствует два двойника, три двойника находятся в междвойниковом пространстве, имеется два параллельных двойника с направлением двойникования, отличным от направления двойникования двойников полисинтетического двойника. Иллюстрация данного случая представлена на рис. 5.2.

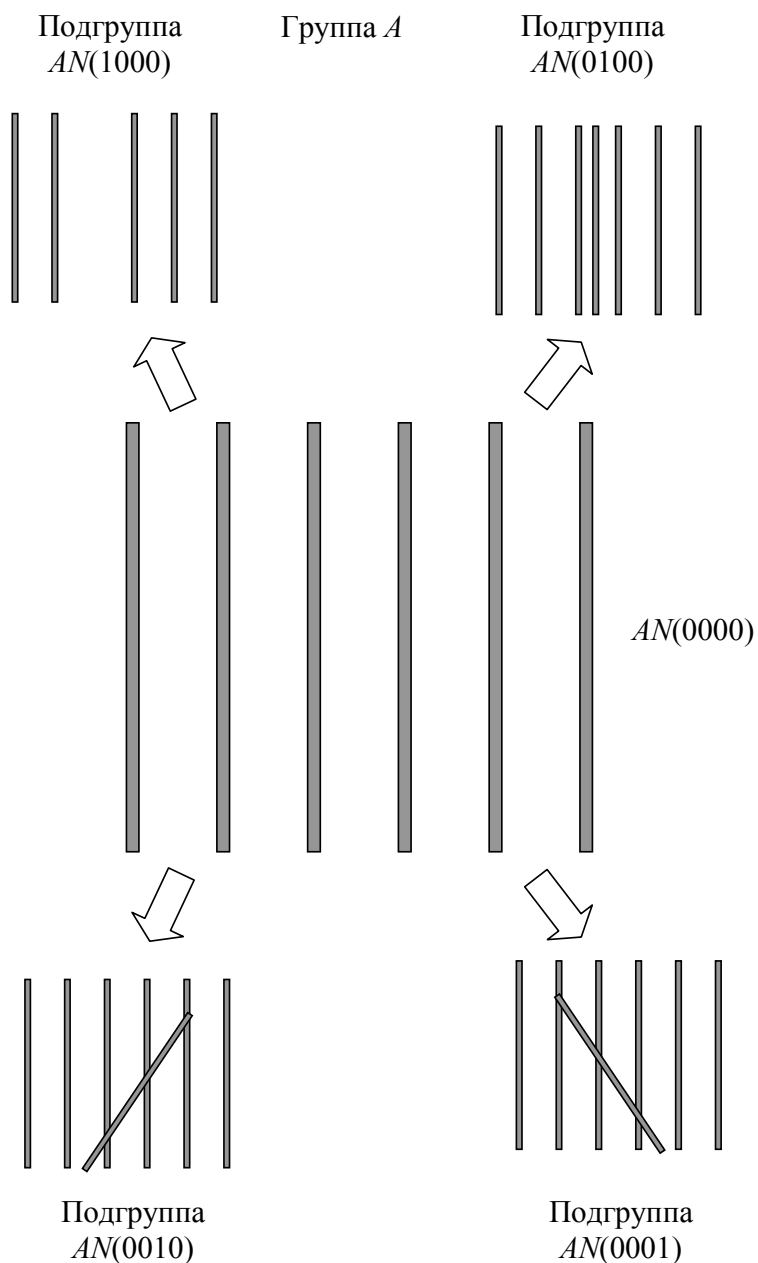


Рис. 5.1. Схематическое изображение классификации полисинтетических двойников по их взаимному расположению относительно друг друга

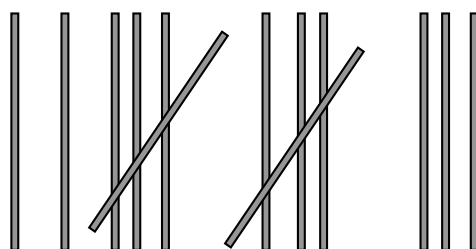


Рис. 5.2. Полисинтетический двойник группы  $AN(2320)$



На рис. 5.3 показаны полисинтетические двойники, у которых параметр  $H$  изменяется по гармоническому закону. При этом в записи  $A^{\cos T}$  параметр  $T$  определяет период. В общем случае для полисинтетических двойников рассматриваемого типа по аналогии с (5.1) можно записать [108]:

$$A^{\cos T} N(n_1 n_2 n_3 n_4). \quad (5.2)$$

В монокристаллах висмута часто наблюдается ветвление двойников [13], [108], входящих в состав полисинтетического двойника (рис. 5.4). При этом двойники иного кристаллографического направления зарождаются на границах двойников полисинтетического двойника, что сходно с двойниками группы  $AN(00n_3 n_4)$ . Отличие заключается в том, что двойники группы  $AN(00n_3 n_4)$  не зарождаются на двойниковых границах. Наличие в полисинтетических двойниках ветвящихся двойников можно описать аббревиатурой типа

$$AN(n_1 n_2 n_3 n_4) V(m_1 m_2), \quad (5.3)$$

где  $m_1$  и  $m_2$  определяют кристаллографию ветвящихся двойников. Для описания, например, монокристаллов висмута достаточно двух чисел [108], так как каждое из них включает два параллельных, но противоположно направленных кристаллографических направлений двойникования. В монокристаллах висмута три таких противоположно направленных кристаллографических направлений двойникования. Одно из них принадлежит материнским двойникам полисинтетического двойника, а два – ветвящимся двойникам.

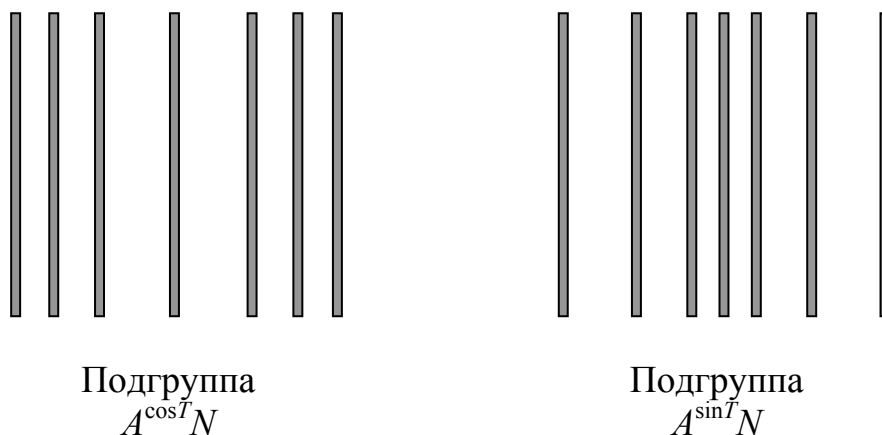


Рис. 5.3. Подгруппы  $A$  с гармоническим изменением параметра  $H$

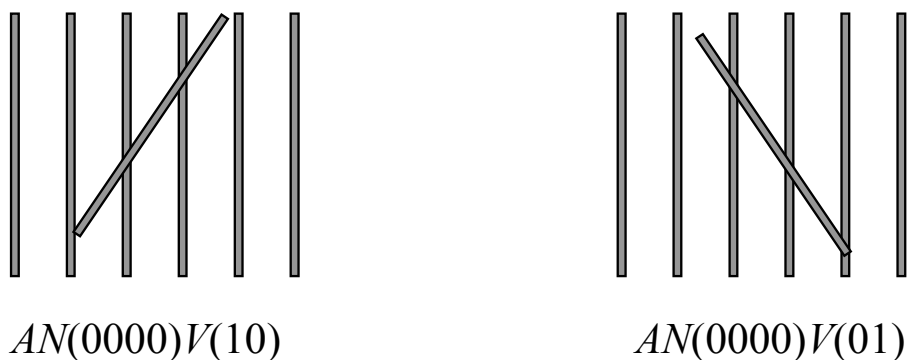


Рис. 5.4. Ветвление двойников в полисинтетических двойниках

Из формы границ двойников полисинтетического двойника также можно сформировать группы. Наиболее часто встречается искривление двойниковых границ в виде ее выгнутости или вогнутости. На рис. 5.5 представлены варианты двойников с такой формой границ. Обозначим такую подгруппу двойников буквой  $F$  и тогда для нее можно записать:

$$AN(n_1n_2n_3n_4)F(n : \pm R1, m : \pm R2), \tag{5.4}$$

где  $n$  и  $m$  – среднее число выгнутостей или вогнутостей на правых и левых двойниковых границах соответственно;  $R1$  и  $R2$  – их средние радиусы; знак плюс или минус указывает на направление изгиба двойниковой границы: «+» – выгнутость; «-» – вогнутость.

Аналогично для двойников с несдвойникованными внутри их областями (рис. 5.6) можно записать:

$$AN(n_1n_2n_3n_4)D(k_1k_2k_3), \tag{5.5}$$

где  $k_1$  – обозначает наличие несдвойникованных областей внутри двойника вдали от его вершин;  $k_2$  и  $k_3$  – указывают на наличие таких областей у вершин двойника (рис. 5.6).

На рис. 5.7 приведены микроснимки некоторых групп полисинтетических двойников. Двойник в полисинтетическом двойнике, указанный на рис. 5.7, а стрелкой, имеет несдвойникованную область внутри. На рис. 5.7, б показано пересечение полисинтетического двойника двойником другого кристаллографического направления. Такая ситуация, представленная на рис. 5.7, в, привела к изменению формы двойника в полисинтетическом двойнике. Представляет интерес ситуация, показанная на рис. 5.7, г, где несдвойникованная область внутри

двойника расположена ближе к одной из границ двойника. Это указывает на то, что несдвойникованные области внутри двойника могут формироваться не только в результате огибания двойниковой прослойкой в процессе ее развития некоторого препятствия, но и в результате слияния двух параллельных двойников.

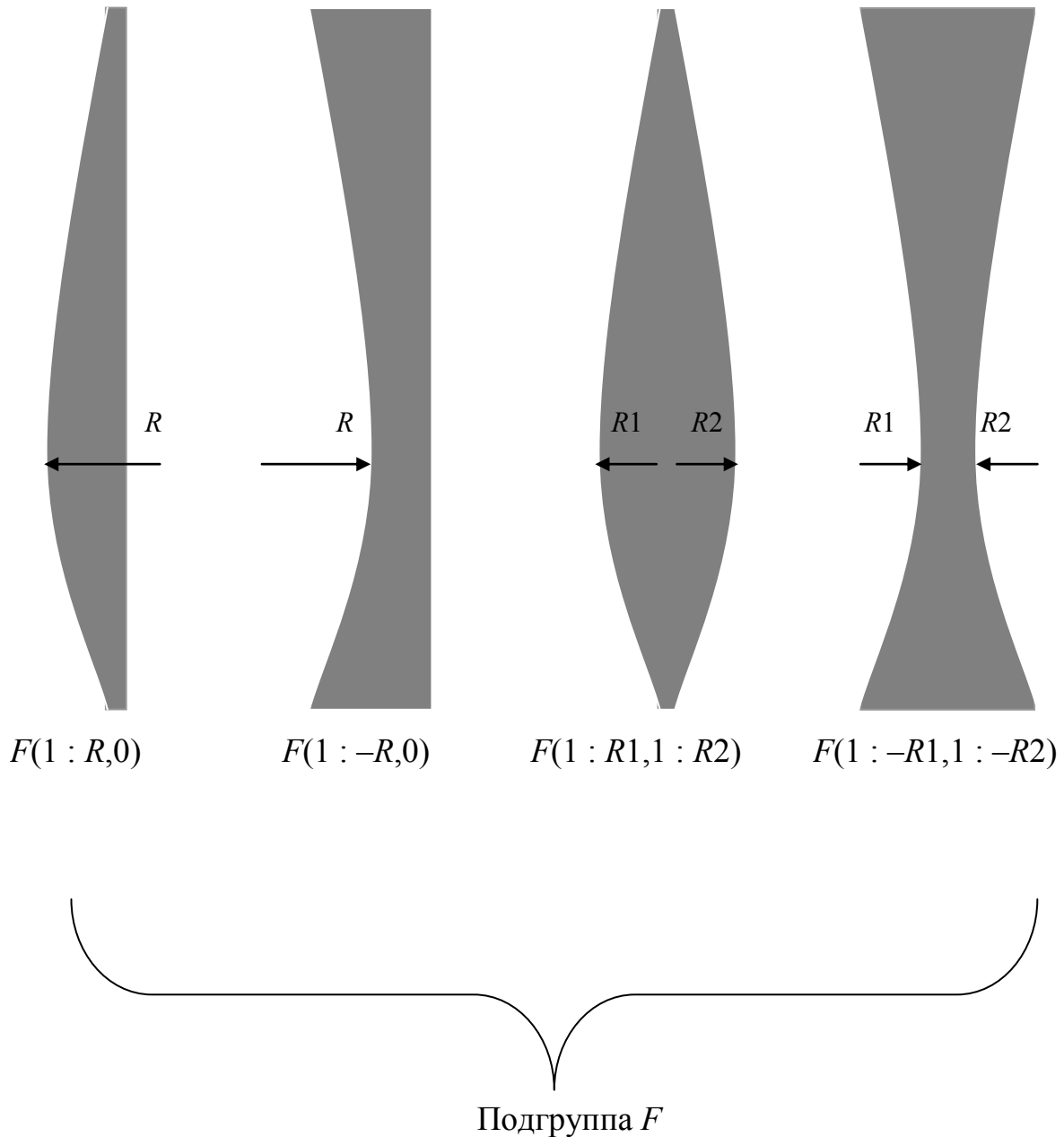


Рис. 5.5. Классификация двойников по выгнутости или вогнутости их границ

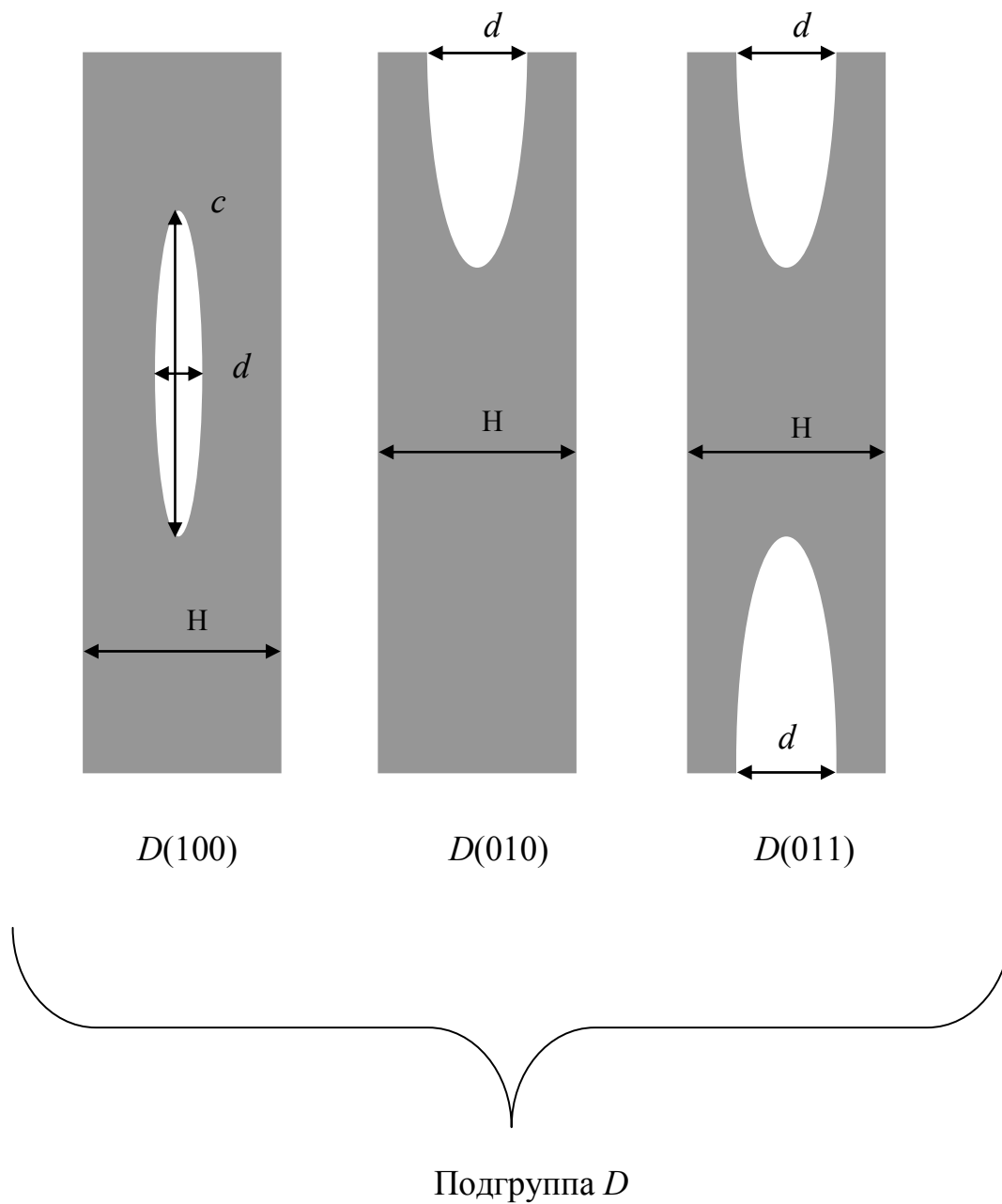


Рис. 5.6. Подгруппа двойников с несдвоенными внутри их областями

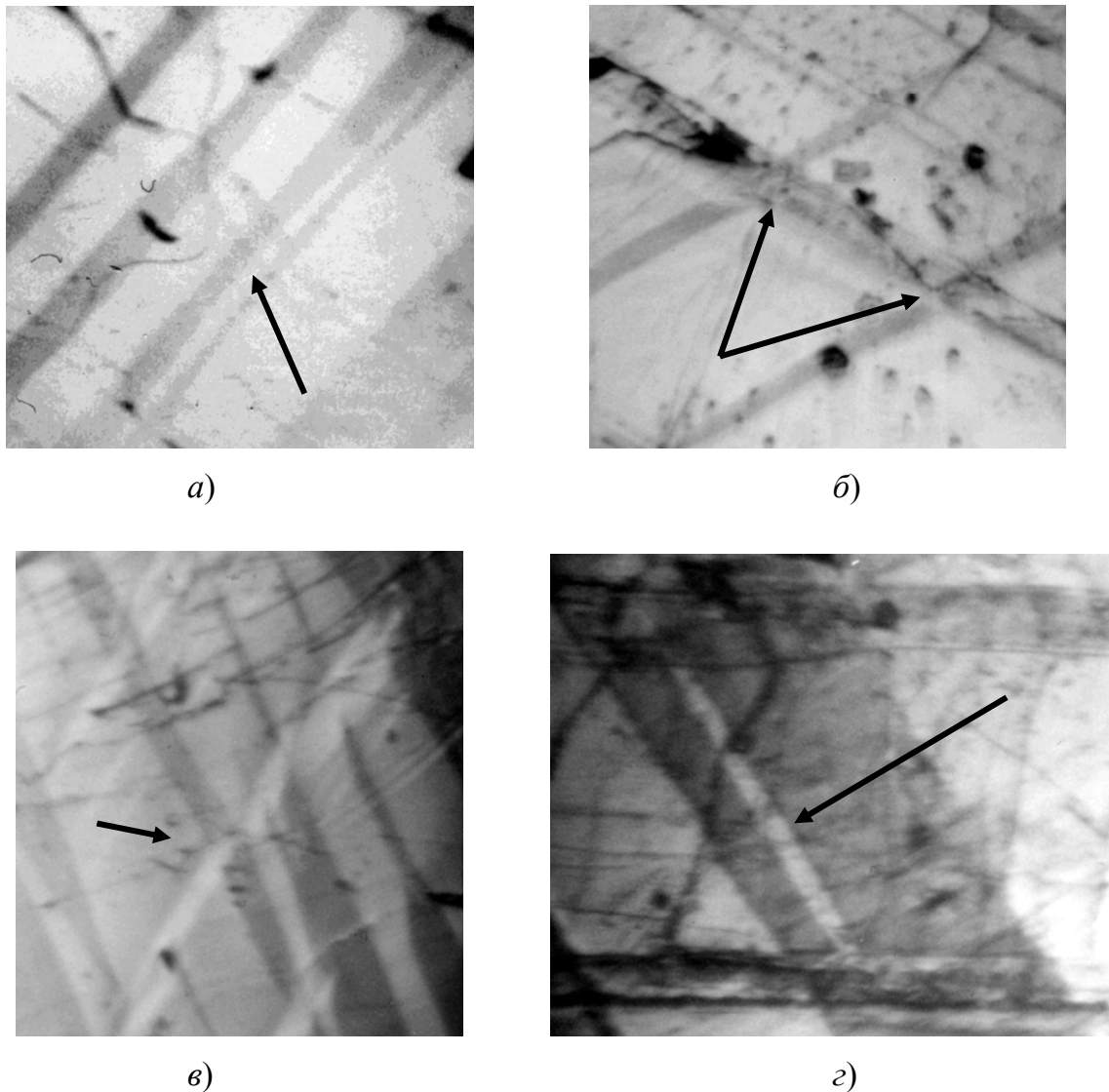


Рис. 5.7. Фрагменты полисинтетических двойников различных групп: *а* –  $D(010)$ ; *б* –  $AN(0010)$ ; *в* –  $AN(0010)D(010)$ ; *г* –  $D(100)$

Следует отметить, что с увеличением интенсивности деформирования или в результате энергетической обработки возможны переходы полисинтетических двойников из одной группы в другую. В качестве примера приведем фрагмент эволюции полисинтетического двойника, формируемого при увеличении интенсивности сжатия монокристалла висмута в направлении, благоприятном для развития двойникования с точки зрения ориентационного фактора Шмида:

$$A7(3000) \rightarrow A9(1100) \rightarrow A9(0310) \rightarrow A10(0331). \quad (5.6)$$

Формула (5.6) свидетельствует о том, что при малых деформациях полисинтетический двойник состоял из семи двойников, в периодической структуре которого отсутствовало три двойника. С рос-

том интенсивности сжатия в полисинтетическом двойнике появились еще два двойника (общее число двойников в полисинтетическом двойнике стало равным девяти), две свободные позиции заняты двойниками, в результате чего число отсутствующих двойников в полисинтетическом двойнике снизилось до одного и появился двойник в междвойниковом пространстве. Таким образом, с ростом усилия сжатия растет общее число двойников в полисинтетическом двойнике. Дальнейшее увеличение степени деформации приводит к исчезновению свободных областей в полисинтетическом двойнике и увеличению числа двойников в междвойниковом пространстве до трех. Более того, появился двойник иного кристаллографического направления. На последнем этапе эволюции в заданном интервале деформирования монокристалла полисинтетический двойник состоит из десяти двойников, число свободных областей и число двойников в междвойниковом пространстве остается прежним, но появляются три дополнительных двойника иных кристаллографических направлений.

Запись (5.6) определяет эволюцию полисинтетического двойника только по взаимному расположению относительно друг друга отдельных входящих в его состав двойников. Аналогичным образом предложенная в данной монографии классификация позволяет проследить эволюцию форм отдельных двойников полисинтетического двойника в зависимости от условий деформирования.

## 5.2. Мезоскопическая дислокационная модель полисинтетического двойника

На рис. 5.8 схематически представлен полисинтетический двойник. Пусть краевая составляющая ( $\mathbf{b}_{кр}$ ) вектора Бюргерса двойникующих дислокаций направлена вдоль оси  $OY$  (рис. 5.8), а винтовая составляющая ( $\mathbf{b}_в$ ) – перпендикулярно плоскости  $XOY$ . Тогда систему параллельных двойников одинаковой ширины  $H$  и ориентированных вдоль оси  $OY$  можно представить так, как это показано на рис. 5.8. Пусть  $D$  – расстояние между двойниками, а  $h$  – расстояние между двойникующими дислокациями (см. выноску на рис. 5.8). 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:

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}^{(1)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[3(x-m(D+H))^2 + (y-nh)^2]}{[(x-m(D+H))^2 + (y-nh)^2]^2}, \\
\sigma_{yy}^{(1)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[(x-m(D+H))^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(D+H))^2 + (y-nh)^2]^2}, \\
\sigma_{zz}^{(1)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(D+H))^2 + (y-nh)^2}, \\
\sigma_{xy}^{(1)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x-m(D+H))[(x-m(D+H))^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(D+H))^2 + (y-nh)^2]^2}, \\
\sigma_{zx}^{(1)} &= -\frac{\mu b_{\text{B}}}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(D+H))^2 + (y-nh)^2}, \\
\sigma_{zy}^{(1)} &= \frac{\mu b_{\text{B}}}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x-m(D+H))^2}{(x-m(D+H))^2 + (y-nh)^2}; \tag{5.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[3(x-m(D+H)-d)^2 + (y-nh)^2]}{[(x-m(D+H)-d)^2 + (y-nh)^2]^2}, \\
\sigma_{yy}^{(2)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[(x-m(D+H)-d)^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(D+H)-d)^2 + (y-nh)^2]^2}, \\
\sigma_{zz}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(D+H)-d)^2 + (y-nh)^2}, \\
\sigma_{xy}^{(2)} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x-m(D+H)-d)[(x-m(D+H)-d)^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(D+H)-d)^2 + (y-nh)^2]^2}, \\
\sigma_{zx}^{(2)} &= -\frac{\mu b_{\text{B}}}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(D+H)-d)^2 + (y-nh)^2}, \\
\sigma_{zy}^{(2)} &= \frac{\mu b_{\text{B}}}{2\pi} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x-m(D+H)-d)^2}{(x-m(D+H)-d)^2 + (y-nh)^2}, \tag{5.8}
\end{aligned}$$

где  $\mu$  – модуль сдвига;  $\nu$  – 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.

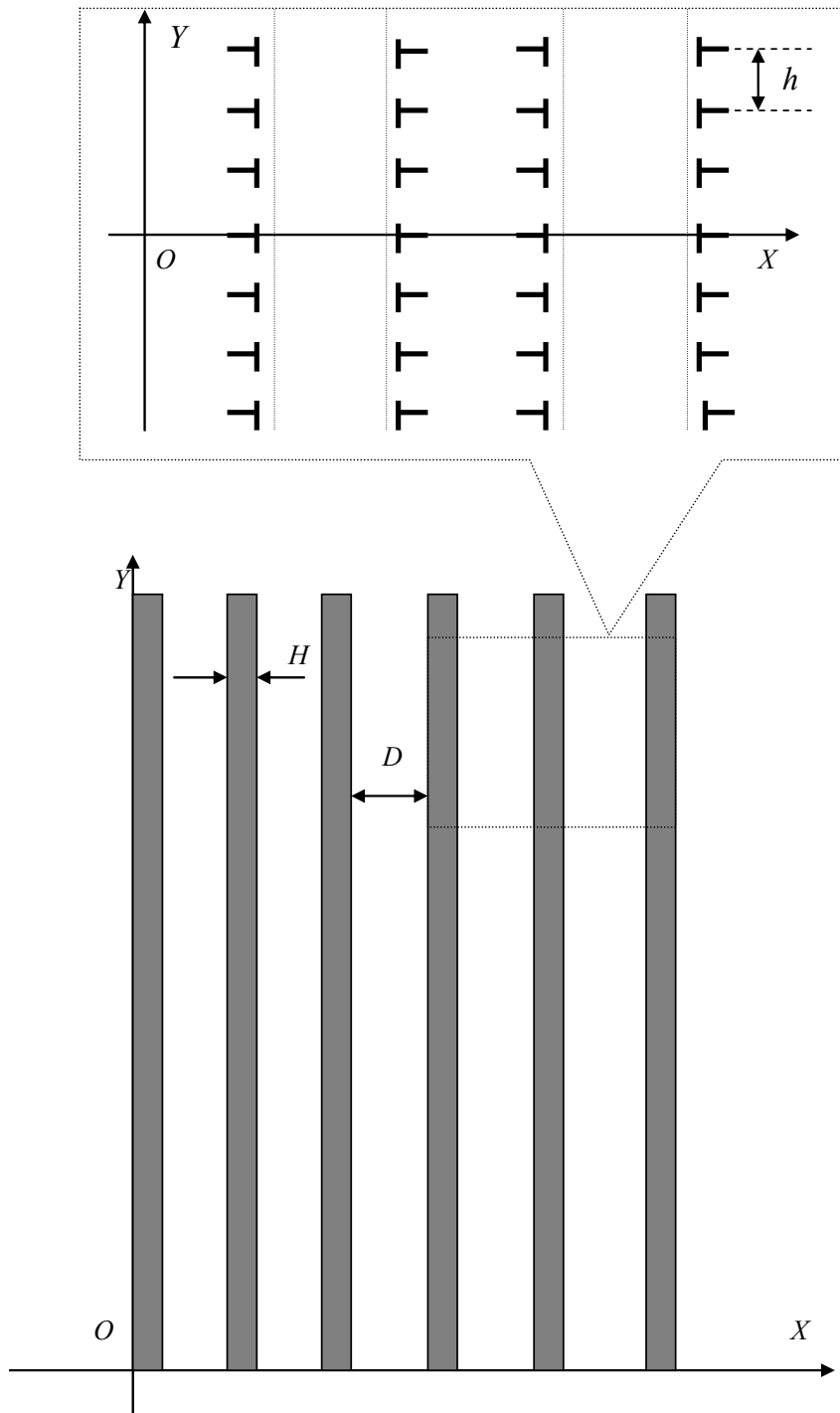


Рис. 5.8. Схематическое изображение полисинтетического двойника (выноска – дислокационная модель полисинтетического двойника)



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

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(1)} - \sigma_{ij}^{(2)}. \quad (5.9)$$

В соотношениях (5.7), (5.8) учитывается конечное число двойникующих дислокаций. Это связано с тем, что при переходе к бесконечному суммированию в (5.7), (5.8) теряется возможность получения точного решения в начале декартовой системы координат (рис. 5.8) и вдоль ее осей [109].

Результаты расчетов представлены на рис. 5.9–5.14. При расчетах принималось:  $\nu = 0,33$ ;  $b_{кр} = 1 \text{ \AA}$ ;  $b_B = 0,5 \text{ \AA}$ ;  $H = 1 \text{ мкм}$ ;  $D = 3 \text{ мкм}$ ;  $h = 0,1 \text{ мкм}$ ;  $M = 10$ ;  $N = 100$ . Из рис. 5.9–5.14 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. 5.15 показано расположение областей локализации напряжений по отношению к полисинтетическому двойнику. При  $y = (Nh)/2 = L/2$  напряжения равны нулю, т. е. внутри полисинтетического двойника напряжения скомпенсированы из-за симметричности рассматриваемой задачи. При  $y = (Nh)/2 = L/2$  (рис. 5.9–5.14) величина напряжений значительно меньше, чем у вершин двойников.

Следует обратить внимание на периодический характер напряжений в области их локализации (рис. 5.9–5.14). Период перепадов напряжений связан с шириной двойников  $H$  и расстоянием между ними  $D$ , а величина напряжений зависит от плотности  $\rho$  двойникующих дислокаций на двойниковых границах ( $\rho = N/L$ ).

Особый интерес вызывает условие равновесия полисинтетического двойника, которое по аналогии с [20] можно записать в виде (4.25), где  $\sigma_{xy}(0, y)$  и  $\sigma_{xz}(0, y)$  берутся из (5.7), (5.8) при  $x = 0$ .

Зависимость от  $y$  всех рассматриваемых в (4.25) сил обусловлена тем, что свободное перемещение двойникующих дислокаций возможно только в плоскости, параллельной вектору Бюргерса, поэтому интересны лишь составляющие сил, параллельные оси  $OY$ .

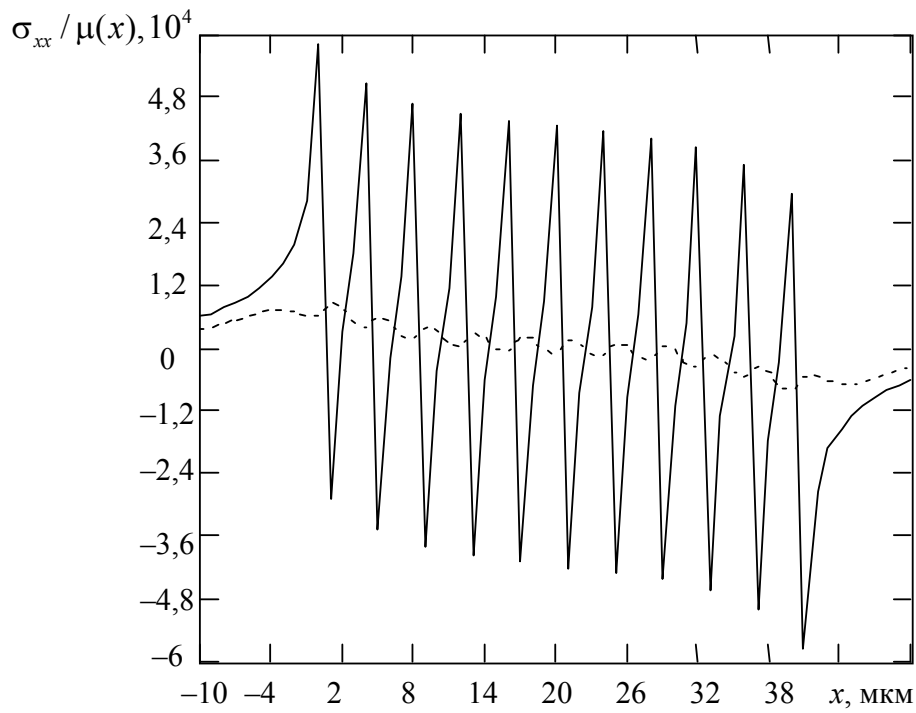


Рис. 5.9. Результаты расчета полей напряжений  $\sigma_{xx} / \mu(x)$  у полисинтетического двойника (сплошная линия –  $y = 0$ , пунктирная –  $y = (Nh)/4$ )

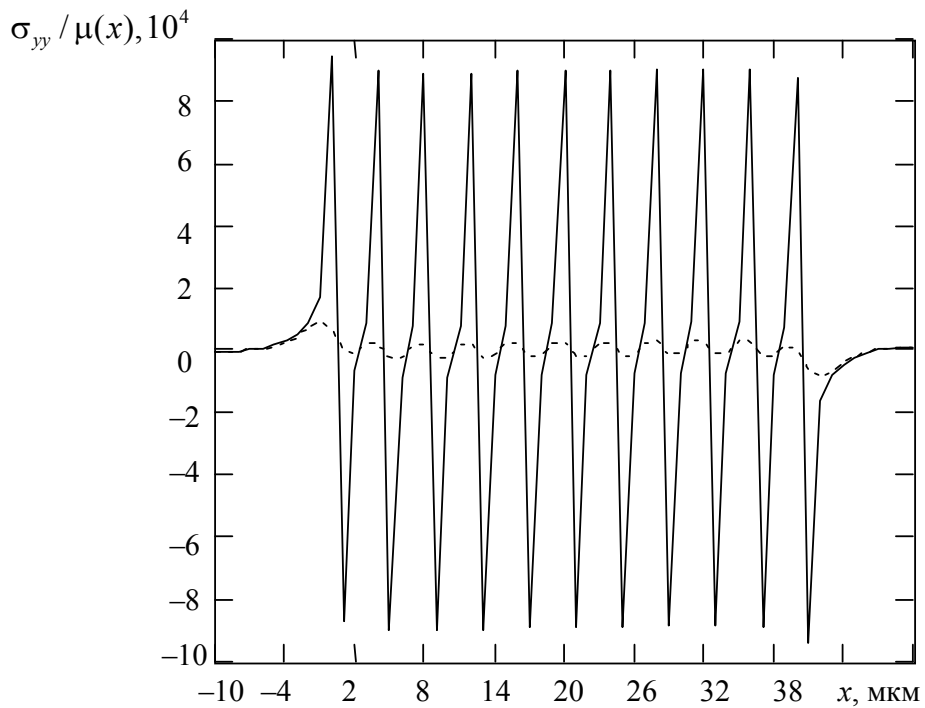


Рис. 5.10. Результаты расчета полей напряжений  $\sigma_{yy} / \mu(x)$  у полисинтетического двойника (сплошная линия –  $y = 0$ , пунктирная –  $y = (Nh)/4$ )

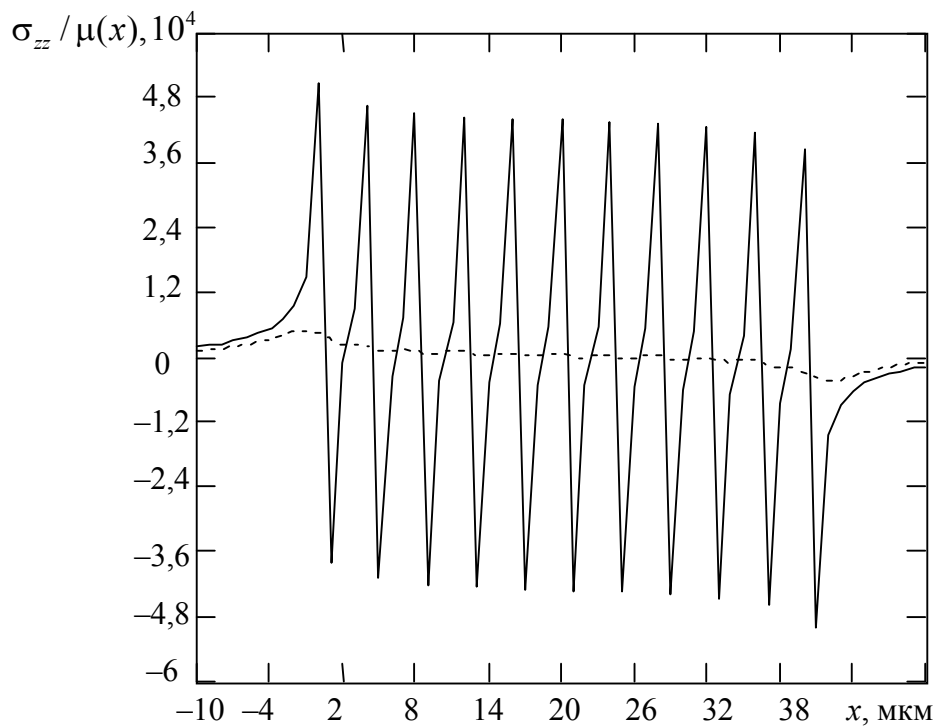


Рис. 5.11. Результаты расчета полей напряжений  $\sigma_{zz} / \mu(x)$  у полисинтетического двойника (сплошная линия –  $y = 0$ , пунктирная –  $y = (Nh)/4$ )

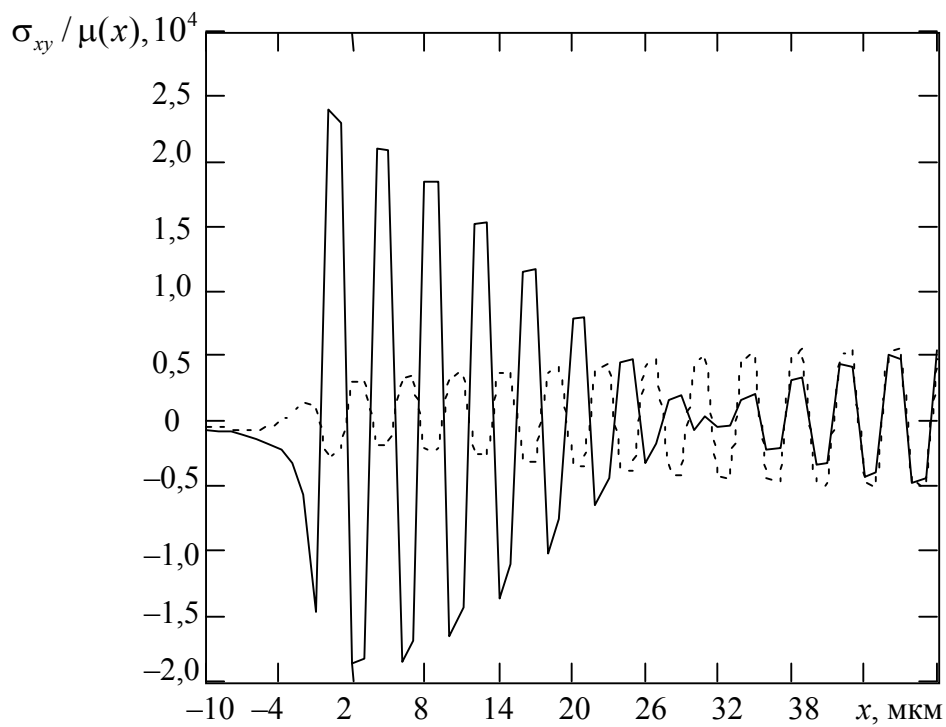


Рис. 5.12. Результаты расчета полей напряжений  $\sigma_{xy} / \mu(x)$  у полисинтетического двойника (сплошная линия –  $y = 0$ , пунктирная –  $y = (Nh)/4$ )

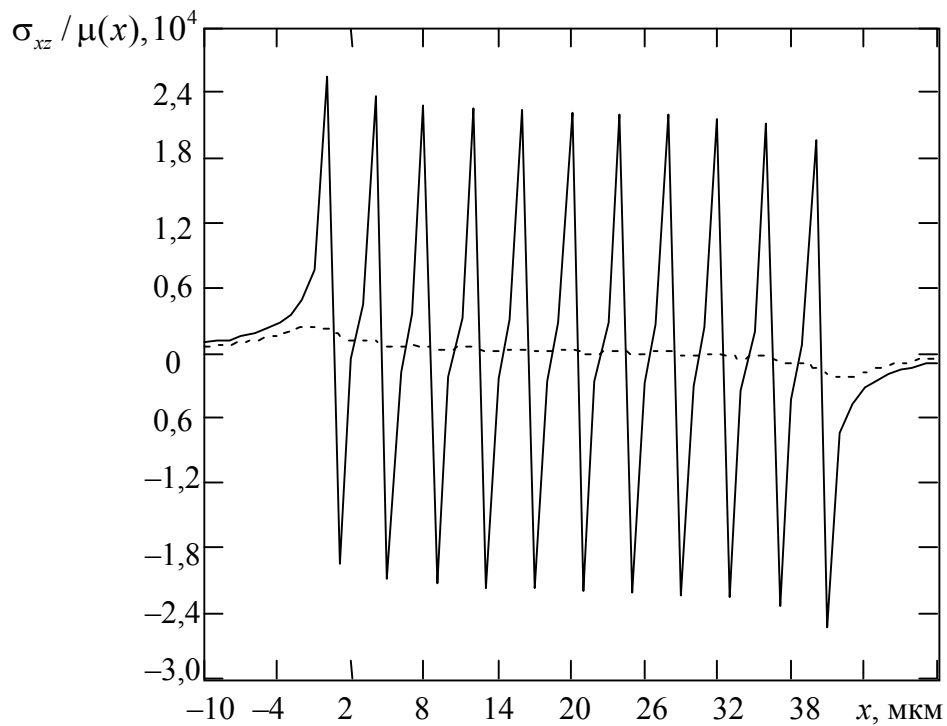


Рис. 5.13. Результаты расчета полей напряжений  $\sigma_{xz} / \mu(x)$  у полисинтетического двойника (сплошная линия –  $y = 0$ , пунктирная –  $y = (Nh)/4$ )

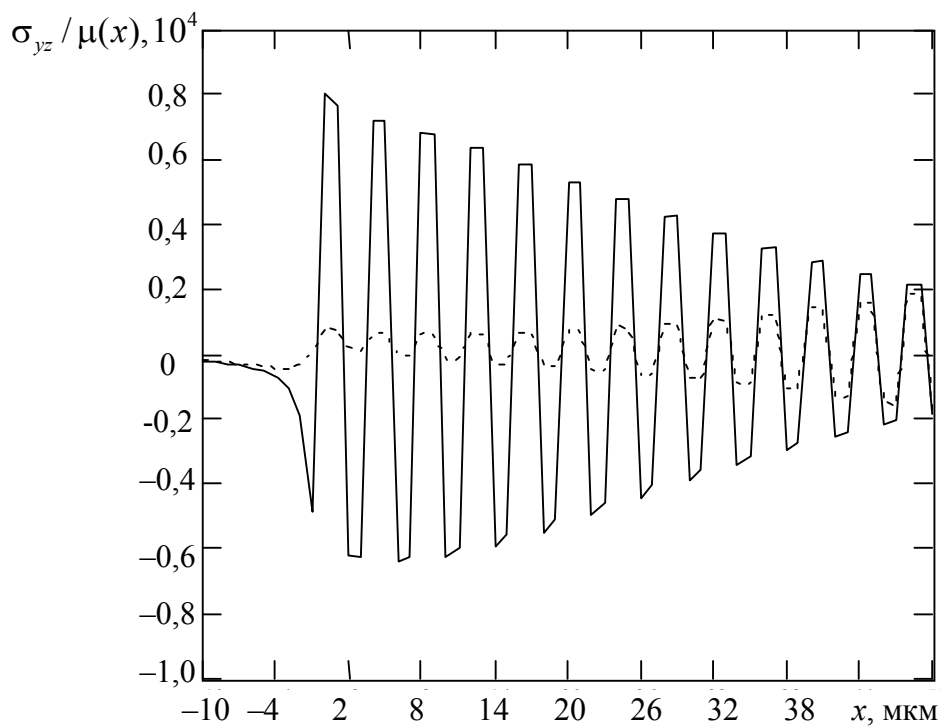


Рис. 5.14. Результаты расчета полей напряжений  $\sigma_{yz} / \mu(x)$  у полисинтетического двойника (сплошная линия –  $y = 0$ , пунктирная –  $y = (Nh)/4$ )

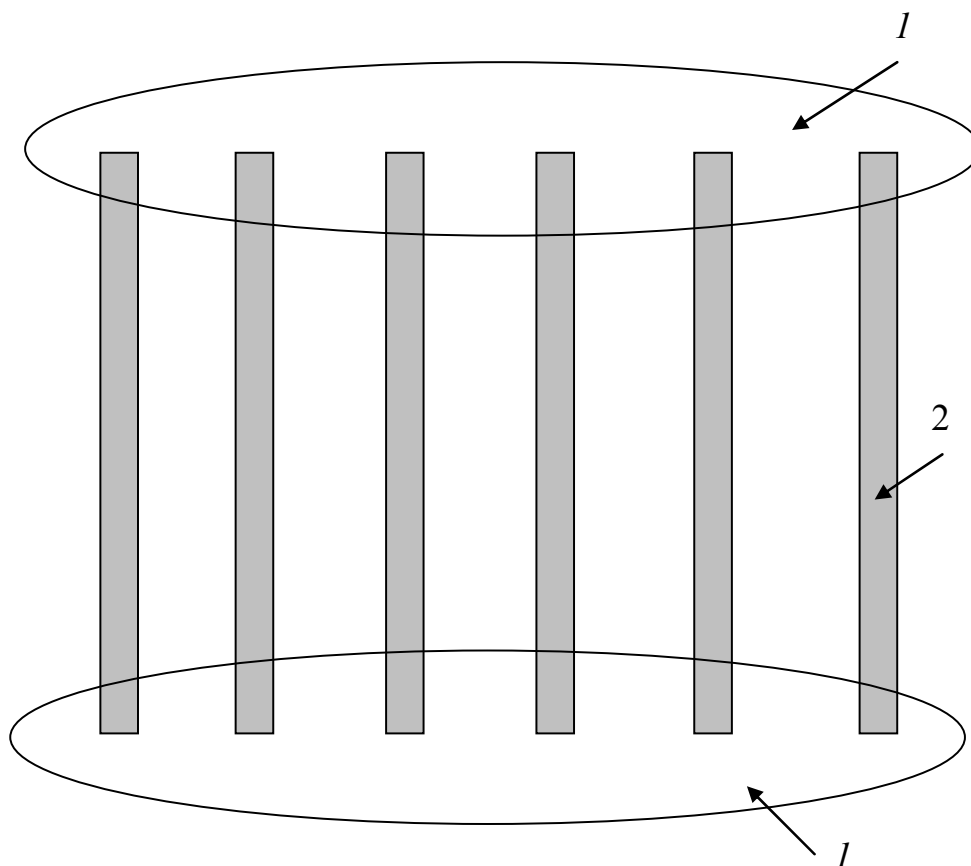


Рис. 5.15. Области максимальной локализации (1) напряжений у полисинтетического двойника конечной длины (2 – двойник)

Рассмотрим случай, когда  $b_{кр} \sigma_{xy}^e(0, y) = 0$  и  $b_{в} \sigma_{xz}^e(0, y) = 0$ . Это соответствует случаю заклинившегося двойника [111]. Тогда  $S/\mu(y)$  в случае полисинтетического двойника будет иметь вид, представленный на рис. 5.16. Наибольшее значение сила торможения принимает у вершин двойников, где наблюдается локализация напряжений (рис. 5.16). 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. 5.15 видно, что у границ двойников сила торможения ниже, чем внутри их.

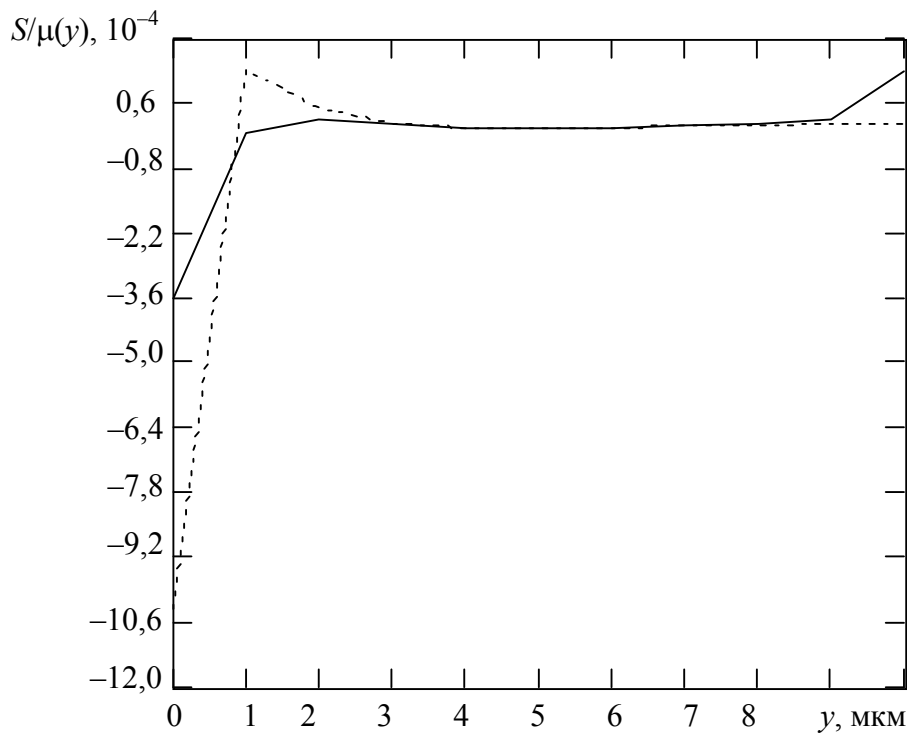


Рис. 5.16. Зависимость силы торможения (отнесенной к модулю сдвига) от расстояния вдоль двойника (y): сплошная линия – вдоль границы двойника; пунктирная – вдоль средней части двойника

В случае приближения бесконечности длины двойников в полисинтетическом двойнике в (5.9) необходимо использование подстановки:

$$\sigma_{xy}^{(1)} = \frac{\mu b_{кр}}{2D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y - 2\pi X_n^{(1)} \operatorname{sh} 2\pi X_n^{(1)})}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2},$$

$$\sigma_{xx}^{(1)} = -\frac{\pi \mu b_{кр}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{2\pi X_n^{(1)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2},$$

$$\sigma_{yy}^{(1)} = \frac{\mu b_{кр}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\operatorname{sh} 2\pi X_n^{(1)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y) - \pi X_n^{(1)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2},$$

$$\sigma_{xz}^{(1)} = -\frac{\mu b_B}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y}{\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y},$$

$$\sigma_{yz}^{(1)} = \frac{\mu b_B}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\operatorname{sh} 2\pi X_n^{(1)}}{\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y}; \quad (5.10)$$

$$\sigma_{xy}^{(2)} = -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y - 2\pi X_n^{(2)} \operatorname{sh} 2\pi X_n^{(2)})}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2},$$

$$\sigma_{xx}^{(2)} = \frac{\pi \mu b_{\text{кр}}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{2\pi X_n^{(2)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2},$$

$$\sigma_{yy}^{(2)} = -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\operatorname{sh} 2\pi X_n^{(2)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y) - \pi X_n^{(2)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2},$$

$$\sigma_{xz}^{(2)} = \frac{\mu b_B}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y}{\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y},$$

$$\sigma_{yz}^{(2)} = -\frac{\mu b_B}{2D} \sum_{n=0}^N \frac{\operatorname{sh} 2\pi X_n^{(2)}}{\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y}, \quad (5.11)$$

где  $Y = y/D$ ;  $X_n^{(1)} = (x - n(h + H) - h)/D$ ;  $X_n^{(2)} = (x - n(h + H))/D$ ;  $n$  – индекс суммирования;  $N$  – число двойников в полисинтетическом двойнике;  $\mu$  – модуль сдвига;  $\nu$  – коэффициент Пуассона;  $\sigma_{ij}^{(1)}$  и  $\sigma_{ij}^{(2)}$  – компоненты тензора напряжений, создаваемых дислокациями, находящимися на противоположных двойниковых границах.

В отличие от дислокационной модели двойника, рассмотренной в [3], где показаны дальнедействующие поля напряжений двойниковых границ на уровне, когда расстояние между двойникующими дислокациями пренебрежимо мало, рассматриваемая модель позволяет изучать поля напряжений в непосредственной близости у двойникующих дислокаций, когда расстояние между ними соизмеримо с областью исследования.

Недостатком предлагаемой модели является использование исходных соотношений для расчета полей напряжений вблизи единичной бесконечной дислокационной стенки, исключая бесконечное сум-

мирование, однако не позволяющих рассматривать напряжения в начале декартовой системы координат (рис. 5.8) и вдоль ее осей. Физический смысл имеет лишь картина полей напряжений, наблюдаемая вдали от начала координат и от осей  $OX$  и  $OY$  [112]. Однако, используя допущение о бесконечности длины двойников в полисинтетическом двойнике, в соотношениях (5.10) и (5.11) можно перейти от суммирования к функциональным зависимостям, что делает модель более экономичной для компьютерных расчетов.

Результаты компьютерного расчета полей напряжений, которые создает полисинтетический двойник, представлены на рис. 5.17–5.21. В расчетах принималось:  $D = 0,01$  мкм;  $h = 2$  мкм;  $H = 5$  мкм;  $N = 10$ ;  $\nu = 0,33$ ;  $b_{кр} = b_v = 1 \overset{0}{A}$ . Для устранения необходимости учета параметра  $\mu$  и повышения общности результатов рассчитывалась безразмерная величина  $\sigma_{ij} / \mu$ . На рис. 5.17–5.21 масштаб подобран таким образом, чтобы детально можно было бы рассматривать напряжения не только в самих двойниках (на рис. 5.17–5.21 их два из десяти заданных), но и в пространстве между ними.

Из рис. 5.17–5.21 видно, что напряжения локализованы на границах двойников и внутри их. В пространстве между двойниками полисинтетического двойника напряжения скомпенсированы и равны нулю. Это обусловлено заданной в рассматриваемой задаче антисимметричностью расположения дислокаций на двойниковых границах.

Сдвиговые напряжения  $\sigma_{xy}$  играют важную роль в междислокационном взаимодействии, а именно во взаимодействии двойниковых границ между собой и с дислокациями, находящимися внутри полисинтетического двойника и не являющимися дислокациями, образующими его границы. Данные напряжения обусловлены наличием краевой составляющей у вектора Бюргера двойникующих дислокаций и определяют области притяжения дислокаций одного знака и отталкивания – другого знака. На основании рис. 5.17–5.21 данные области схематически показаны на рис. 5.22. Аналогичную картину можно изобразить и для случая напряжений  $\sigma_{xz}$  и  $\sigma_{yz}$  (рис. 5.20, 5.21). Скопление в отдельных областях у двойниковых границ полных дислокаций одного знака способствует интенсификации процесса их расщепления на частичные двойникующие дислокации, что приводит к искривлению двойниковых границ в результате захвата двойником



данных дислокаций. В том случае, если такие дислокационные реакции энергетически не выгодны, в областях скопления одноименных полных дислокаций возможно зарождение микротрещин по дислокационному механизму [113]. При этом двойниковая граница, с одной стороны, выступает в качестве стопора, препятствующего движению дислокаций (рис. 5.23), а с другой – способствует притяжению к ней дислокаций.

Важным фактором, способствующим миграции полных дислокаций в указанные на рис. 5.22 области, является интенсивность термической обработки материалов с полисинтетическими двойниками, так как процесс движения дислокаций является термически активируемым [40].

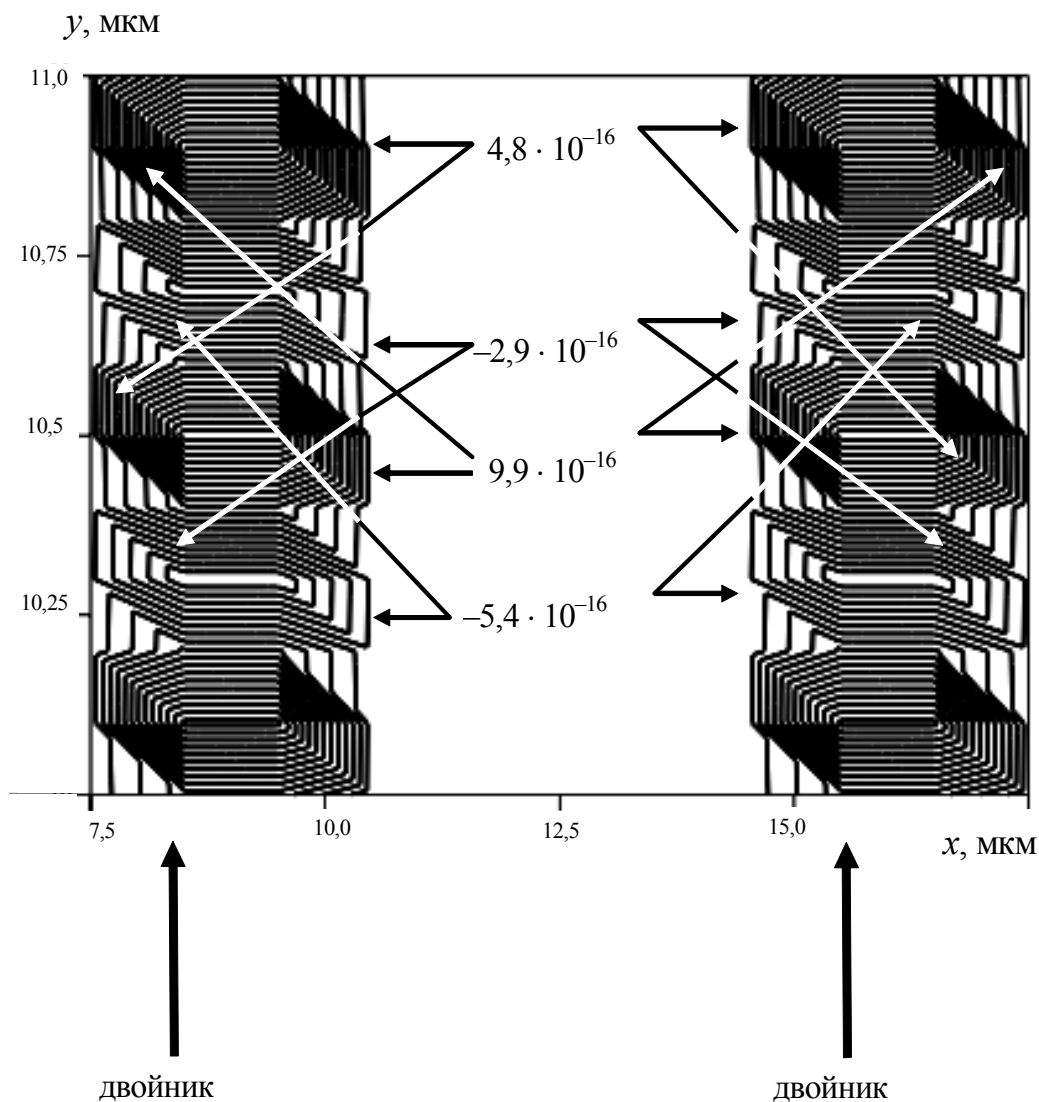


Рис. 5.17. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}/\mu$  в полисинтетическом двойнике

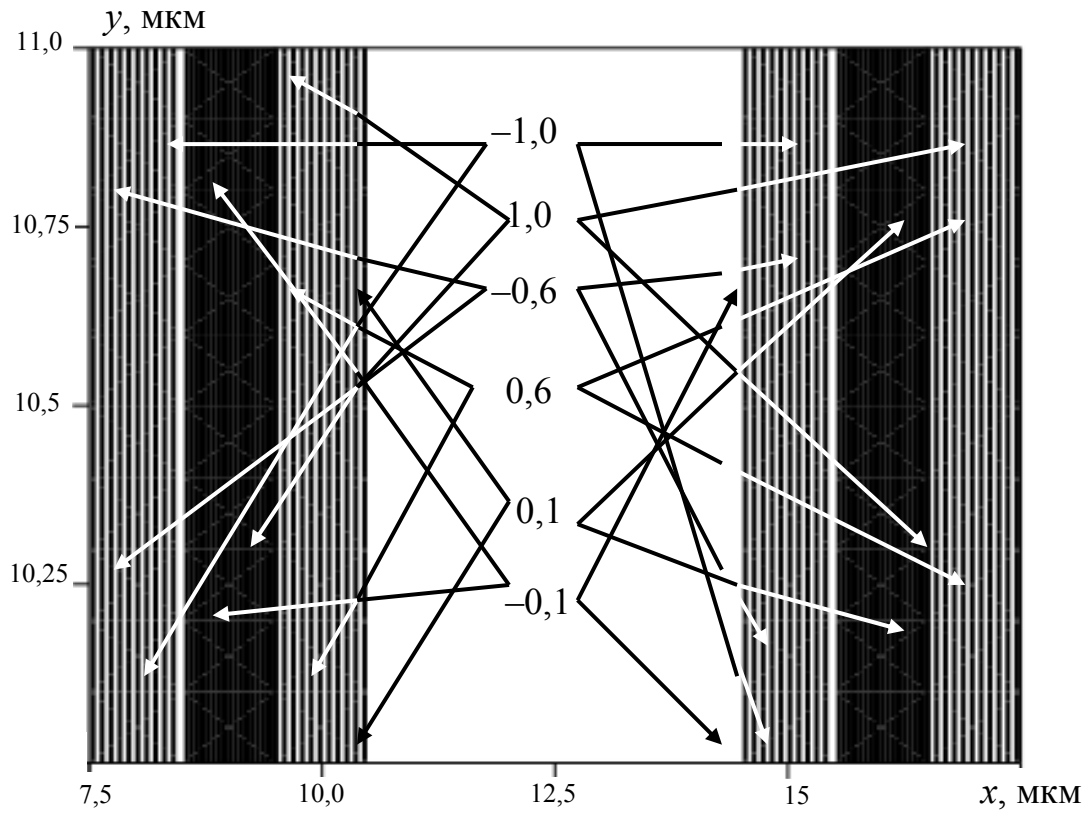


Рис. 5.18. Распределение напряжений  $\sigma_{xx}/\mu$  в полисинтетическом двойнике

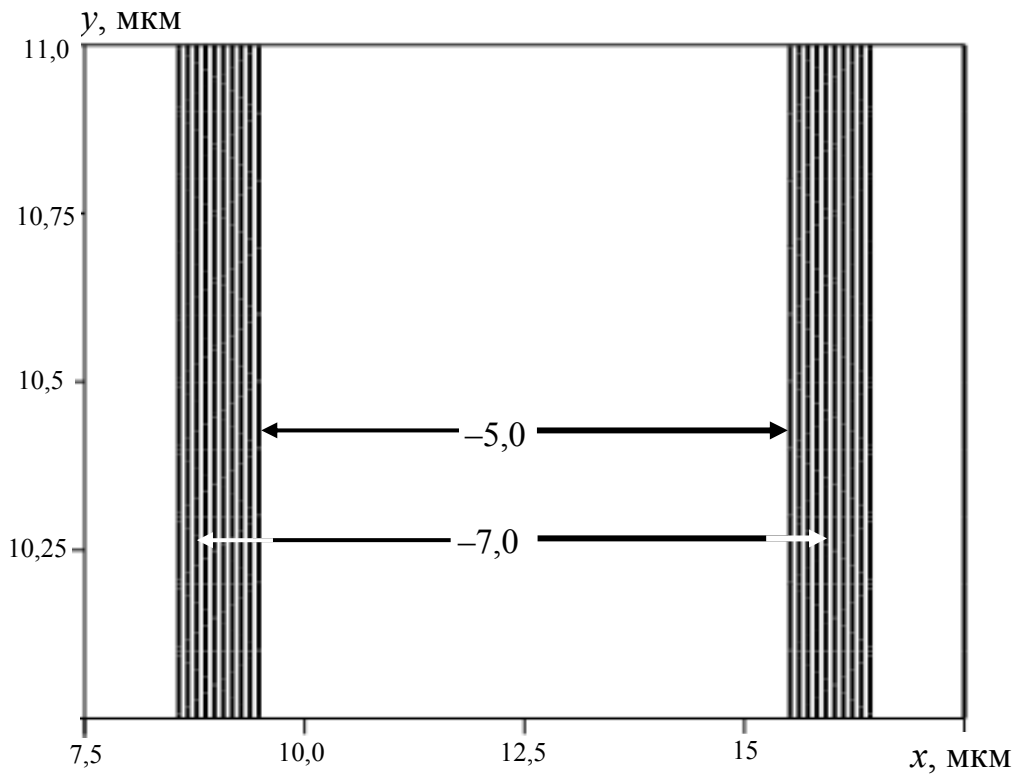


Рис. 5.19. Распределение напряжений  $\sigma_{yy}/\mu$  в полисинтетическом двойнике

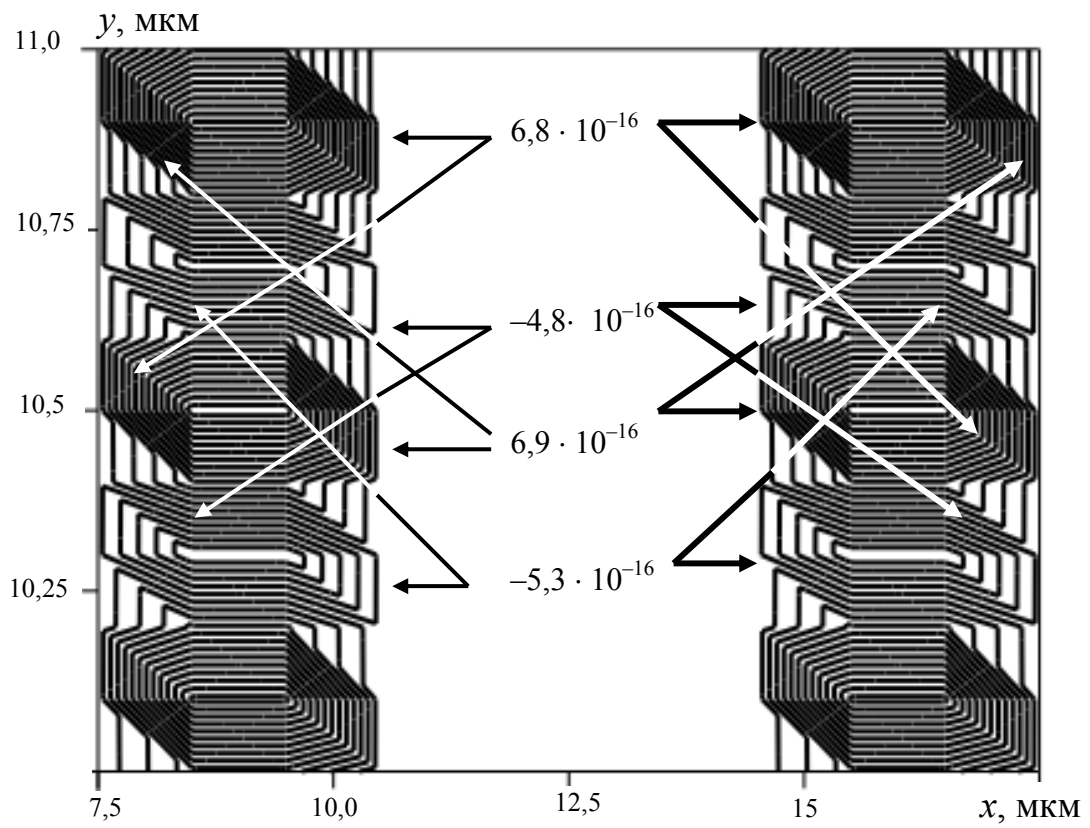


Рис. 5.20. Распределение напряжений  $\sigma_{xz}/\mu$  в полисинтетическом двойнике

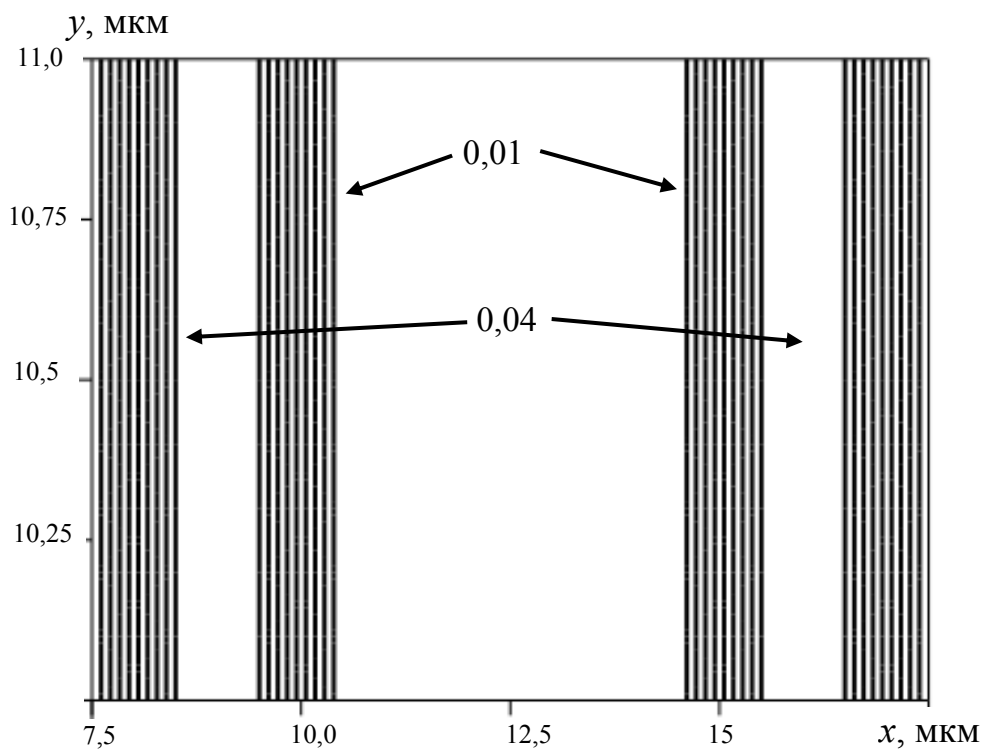


Рис. 5.21. Распределение напряжений  $\sigma_{yz}/\mu$  в полисинтетическом двойнике

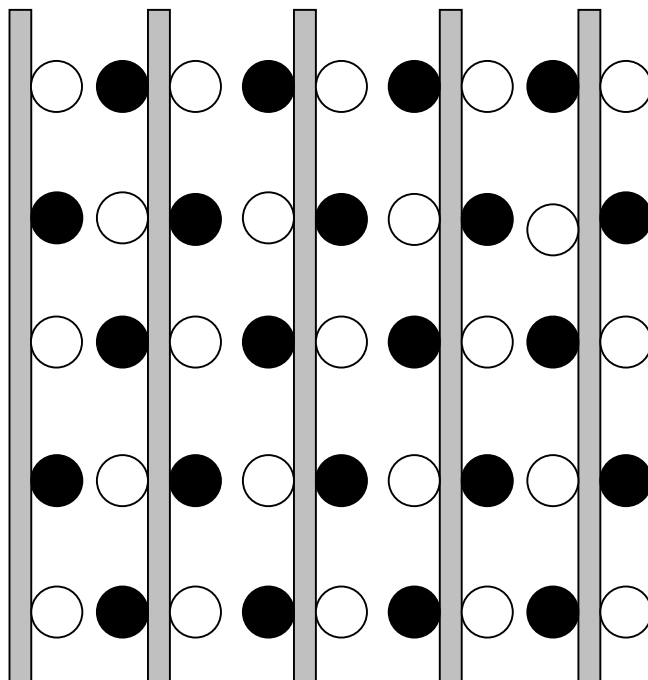


Рис. 5.22. Схема распределения областей (белые и черные окружности) локализации разноименных дислокаций (отмечено белым и черным цветом окружностей) у двойниковых границ (серые вытянутые прямоугольники – двойники)

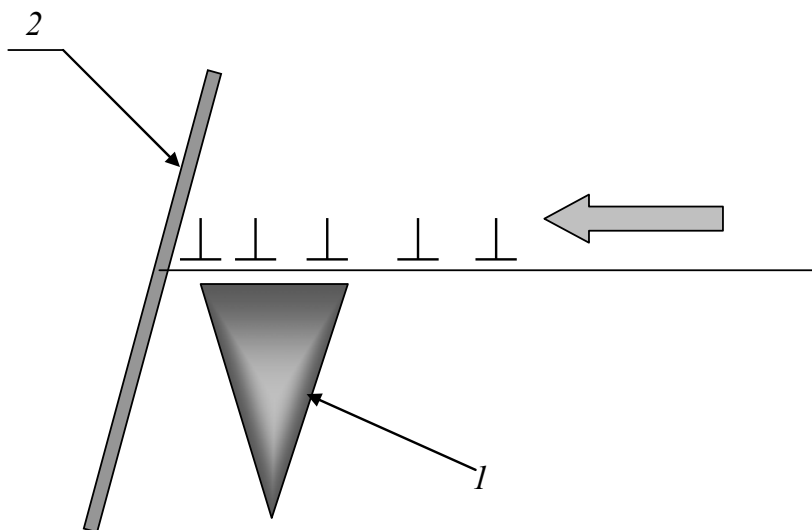


Рис. 5.23. Схема, иллюстрирующая дислокационный механизм образования трещины (1) у двойниковой границы (2)

В работе [114] изучалось поведение клиновидных двойниковых прослоек при пульсирующих нагрузках по схеме трехточечного изгиба. Представляет интерес анализ полученных в [114] результатов на основании проведенных в данной работе расчетов напряжений в системе параллельных двойников. Согласно данным работы [114] с рос-

том числа циклов нагружения сдвойникованных монокристаллов при одинаковой величине нагрузки в каждом цикле нагружения прирост ширины двойников уменьшается. При трехточечном изгибе активно пирамидальное скольжение [115], благодаря чему число полных дислокаций у двойниковых границ растет. Если предположить, что реакции расщепления полных дислокаций на частичные двойникующие дислокации затруднены, то, скапливаясь у двойниковых границ в указанных на рис. 5.22 областях, пирамидальные дислокации будут тормозить процесс увеличения ширины двойников. Однако при малом количестве циклов нагружения подвижность пирамидальных дислокаций существенно не ограничена. Подвижные пирамидальные дислокации существенным образом не способны повлиять на процесс увеличения ширины двойников, так как они участвуют в процессе одновременного перемещения с двойникующими дислокациями, но в плоскостях, отличных от плоскостей двойникования.

При достижении критического числа пирамидальных дислокаций в областях их скопления у двойниковых границ на данные дислокации уже с их стороны начинают действовать напряжения обратного знака, что приводит к запираанию источников пирамидальных дислокаций и ограничению их подвижности. Это, в свою очередь, приводит к уменьшению подвижности двойниковых границ в результате ограничения подвижности двойникующих дислокаций, взаимодействующих со ставшими неподвижными или малоподвижными пирамидальными дислокациями.

Таким образом, при малом числе циклов нагружения наблюдается согласованное движение как двойникующих, так и пирамидальных дислокаций. При большом количестве циклов нагружения подвижность пирамидальных дислокаций ограничивается запирающими напряжениями, из-за чего данные дислокации становятся препятствием на пути движения двойниковых границ.

### **5.3. Макроскопическая дислокационная модель полисинтетического двойника**

Разработанная в [26] дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника позволила решить проблему, имеющуюся в существующей дислокационной модели тонкого двойника [3], которая не дает возможности рассчитывать поля напряжений внутри двойника. Это существенно ограничивало область применения дисло-

кационных моделей двойников, так как в большинстве случаев на практике приходится сталкиваться с двойниками, ширина которых соизмерима с их длиной [116]–[118].

При деформировании двойникующихся материалов двойники в них, как правило, формируются группами [119]. Поэтому практический интерес представляет решение задачи по математическому моделированию полисинтетического двойникования, являющегося результатом развития системы параллельных двойников. Полисинтетическому двойникованию подвержены материалы при их деформировании сжатием, растяжением или кручением [3], т. е. таким видам деформаций, которые часто встречаются при эксплуатации двойникующихся материалов.

Особый интерес вызывает решение такой задачи о расчете полей напряжений у полисинтетического двойника, находящегося вдали от поверхности. Это актуально для случая крупнозернистых поликристаллических материалов, когда при внешнем деформировании система параллельных двойников зарождается на границах зерен. При этом отвлечемся от напряжений границ зерен и рассмотрим только те напряжения и эффекты, которые связаны только с двойникованием.

Для расчета полей напряжений  $\sigma_{ij}(x, y)$  у единичного клиновидного двойника с произвольной формой границ в работе [119] были предложены соотношения (3.1)–(3.7). Полученные соотношения могут быть положены в основу макроскопической дислокационной модели полисинтетического двойника в следующей модификации:

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x, y) = \sum_{n=0}^N \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y - nD, x_0) dx_0; \quad (5.12)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x, y) = \sum_{n=0}^N \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y - nD, y_0) dx_0. \quad (5.13)$$

Здесь  $N$  связано с числом двойников в полисинтетическом двойнике. Так как суммирование ведется от нуля, то рассчитываемое количество двойников будет на единицу больше, чем  $N$ .

Для использования (3.6) и (3.7) в (5.12) и (5.13) необходимо произвести замену  $y \rightarrow y - nD$ .

На рис. 5.24 схематически представлен полисинтетический двойник, для которого справедливы соотношения (5.12) и (5.13). Пусть направления краевой и винтовой составляющих вектора Бюр-

герса двойникующих дислокаций по отношению к полисинтетическому двойнику будут такими, как это показано на рис. 5.24. В случае прямолинейных границ двойников в полисинтетическом двойнике и при  $\rho(x_0) = \rho_2(x_0) = \text{const} = \rho$  для скалывающих напряжений  $\sigma_{xy}$  получим результат, представленный на рис. 5.25. Принималось:  $L = 100$  мкм;  $H = 21$  мкм;  $D = 31$  мкм;  $N = 5$ . Для удобства рассчитывалась приведенная величина  $\sigma_{xy}^*(x, y) = \sigma_{xy}(x, y) / \rho A$ , где  $A = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)}$ .

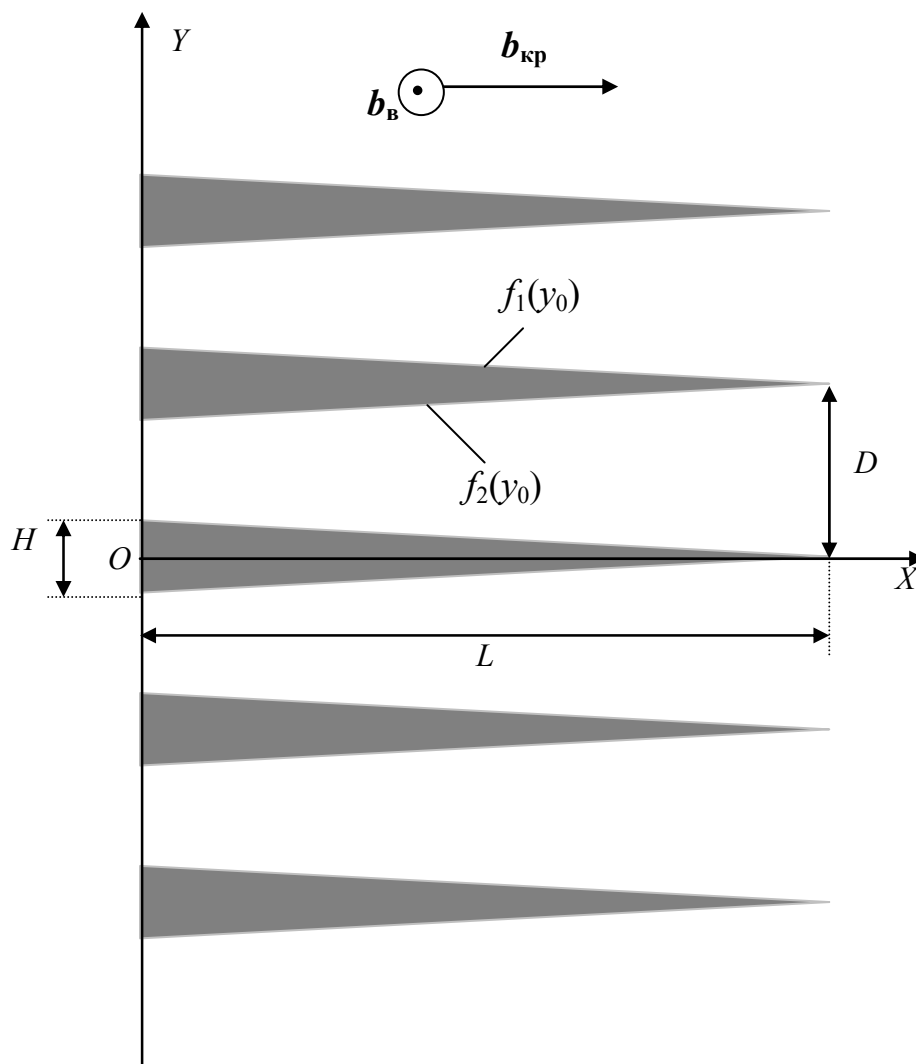


Рис. 5.24. Схематическое изображение полисинтетического двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла

Из рис. 5.25 видно, что напряжения локализуются на границах двойников, входящих в состав полисинтетического двойника, и у их вершин. У вершин двойников напряжения меняют знак на противоположный. С удалением от вершин двойников в сторону их роста

также имеется область локализации положительных сдвиговых напряжений.

Аналогично можно рассчитать поля напряжений у полисинтетического двойника с различной формой двойниковых границ, входящих в его состав двойников. Это осуществимо путем задания функций  $f_1(x_0)$  и  $f_2(x_0)$ . Плотность двойнивающих дислокаций на двойниковых границах задается функциями  $\rho_1(x_0)$  и  $\rho_2(x_0)$ .

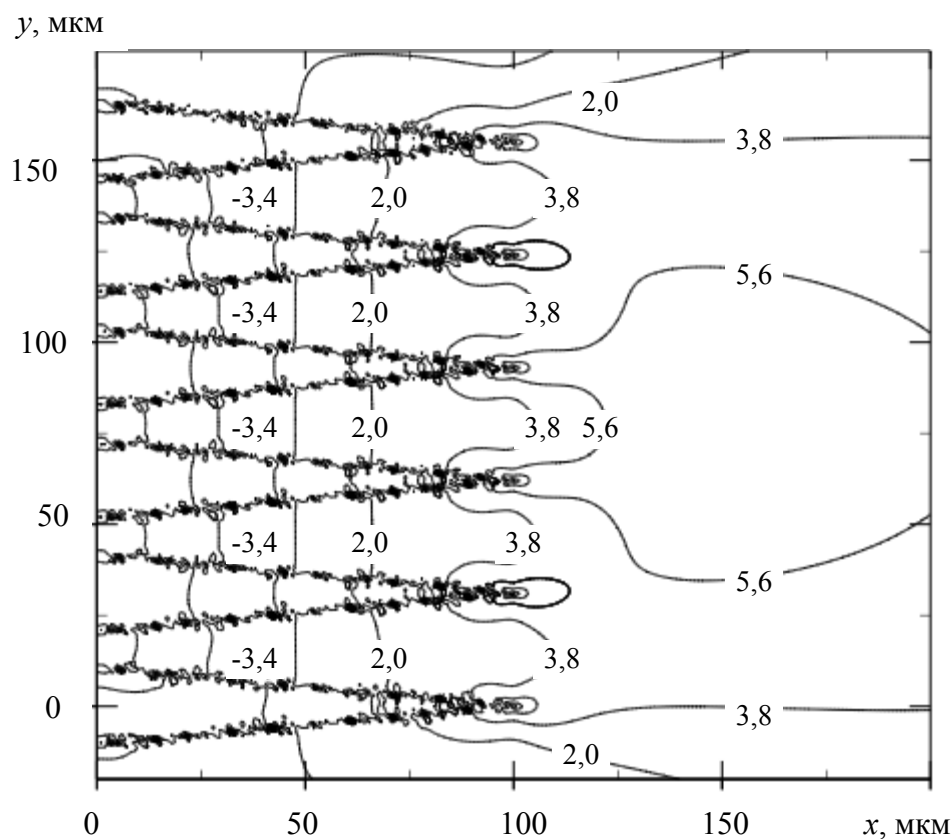


Рис. 5.25. Конфигурация полей сдвиговых напряжений  $\sigma_{xx}^*(x, y)$  у полисинтетического двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла

Представляет интерес случай, когда полисинтетический двойник находится у поверхности кристалла. Такой двойник схематически представлен на рис. 5.26. След поверхности кристалла на рис. 5.26 совпадает с осью  $OX$ . Пусть все двойники параллельны оси  $OY$ , и их длина, ширина и расстояние между ними постоянны. Это не противоречит общности полученных результатов и математических выкладок, так как легко можно перейти к рассмотрению любой группы полисинтетических двойников, классификация которых приведена в [108].



Из-за громоздкости выражений, которые при этом будут получены, рассмотрение данного вопроса в настоящей монографии не целесообразно.

В случае полисинтетического двойника у поверхности кристалла в (5.11) и (5.12) необходимо сделать подстановку (3.32), (3.33).

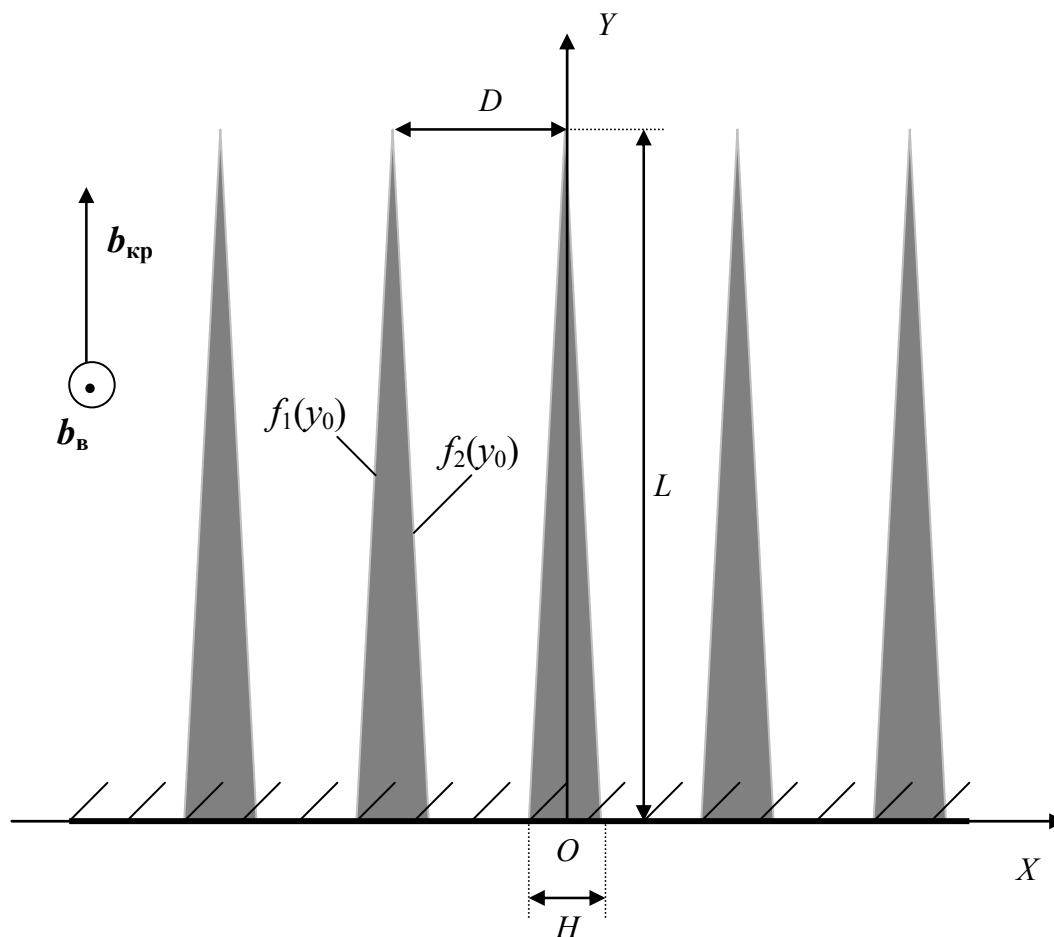


Рис. 5.26. Схематическое изображение полисинтетического двойника у поверхности кристалла

Результаты расчетов для полисинтетического двойника с прямолинейными границами его двойников и равномерном распределении двойникоующих дислокаций представлены на рис. 5.27 на примере сдвиговой компоненты  $\sigma_{xy}$ . Для удобства рассчитывалась приведенная величина  $\sigma_{xy}^*(x, y) = \sigma_{xy}(x, y) / \rho D_1$ . Принималось:  $L = 100$  мкм;  $H = 21$  мкм;  $D = 31$  мкм;  $N = 5$ . Так как в (5.11) и (5.12) суммирование ведется от нуля, то полное число двойников в полисинтетическом двойнике на единицу больше, чем  $N$ .

Из рис. 5.27 видно, что сдвиговые напряжения локализованы на двойниковых границах и у вершин двойников полисинтетического двойника. Высокий уровень напряжений наблюдается и у поверхности кристалла. Внутри полисинтетического двойника наблюдаются области равных напряжений. У двойников напряжения отрицательны, а при удалении от вершин двойников в направлении их развития – положительны.

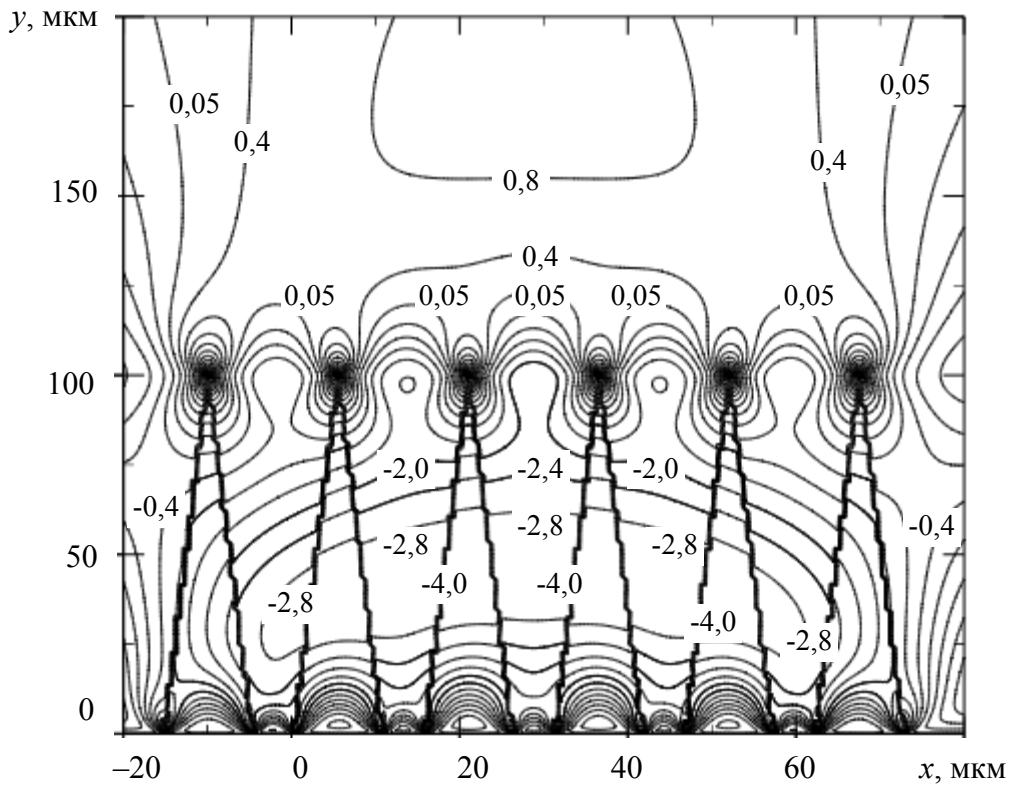


Рис. 5.27. Результаты расчетов приведенной величины  $\sigma_{xy}^*(x, y)$  для случая прямолинейных границ двойников с равномерной плотностью двойникующих дислокаций

Предложенная методика позволяет рассчитывать поля напряжений у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности кристалла, не только при равномерном распределении двойникующих дислокаций на двойниковых границах и прямолинейных двойниковых границах, но и в случае  $\rho_1(y_0) \neq \text{const}$ ,  $\rho_2(y_0) \neq \text{const}$ , при различных формах двойниковых границ, если эти характеристики одинаковы для всех двойников полисинтетического двойника. В качестве примера рассмотрим ситуацию, когда  $\rho_1(y_0) = \rho_2(y_0) = \rho(y_0)$ , причем

$$\rho(y_0) = \frac{2\sigma(1-\nu)}{\mu\sqrt{b_{кр}^2 + b_B^2}} \sqrt{\frac{L+y_0}{L-y_0}}. \quad (5.14)$$

Данное выражение применяется для случая равновесного распределения дислокаций в одностороннем скоплении, поджимаемом к препятствию сдвиговым напряжением  $\sigma$  [40].

Пусть одна из границ двойников полисинтетического двойника выпуклая, тогда в результате расчетов получится распределение, представленное на рис. 5.28.

Для удобства расчетов без ущерба для общности результатов в данном случае рассчитывалась величина  $\kappa_{xy}(x, y) = \sigma_{xy}(x, y) / B_{xy}$ , где  $B_{xy} = \sigma b_{кр} / (\pi \sqrt{b_{кр}^2 + b_v^2})$ . Остальные расчетные параметры брались такие же, как и в предыдущем случае.

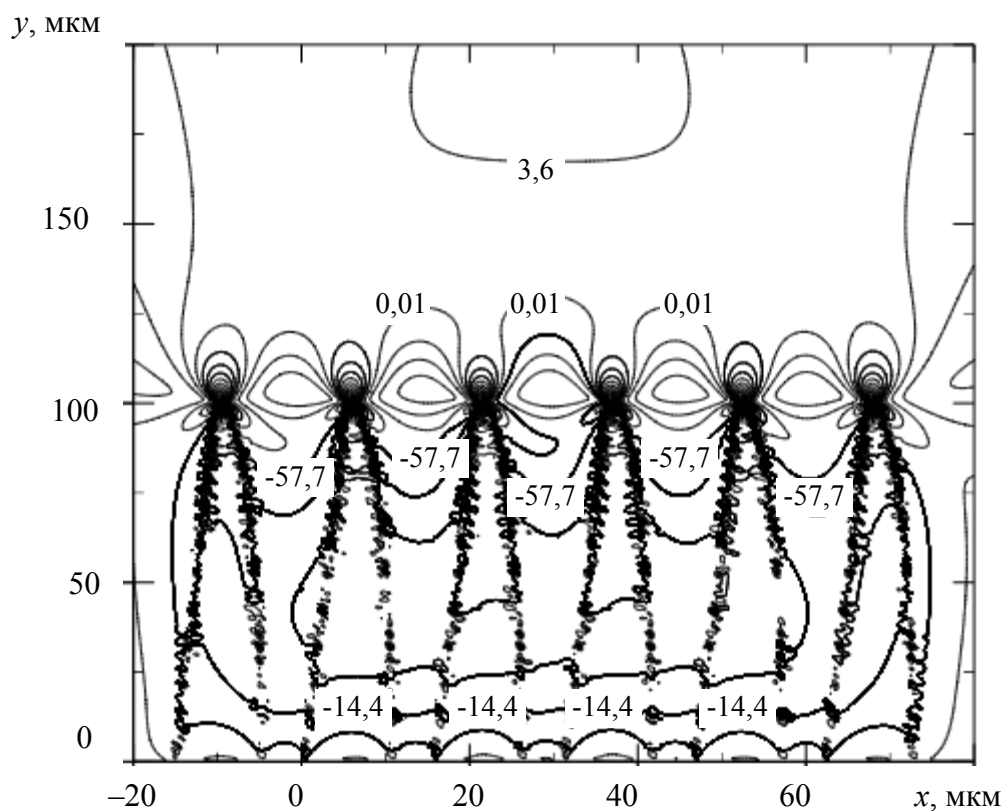


Рис. 5.28. Вид распределения  $\kappa_{xy}(x, y)$  для полисинтетического двойника с выпуклой двойниковой границей и неравномерным распределением двойникоующих дислокаций на двойниковых границах

Из рис. 5.28 видно, что, как и в предыдущем случае, напряжения локализованы на двойниковых границах и у вершин двойников. У вершин двойников напряжения также меняют свой знак. Заметна выпуклость одной из границ двойников.

Представляет интерес изучение условия равновесия двойника, входящего в состав полисинтетического двойника, находящегося у поверхности кристалла. Условие равновесия в данном случае примет вид [20]:

$$b_{\text{кр}}\sigma_{xy}(0, L, y_0) + b_{\text{в}}\sigma_{xz}(0, L, y_0) - \frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}}}{2y_0} + S(y_0) = 0. \quad (5.15)$$

Дифференцируя правую и левую часть данного соотношения по  $dy_0$ , получим

$$\begin{aligned} & \sqrt{1 + (f'_1(y_0))^2} \rho_1(y_0) [b_{\text{кр}}\sigma_{xy}^{(1,0)}(0, L, y_0) + b_{\text{в}}\sigma_{yz}^{(1,0)}(0, L, y_0)] + \\ & + \sqrt{1 + (f'_2(y_0))^2} \rho_2(y_0) [b_{\text{кр}}\sigma_{xy}^{(2,0)}(0, L, y_0) + b_{\text{в}}\sigma_{yz}^{(2,0)}(0, L, y_0)] = \\ & = -\frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}}}{2y_0^2} - \frac{dS(y_0)}{dy_0}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

В случае прямолинейных двойниковых границ при  $\rho_1(y_0) = \rho_2(y_0) = \rho(y_0)$  и  $S(y_0) = \text{const}$  из (5.15) получим

$$\rho(y_0) = -\frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}}}{2y_0^2 K(0, L, y_0)}, \quad (5.17)$$

где

$$\begin{aligned} K(0, L, y_0) = & \sqrt{1 + \left(\frac{H}{2L}\right)^2} \left[ b_{\text{кр}} (\sigma_{xy}^{(1,0)}(0, L, y_0) + \sigma_{xy}^{(2,0)}(0, L, y_0)) + \right. \\ & \left. + b_{\text{в}} (\sigma_{yz}^{(1,0)}(0, L, y_0) + \sigma_{yz}^{(2,0)}(0, L, y_0)) \right]. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Расчеты показали, что при отсутствии внешних сил равновесная плотность дислокаций при  $S(y_0) = \text{const}$  принимает отрицательные значения. Результаты указывают на необходимость дополнительных

сил для зарождения двойника равновесной формы либо на наличие на двойниковых границах двойникующих дислокаций разного знака, что не имеет физического смысла.

Такая же ситуация наблюдается и при  $S(y_0) \neq \text{const} > 0$ . Так, например, при  $S(y_0) = Ay_0 + B$  получаем

$$\rho(y_0) = -\frac{D_1 b_{\text{кр}} + D_2 b_{\text{в}} + 2Ay_0^2}{2y_0^2 K(0, L, y_0)}. \quad (5.19)$$

В данном случае  $\rho(y_0)$  всегда больше нуля, когда  $A < 0$ . Следовательно, сила сопротивления должна действовать в направлении развития двойника, что физически невозможно. Таким образом, существует необходимость наличия дополнительных внешних сил, направленных на преодоление силы притяжения двойникующих дислокаций к поверхности, и сил сопротивления развитию двойника.

#### **5.4. Распределение примесей у полисинтетического двойника и теоретические основы синтеза слоистых материалов**

Рассмотрим мезоскопическую дислокационную модель полисинтетического двойника. В данном случае распределение примесей у полисинтетического двойника может быть рассчитано из соотношений (3.45), (3.46), где нормальные компоненты тензора напряжений могут быть найдены из (5.7), (5.8) и (5.9).

Результаты расчетов приведены на рис. 5.29. Принималось:  $h = 0,1$  мкм;  $d = 1$  мкм;  $H = 3$  мкм;  $b = 1 \overset{0}{A}$ ;  $\nu = 0,33$ ;  $N = 100$ ;  $M = 10$ ;  $y = 0$ ;  $C_0 = 25$  ат. %.

Как видно из рис. 5.29, распределение легирующего компонента в полисинтетическом двойнике носит осциллирующий характер. За пределами полисинтетического двойника, по мере удаления от него, концентрация легирующего компонента стремится к  $C_0$  (рис. 5.29), т. е. к значению концентрации вдали от источников внутренних напряжений. Важную роль в характере распределения легирующего компонента в полисинтетическом двойнике играет соотношение радиусов атомов легирующего компонента и атомов матрицы. В зависимости от данного соотношения легирующий компонент локализуется

у двойниковой границы либо внутри единичного двойника, либо снаружи (рис. 5.29). Это приводит к тому, что у двойниковых границ полисинтетического двойника из-за избыточной концентрации легирующего компонента возможно формирование фаз, образование которых невозможно вдали от источников внутренних напряжений, к которым относятся границы полисинтетических двойников.

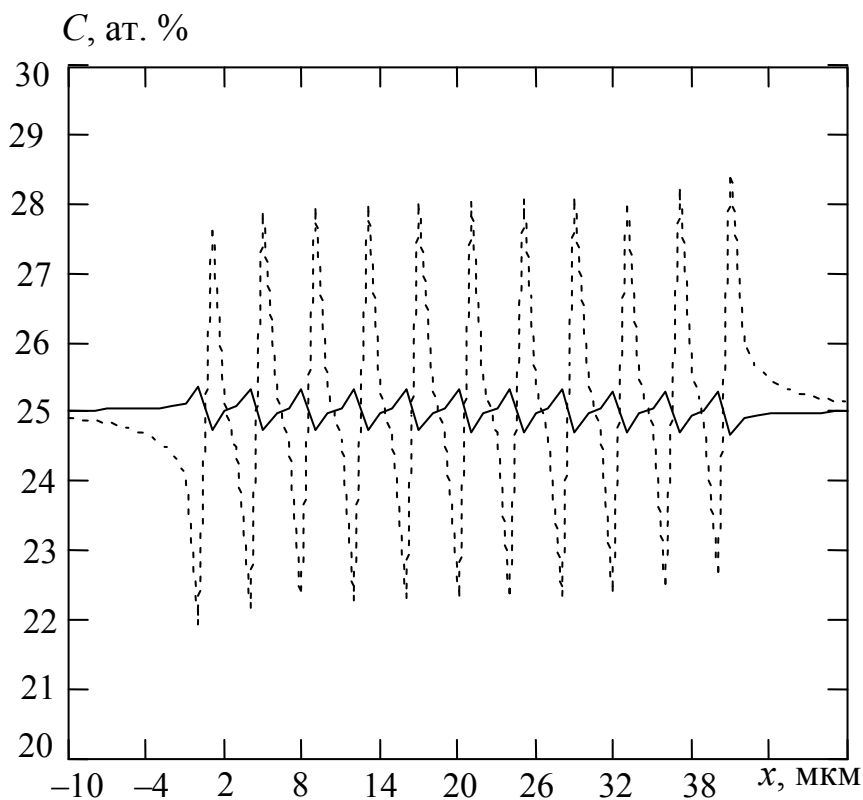


Рис. 5.29. Распределение легирующего компонента у полисинтетического двойника вдоль оси  $Ox$  при  $y = 0$ : сплошная линия —  $r > r_0$ , пунктирная —  $r < r_0$

Пусть  $A_xBR_y$  — фаза, формирующаяся вдали от источников внутренних напряжений ( $A$  — элемент матрицы;  $BR$  — элемент легирующего компонента;  $R = 1$  при  $r > r_0$ ;  $R = 2$  при  $r < r_0$ ;  $x$  и  $y$  — целые числа). Тогда согласно рис. 5.29 легирующий компонент у двойниковой границы будет располагаться так, как это показано на рис. 5.30. В области 1 (рис. 5.30) благоприятны условия для зарождения фаз типа  $A_{x-n}B1_{y+n}$  ( $n$  — целое число), а в области 2 — фаз типа  $A_{x-n}B2_{y+n}$ . Это создает условия для синтеза слоистых материалов благодаря периодичности концентраторов напряжений в полисинтетическом двойнике, способствующем специфической сортировке легирующего компонента.

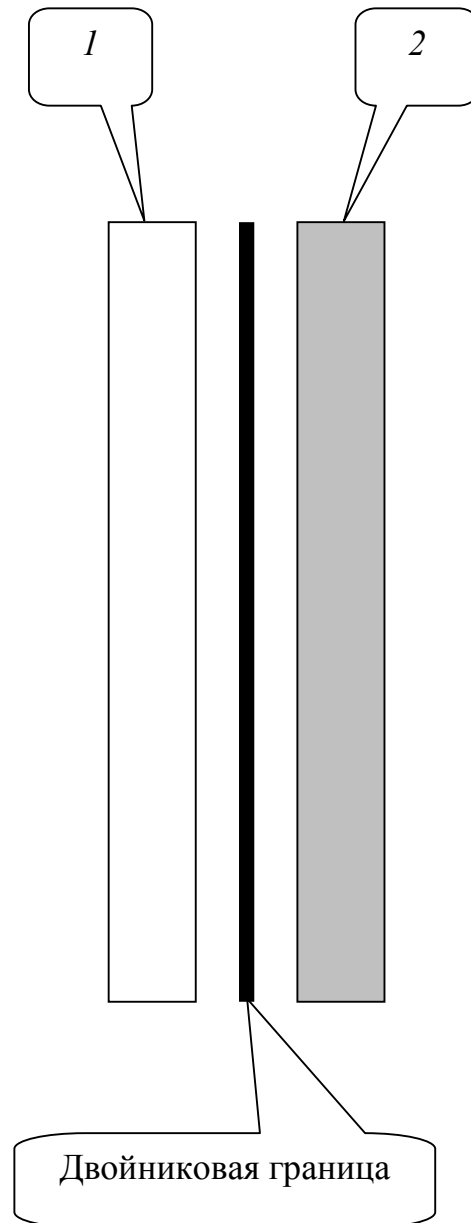


Рис. 5.30. Схематическое изображение распределения легирующего компонента и областей зарождения фаз:  
 1 – типа  $A_{x-n}B_{1_{y+n}}$ ; 2 – типа  $A_{x-n}B_{2_{y+n}}$ . Здесь  $n$  – целое число

В случае бесконечной длины двойников полисинтетического двойника вместо (5.7) и (5.8) необходимо использовать (5.10) и (5.11). Результаты расчетов представлены на рис. 5.31. Максимальная концентрация примеси наблюдается у двойниковых границ. При этом сторона по отношению к двойниковой границе, у которой располагаются примесные атомы, определяется соотношением между радиусами атомов матрицы и примесей. Схематически это продемонстрировано на рис. 5.32.

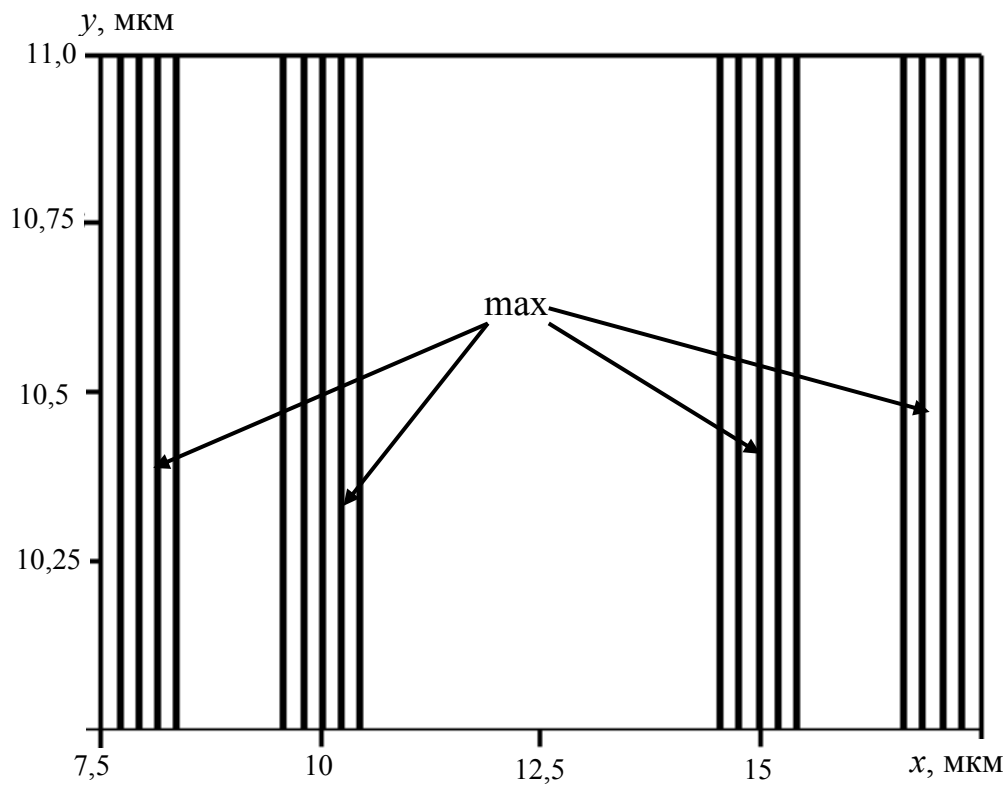


Рис. 5.31. Концентрационные профили распределения примесей в полисинтетическом двойнике

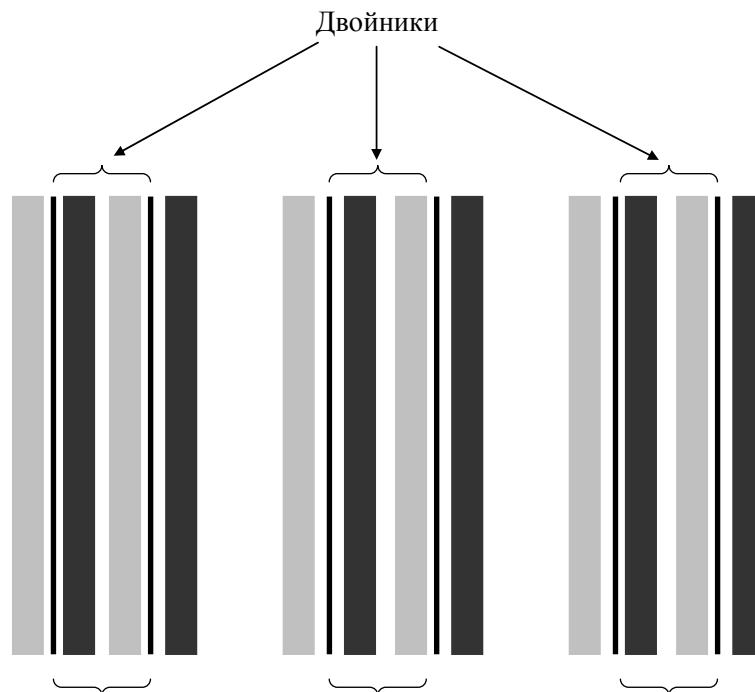


Рис. 5.32. Схематическое изображение областей локализации примесей у границ двойников полисинтетического двойника: серые прямоугольники – случай, когда  $r_0 > r$ ; черные –  $r_0 < r$ . Черные вертикальные линии – двойниковые границы



Если предположить, что в качестве примеси в материале выступает легирующий компонент, то полисинтетическое двойникование, вследствие своей способности сортировать атомы по их радиусу и благодаря трансляционно-симметричному расположению областей локализации легирующего компонента (рис. 5.32), может выступать в качестве способа синтеза слоистых бинарных, или многокомпонентных, монокристаллических систем [120], [121].

Миграции легирующего компонента к двойниковым границам способствует термическая обработка. А так как существует явление раздвойникования монокристаллов при приложении к ним напряжений обратного знака, то данное явление может устранять в слоистом материале напряжения, связанные с наличием двойниковых границ. Естественно, что структура такого материала с упорядоченно распределенным в тонких слоях легирующим компонентом при устранении двойников будет неустойчивой. Более устойчивой будет конденсированная система, в которой в результате термической обработки в областях локализации легирующего компонента произойдут фазовые превращения.

### **5.5. О возможности применения полисинтетического двойникования для получения фазовых дифракционных решеток**

В работе [122] предложен способ формирования фазовых дифракционных решеток, схема которого показана на рис. 5.33. При этом отмечалось, что для начала генерации источником двойникоующих дислокаций необходимо наличие сосредоточенной нагрузки, концентрирующей в малой области кристалла достаточно большие для начала двойникования внутренние напряжения, определяемые ориентационным фактором Шмида. В качестве таких нагрузок могут быть использованы сферические инденторы 2 (рис. 5.33), расположенные друг от друга на расстоянии  $L$  вдоль оси  $OX$  и  $D$  – вдоль оси  $OY$ . При деформировании поверхности кристалла сосредоточенной нагрузкой вокруг отпечатка индентора обычно возникает несколько клиновидных двойников, причем развивающихся не всегда в одном, а чаще в нескольких кристаллографических направлениях. В монокристаллах висмута, например, при деформировании их плоскости спайности (111) таких направлений шесть [123]. Для выделения необходимых двух взаимно противоположных направлений двойникова-

ния можно использовать, например, дополнительные внешние напряжения  $\sigma$ , действующие вдоль выбранных направлений и облегчающие тем самым процесс двойникования именно в шести направлениях, делая данные направления предпочтительными.

Другим способом выделения преимущественных направлений двойникования в [124] предложено рассматривать анизотропию электропластического эффекта при двойниковании монокристаллов [122]. При этом преимущественную стимуляцию получают дислокационные процессы при двойниковании в направлениях, вдоль которых пропускается электрический ток.

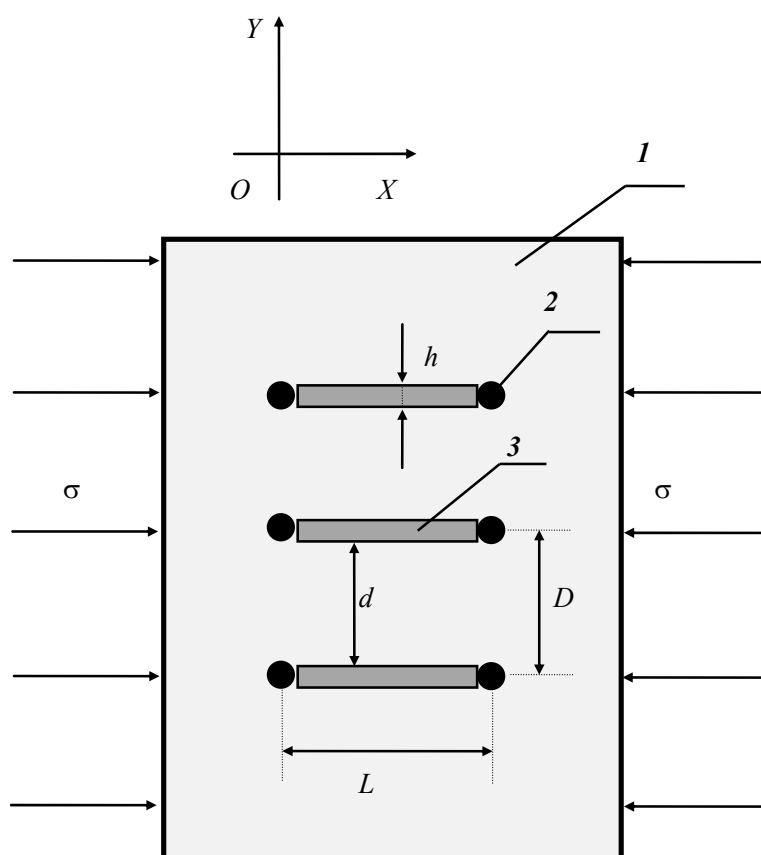


Рис. 5.33. Схема для создания фазовых дифракционных решеток на основании явления двойникования кристаллов: 1 – образец; 2 – концентраторы внешних напряжений; 3 – двойниковые прослойки

Для уменьшения числа двойников, возникающих у концентратора внешних напряжений, в [122] предлагалось отдавать предпочтение сосредоточенным нагрузкам, имеющим сферическую форму. Как указывалось в [122], регулировать число двойников можно изменением температуры деформирования кристалла. Повышение темпе-

ратуры (в определенных интервалах) чаще способствует уменьшению вклада двойникования в процесс пластической деформации кристаллов и приводит к уменьшению числа двойников у концентраторов напряжений [118]. Уменьшению числа неблагоприятных двойников может способствовать и облучение кристаллов ионами [118]. В случае деформирования монокристаллов висмута особенно заметный эффект уменьшения числа двойников с одновременной стимуляцией подвижности двойникоующих дислокаций дает облучение ионами циркония [118].

При деформировании поверхности монокристаллов сосредоточенными нагрузками, расположенными друг от друга на расстоянии  $D$ , между границами возникающих при этом двойниковых прослоек имеется слой материала шириной  $d$ , не подвергнутый двойникованию [122]. При нормальном падении плоской световой волны на такую дифракционную решетку будут возникать лучи, отражающиеся в противоположном направлении, что будет отрицательно сказываться на получаемой дифракционной картине. Для уменьшения интервала  $d$  до нуля в [122] было предложено увеличение внешних напряжений  $\sigma$  (рис. 5.33) либо увеличение нагрузки на сферические инденторы 2.

Рассмотрим возможность синтеза фазовых дифракционных решеток на примере использования результатов расчетов ориентационного фактора Шмида, что отличается от общеизвестных способов. При этом рассмотрим вариант трехточечного изгиба монокристалла висмута. Схема установки для трехточечного изгиба монокристаллических образцов может иметь вид, приведенный на рис. 5.34. Индентор 6 должен иметь клиновидную форму, благодаря чему нагрузка распределялась вдоль линии пересечения плоскостей (111) и (110), при этом индентор опускался перпендикулярно плоскости (111).

Схема деформирования монокристалла висмута для данного случая представлена на рис. 5.35. Плоскость двойникования (110) по отношению к плоскости (111) расположена под углом  $\varphi$ . Для расчета фактора Шмида необходимо определить направление действия внешней нагрузки, нормаль к плоскости двойникования и направление двойникования [122]. При деформировании перпендикулярно плоскости скола (111) нормаль к этой плоскости и направление деформирования будет [111]. Нормаль к плоскости двойникования (110) имеет индекс [110]. Направления двойникования общеизвестны [2]. Одно из направлений, находящееся в плоскости (110), имеет индекс [001]. Рассмотренные плоскости и направления показаны на рис. 5.35.

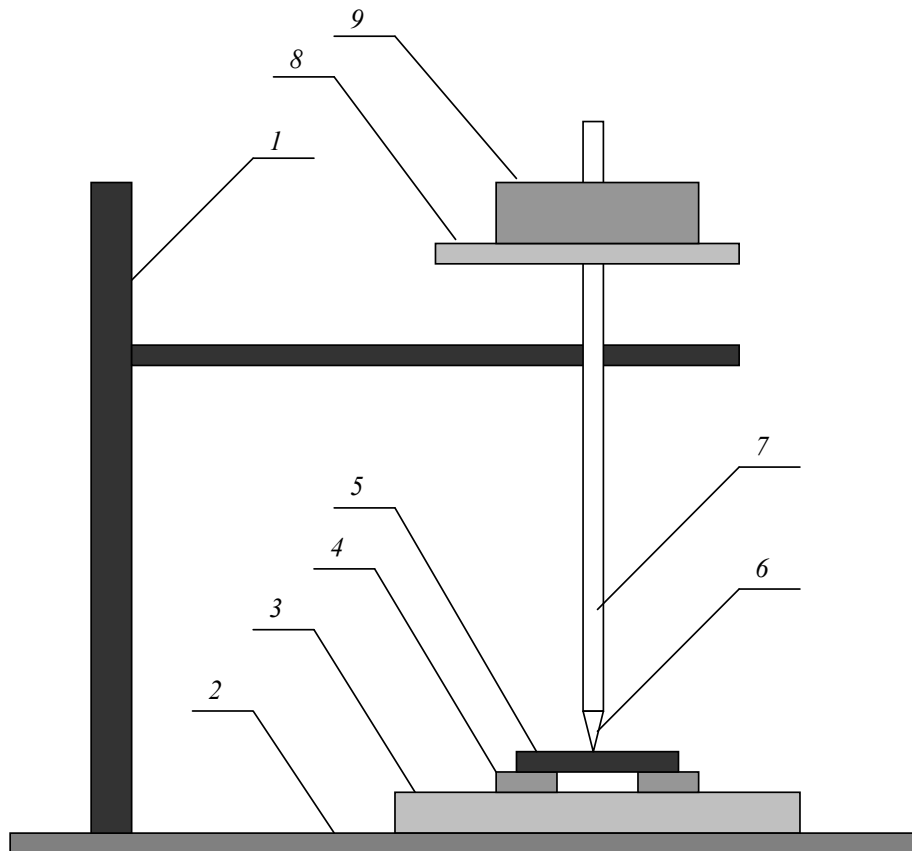


Рис. 5.34. Схема установки для трехточечного изгиба монокристаллов: 1 – штатив; 2 – опора; 3 – подвижный столик; 4 – опоры для образцов; 5 – образец; 6 – индентор; 7 – шток; 8 – столик для грузов; 9 – груз

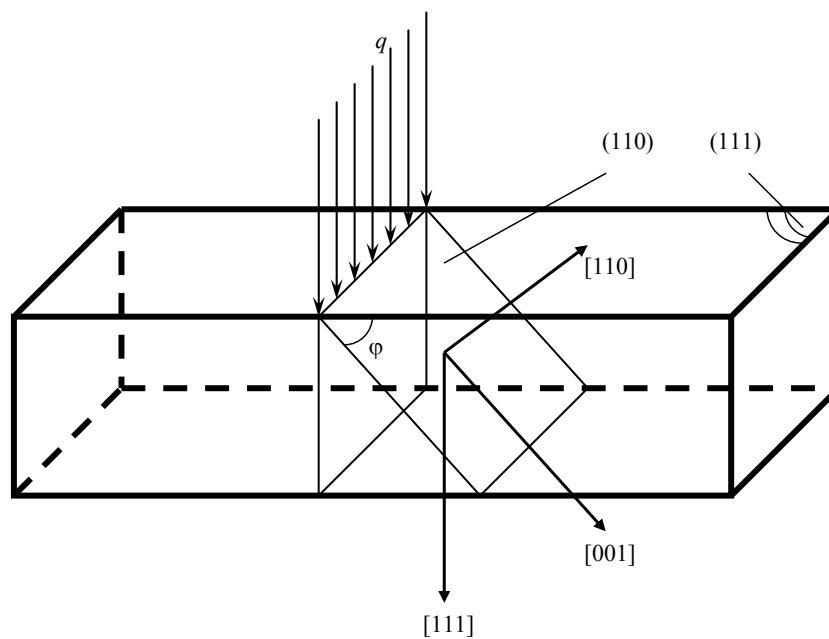


Рис. 5.35. Схема деформирования монокристалла висмута при приложении нагрузки, равномерно распределенной вдоль направления пересечения плоскостей (111) и (110)

Висмут имеет ромбоэдрическую структуру с углом  $57^{\circ}14'13''$  и параметром кристаллической решетки  $a = 0,4746$  нм [2]. Взаимное расположение указанных выше направлений представлено на схеме для определения углов с целью расчета фактора Шмида для двойникования при деформировании кристалла в направлении  $[111]$  (рис. 5.36). Фактор Шмида определяется по формуле [3]:

$$m = \cos \alpha \cos \beta, \quad (5.20)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – углы между направлением деформирования и направлением двойникования (скольжения) и нормалью к плоскости двойникования (скольжения) соответственно.

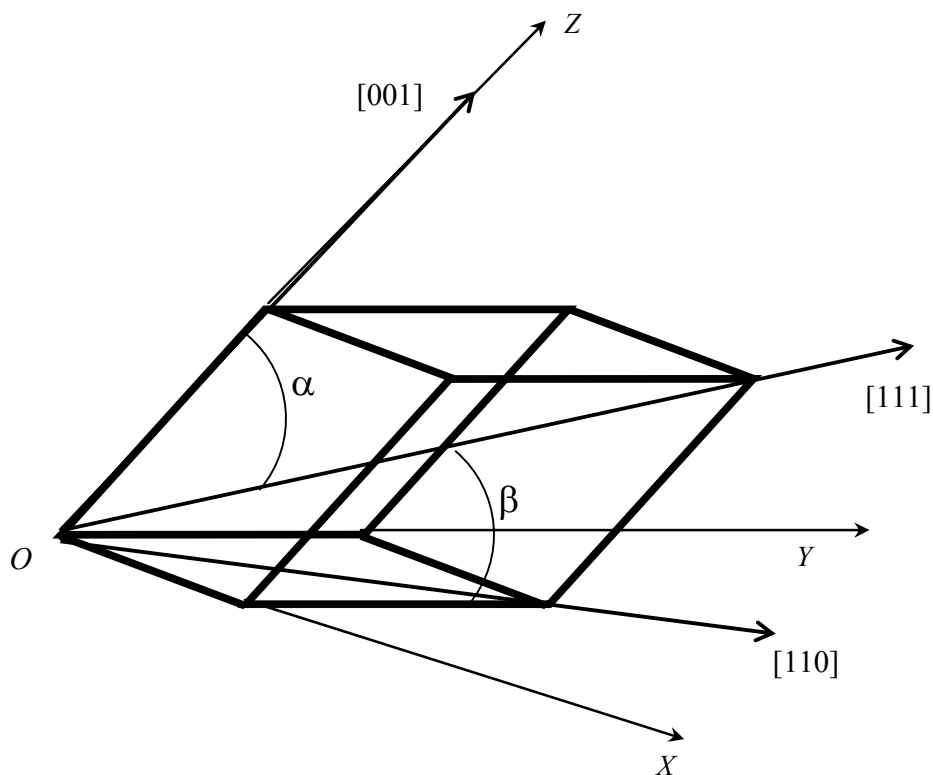


Рис. 5.36. Схема для расчета фактора Шмида для двойникования при деформировании монокристалла висмута вдоль направления  $[111]$

Результаты расчетов фактора Шмида для различных направлений деформирования представлены в табл. 5.1. При этом для расчетов пирамидального скольжения использовалась схема, представленная на рис. 5.37. Факторы Шмида для двойникования и скольжения для направлений деформирования  $[1\bar{1}0]$  и  $[110]$  рассчитывались аналогично.

Таблица 5.1

Рассчитанные значения фактора Шмида для двойникования и скольжения при различных направлениях деформирования монокристалла висмута

Канал пластической деформации	Направление деформирования		
	[111]	$[1\bar{1}0]$	[110]
Двойникование $[001](110)$	0,77	0,29	0,54
Пирамидальное скольжение $[221](11\bar{1})$	0,0	0,22	0,0
Базисное скольжение $[\bar{2}\bar{2}1](111)$	0,0	0,22	0,0

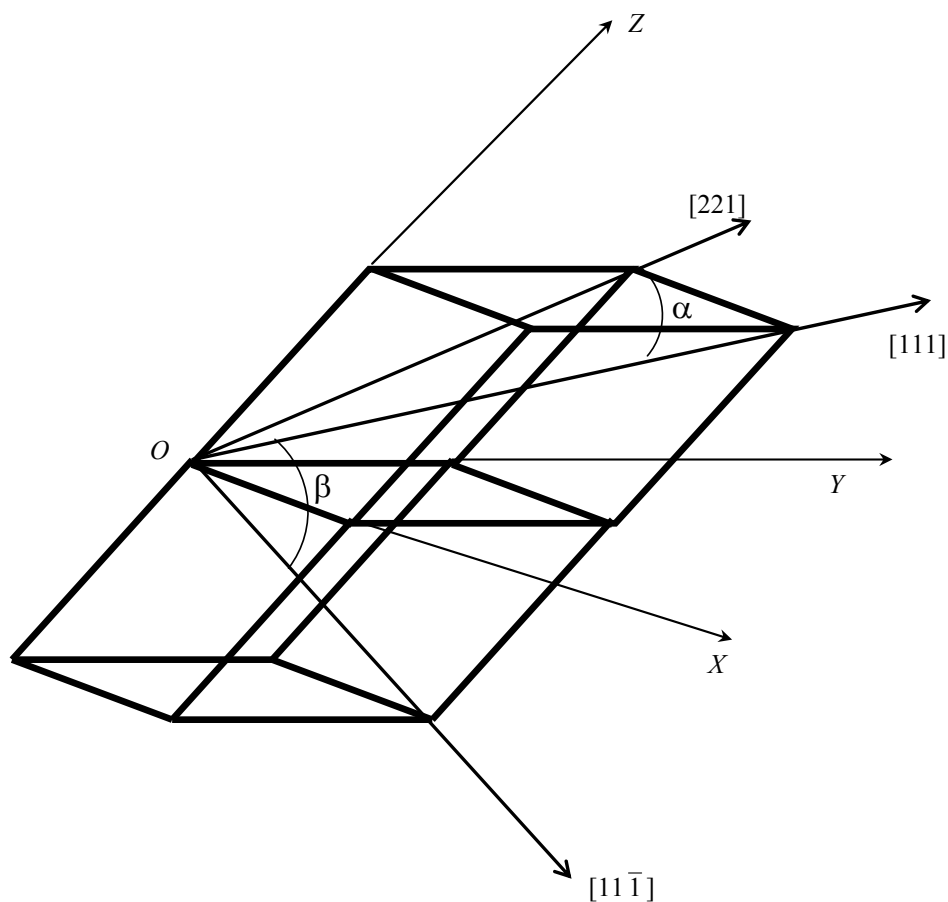


Рис. 5.37. Схема для расчета фактора Шмида для скольжения в  $(11\bar{1})$  при деформировании монокристалла висмута вдоль направления [111]

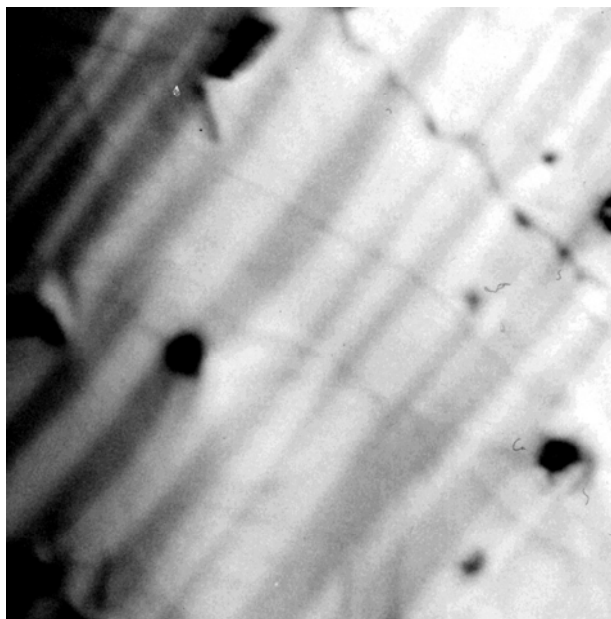
Из анализа результатов табл. 5.1 можно сделать заключение, что для активизации двойникового наиболее эффективно деформирование монокристаллов висмута в направлении, перпендикулярном плоскости скола (111). Двойникование также активно и при деформировании монокристаллов висмута и вдоль направления [110]. В вышеперечисленных случаях существует ориентационный запрет на базисное и пирамидальное скольжения. В то время как в случае деформирования вдоль  $[1\bar{1}0]$  активность двойникового низкая, при этом она соизмерима с активностью базисного и пирамидального скольжения.

Таким образом, из полученных результатов расчета фактора Шмида делаем вывод, что наиболее эффективным с точки зрения получения полисинтетического двойникового является деформирование монокристаллов висмута в направлении, перпендикулярном плоскости (111), и разработанная установка для деформирования монокристаллов висмута трехточечным изгибом целесообразна. Данные результаты были подтверждены экспериментально.

Методом трехточечного изгиба получена система параллельных двойников в монокристаллах висмута. Типичный вид полисинтетических двойников при приложении нагрузки перпендикулярно плоскости (111) монокристаллов висмута приведен на рис. 5.38, *а*. Применялся также метод одноосного сжатия моно- и поликристаллов (величина деформации около 10 %). В случае поликристаллов полисинтетические двойники образовывались лишь в отдельных зернах, благоприятно ориентированных по отношению к деформирующему усилию (рис. 5.38, *б*).

Из рис. 5.37 видно, что в случаях благоприятной ориентации кристаллов по отношению к внешним напряжениям слабо выражено скольжение. Однако двойники не всегда имеют правильную форму. На нее активное влияние оказывает несовершенство структуры монокристалла (рис. 5.38, *а*). Поэтому для синтеза фазовых дифракционных решеток необходимо использовать качественно выращенные монокристаллы с малой долей инородных включений.

При размерах монокристаллов висмута  $2 \times 5 \times 10$  мм в случае трехточечного изгиба оптимальной деформирующей нагрузкой можно считать 30 Н. Более высокие нагрузки приводят к увеличению ширины двойников, что в отдельных случаях ведет к их слиянию.



а)



б)

Рис. 5.38. Полисинтетические двойники: а – в монокристалле висмута; б – в зерне поликристалла висмута ( $\times 500$ ) (данный рисунок предоставлен профессором В. Г. Шепелевичем)

Однако даже при нагрузках разрушения монокристалла превращения полисинтетического двойника в один двойник шириной, равной ширине полисинтетического двойника, не наблюдается. Это указывает на энергетическую выгоду полисинтетического двойникования по отношению к процессам роста ширины двойников и слияния параллельных двойников в один двойник. Математическая запись данного утверждения может быть представлена в следующем виде:

$$W_{\text{поли}} < (W_{\text{ш}} + W_{\text{сл}})/2, \quad (5.21)$$



где  $W_{\text{поли}}$  – энергия формирования полисинтетического двойника;  $W_{\text{ш}}$  – энергия роста ширины отдельного двойника, поглощающего другие двойники полисинтетического двойника;  $W_{\text{сл}}$  – энергия слияния двойников в один двойник. В соотношении (5.21) в правой части принято деление пополам, так как  $W_{\text{поли}}$  меньше и  $W_{\text{ш}}$  и  $W_{\text{сл}}$  в отдельности. Условие (5.21) выполняется в том случае, если в величинах  $W_{\text{ш}}$  и  $W_{\text{сл}}$  содержится величина  $W_{\text{поли}}$ .

В качестве методов активизации процессов полисинтетического двойникования можно отметить ионную имплантацию, которая способствует уменьшению степени некогерентности двойниковых границ, что делает их прямолинейными; воздействие на кристалл импульсного электрического тока большой плотности, которое способствует увеличению числа двойников в полисинтетическом двойнике. Термическая обработка гасит двойникование при температурах, близких к температуре плавления монокристалла висмута.

Для изучения устойчивости двойниковой структуры фазовых дифракционных решеток отпечатки индентора алмазной пирамиды Виккерса наносились как в междвойниковом пространстве, так и на самих двойниках полисинтетического двойника (рис. 5.39).

Линейная плотность двойников  $\rho_n$  в полисинтетическом двойнике вдоль направления  $OX$  (рис. 5.39) может быть определена по формуле

$$\rho_n = \frac{N}{L}, \quad (5.22)$$

где  $N$  – число двойников, укладываемых на отрезке  $L$  вдоль оси  $OX$ . Не трудно показать, что  $L = N(h + H)$ , где  $h$  – ширина двойника,  $H$  – величина междвойникового пространства (рис. 5.39). Тогда (5.22) переписывается в виде

$$\rho_n = \frac{1}{h + H}. \quad (5.23)$$

В данной работе изучалось влияние параметра  $\rho$  на закономерности развития клиновидных двойников у отпечатка индентора Виккерса.

Для определения роли базисного скольжения на двойникование монокристаллов висмута последние деформировались сжатием в направлении, параллельном плоскости (111) и благоприятном для базисного скольжения.

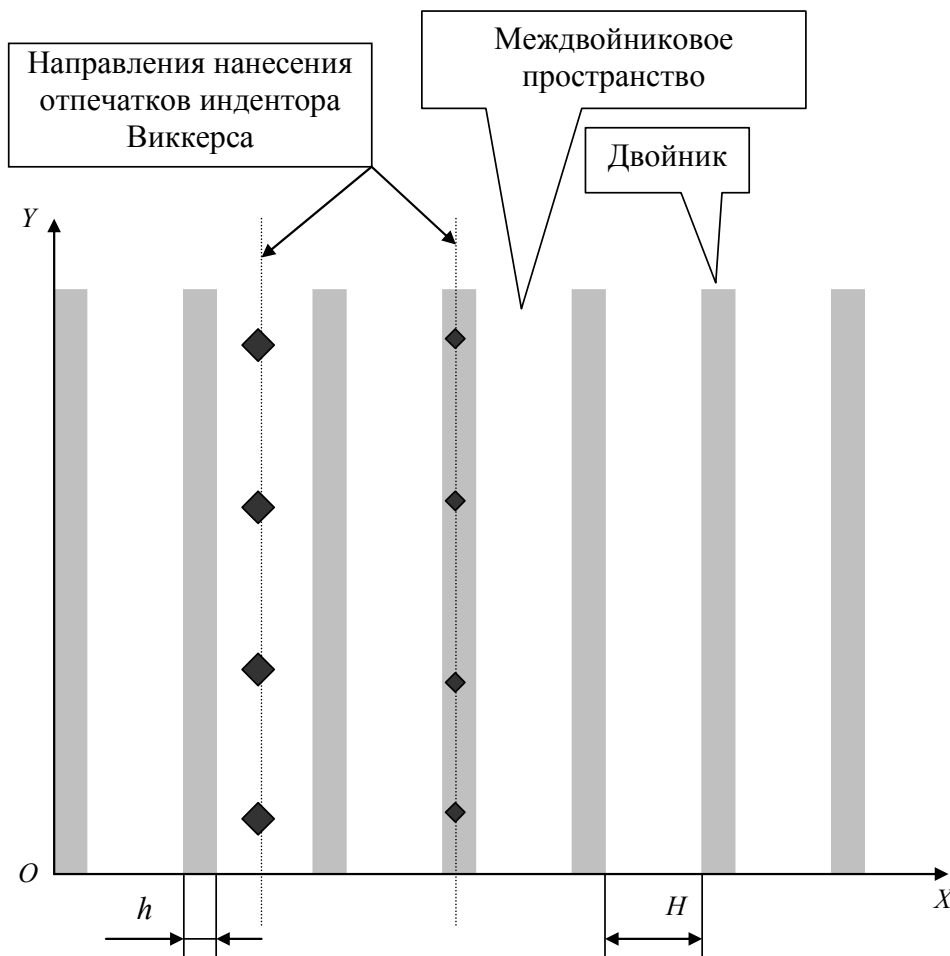


Рис. 5.39. Полисинтетический двойник и направления нанесения отпечатков индентора Виккерса

Типичная деформационная картина, возникающая у отпечатка пирамиды Виккерса на поверхности  $(111)$  монокристалла висмута, представлена на рис. 2.1. Отличительной особенностью этой картины является наличие у отпечатка клиновидных двойников системы  $\{110\}\langle 001\rangle$ , которые, как правило, развиваются в местах пересечения полос сдвига пирамидального скольжения, где внутренние напряжения максимальны. При этом следы пирамидального скольжения у отпечатка индентора образуют шестиугольник.

Эволюция ансамблей клиновидных двойников в зависимости от условий деформирования монокристаллов висмута может быть достаточно полно описана зависимостями, представленными на рис. 2.3, 5.40 и 5.41. Сжатие ( $\varepsilon = 8\%$ ) монокристаллов висмута в условиях ориентационного запрета на двойникование приводит к увеличению числа клиновидных двойников у отпечатка индентора, но уменьшению их длины. С ростом нагрузки на индентор в исследуемом интер-

вале нагрузок число двойников у индентора растет, в то время как у исходного образца, не подвергнутого предварительной обработке давлением, с увеличением нагрузки на индентор количество двойников остается практически неизменным. Это означает, что предварительное сжатие увеличило плотность базисных и пирамидальных дислокаций в образце. В результате увеличилась концентрация напряжений у стопоров за счет увеличения у них числа дислокаций. Скопления дислокаций являются одним из типов источников двойникующих дислокаций, так как в данных областях энергетически выгодно расщепление полных дислокаций на частичные двойникующие дислокации. Это, в свою очередь, способствует увеличению рабочих источников двойникующих дислокаций при деформировании монокристаллов висмута сосредоточенной нагрузкой. С ростом нагрузки на индентор увеличивается деформация областей у индентора, растет уровень напряжений, приводя к активизации тех источников двойникующих дислокаций, активизация которых при более низком уровне напряжений была невозможной. Это проявилось в увеличении числа двойников при росте нагрузки на индентор (рис. 5.40). Являясь дополнительными источниками двойникующих дислокаций, скопления базисных и пирамидальных дислокаций одновременно выступают препятствиями для трансляции двойникующих дислокаций вдоль двойниковых границ. Это приводит к уменьшению длины клиновидных двойников, возникающих у отпечатка индентора в деформированном сжатием монокристалле висмута. Однако двойниковые границы сами являются концентраторами больших внутренних напряжений и при их взаимодействии со скоплением базисных или пирамидальных дислокаций создаются благоприятные условия для ветвления двойников. Число ветвящихся двойников в деформированном монокристалле выше, чем в недеформированном.

Полисинтетические двойники оказывают влияние на закономерности развития клиновидных двойников у отпечатка индентора (см. рис. 2.3, 5.40 и 5.41), приводя к увеличению их числа, но уменьшению длины. Аналогичный результат получается и при нанесении отпечатков вдоль единичной двойниковой прослойки полисинтетического двойника. Влияние полисинтетических двойников на деформационную картину у отпечатка индентора обусловлено напряженным состоянием в пространстве между двойниками, а также высокой плотностью базисных и пирамидальных дислокаций. Это приводит к тому, что начало генерации двойникующих дислокаций при индентирова-

нии происходит при более низком уровне внешних напряжений и действуют те источники двойнивающих дислокаций, для работы которых в неармированном полисинтетическими двойниками монокристалле уровень напряжений индентора был недостаточным. Скопления базисных и пирамидальных дислокаций увеличивают общее число источников двойнивающих дислокаций в результате расщепления полных дислокаций на частичные двойнивающие дислокации. Следовательно, увеличивается число клиновидных двойников, возникающих у отпечатка индентора.

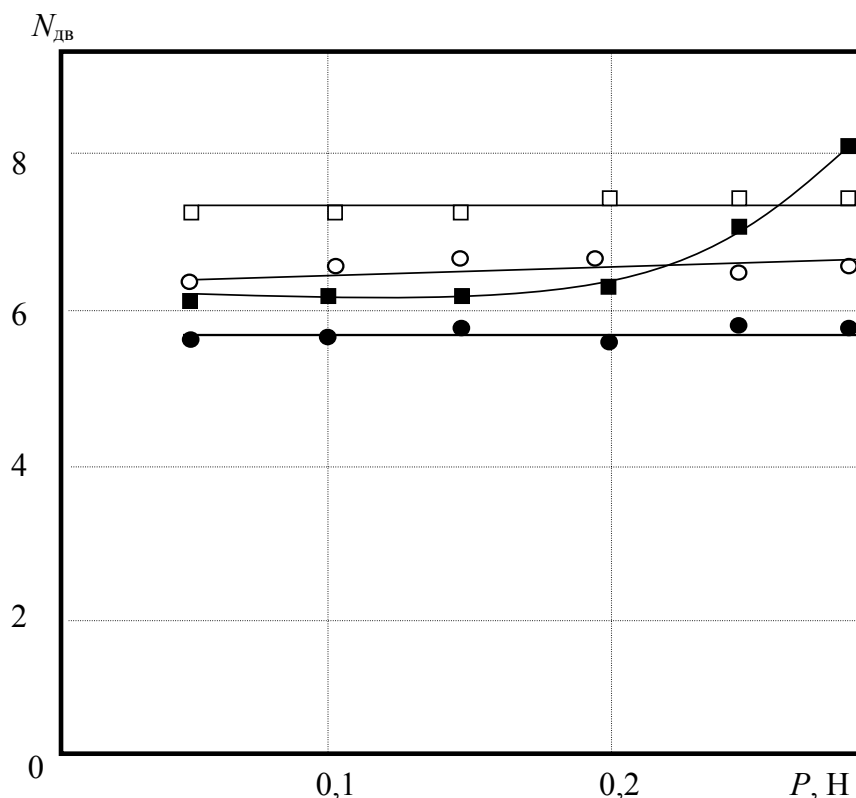


Рис. 5.40. Зависимость среднего числа двойников  $N_{дв}$ , возникающих у отпечатка индентора, от нагрузки на индентор  $P$ : ● – исходный образец; ■ – образец, деформированный сжатием ( $\varepsilon = 8\%$ ), в условиях ориентационного запрета для двойникования; образец, подвергнутый полисинтетическому двойникованию ( $\varepsilon = 8\%$ ), при  $\rho_n = 0,005 \text{ мкм}^{-1}$  (○) и  $\rho_n = 0,02 \text{ мкм}^{-1}$  (□), отпечатки наносились между двойниками

С другой стороны, полисинтетические двойники являются препятствиями на пути развития клиновидных двойников, препятствующими увеличению их длины. В связи с этим длина двойников в монокристаллах висмута, подвергнутых полисинтетическому двойникованию, меньше чем в исходных образцах, а также в образцах,

деформированных в условиях ориентационного запрета на двойникование (см. рис. 2.3 и 5.41). Это происходит на фоне увеличения в 1,5–2 раза ширины клиновидных двойников у устья в монокристаллах висмута с полисинтетическими двойниками по сравнению с двойниками в исходных образцах. Увеличение ширины двойников у устья указывает на интенсификацию процессов генерации двойняющих дислокаций.

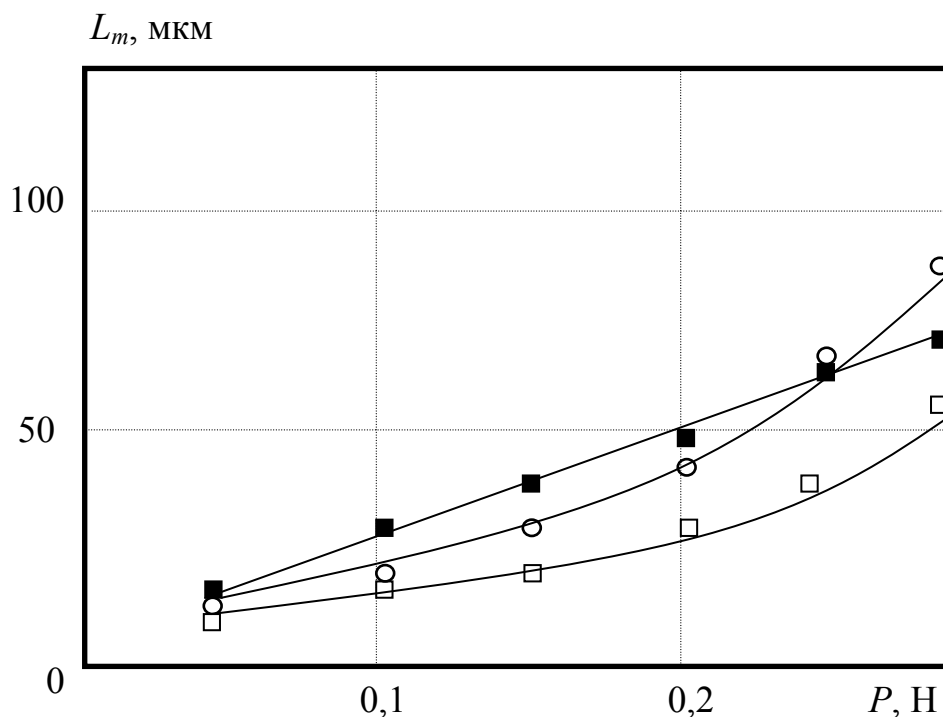


Рис. 5.41. Зависимость максимальной длины двойника  $L_m$  от нагрузки на индентор  $P$ : ■ — образец, деформированный сжатием ( $\epsilon = 8\%$ ), в условиях ориентационного запрета для двойникования; образец, подвергнутый полисинтетическому двойникованию ( $\epsilon = 8\%$ ), при  $\rho_n = 0,005 \text{ мкм}^{-1}$  (○) и  $\rho_n = 0,02 \text{ мкм}^{-1}$  (□), отпечатки наносились между двойниками

Как видно из рис. 2.3, 5.40 и 5.41, количественные характеристики клиновидных двойников зависят от параметра  $\rho_n$ . С увеличением плотности параллельных двойников уменьшается длина и растет число клиновидных двойников у индентора.

Представляют интерес механизмы зарождения трещин в локально деформируемых монокристаллах висмута с полисинтетическими двойниками. На рис. 5.42 представлена схема развития пирамидального скольжения под отпечатком индентора в монокристалле висмута с полисинтетическими двойниками. В хрупких материалах в местах

скоплений дислокаций у границ двойников велика вероятность возникновения трещин. В пластичных монокристаллах висмута такие скопления инициируют вторичное скольжение. Скопление вторичных пирамидальных дислокаций различных кристаллографических направлений создает благоприятные условия для возникновения микротрещин под отпечатком индентора (рис. 5.42).

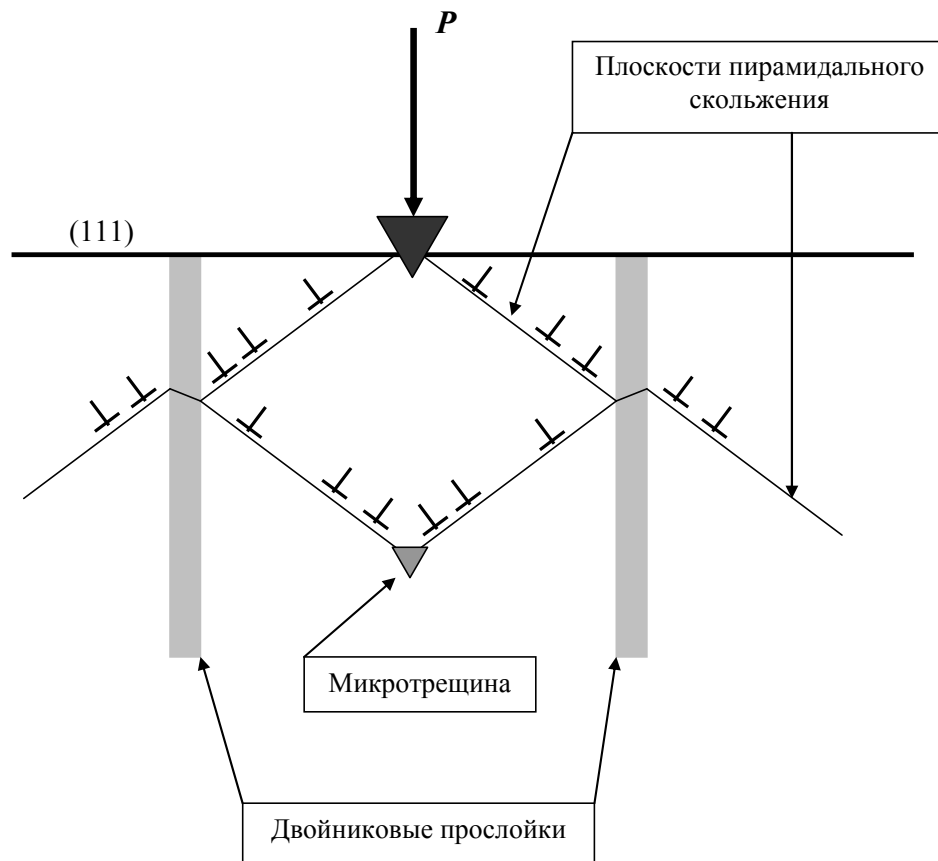


Рис. 5.42. Схема образования микротрещин под индентором в монокристалле висмута, подвергнутом полисинтетическому двойникованию

Существует способ [124] изготовления фазовых дифракционных решеток, заключающийся в формировании слоистой заготовки с помощью делительной машины, когда необходимый для фазовой дифракционной решетки рельеф поверхности задается в результате механического контакта инструмента с заготовкой.

Данный способ не позволяет получать рельеф поверхности с периодом около 10 мкм. Рельеф полностью зависит от качества изготовления инструмента. Из-за контакта последнего с рабочей поверхностью в подложке возникают напряжения, способствующие искажению рельефа.

Известен способ изготовления фазовых дифракционных решеток, заключающийся в формировании слоистой заготовки с предварительным скреплением между собой ее элементов – тонких пластин, свернутых в рулон. Способ включает в себя следующие действия: первую резку заготовки; обработку плоскости резки; формирование ступенчатого профиля штрихов в результате совокупного выпрямления пластин; окончательное соединение слоев между собой и вторую резку [125].

Период рельефа такой решетки определяется толщиной составляющих ее пластин. При малой толщине пластин затрудняется обработка поверхности после первой резки.

Предлагаемый способ можно реализовать следующим образом. Произвести скол двойникового монокристалла вдоль плоскости спайности для получения зеркальной поверхности. Затем монокристалл деформировать (в результате сжатия или растяжения) в направлении высокого значения фактора Шмида [3] для двойникового до получения полисинтетического двойника – дефекта кристаллической решетки, создающего на поверхности кристалла специфический рельеф (рис. 5.43), который может быть использован для синтеза фазовой дифракционной решетки. Данный рельеф можно характеризовать следующими параметрами:  $h$  – ширина двойника;  $H$  – расстояние между ближайшими границами соседних двойников;  $\delta$  – высота рельефа (рис. 5.43), которая, как правило [2], приблизительно равна  $h/2$ . В результате дифракционная картина с использованием указанных параметров может быть описана соотношением [125]:

$$m\lambda = (h + H)[\sin(2\alpha - \psi) + \sin \psi], \quad (5.24)$$

где  $m$  – целое число;  $\lambda$  – длина волны;  $\psi$  – угол падения светового луча на поверхность решетки;  $\operatorname{tg} \alpha = \delta/h$ .

Постоянство параметров  $h$  и  $H$  зависит от дефектности монокристалла (рис. 5.43). Достигнуть малой дефектности монокристалла в большинстве случаев затруднительно, поэтому предлагаемые фазовые дифракционные решетки целесообразно использовать при малых углах  $\psi$  падения светового луча, когда непостоянство  $h$  и  $H$  не оказывает существенного влияния на дифракционную картину. Однако способ позволяет получать период дифракционной решетки  $d = h + H$  около 10 мкм, чего не было достигнуто в указанных прототипах.

Экспериментальные исследования с использованием гелий-неонового лазера подтверждают соответствие экспериментальных данных результатам, полученным по формуле (5.23). Заметим также, что соответствие в большей мере наблюдается при малых углах падения луча на дифракционную решетку.

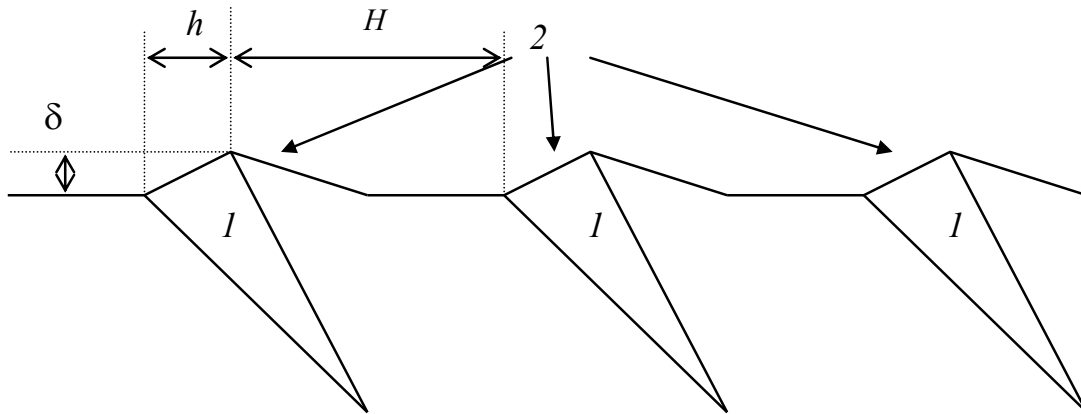


Рис. 5.43. Вид рельефа, создаваемого полисинтетическим двойником на поверхности монокристалла. Вид в плоскости, перпендикулярной плоскости скола монокристалла:  
1 – двойники; 2 – рельефная поверхность

Рассмотрим основные параметры фазовой дифракционной решетки на полисинтетических двойниках.

Угловой размер главного дифракционного максимума равен [125]:

$$\delta\varphi = \frac{\lambda}{NH \cos \varphi} = \frac{\lambda}{L \cos \varphi}, \quad (5.25)$$

где  $N$  – число двойников в полисинтетическом двойнике;  $H$  – ширина единичного двойника (рис. 5.44);  $L$  – размер полисинтетического двойника;  $\varphi$  – угол дифракции;  $\lambda$  – длина волны, которую для расчетов примем равной 500 нм. При  $L = 10$  мм величина  $\delta\varphi = 5 \cdot 10^{-7}$  рад, а линейная ширина спектральной линии  $\delta l = 0,0005$  мм. При  $H = 10$  мкм такая дифракционная решетка должна содержать 1000 двойников.

Угловая дисперсия дифракционной решетки определяется по формуле [125]:

$$D_{\varphi} = \frac{m}{H \cos \varphi}, \quad (5.26)$$

где  $m$  – порядок спектра.



Как видим, угловая дисперсия определяется шириной двойников. У монокристаллов кремнистого железа, сурьмы возникают двойники, у которых ширина меньше, чем в монокристаллах висмута. Поэтому для управления угловой дисперсией фазовой дифракционной решетки на полисинтетических двойниках можно рекомендовать использование соответствующих материалов.

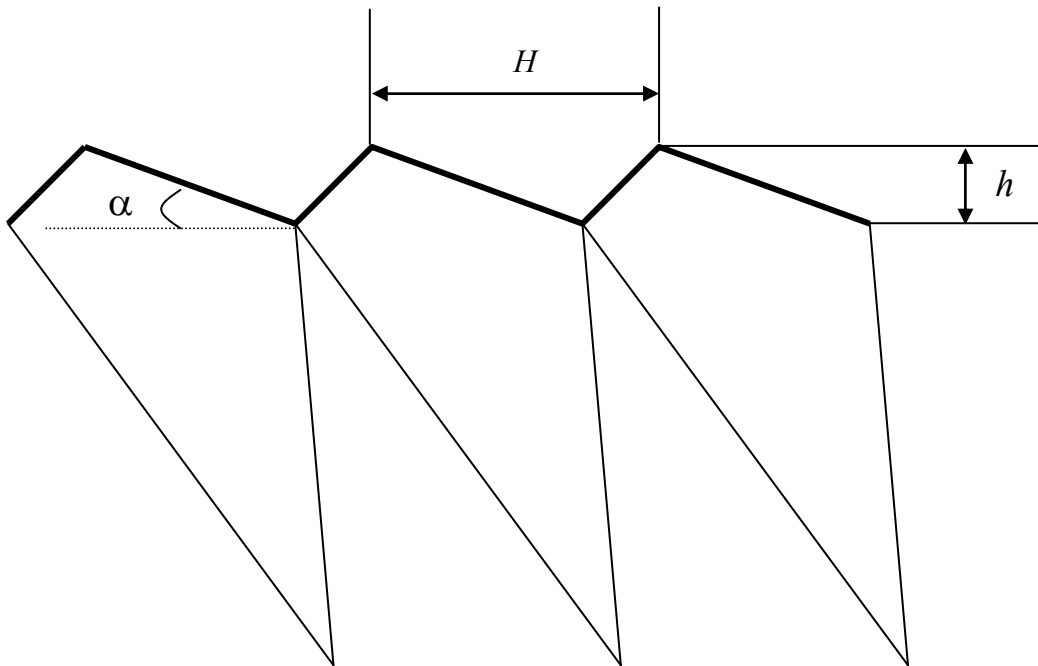


Рис. 5.44. Схема для расчета углового размера главного дифракционного максимума

Дифракционная картина рассматриваемой дифракционной решетки может быть описана соотношением (5.24). По экспериментальным данным для висмута  $\alpha = 2-10^\circ$ .

# Глава 6

## **ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ДВОЙНИКОВАНИЯ ДЛЯ РЕ- ШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ ДЕФОРМИРУЕ- МЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПРИ СОПУТ- СТВУЮЩЕМ РАЗВИТИИ ДВОЙНИКОВАНИЯ**

Решение задач механики деформируемого твердого тела с учетом напряжений, которые создают двойники, является важным с практической точки зрения, так как позволяет более точно оценить прочностные характеристики материала с поправкой на локализацию напряжений у двойниковых границ.

С научной точки зрения решение подобных задач представляет интерес для прогнозирования процессов развития двойников под действием внешних напряжений, что играет большую роль, например, в разработке технологии обработки двойникующихся материалов давлением.

Количество задач механики деформируемого твердого тела достаточно большое. В данной главе продемонстрирована возможность использования дислокационной теории двойникования для решения лишь некоторых задач, имеющих важное значение в механике твердого тела.

### 6.1. Напряженное состояние у наноразмерного двойникового зародыша при наличии точечного источника расширения

Изучение стадий зарождения двойников является весьма сложной экспериментальной задачей [2]. В работе [11] 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.

Для расчета полей напряжений, создаваемых нанодвойником, воспользуемся методикой, рассмотренной выше (гл. 4).

Для определения напряжений у точечного источника расширения мощностью  $\delta v$ , находящегося в точке  $O$  (рис. 4.21), воспользуемся соотношением [40]:

$$\sigma_{rr} = -\frac{\mu \delta v}{\pi r^3}, \quad (6.1)$$

где  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ .

Используя соотношения [48]:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \sigma_{rr} \sin^2 \theta, \\ \sigma_{yy} &= \sigma_{rr} \cos^2 \theta, \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{rr} \sin \theta \cos \theta, \end{aligned} \quad (6.2)$$

получим

$$\sigma_{xx} = -\frac{\mu \delta v}{\pi} \frac{y^2}{(x^2 + y^2)^{5/2}},$$

$$\sigma_{yy} = -\frac{\mu\delta\nu}{\pi} \frac{x^2}{(x^2 + y^2)^{5/2}},$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{\mu\delta\nu}{\pi} \frac{xy}{(x^2 + y^2)^{5/2}}. \quad (6.3)$$

Результирующие напряжения в среде с нанодвойником находятся как суперпозиция напряжений, определяемых по формулам (2.59) и (6.3).

Результаты расчетов скалывающих напряжений  $\sigma_{xy}$  у нанодвойника при отсутствии точечного источника напряжений представлены на рис. 6.1–6.4. В расчетах принималось:  $N = 10$ ;  $b_{кр} = 0,124$  нм;  $\mu = 81$  ГПа;  $\nu = 0,29$ ;  $d = 2,48$  нм;  $h = 0,248$  нм [3]. Длина нанодвойника при этом находится по формуле

$$2L = 2Nd. \quad (6.4)$$

В данном случае она составила 49,6 нм.

При отсутствии концентратора напряжений внутри двойникового зародыша (рис. 6.1) положительные напряжения локализуются у его вершин (в точках  $A$  и  $C$  на рис. 4.21), а отрицательные – в средней его части (в точках  $B$  и  $D$  на рис. 4.21).

При помещении в точку  $O$  источника расширения, создающего напряжения, определяемые по формулам (6.3), при  $\delta\nu = 1$  мкм<sup>3</sup> положительные напряжения у вершин нанодвойника несколько уменьшаются, а отрицательные – увеличиваются (рис. 6.2). При  $\delta\nu = 10$  мкм<sup>3</sup> отрицательные напряжения в средней части нанодвойника (в точках  $B$  и  $D$  на рис. 4.21) возрастают почти на порядок, а положительные напряжения, в отличие от предыдущего случая, у вершин нанодвойника (в точках  $A$  и  $C$  на рис. 4.21) также возрастают (рис. 6.3).

Повышение уровня напряжений в средней части нанодвойника (в точках  $B$  и  $D$  на рис. 4.21) способствует генерации двойникующих дислокаций и росту ширины двойника. Поэтому можно предположить, что на начальных стадиях развитие двойников обусловлено преимущественно процессами генерации двойникующих дислокаций.

Представляет интерес ситуация, когда в точке  $O$  (рис. 4.21) находится дислокация, так как в качестве одного из типов источников

двойникующих дислокаций могут выступать полные дислокации, расщепляющиеся на частичные двойникующие дислокации [45]. В случае краевой дислокации, находящейся в точке  $O$ , распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  представлено на рис. 6.4.

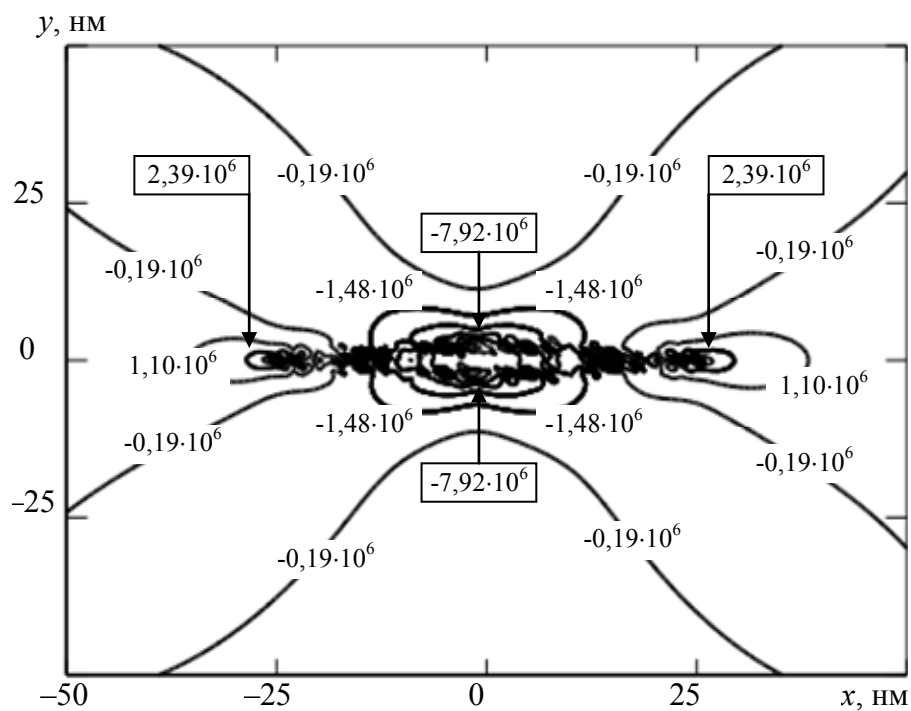


Рис. 6.1. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у нанодвойника при отсутствии дополнительных источников напряжений

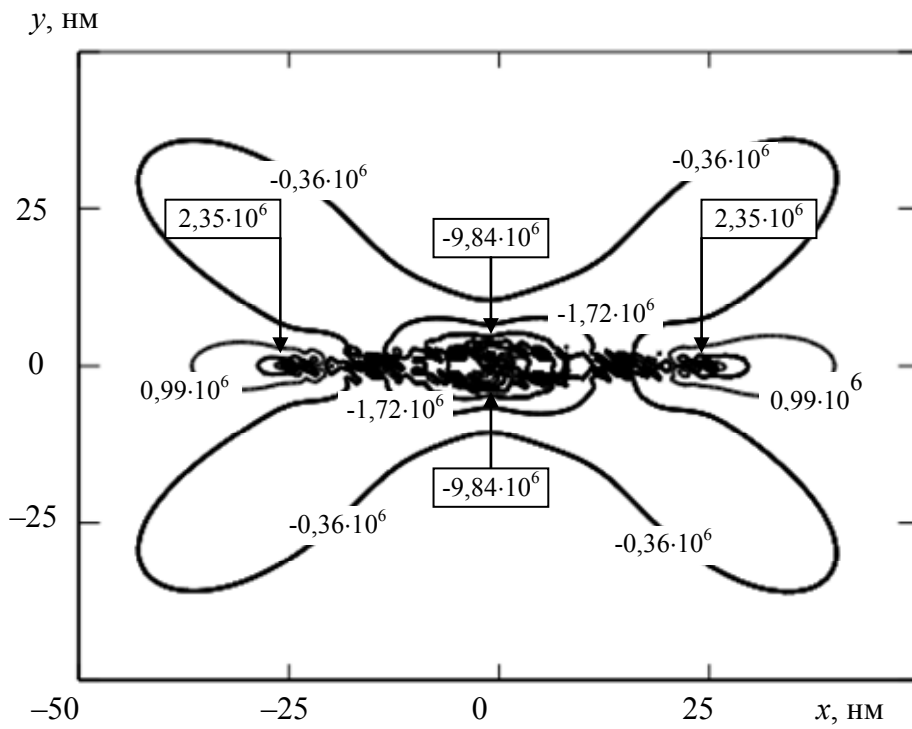


Рис. 6.2. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у нанодвойника при наличии точечного источника расширения с  $\delta v = 1 \text{ мкм}^3$

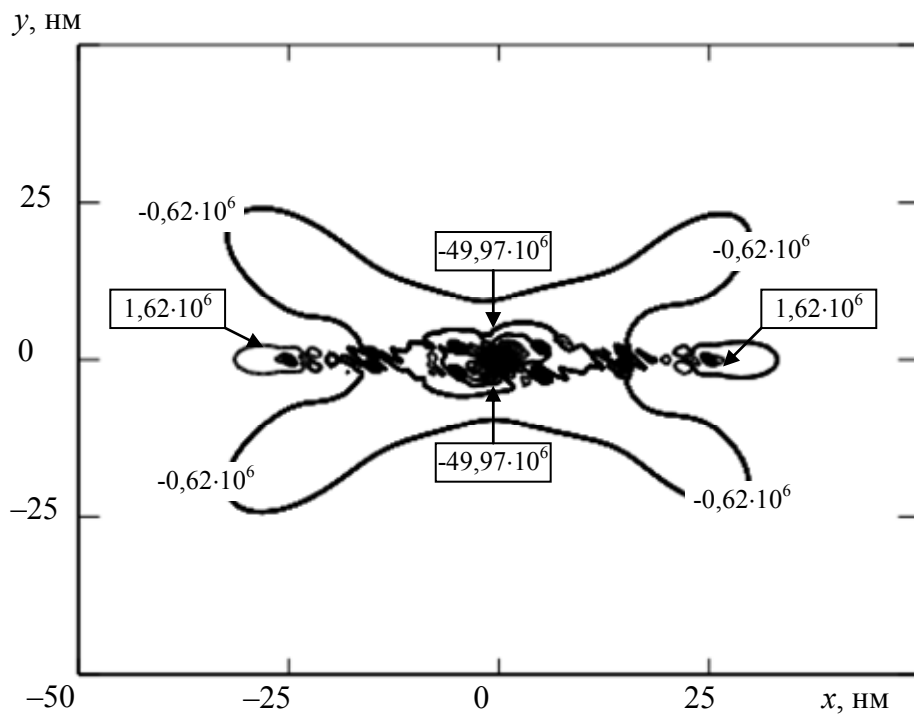


Рис. 6.3. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у нанодвойника при наличии точечного источника расширения с  $\delta v = 10 \text{ мкм}^3$

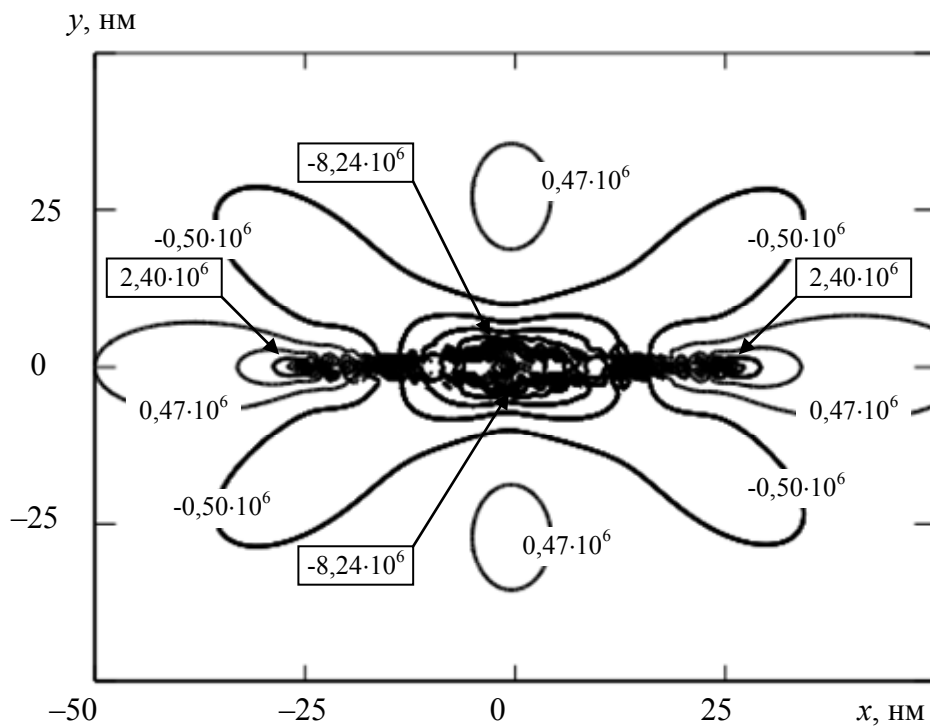


Рис. 6.4. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у нанодвойника при наличии в точке  $O$  полной краевой дислокации с величиной вектора Бюргера  $b = 0,348$  нм

Как видно из рис. 6.4, напряжения возрастают в точках, соответствующих точкам  $B$  и  $D$  на рис. 4.21. В меньшей степени эти напряжения растут в области точек  $A$  и  $C$  на рис. 4.21. Это означает, что полная дислокация в точке  $O$  с вектором Бюргера, ориентированным вдоль оси  $OX$  (рис. 4.21), способствует генерации новых двойникующихся дислокаций на границах двойникового зародыша.

## 6.2. Расчет полей напряжений в деформируемом сосредоточенной или распределенной нагрузкой кристалле при наличии в нем клиновидного двойника

На рис. 6.5 схематически представлен клиновидный двойник длиной  $L$  и шириной у устья  $H$  с формами границ, описываемыми функциями  $f_1(y_0)$  и  $f_2(y_0)$ . Направим ось  $OX$  вдоль поверхности кристалла, а ось  $OY$  – перпендикулярно ей, вдоль направления развития двойника (рис. 6.5). Пусть поверхность деформируется в точке  $O$  вдоль оси  $OY$  внешней силой  $P$  перпендикулярной поверхности.

Пусть в точке  $O$  также действуют внешние сдвиговые напряжения  $Q$ . Тогда в упругом полупространстве будут действовать напряжения, которые могут быть определены по формулам [48]:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^e &= -\frac{2}{\pi} \left( \frac{x^2(Py + Qx)}{(x^2 + y^2)^2} \right), \\ \sigma_{yy}^e &= -\frac{2}{\pi} \left( \frac{y^2(Py + Qx)}{(x^2 + y^2)^2} \right), \\ \sigma_{xy}^e &= -\frac{2}{\pi} \left( \frac{xy(Py + Qx)}{(x^2 + y^2)^2} \right).\end{aligned}\tag{6.5}$$

Напряженное состояние у клиновидного двойника может быть рассчитано из соотношений, аналогичных (3.1)–(3.5) и (3.32), (3.33).

В настоящей монографии ограничимся только рассмотрением случая прямолинейных двойниковых границ.



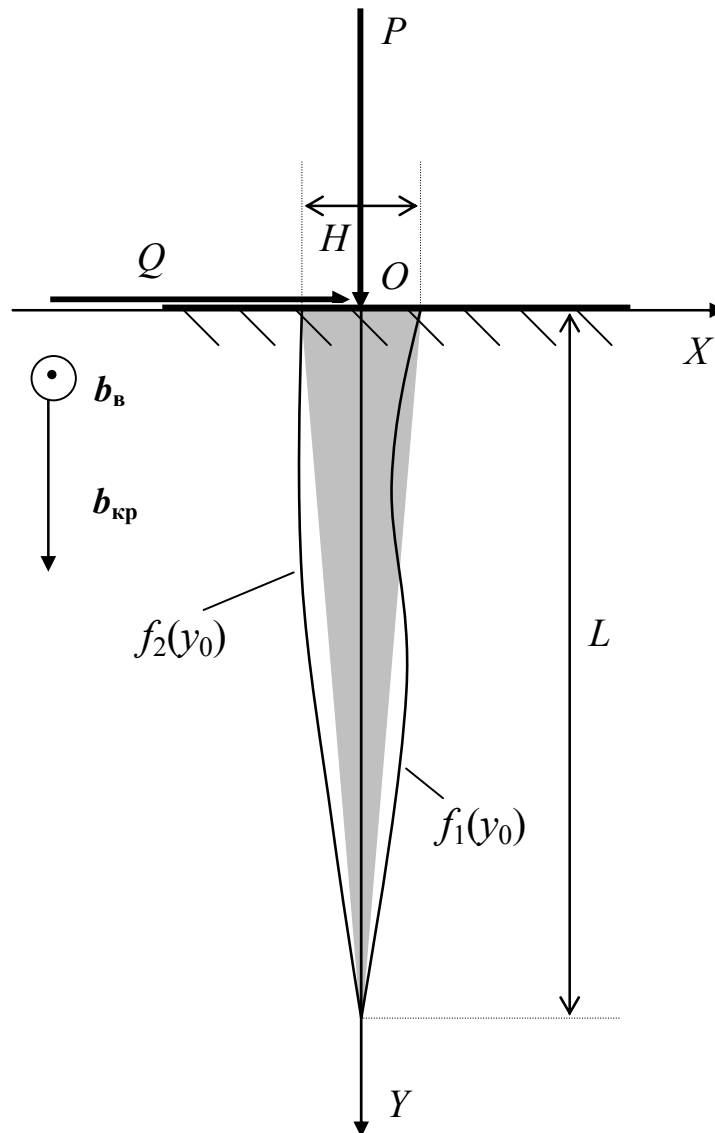


Рис. 6.5. Схематическое изображение клиновидного двойника у поверхности упругого полупространства и действующей на нее сосредоточенной нагрузки

На рис. 6.6–6.8 представлены результаты расчетов на примере распределения величины сдвиговой компоненты  $\sigma_{xy}$  тензора напряжений. Принималось:  $H = 31$  мкм;  $L = 100$  мкм;  $b_{кр} = 0,124$  нм;  $a = 0,248$  нм (здесь  $a$  – межатомное расстояние). Используя соотношение для расчета линейной плотности двойниующих дислокаций на двойниковых границах:

$$\rho = \frac{H}{2aL}, \quad (6.6)$$

получим  $\rho = 0,625 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ .

На рис. 6.6 показано распределение сдвиговых напряжений у клиновидного двойника при отсутствии внешних напряжений. Рассмотрим два предельных случая, когда  $P \neq 0, Q = 0$  и  $P = 0, Q \neq 0$ . Рис. 6.7 иллюстрирует случай распределения сдвиговых напряжений при  $P = 100 \text{ Н}, Q = 0$ , а рис. 6.8 – вариант, когда  $P = 0, Q = 100 \text{ Н}$ . Видно, что при  $Q = 0$  повышается уровень сдвиговых напряжений у одной из двойниковых границ (рис. 6.7). При  $P = 0$  напряжения  $\sigma_{xy}$  не перераспределяются, но растет их общий уровень (рис. 6.8).

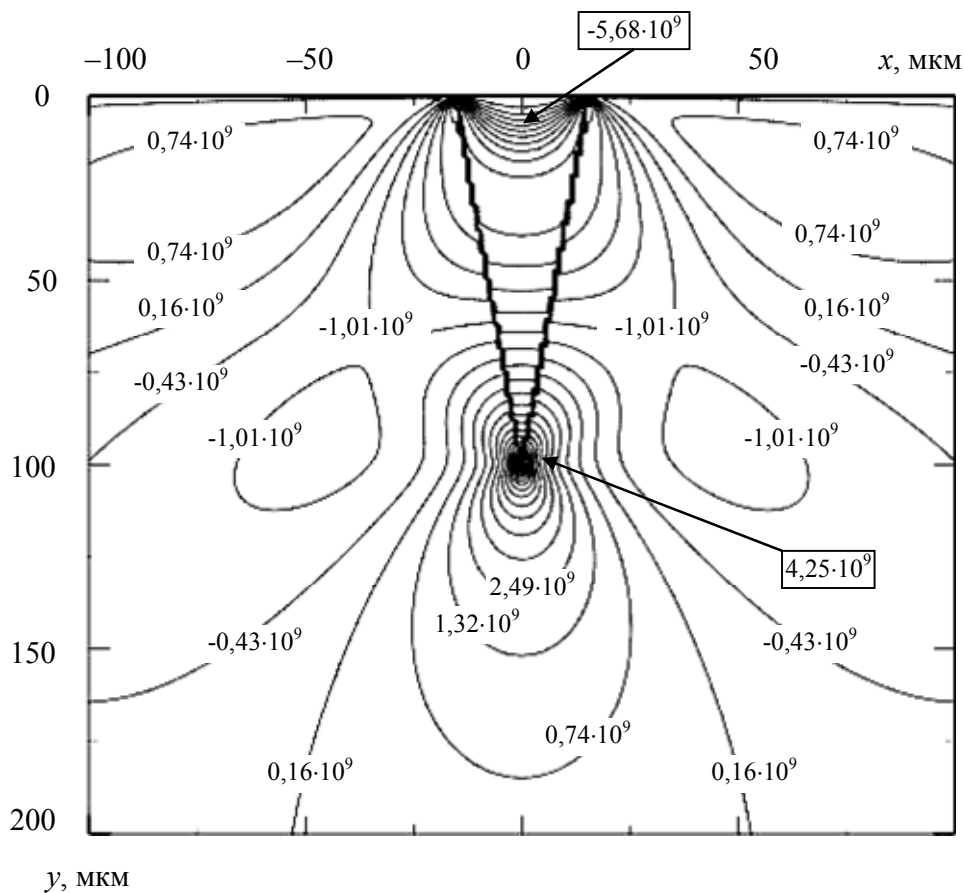


Рис. 6.6. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при отсутствии внешних напряжений

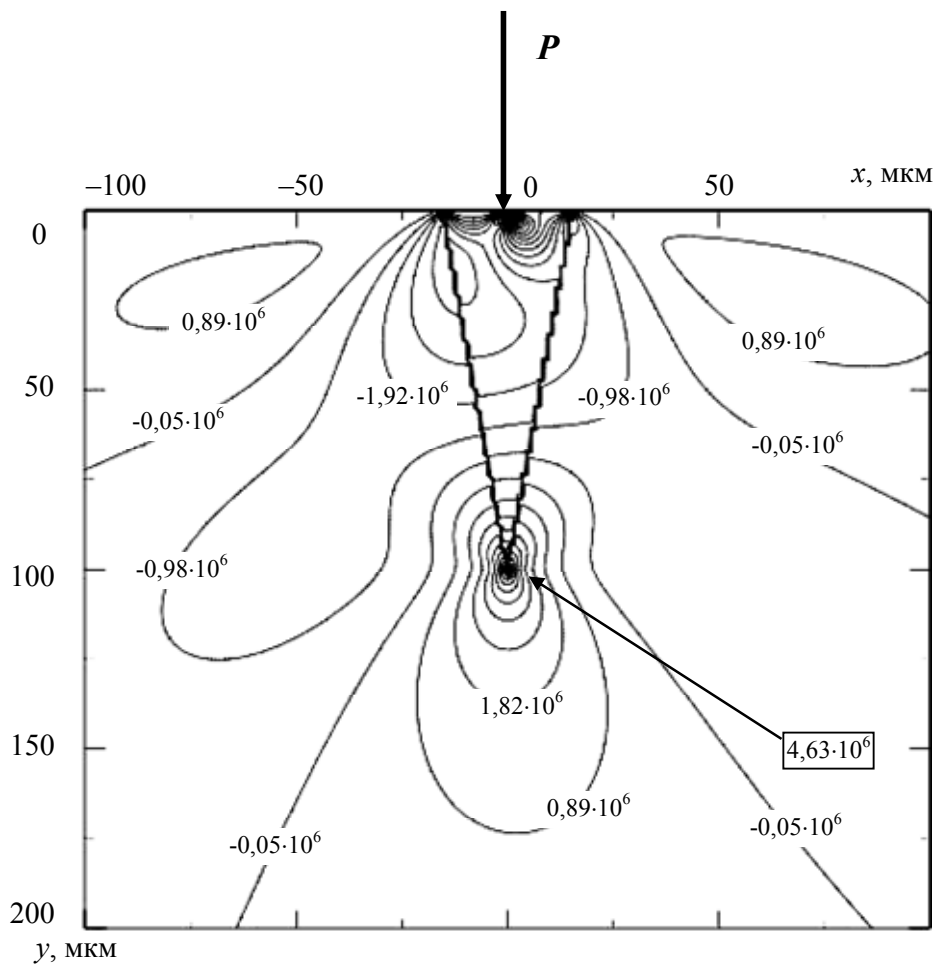


Рис. 6.7. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при действующей в точке  $O$  сосредоточенной нормальной силы  $P$

Представляет интерес ситуация, когда внешняя сила действует не в точке  $O$ , а в другой точке на оси  $OX$ . В этом случае соотношения (6.5) необходимо привести к виду

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^e &= -\frac{2}{\pi} \left( \frac{(x-a)^2 (Py + Q(x-a))}{((x-a)^2 + y^2)^2} \right), \\ \sigma_{yy}^e &= -\frac{2}{\pi} \left( \frac{y^2 (Py + Q(x-a))}{((x-a)^2 + y^2)^2} \right), \\ \sigma_{xy}^e &= -\frac{2}{\pi} \left( \frac{(x-a)y(Py + Q(x-a))}{((x-a)^2 + y^2)^2} \right).\end{aligned}\tag{6.7}$$

Здесь  $a$  – расстояние от точки  $O$  до точки действия сосредоточенной силы.

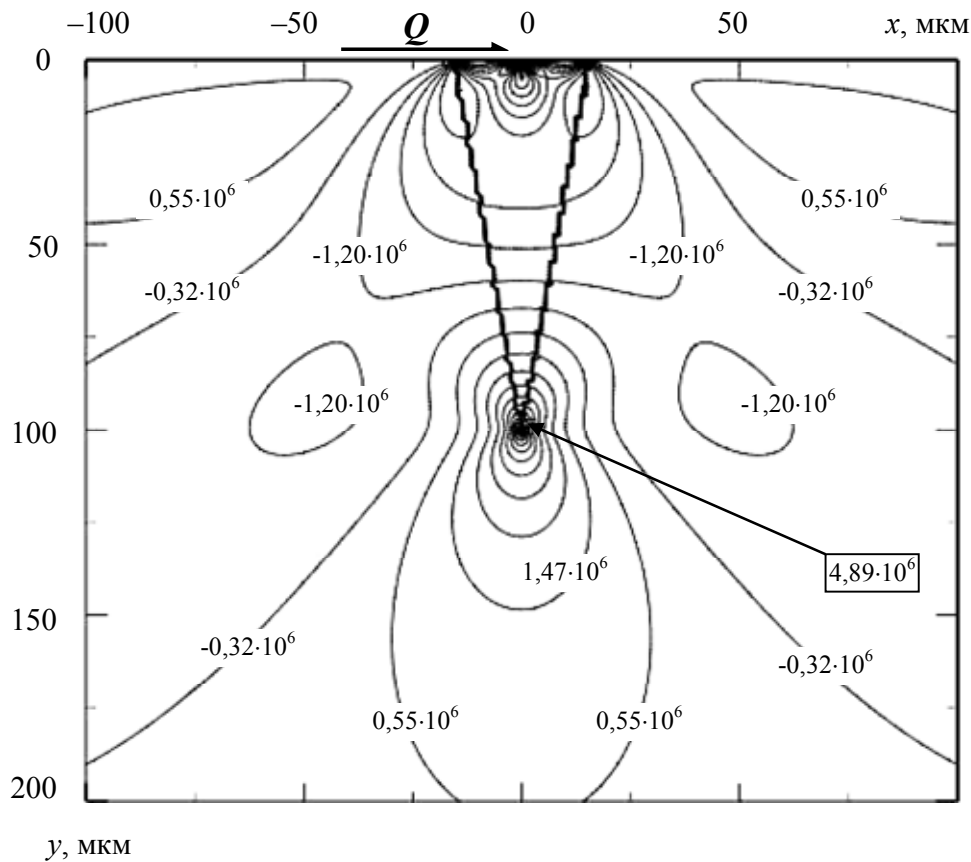


Рис. 6.8. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при действующей в точке  $O$  сосредоточенной касательной силы  $Q$

В данном случае представляет интерес ситуация, когда  $a = H/2$  (или  $a = -H/2$ ), т. е. когда внешняя сосредоточенная нагрузка действует на двойниковой границе. Тогда увеличивается локализация напряжений у границы, на которую действует нагрузка (рис. 6.9). Это приводит к интенсификации на данной границе процесса генерации двойникующих дислокаций, что, в свою очередь, ведет к искривлению двойниковой границы, делая ее выпуклой [12].

Для распределенных внешних усилий поля напряжений в нагруженном вдоль прямой упругом полупространстве при произвольном распределении нормальных  $p(x)$  и касательных усилий  $q(x)$  в случае, схематически представленном на рис. 6.10, определяются по формулам [48]:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^e(x, y) &= -\frac{2y}{\pi} \int_{-b}^a \frac{p(s)(x-s)^2 ds}{[(x-s)^2 + y^2]^2} - \frac{2}{\pi} \int_{-b}^a \frac{q(s)(x-s)^3 ds}{[(x-s)^2 + y^2]^2}, \\ \sigma_{yy}^e(x, y) &= -\frac{2y^3}{\pi} \int_{-b}^a \frac{p(s) ds}{[(x-s)^2 + y^2]^2} - \frac{2y^2}{\pi} \int_{-b}^a \frac{q(s)(x-s) ds}{[(x-s)^2 + y^2]^2}, \\ \sigma_{xy}^e(x, y) &= -\frac{2y^2}{\pi} \int_{-b}^a \frac{p(s)(x-s) ds}{[(x-s)^2 + y^2]^2} - \frac{2y}{\pi} \int_{-b}^a \frac{q(s)(x-s)^2 ds}{[(x-s)^2 + y^2]^2},\end{aligned}\quad (6.8)$$

где  $a$  и  $b$  определяют размер полосы, к которой приложена нагрузка (рис. 6.10);  $s$  – параметр интегрирования.

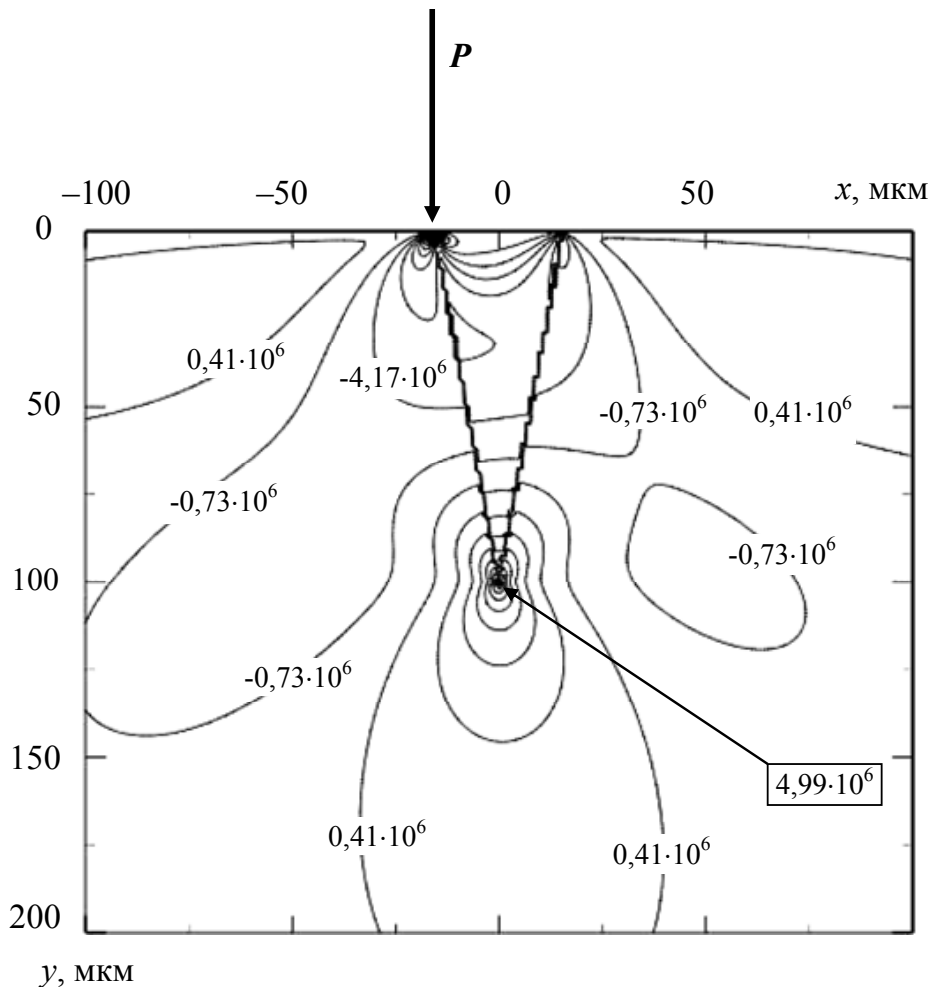


Рис. 6.9. Поля напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника, находящегося у поверхности упругого полупространства, при действии нормальной силы на границе двойника

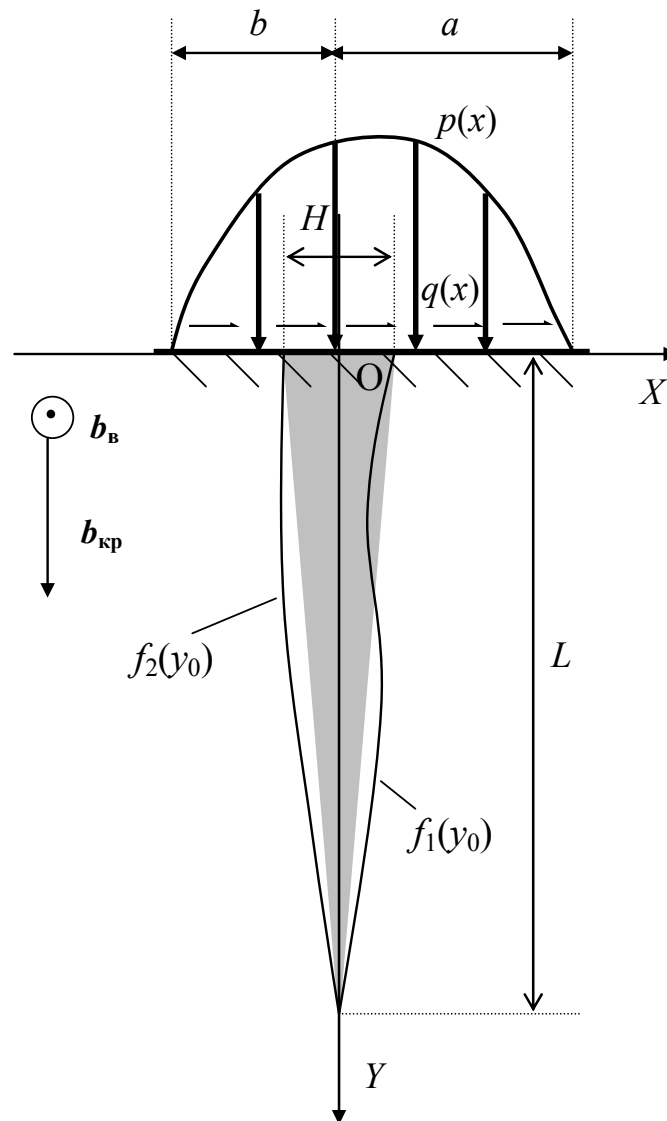


Рис. 6.10. Схематическое изображение клиновидного двойника, расположенного у поверхности кристалла, при действующей на нее распределенной нагрузке

В настоящей монографии, как и ранее, ограничимся случаем прямолинейных двойниковых границ.

Результаты расчетов представлены на рис. 6.11–6.15. Принималось:  $H = 31$  мкм;  $L = 100$  мкм;  $b_{кр} = 0,124$  нм; для железа:  $a = 0,248$  нм [3]. Ограничимся рассмотрением распределения только сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$ , которые играют важную роль в процессах междислокационного взаимодействия.

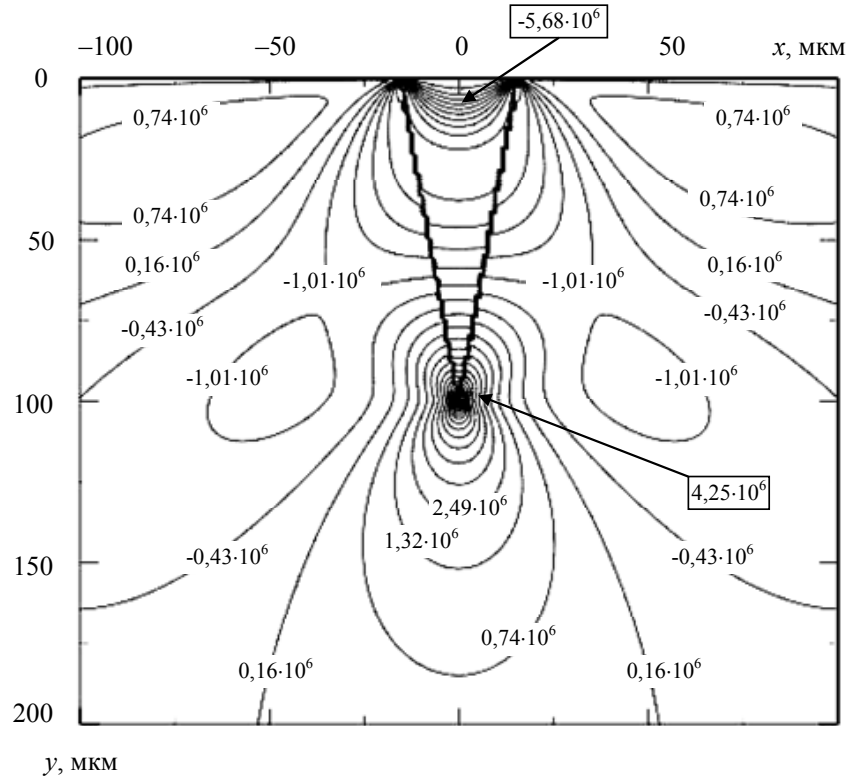


Рис. 6.11. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при отсутствии внешних сил

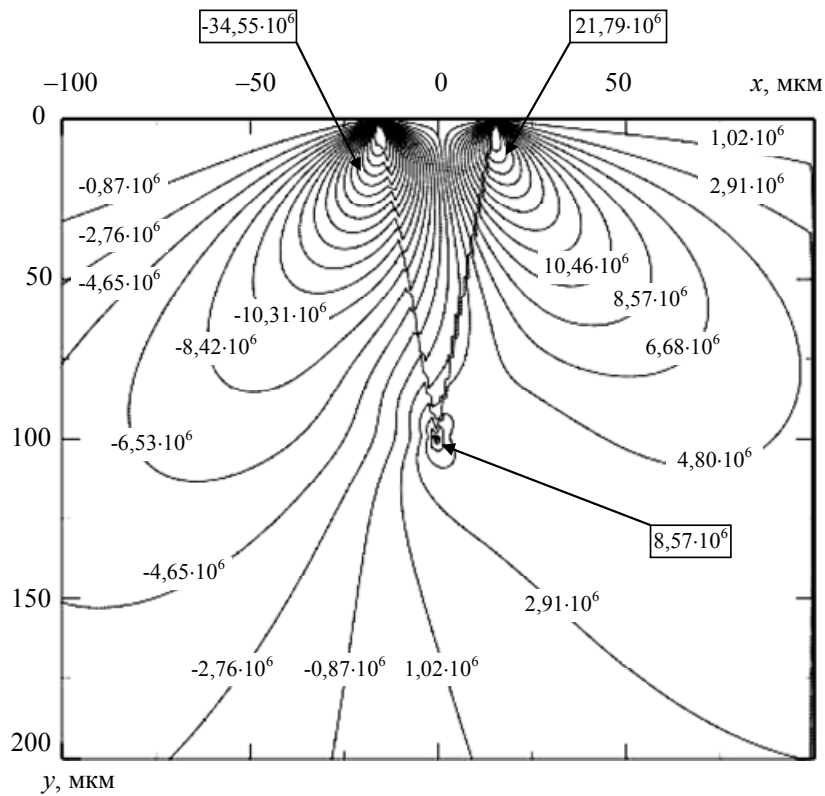


Рис. 6.12. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при  $p(s) = 100 \text{ Н/м}$ ,  $q(s) = 0$  и  $a = b = H/2$

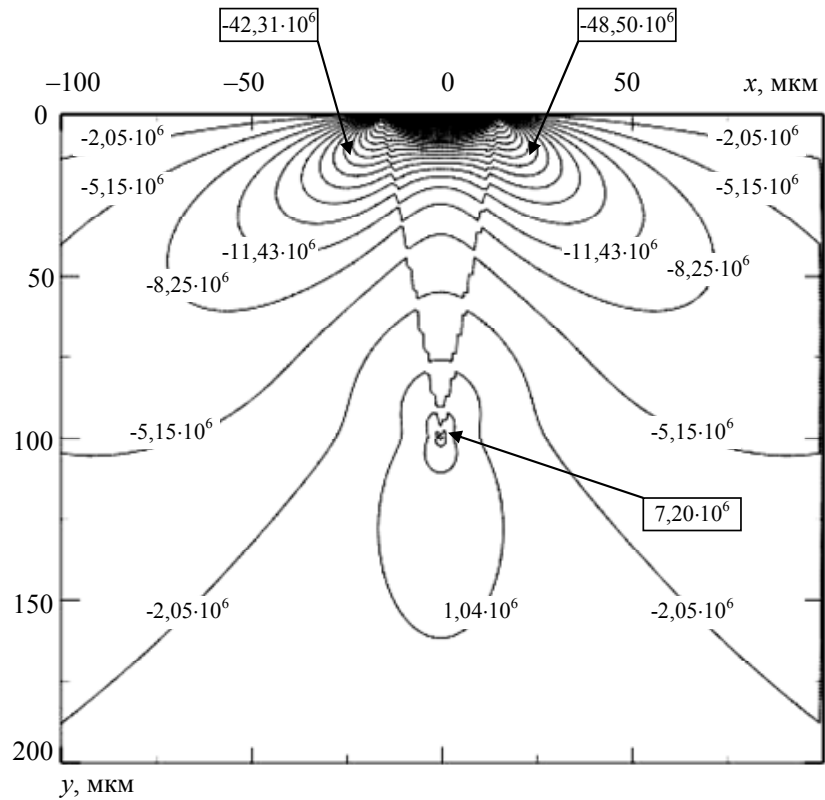


Рис. 6.13. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при  $p(s) = 0$ ,  $q(s) = 100$  Н/м и  $a = b = H/2$

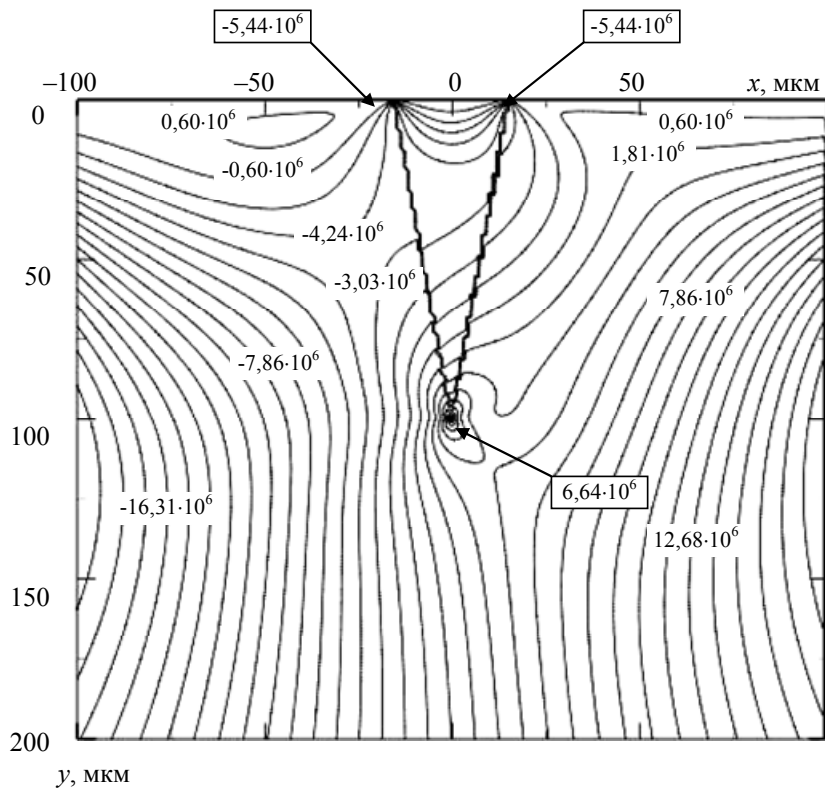


Рис. 6.14. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при  $p(s) = 100$  Н/м,  $q(s) = 0$  и  $a = b = 5H$



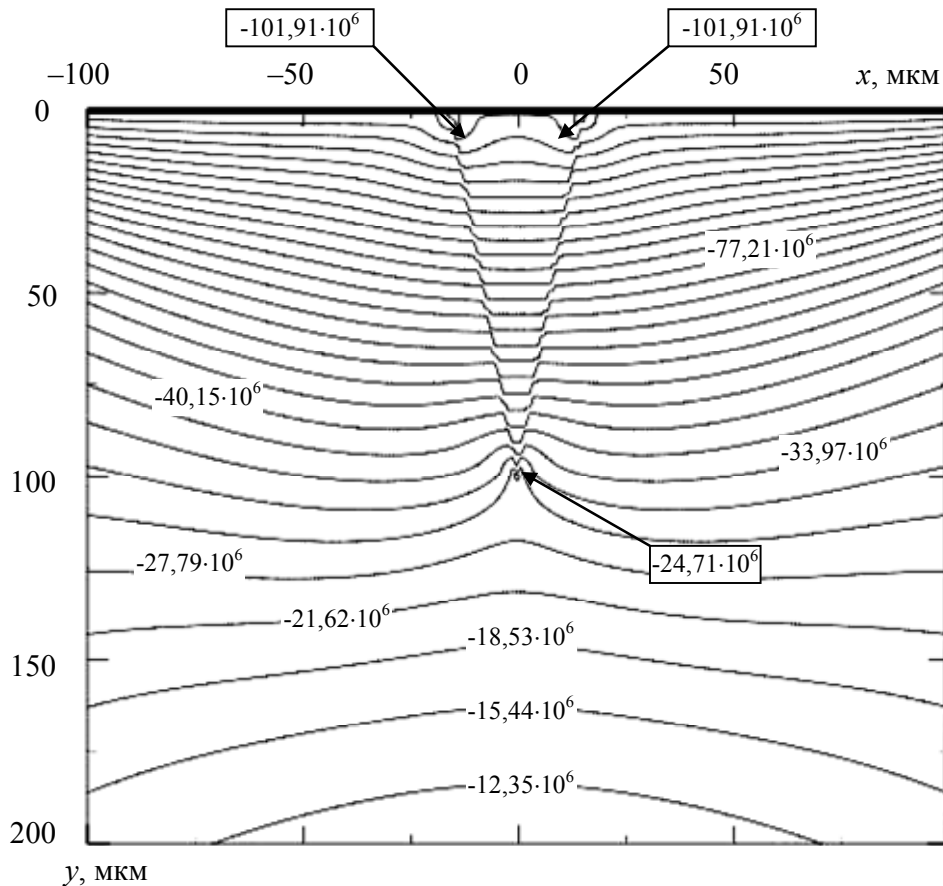


Рис. 6.15. Распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  у клиновидного двойника при  $p(s) = 0$ ,  $q(s) = 100$  Н/м и  $a = b = 5H$

При отсутствии внешних напряжений скалывающие напряжения  $\sigma_{xy}$  локализуются на двойниковых границах и у вершины двойника, а также в области относительно удаленной от средней части двойника (рис. 6.11). Высокий уровень данные напряжения имеют и у поверхности кристалла, и внутри двойника. Напряжения у клиновидного двойника, находящегося у поверхности, знакопеременны. Они положительны у вершины, а также у устья двойника, и отрицательны в остальных областях (рис. 6.11).

С целью изучения влияния внешних распределенных на поверхности напряжений на напряженное состояние у двойника рассмотрим случаи, когда область действия внешних напряжений равна ширине двойника у устья или значительно ее превосходит. Случай сосредоточенных напряжений в настоящей монографии рассматривать не будем. Для физического анализа удобно рассмотрение вариантов, когда  $p(s) = \text{const} \neq 0$ ,  $q(s) = 0$  и  $p(s) = 0$ ,  $q(s) = \text{const} \neq 0$ .

На рис. 6.12 показано распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  в случае, когда  $p(s) = 100 \text{ Н/м}$ ;  $q(s) = 0$  при  $a = b = H/2$ . В данном случае нормальная распределенная нагрузка  $p(s)$  перестает действовать на двойниковых границах. Это приводит к тому, что в данных областях значительно возрастают внутренние напряжения. Происходит перераспределение напряжений таким образом, что у одной из границ двойника они положительны, а у другой – отрицательны (рис. 6.12). Это, в свою очередь, способствует активизации процесса генерации двойникующих дислокаций у одной из границ и подавлению этого процесса – у другой.

Действие только тангенциальной внешней нагрузки (величиной  $q(s) = 100 \text{ Н/м}$  при  $p(s) = 0$  и  $a = b = H/2$ ) у устья двойника также способствует увеличению уровня напряжений, но они имеют один знак по обе стороны двойника (рис. 6.13) и меняют его только у вершины двойника.

При  $a = b = 5H$  уровень напряжений  $\sigma_{xy}$  при  $p(s) = 100 \text{ Н/м}$  и  $q(s) = 0$  (рис. 6.14) падает по сравнению с предыдущим случаем, а при  $q(s) = 100 \text{ Н/м}$  и  $p(s) = 0$  – возрастает (рис. 6.15), причем так, что у вершины двойника напряжения имеют одинаковый знак, как и в других областях у двойника.

### 6.3. Метод расчета полей напряжений в упругом полупространстве при наличии полисинтетического двойника

При решении задачи по расчету полей напряжений в деформируемом упругом полупространстве, при наличии у его поверхности полисинтетического двойника, введем следующие ограничения на количество вариантов рассмотрения результатов расчетов: 1) плотность двойникующих дислокаций на двойниковых границах одинакова и постоянна, т. е.  $\rho_1(y_0) = \rho_2(y_0) = \rho$ ; 2) границы двойников полисинтетического двойника прямолинейны и описываются функциями (3.8), (3.9).

Ограничимся также количеством рассматриваемых вариантов распределения внешних напряжений. При этом рассмотрим случаи, представляющие практический интерес: 1) сосредоточенная нагрузка действует в некоторой точке в области полисинтетического двойника;

2) распределенные нагрузки действуют на участке, размер которого равен ширине двойника у устья; 3) распределенные нагрузки действуют на участке длиной, равной ширине полисинтетического двойника.

Схематическое изображение полисинтетического двойника, находящегося у поверхности деформируемого упругого полупространства, представлено на рис. 6.16.

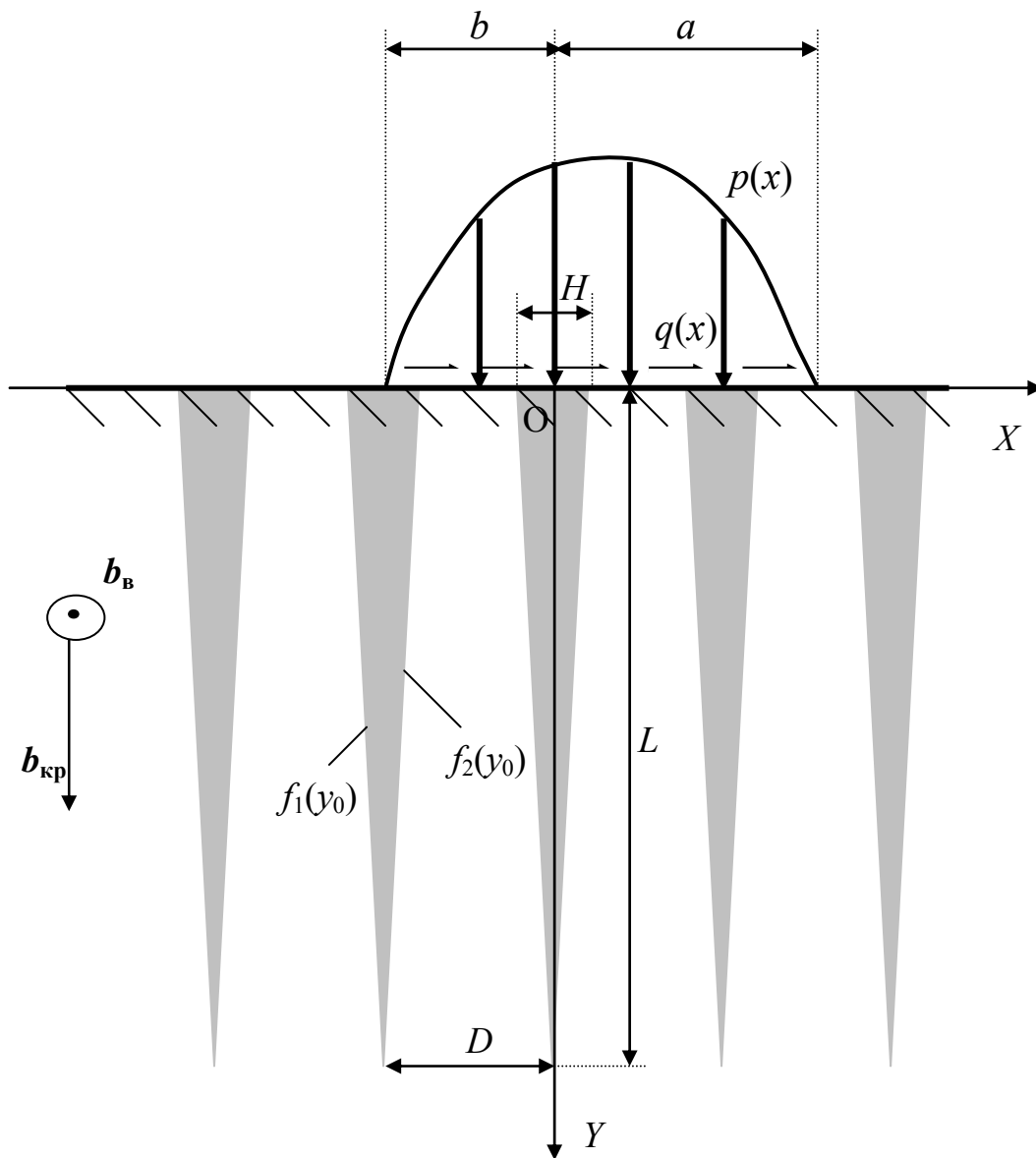


Рис. 6.16. Схематическое изображение полисинтетического двойника, находящегося у поверхности упругого полупространства, деформируемой распределенной нагрузкой

На рис. 6.17 приведен результат расчета распределения у полисинтетического двойника сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  при отсутствии внешних напряжений в случае следующих расчетных параметров:  $L = 100$  мкм;  $H = 21$  мкм;  $D = 31$  мкм;  $N = 5$ ;  $b_v = b_{кр} = 0,124$  нм;  $\mu = 81$  ГПа;  $\nu = 0,29$  [3]. Видно, что напряжения локализованы на границах двойников и у их вершин. В области, занятой двойниками, напряжения отрицательны, а областях, удаленных от вершин двойников в сторону их роста, напряжения положительны. При этом имеется область максимальных значений положительных напряжений, которая удалена от вершин двойников полисинтетического двойника (рис. 6.17).

При изучении влияния сосредоточенной нагрузки на напряженное состояние у полисинтетического двойника целесообразно рассмотрение двух предельных случаев:  $P \neq 0, Q = 0$  и  $P = 0, Q \neq 0$ . Общий случай, когда  $P \neq 0, Q \neq 0$ , является суперпозицией двух предыдущих.

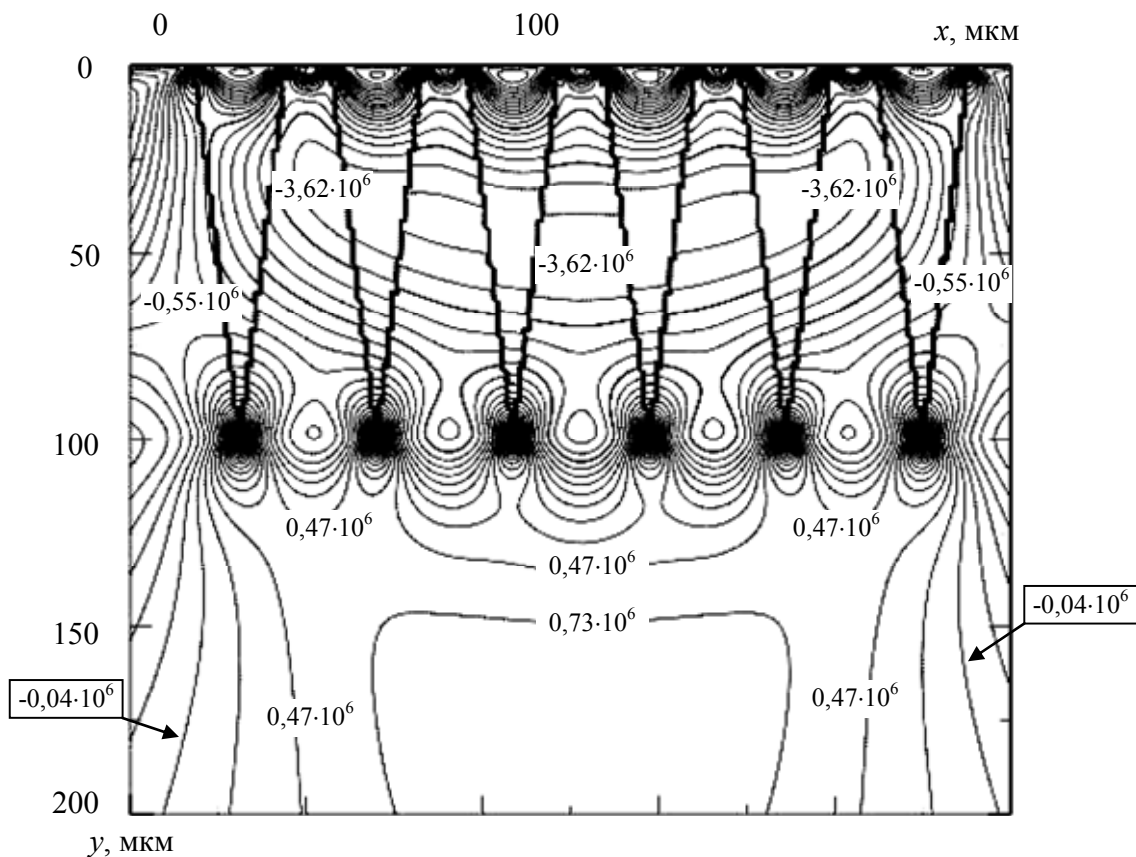


Рис. 6.17. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности, при отсутствии внешних напряжений

На рис. 6.18 представлены результаты расчетов распределения сдвиговых напряжений у полисинтетического двойника при действии в средней его части нормальной нагрузки  $P = 100$  Н (при  $Q = 0$ ). Это привело к изменению уровня напряжений у полисинтетического двойника, но не к изменению их знака. Наблюдается локализация напряжений в области действия сосредоточенной нагрузки. Аналогичная ситуация наблюдается и при  $P = 0$ ,  $Q = 100$  Н (рис. 6.19).

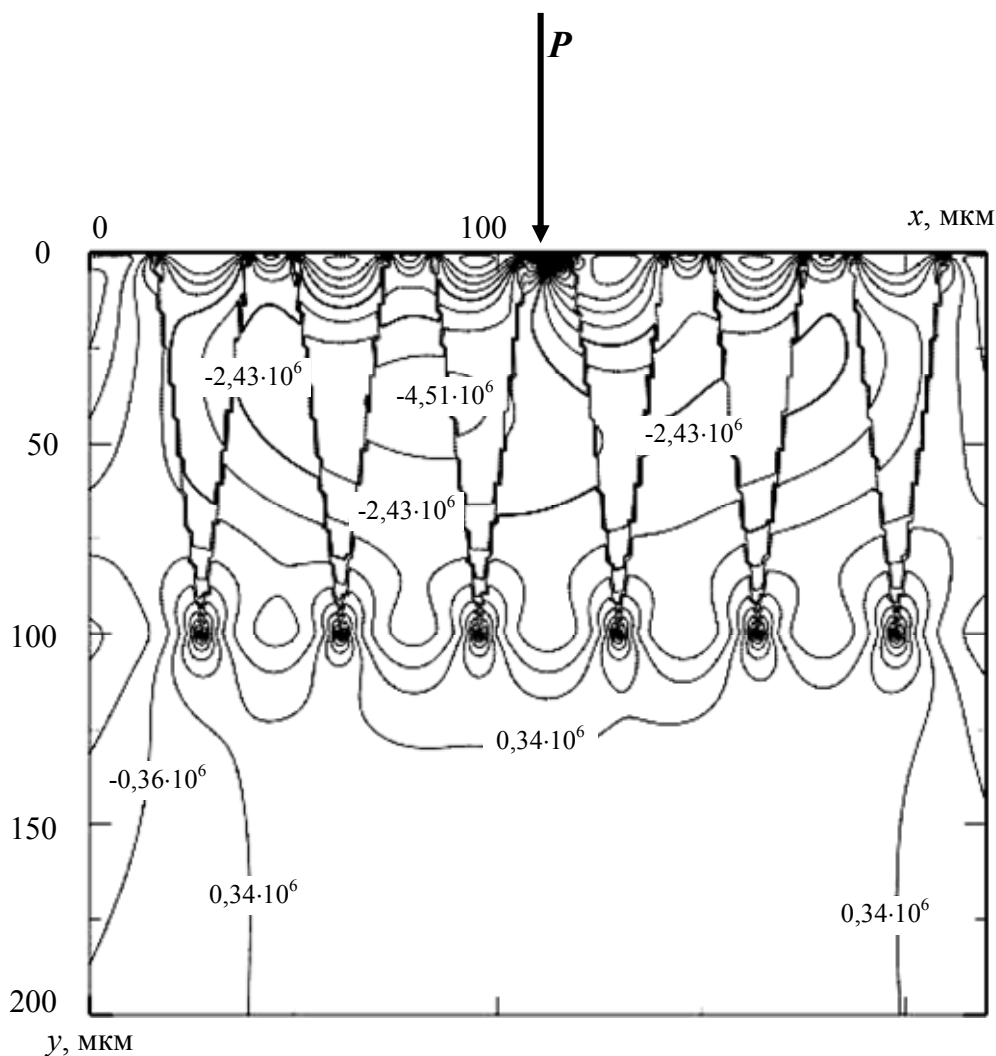


Рис. 6.18. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности, при действующей нормальной сосредоточенной нагрузке  $P = 100$  Н ( $Q = 0$ )

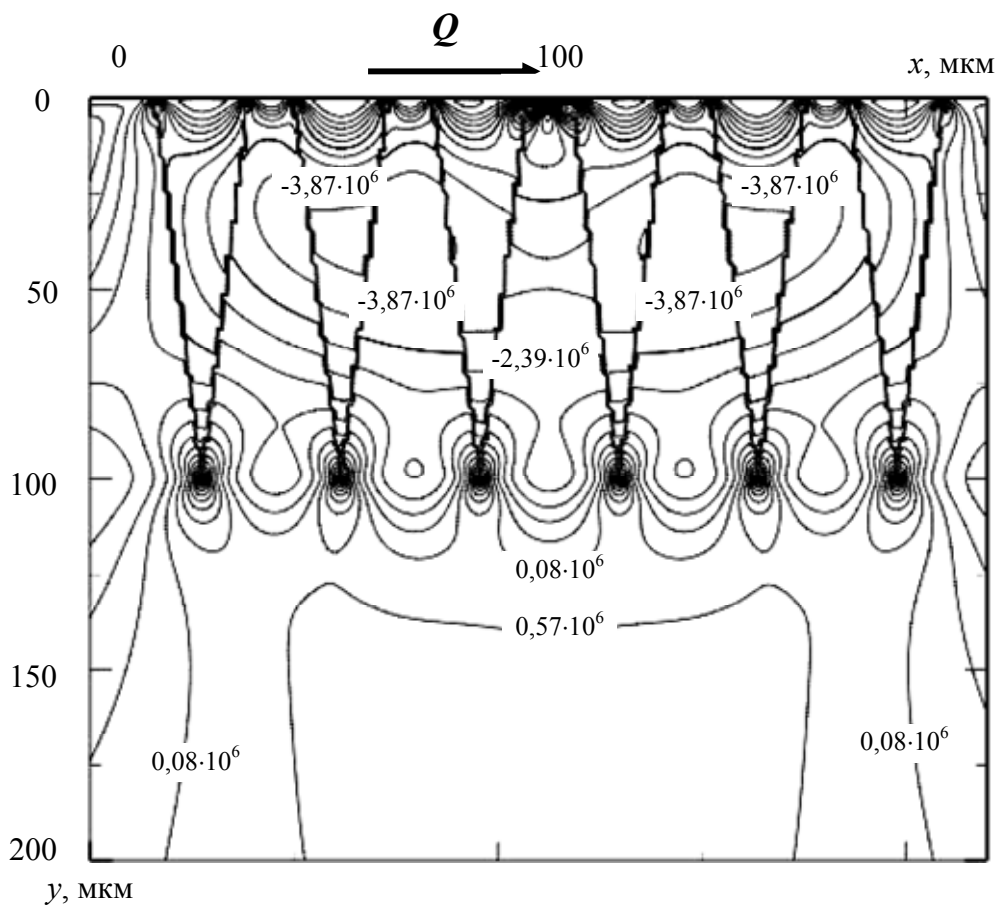


Рис. 6.19. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности, при действующей сдвиговой сосредоточенной нагрузке  $Q = 100$  Н ( $P = 0$ )

Иная ситуация наблюдается при действии на поверхность распределенной нормальной нагрузки (рис. 6.20). При распределении нормальной нагрузки на участке, равном ширине двойника у устья, при  $p(s) = 100$  Н/м,  $q(s) = 0$ , сдвиговые напряжения положительны у двойников, находящихся с правой стороны полисинтетического двойника, и отрицательны у двойников, находящихся с левой стороны полисинтетического двойника.

В случае касательных усилий, распределенных на участке, равном ширине двойника, при  $p(s) = 0$ ,  $q(s) = 100$  Н/м, область положительных напряжений удаляется от вершин двойников (рис. 6.21).

При увеличении области распределения внешней нагрузки до размеров ширины полисинтетического двойника в случае  $p(s) = 100$  Н/м,  $q(s) = 0$  (рис. 6.22) исчезает область локализации напряжений у вершин двойников полисинтетического двойника, однако внутри поли-

синтетического двойника имеются области положительных и отрицательных напряжений. При  $p(s) = 0$ ,  $q(s) = 100$  Н/м в рассматриваемой области при таком распределении касательных усилий напряжения только отрицательны (рис. 6.23).

Результаты, представленные на рис. 6.17 и 6.18, свидетельствуют о том, что из-за перераспределения напряжений у полисинтетического двойника под действием внешних напряжений дислокационная активность повышается не только в области действия внешней нагрузки, но и вдали от нее.

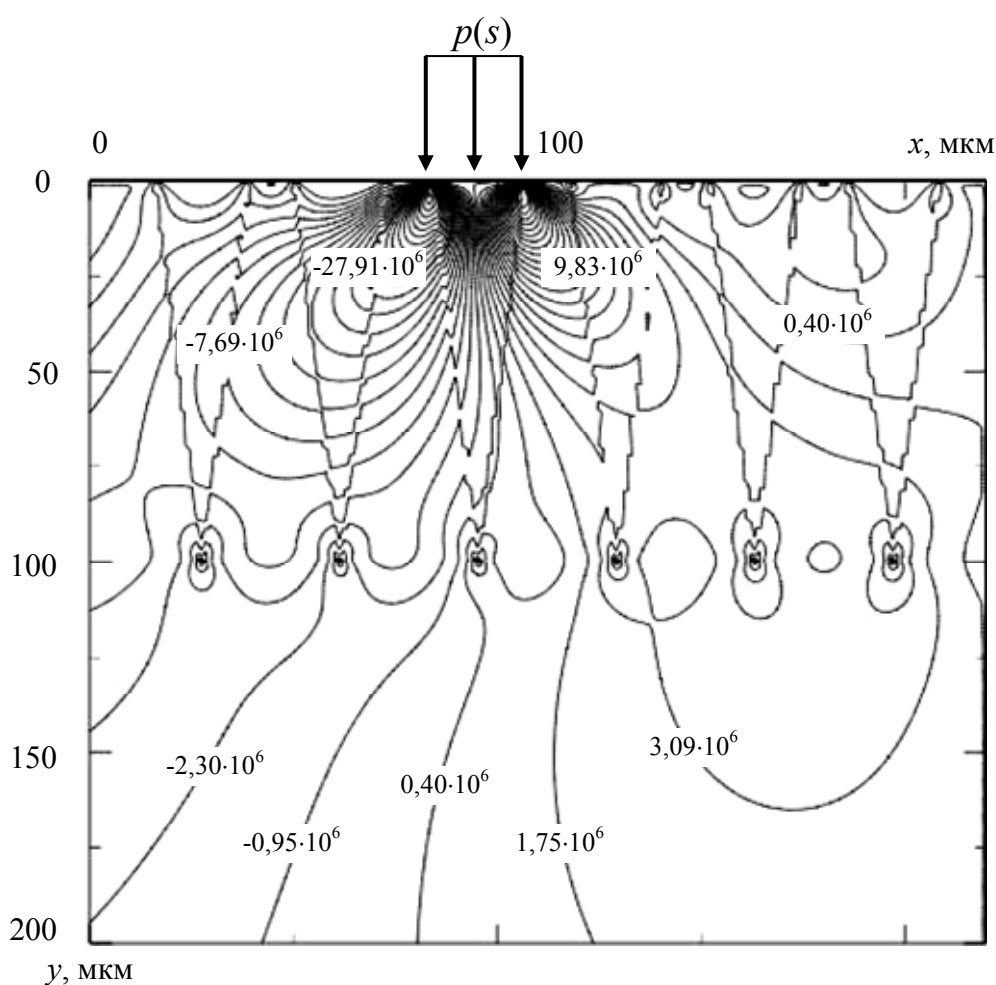


Рис. 6.20. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности, при наличии у поверхности распределенной нормальной нагрузки  $p(s) = 100$  Н/м ( $q(s) = 0$ ), действующей на полосу, длина которой равна ширине двойника у устья

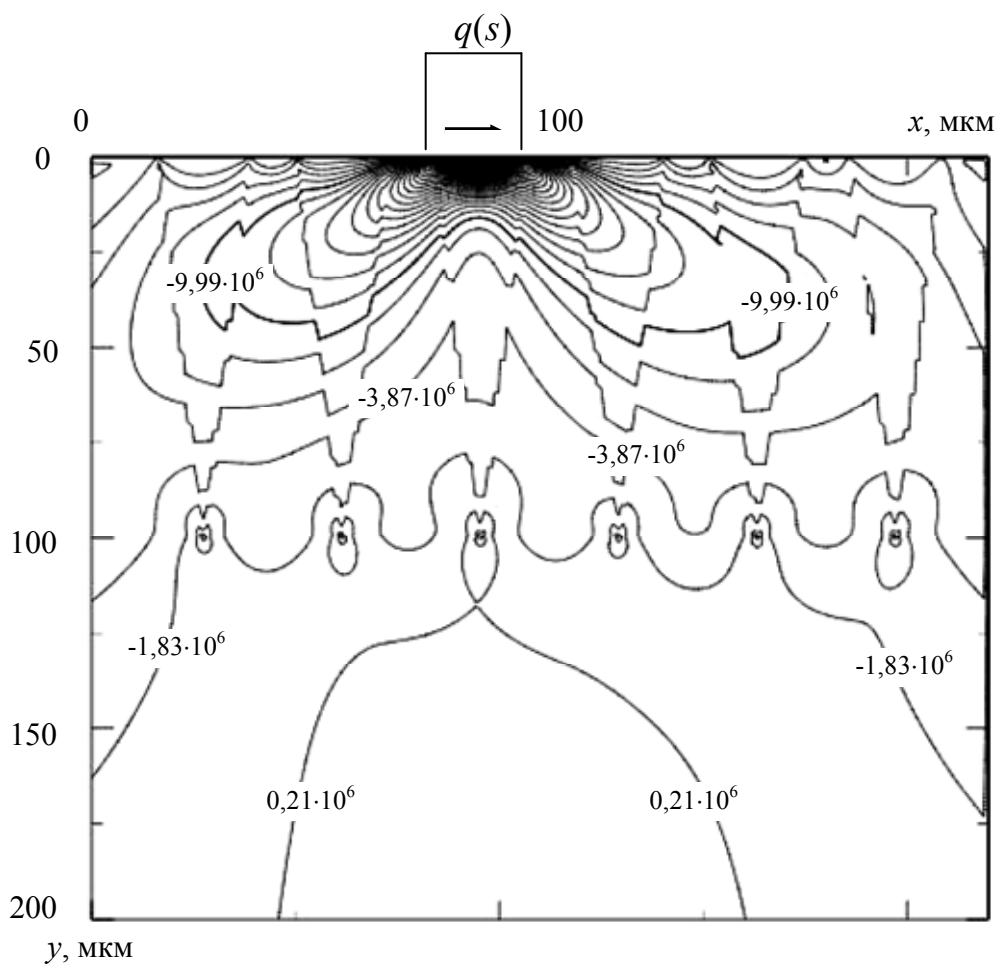
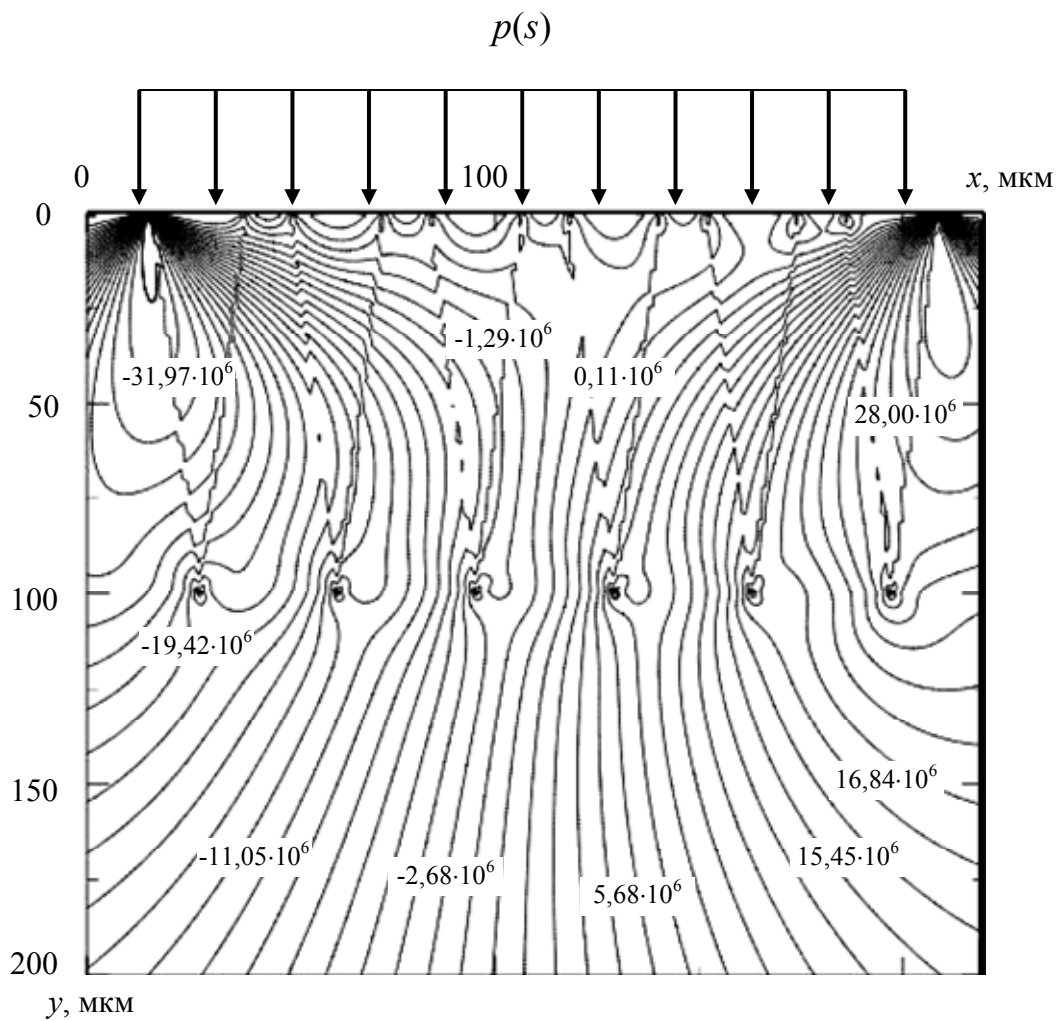


Рис. 6.21. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности, при наличии у поверхности распределенной сдвиговой нагрузки  $q(s) = 100 \text{ Н/м}$  ( $p(s) = 0$ ), действующей на полосе, длина которой равна ширине двойника у устья





*Рис. 6.22.* Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности, при наличии у поверхности распределенной нормальной нагрузки  $p(s) = 100 \text{ Н/м}$  ( $q(s) = 0$ ), действующей на полосе, длина которой равна ширине полисинтетического двойника

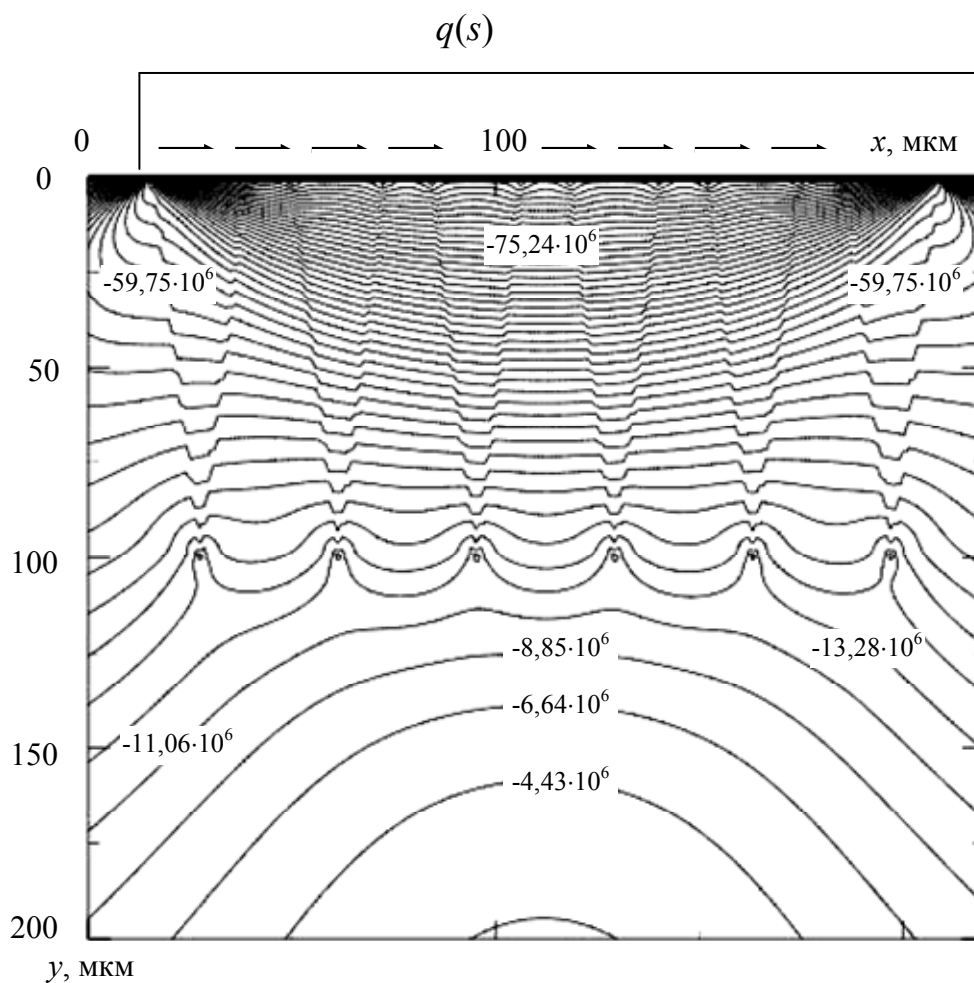


Рис. 6.23. Распределение напряжений  $\sigma_{xy}$  у полисинтетического двойника, находящегося у поверхности, при наличии у поверхности распределенной сдвиговой нагрузки  $q(s) = 100$  Н/м ( $p(s) = 0$ ), действующей на полосе, длина которой равна ширине полисинтетического двойника

# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящее время накоплен обширный экспериментальный материал по вопросу двойникования твердых тел. Это дает основание для развития теории двойникования, которая позволила бы описывать и прогнозировать наблюдаемые явления, а также дать непротиворечивые физические представления о механизмах двойникования кристаллов при их деформировании. Существующие теории двойникования не позволяют охватить весь класс двойников, изучавшихся экспериментально, используют такие приближения, которые существенно сужают область применения теорий двойникования. Поэтому предложенные в данной монографии модели двойникования позволяют сделать шаг вперед в развитии представлений о данном явлении, наблюдаемом при деформировании твердых тел.

Наиболее существенные научные и практические результаты выполненных исследований заключаются в следующем.

1. Предложена дислокационная мезоскопическая модель двойника, позволяющая учитывать винтовую и краевую составляющие вектора Бюргерса двойникующих дислокаций. При этом двойниковая граница рассматривалась на таком масштабном уровне, когда расстояние между двойникующими дислокациями не является пренебрежимо малым. Модель позволила рассчитать поля напряжений, смещений и деформаций у клиновидного двойника наноразмерной длины и у микродвойника с малой плотностью двойникующих дислокаций на границах. Впервые на основании мезоскопической дислокационной модели детально проанализированы напряжения, возникающие у вершины двойника, изучена роль поверхности в формировании напряженного состояния у двойника, а также энергетика формирования двойника, получено условие его равновесия. Установлено, что напряжения локализованы не только на границах двойника и у его вершины, как это считалось ранее, но и в удалении от средней части двойника на расстоянии четверти его длины. Напряженное состояние у вершины

двойника зависит от расстояния между двойникующими дислокациями и при определенных условиях может менять знак на противоположный. Поверхность способствует перераспределению напряжений у двойника, увеличивая их локализацию у устья клиновидного двойника. Определяющим фактором в процессе развития двойника является энергия взаимодействия двойникующих дислокаций.

2. На основании макроскопической дислокационной модели впервые удалось отказаться от приближения тонкого двойника, что позволило существенно расширить класс двойников, который может быть рассмотрен в рамках дислокационной теории двойникования. Впервые в приближении непрерывного распределения двойникующих дислокаций на двойниковых границах получены соотношения для расчета полей напряжений, смещений и деформаций для двойников с произвольной формой границ, также удалось произвести расчет напряжений внутри клиновидного двойника, что не возможно было сделать на основании модели тонкого двойника.

3. Разработанные модели двойников позволили решить ряд прикладных задач, например, проведен расчет потоков миграции и распределения примесей у клиновидного, полисинтетического двойника и нанодвойника и расчет напряжений у полисинтетического двойника и нанодвойника. Впервые разработанная теория двойникования применена для решения задач механики деформируемого твердого тела.

# ЛИТЕРАТУРА

1. Энциклопедия неорганических материалов. – Киев, 1977. – Т. 1. – 840 с.
2. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – Москва : АН СССР, 1960. – 262 с.
3. Полухин, П. И. Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – Москва : Металлургия, 1982. – 584 с.
4. Косевич, А. М. Дислокационная теория упругого двойникования кристаллов / А. М. Косевич, В. С. Бойко // Успехи физ. наук. – 1971. – Т. 104, № 2. – С. 101–255.
5. Гарбер, Р. И. Механическое двойникование кальцита, III / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1940. – Т. 10, № 3. – С. 354–357.
6. Гарбер, Р. И. О повышении предела текучести при отжиге двойникового кальцита / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1946. – Т. 16, № 10. – С. 923–927.
7. Гарбер, Р. И. Отжиг двойниковых кристаллов кальцита и натронной селитры / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1947. – Т. 17, № 1. – С. 63–68.
8. Гарбер, Р. И. Механизм двойникового натронной селитры при пластической деформации // Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1947. – Т. 17, № 1. – С. 48–62.
9. Лифшиц, И. М. О макроскопическом описании явления двойникового кристаллов // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1948. – Т. 18, № 12. – С. 1134–1143.
10. Александров, А. В. Основы теории упругости и пластичности / А. В. Александров, В. Д. Потапов. – Москва : Высш. шк., 1990. – 400 с.
11. Остриков, О. М. Нанодвойникование монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2002. – № 3. – С. 51–52.

12. 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.

13. Остриков О. М. Ветвление клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой / О. М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 1999. – Т. 87, № 1. – С. 94–96.

14. Остриков, О. М. Особенности зарождения клиновидных двойников у отпечатка пирамиды Викакса на поверхности (111) монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Материаловедение. – 2002. – № 1. – С. 17–20.

15. 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.

16. Остриков, О. М. Механизмы формоизменения клиновидных двойников в локально деформируемых ионноимплантированных монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Вестн. Гомел. гос. ун-та им. П. О. Сухого. – 2006. – № 4. – С. 8–22.

17. Лифшиц, И. М. Несколько соображений о двойниковании кальцита / И. М. Лифшиц, И. В. Обреимов // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1948. – Т. 12, № 2. – С. 65–80.

18. Остриков, О. М. Колебания атомов двойниковой границы / О. М. Остриков // Журн. техн. физики. – 1999. – Т. 69, № 6. – С. 115–118.

19. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. – Москва : Наука, 1978. – 792 с.

20. Косевич, А. М. О дислокационной модели двойникования / А. М. Косевич, Л. А. Пастур // Физика твердого тела. – 1961. – Т. 3, № 4. – С. 1291–1297.

21. Остриков, О. М. Экспресс-методика определения вклада двойникования и скольжения в пластическую деформацию монокристаллов при индентировании / О. М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 2000. – Т. 89, № 5. – С. 106–109.

22. Остриков, О. М. Неровности рельефа отпечатка индентора Викакса на поверхности (111) монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Цв. металлургия. – 2002. – № 2. – С. 71–73.

23. Pampillo, C. Comprehensive plastic deformation of a bulk metallic glass / C. Pampillo, H. S. Ghen // J. Mater. Sci. – V. 13, № 13. – P. 181–188.

24. Федоров, В. А. Образование трещин на границах зерен и двойников в цинке при охлаждении до низких температур / В. А. Федоров, В. М. Финкель, В. П. Плотников // Физика металлов и металловедение. – 1980. – Т. 49, № 2. – С. 413–416.

25. Остриков, О. М. Расчет на основании дислокационной мезоскопической модели энергии заклинившего двойника клиновидной формы / О. М. Остриков // Журн. техн. физики. – 2008. – Т. 78, № 2. – С. 58–62.

26. Остриков, О. М. Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О. М. Остриков // Вестн. Гомел. гос. ун-та им. П. О. Сухого. – 2006. – № 2. – С. 10–18.

27. Остриков, О. М. Напряженное состояние у вершины клиновидного двойника / О. М. Остриков // Механика твердого тела. – 2004. – № 2. – С. 104–113.

28. Остриков, О. М. Условие равновесия наноразмерных зародышей двойников / О. М. Остриков // Вестн. Белорус. нац. техн. ун-та. – 2007. – № 2. – С. 26–28.

29. Остриков, О. М. Расчет на основании мезоскопической дислокационной модели собственной энергии клиновидного двойника / О. М. Остриков // Материалы. Технологии. Инструменты. – 2007. – Т. 12, № 2. – С. 22–24.

30. Остриков, О. М. Расчет напряжений и вывод условия равновесия клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности ионно-имплантированного материала / О. М. Остриков // Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий : тез. докл. конф. – Обнинск : ИАТЭ, 2007. – С. 84–85.

31. Остриков, О. М. Дислокационная мезоскопическая модель полисинтетического двойника / О. М. Остриков // Вестн. Гомел. гос. ун-та им. П. О. Сухого. – 2007. – № 2. – С. 11–21.

32. Остриков, О. М. Напряженное состояние у клиновидного двойника при дисбалансе плотностей двойникующих дислокаций / О. М. Остриков // Прикладная механика и техническая физика. – 2002. – Т. 43, № 4. – С. 180–182.

33. Остриков, О. М. Исследование механического двойникования монокристаллов сурьмы методом наноиндентирования / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Инженер.-физ. журн. – 2003. – Т. 76, № 1. – С. 170–172.

34. Остриков, О. М. Эволюция ансамблей клиновидных двойников в монокристаллах висмута, облученных ионами углерода / О. М. Остриков // Актуальные проблемы прикладных, технических и гуманитарных наук. – 2008. – Т. 1, № 1. – С. 10–15.

навук : зб. навук. работ аспірантаў / М-ва адукацыі Рэсп. Беларусь, Мазыр. дзярж. пед. ін-т ; рэдкал.: У. Ц. Піскун (рэд.) [і інш.]. – Мазыр, 1997. – С. 79–82.

35. Остриков, О. М. Двойникование монокристаллов висмута, имплантированных ионами углерода и циркония / О. М. Остриков // Физика конденсир. сред : тез. докл. V Республик. науч. конф. студентов и аспирантов, Гродно, 21–25 апр. 1997 г. // М-во образования Респ. Беларусь, Гродн. гос. ун-т им. Я. Купалы. – Гродно, 1997. – С. 121.

36. Остриков, О. М. Двойникование кристаллов при воздействии на них облучения и электрического поля / О. М. Остриков. – Минск, 1999. – 39 с. – Деп. в ВИНТИ, № 3702-B98 // Ред. журн. «Изв. НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук».

37. Остриков, О. М. Кинетика образования клиновидных двойников в кристаллах висмута, облученных нерастворимыми в матрице мишени ионами / О. М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 1999. – Т. 87, № 5. – С. 78–82.

38. Остриков, О. М. Физические закономерности двойникования при воздействии внешних ортогональных друг другу электрических и магнитных полей, прикладываемых к монокристаллам висмута, облученных ионами бора / О. М. Остриков // Журн. техн. физики. – 2000. – Т. 70, № 12. – С. 39–42.

39. Остриков, О. М. Сравнительный анализ закономерностей развития сдвиговой пластической деформации в аморфных и монокристаллических материалах при локальном дозированном деформировании их поверхностей / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2006. – № 12. – С. 18–21.

40. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – Москва : Атомиздат, 1972. – 600 с.

41. Старцев, В. И. Термическое травление и отжиг двойниковых прослоек в кристаллах сурьмы / В. И. Старцев, Ф. Ф. Лаврентьев, Л. М. Сойфер // Кристаллография. – 1960. – Т. 15, № 3. – С. 214–219.

42. Wang, P. Observation of twins in the  $\alpha_2$  phase in a quenched Ti-46,54 at. % Al alloy / P. Wang, D. Velraghavan, V. K. Vasudevan // Scr. Mater. – 1996. – V. 34, № 10. – P. 1601–1607.

43. Гарбер, Р. И. Механизм двойникования кальцита и натронной селитры при пластической деформации / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1947. – Т. 17, № 1. – С. 48–62.

44. Гарбер, Р. И. Механические свойства единичных двойниковых прослоек / Р. И. Гарбер // Физика твердого тела. – 1959. – Т. 1, № 5. – С. 814–825.



45. Остриков, О. М. Влияние облучения ионами циркония на работу источников двойникоующих дислокаций в монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2001. – № 1. – С. 43–45.

46. Остриков, О. М. Магнитоэластический эффект при двойниковании монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Приклад. механика и техн. физика. – 2001. – Т. 42, № 3. – С. 159–161.

47. Боярская, Ю. С. Деформирование кристаллов при испытаниях на микротвердость / Ю. С. Боярская. – Кишинев : Штиинца, 1972. – 236 с.

48. Джонсон, К. Механика контактного взаимодействия / К. Джонсон. – Москва : Мир, 1989. – 510 с.

49. Остриков, О. М. Использование полипараксилиленовых тонких пленок при исследовании пластической деформации монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Приклад. механика и техн. физика. – 2006. – Т. 47, № 4. – С. 162–166.

50. Остриков, О. М. Влияние скорости нагружения на механизм пластической деформации в висмуте / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Журн. техн. физики. – 2001. – Т. 71, № 5. – С. 44–46.

51. Фридель, Ж. Дислокации / Ж. Фридель. – Москва : Мир, 1967. – 644 с.

52. Ландау, Л. Д. Теория упругости / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Наука, 1987. – 246 с.

53. Остриков, О. М. Влияние ортогональных друг другу электрического и магнитного полей на двойникование монокристаллов висмута, облученных ионами углерода / О. М. Остриков. – Минск, 2001. – 19 с. – Деп. в ВИНТИ 09.12.2000, № 3107-B00 // Ред. журн. «Инженер.-физ. журн.». – 2001. – Т. 74, № 4.

54. 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.

55. Остриков, О. М. Влияние температурных условий деформирования на реализацию двойникования монокристаллов висмута, облученных ионами бора, азота и углерода / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2003. – № 2. – С. 29–31.

56. Остриков, О. М. Условие равновесия клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла, при непрерывном распределении двойникоующих дислокаций на двойниковых границах при

отсутствии внешних сил / О. М. Остриков // Сборник научных трудов IV научно-практической конференции молодых ученых и специалистов «Исследования и перспективные разработки в авиационной промышленности», Москва, 24–26 окт. 2007 г. – Москва, 2007. – С. 756–760.

57. Финкель, В. М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В. М. Финкель, В. А. Федоров, А. П. Королев. – Ростов-на-Дону. – 1990. – 172 с.

58. Остриков, О. М. Влияние импульсов электрического тока на работу источников двойникоующих дислокаций в монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Инженер.-физ. журнал. – 1999. – Т. 72, № 3. – С. 592–594.

59. Воднев, В. Т. Основные математические формулы : справочник / В. Т. Воднев, А. Ф. Наумович, Н. Ф. Наумович. – Минск : Выш. шк., 1988. – 269 с.

60. Корн, Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – Москва : Наука, 1974. – 832 с.

61. Бронштейн, И. Н. Справочник по математике / И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев. – Москва : Наука, 1986. – 544 с.

62. Edel`man, V. S. STM observation of twin microlayers on cleaved bismuth surfaces / V. S. Edel`man // Phys. Lett. A. – 1996. – V. 210, № 1–2. – P. 105–109.

63. Дашевский, М. Я. Анализ наблюдаемых двойниковых структур в кремнии / М. Я. Дашевский, Р. В. Кибизов // Кристаллография. – 1996. – Т. 41, № 3. – С. 522–533.

64. Солдатов, В. П. О некоторых особенностях двойникования монокристаллов цинка при низких температурах / В. П. Солдатов // Физика металлов и металловедение. – 1967. – Т. 24, № 4. – С. 744–753.

65. Савицкий, Д. И. Исследование двойниковой структуры монокристаллов  $\text{LaGaO}_3$  / Д. И. Савицкий [и др.] // Функционал. материалы. – 1994. – Т. 1, № 2. – С. 55–59.

66. Миронов, Б. В. Двойникование в кристаллах  $\text{Na}_5\text{YSi}_4\text{O}_{12}$  / Б. В. Миронов, Б. А. Максимов, М. И. Сирота // Кристаллография. – 1986. – Т. 31, № 2. – С. 244–247.

67. Бриллиантов, Н. А. О пластической деформации, IV / Н. А. Бриллиантов, И. В. Обреимов // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1937. – Т. 7, № 8. – С. 978–986.

68. Гарбер, Р. И. Механическое двойникование кальцита, III / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1940. – Т. 10, № 3. – С. 354–357.

69. Старцев, В. И. Исследование поворотов кристаллической решетки при пластической деформации / В. И. Старцев // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1940. – Т. 10, № 6. – С. 703.

70. Гарбер, Р. И. О повышении предела текучести при отжиге двойникового кальцита / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1946. – Т. 16, № 10. – С. 923–927.

71. Гарбер, Р. И. Отжиг двойникованных кристаллов кальцита и натронной селитры / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1947. – Т. 17, № 1. – С. 63–68.

71. Особенности двойникования ромбических фаз кристаллов  $\text{PbHfO}_3$  / В. Ю. Тополов [и др.] // Кристаллография. – 1990. – Т. 35, № 3. – С. 755–760.

72. Тамазян, Р. А. Атомная структура и микродвойникование садалита / Р. А. Тамазян, Ю. А. Малиновский, А. М. Ильинец // Кристаллография. – 1988. – Т. 33, № 3. – С. 625–629.

73. Карькина, Л. Е. Роль дальнедействующих напряжений при образовании дефектных деполей в  $\text{TiAl}$  / Л. Е. Карькина // Физика металлов и металловедение. – 1995. – Т. 80, № 1. – С. 124–133.

74. Карькина, Л. Е. Взаимодействие двойников с дислокациями и двойниками в  $\text{TiAl}$ . I. Взаимодействие с дислокациями / Л. Е. Карькина, А. Б. Ноткин // Физика металлов и металловедение. – 1993. – Т. 75, № 3. – С. 147–154.

75. Карькина, Л. Е. Взаимодействие двойников с дислокациями и двойниками в  $\text{TiAl}$ . II. Взаимодействие двойников / Л. Е. Карькина, А. Б. Ноткин // Физика металлов и металловедение. – 1993. – Т. 75, № 3. – С. 155–161.

76. Работнов, Ю. Н. Механика деформируемого твердого тела / Ю. Н. Работнов. – Москва : Наука, 1988. – 712 с.

77. Новиков, И. И. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки / И. И. Новиков, К. М. Розин. – Москва : Металлургия, 1990. – 336 с.

78. Остриков, О. М. Изменение концентрации примесей у двойниковой границы под воздействием электрического тока / О. М. Остриков // Физика конденсированных сред : тез. докл. конф. – Гродно, 1997. – С. 122.

79. Финкель, В. М. О температурной зависимости интенсивности и кинетики развития двойникования при динамическом растяже-

нии кремнистого железа / В. М. Финкель, А. М. Савельев, А. П. Королев // Физика металлов и металловедение. – 1979. – Т. 47, № 2. – С. 411–419.

80. Steegmuller, O. Slip in Bismuth / O. Steegmuller, J. S. Daniel // J. of the Less-Common Metals. – 1972. – V. 27. – P. 81–85.

81. Остриков, О. М. Влияние облучения ионами бора на характер реализации двойникования и скольжения при длительных (более 60 с) выдержках под нагрузкой кристаллов висмута / О. М. Остриков // Инженер.-физ. журн. – 1999. – Т. 72, № 5. – С. 967–970.

82. Остриков, О. М. Особенности двойникования монокристаллов висмута, облученных ионами тантала / О. М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 2000. – Т. 89, № 6. – С. 99–103.

83. Нашельский, А. Я. Производство полупроводниковых материалов / А. Я. Нашельский. – Москва : Металлургия, 1989. – 272 с.

84. Никифоров, А. В. Дислокационная структура пластически деформированных слоистых монокристаллов  $\text{LiF-LiF:Mg}^{+2}$  / А. В. Никифоров, О. В. Клявин // Физика твердого тела. – 1996. – Т. 38, № 9. – С. 2744–2749.

85. Боярская, Ю. С. О торможении винтовых дислокаций осколками в монокристаллах  $\text{NaCl:Pb}$  / Ю. С. Боярская, Р. П. Житару, Н. А. Палистрат // Физика твердого тела. – 1995. – Т. 37, № 7. – С. 2189–2194.

86. Голяндин, С. Н. Термически активируемая и силовая микропластическая деформация и амплитудно-частотные спектры внутреннего трения в кристаллах / С. Н. Голяндин, С. Б. Кустов // Физика твердого тела. – 1996. – Т. 37, № 1. – С. 3248–3261.

87. Остриков, О. М. Потоки миграции примесей у клиновидного двойника / О. М. Остриков // Современные проблемы машиноведения : тез. докл. VI Междунар. науч.-техн. конф. (науч. чтения, посвящ. П. О. Сухому), Гомель, 19–20 окт. 2006 г. / М-во образования Респ. Беларусь, Гомел. гос. техн. ун-т им. П. О. Сухого, ОАОР «ОКБ Сухого» ; под. общ. ред. С. Б. Сарело. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2006. – С. 59–60.

88. Остриков, О. М. Нанодвойникование как эффективный способ формирования композитов с наноразмерными включениями / О. М. Остриков // Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий : тез. докл. конф. – Обнинск : ИАТЭ, 2007. – С. 89–90.

89. Study of twins in GaAs, GaP and InAs crystals / T. P. Chen [et al.] // *J. Cryst. Growth*. – 1992. – V. 118, № 1–2. – P. 109–116.
90. Turan, S. High resolution transmission electron microscopy of the planar defect structure of hexagonal boron nitride / S. Turan, K. M. Knowles // *Phys. status solidi. A*. – 1995. – V. 150, № 1. – P. 227–237.
91. Kawabata, M. M. Unusual motion of twin boundary in  $(\text{TMTSF})_2 \text{PF}_6$  single crystal under constant stress / M. M. Kawabata, T. Sambongi // *Solid State Commun.* – 1996. – V. 98, № 4. – P. 283–286.
92. The atomic structure of twin boundaries in rutile / W.-Y. Lee [et al.] // *Phil Mag. Lett.* – 1993. – V. 68, № 5. – P. 309–314.
93. Иродов, И. Е. Основные законы электромагнетизма / И. Е. Иродов. – Москва : Высш. шк., 1983. – 279 с.
94. Терлецкий, Я. П. Электродинамика / Я. П. Терлецкий, Ю. П. Рыбаков. – Москва : Высш. шк., 1990. – 352 с.
95. Индивидуальные задания по высшей математике: Ряды. Кратные и криволинейные интегралы. Элементы теории поля / А. П. Рябушко [и др.]. – Минск : Выш. шк., 2004. – 368 с.
96. Соколовский, В. В. Теория пластичности / В. В. Соколовский. – Москва : Высш. шк., 1969. – 608 с.
97. Качанов, Л. М. Основы теории пластичности / Л. М. Качанов. – Москва : Наука, 1969. – 420 с.
98. Основы научных исследований / под ред. В. И. Крутова, В. В. Попова. – Москва : Высш. шк., 1989. – 400 с.
99. Hahner, P. The dynamics of dislocation dipoles during single glide / P. Hahner // *Scr. Mater.* – 1996. – V. 34, № 3. – P. 435–441.
100. Yonenaga, I. Dislocation velocity in GeSi alloy / I. Yonenaga, K. Sumino // *Appl. Phys. Lett.* – 1996. – V. 69, № 9. – P. 1264–1266.
101. Schwarz, K. W. Interaction of threading and misfit dislocations in a strained epitaxial layer / K. W. Schwarz, J. Tersoff // *Appl. Phys. Lett.* – 1996. – V. 69, № 9. – P. 1220–1222.
102. Makaruk, H. Description of dislocations quantum groups methods / H. Makaruk // *J. Techn. Phys.* – 1996. – V. 37, № 1. – P. 95–100.
103. Плескачевский, Ю. М. Этапы развития и уровни организации структуры материалов: адаптивные композиты / Ю. М. Плескачевский, С. В. Шилько, С. В. Стельмах // Доклады Нац. акад. наук Беларуси. – 1999. – Т. 43, № 5. – С. 119–123.
104. Сергиевич, Н. В. Автолокализация дефектов в адаптивных композитах: вероятностная модель процесса / Н. В. Сергиевич, С. В. Шилько, М. Д. Юдин // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2000. – Т. 6, № 4. – С. 504–509.

105. Shilko, S. V. The Mathematical Simulation of Free Boundary Evolution in Frictional Contact / S. V. Shilko, Yu. M. Pleskachevsky // *Boundary Elements Communications Journal*. – 2001. – Vol. 12, № 2–3. – P. 18–33.

106. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов / под ред. В. Е. Панина. – Новосибирск : Наука, 1995. – Т. 1. – 298 с. ; Т. 2. – 320 с.

107. Остриков, О. М. Формирование наноразмерных фаз в нанодвойниках / О. М. Остриков // *Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого*. – 2006. – № 3. – С. 3–7.

108. Остриков, О. М. Классификация полисинтетических двойников / О. М. Остриков // *Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого*. – 2006. – № 2. – С. 3–9.

109. Остриков, О. М., Корнеевец Е.В. Дислокационная модель полисинтетического двойника / О. М. Остриков, Е. В. Корнеевец // *Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого*. – 2006. – № 3. – С. 42–50.

110. Остриков, О. М. Распределение легирующего компонента в полисинтетических двойниках и теоретический прогноз формирования слоистых материалов с использованием явления полисинтетического двойникования / О. М. Остриков // *Материалы. Технологии. Инструменты*. – 2006. – Т. 11, № 3. – С. 54–56.

111. Остриков, О. М. Влияние алюминиевых тонких пленок на двойникование приповерхностных слоев монокристаллов висмута / О. М. Остриков // *Металлы*. – 2000. – № 1. – С. 79–81.

112. Физика кристаллов с дефектами / А. А. Предводителей [и др.]. – Москва : МГУ, 1986. – 240 с.

109. Качанов, Л. М. Основы механики разрушения / Л. М. Качанов. – Москва : Наука, 1974. – 312 с.

113. Финкель, В. М. Об упругом двойниковании кремнистого железа / В. М. Финкель, В. А. Зрайченко, И. Н. Воронов // *Докл. АН СССР*. – 1965. – Т. 160, № 2. – С. 329–331.

114. Босин, М. Е. О локализации пластической деформации в кристаллах цинка с дислокациями леса / М. Е. Босин, Ф. Ф. Лаврентьев, В. Н. Никифоренко // *Физика твердого тела*. – 1996. – Т. 38, № 12. – С. 3619–3624.

115. Остриков, О. М. Физические закономерности двойникования монокристаллов висмута, облученных ионами аргона / О. М. Остриков // *Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия*. – 2001. – № 11. – С. 39–42.

116. Остриков, О. М. Влияние облучения ионами бора, азота, углерода и циркония на процесс генерации двойникоующих дислокаций в монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2001. – № 8. – С. 45–46.

117. Остриков, О. М. Влияние температурных условий деформирования на реализацию двойникоования монокристаллов висмута, облученных ионами циркония / О. М. Остриков // Металлофизика и новейшие технологии. – 2002. – Т. 24, № 9. – С. 1215–1220.

118. Остриков, О. М. Дислокационная модель полисинтетического двойника / О. М. Остриков, Е. В. Корнеевец // Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого. – 2006. – № 3. – С. 42–50.

119. Остриков, О. М. Распределение легирующего компонента в полисинтетических двойниках и теоретический прогноз формирования слоистых материалов с использованием явления полисинтетического двойникоования / О. М. Остриков // Материалы. Технологии. Инструменты. – 2006. – Т. 11, № 3. – С. 54–56.

120. Остриков, О. М. Обоснование возможности формирования слоистых материалов на основе явления полисинтетического механического двойникоования, вызванного интенсивной деформацией / О. М. Остриков // Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий : тез. докл. конф. – Обнинск : ИАТЭ, 2007. – С. 88–89.

121. Остриков, О. М. О возможности формирования фазовых дифракционных решеток на основе явления двойникоования монокристаллов / О. М. Остриков // Письма в журн. техн. физики. – 2000. – Т. 26, № 21. – С. 49–52.

122. Гиндин, И. А. О двойникоовании висмута / И. А. Гиндин, В. И. Старцев // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1950. – Т. 20, № 8. – С. 738–741.

123. Сойфер, Л. М. Размножение дислокаций в висмуте и сурьме / Л. М. Сойфер, З. А. Щеголева / Физика металлов и металловедение. – 1967. – Т. 24, № 1. – С. 140–48.

124. Способ изготовления фазовых дифракционных решеток : а. с. СССР № 1675814, кл. G 02 В 5/18 / В. В. Колчин, А. К. Корнейчик ; опубл. 07.09.91 г.

125. Нагибина, И. М. Прикладная физическая оптика / И. М. Нагибина [и др.]. – Москва : Высш. шк., 2002. – 565 с.