УДК 539.3

ВЕРОЯТНОСТНО-СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ АНСАМБЛЕЙ КЛИНОВИДНЫХ ДВОЙНИКОВ У ОТПЕЧАТКА ИНДЕНТОРА ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ДОЗИРОВАННОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ ПОВЕРХНОСТИ ДВОЙНИКУЮЩЕГОСЯ МОНОКРИСТАЛЛА

О. М. ОСТРИКОВ

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

Введение

Предложенный в работах [1]–[3] метод исследования механического двойникования, связанный с локальным дозированным деформированием поверхности, оказался весьма эффективным и нашел широкое применение не только в изучении механизмов двойникования [4]–[7], но и негомогенной пластической деформации аморфных материалов [8]–[10], а также выкрашивания деформируемого материала [11], [12].

Формирование ансамбля клиновидных двойников (или полос сдвига в случае металлического стекла [8]–[10]) у отпечатка индентора носит случайный характер. Это связано с тем, что в области деформирования невозможно точно определить расположение источников двойникующих дислокаций в кристаллических или полос сдвига в аморфных материалах. Поэтому для моделирования деформационной картины, образованной вдавливанием индентора и связанной с двойникованием или негомогенной пластичностью, целесообразно использовать методы теории вероятности и математической статистики [13]–[15].

Локальное деформирование поверхности как метод имеет важное практическое значение, так как поверхность материалов в процессе их эксплуатации подвержена локальным деформационным воздействиям, результат которых может сказаться на долговечности и надежности изделия.

В данной работе ограничимся рассмотрением только ситуации, связанной с двойникованием. Полученные результаты могут быть распространены и на негомогенную пластичность аморфных материалов, подверженных локальному деформированию сосредоточенной нагрузкой, и на случай возникновения у отпечатка индентора трещин и т. д.

Целью работы стала разработка на основе методов теории вероятности и математической статистики такой модели, которая позволяла бы прогнозировать конфигурацию ансамбля клиновидных двойников, возникающих у отпечатка индентора различной формы.

Основная часть

Типичная картина, возникающая, например, на деформируемой алмазной пирамидой Виккерса поверхности скола (111) монокристалла висмута, представлена в работах [5]–[7]. У отпечатка индентора возникает 6–8 двойников клиновидной формы, средняя длина которых порядка 100 мкм (рис. 1).

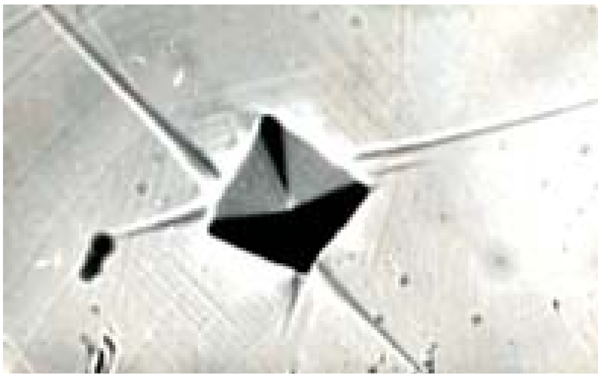

Рис. 1. Типичная деформационная картина, возникающая у отпечатка пирамиды Виккерса на поверхности (111) монокристалла висмута (×500)

Висмут является модельным материалом для изучения двойникования при индентировании. Поэтому полученные результаты можно обобщить и на другие двойникующиеся твердые тела, у которых у отпечатка индентора возникает картина, представленная на рис. 1. Таким образом, разрабатываемый в данной работе математический аппарат для описания двойникования при локальном деформировании монокристаллов висмута может быть обобщен и на другие материалы. Это дает возможность в дальнейшем не конкретизировать, о каком материале идет речь.

Количество двойников (N), возникающих у концентратора напряжений, является случайной величиной. Распределение этой величины в зависимости от условий эксперимента может быть хорошо описано как распределением Пуассона, так и распределением Стьюдента [7].

В случае распределения величины N по закону Пуассона вероятность того, что у отпечатка индентора возникнет N двойников, определяется по следующей формуле [13], [14]:

$$P_N = \frac{a^N}{N!} e^{-a}, \tag{1}$$

где a – параметр закона Пуассона ($a > 0$) [13].

Использование закона Пуассона для расчета вероятности возникновения у концентратора напряжений N двойников удобно в связи с тем, что величина N дискретная и принимает только неотрицательные целые значения, что является основным условием применимости закона Пуассона [13].

Другим требованием применимости закона Пуассона является необходимость выполнения равенства математического ожидания (m_N) и дисперсии (D_N) величины N [14], причем

$$m_N = D_N = a. \tag{2}$$

Условие (2) не всегда выполняется на эксперименте. Поэтому целесообразно использование распределения Стьюдента, которое с помощью гамма-функции (Г) представляется в виде [16]:

$$f(t) = \frac{\Gamma((n+1)/2)}{\Gamma(n/2)\sqrt{\pi n}} \left(1 + t^2\right)^{-(n+1)/2}, \tag{3}$$

где в нашем случае n – число отпечатков индентора, у которых ведется подсчет количества образовавшихся двойников; $t = \left(\overline{N} - N\right)/S_n$ (здесь $\overline{N}$ – среднее число двойников, возникающих у отпечатков индентора; $S_n^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^{n} \left(N_i - \overline{N}\right)^2 \approx D_N^2$).

Согласно [16], при $n \geq 30$ распределение (3) переходит в нормальное распределение, плотность которого применительно к рассматриваемой задаче можно представить в следующем виде [13]:

$$f(N) = \frac{1}{D_N \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(N - m_N)}{2D_N^2}}. \tag{4}$$

Длина (L) клиновидных двойников, возникающих у отпечатка индентора, в отличие от их количества N принимает не только целые значения. Поэтому использование закона Пуассона применительно к L неправомерно. Нецелесообразно и применение соотношения типа (1) к L из-за малой вероятности выполнения на практике условия типа (2). В экспериментах для L математическое ожидание (m_L) и дисперсия (D_L), как правило, не равны друг другу, т. е. $m_L \neq D_L$. Поэтому можно считать, что при малых n величина L подчиняется распределению Стьюдента, а при больших n – закону нормального распределения:

$$f(L) = \frac{1}{D_L \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(L - m_L)}{2D_L^2}}. \tag{5}$$

Для N и L также справедлива следующая формула:

$$f(N, L) = \frac{1}{2\pi\sigma_N\sigma_L\sqrt{1 - r^2}} e^{-\frac{1}{2(1-r^2)}\left[\frac{(N - m_N)^2}{\sigma_N^2} - \frac{2r(N - m_N)(L - m_L)}{\sigma_N\sigma_L} + \frac{(L - m_L)^2}{\sigma_L^2}\right]}, \tag{6}$$

где σ_N, σ_L – среднеквадратичные отклонения величин N и L, соответственно; r – коэффициент корреляции величин N и L.

При $r \neq 0$ случайные величины N и L зависимы [13]. В случае, когда $r = 0$ (т. е. N и L независимы) формула (6) примет следующий вид:

$$f(N, L) = \frac{1}{2\pi\sigma_N\sigma_L} e^{-\frac{1}{2}\left[\frac{(N - m_N)^2}{\sigma_N^2} + \frac{(L - m_L)^2}{\sigma_L^2}\right]}. \tag{7}$$

Выражения (6) и (7) нормального закона достаточны для описания вероятностных процессов зарождения у концентратора напряжений полос сдвига и трещин [10], имеющих близкую к нулю ширину. В случае двойникования более полное математическое описание требует учета и ширины (H) двойника у устья [7]. Это приводит к необходимости использования трехмерного распределения типа

$$f(N, L, H) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\sigma_N\sigma_L\sigma_H} e^{-\frac{1}{2}\left[\frac{N^2}{\sigma_N^2} + \frac{L^2}{\sigma_L^2} + \frac{H^2}{\sigma_H^2}\right]}. \tag{8}$$

Здесь σ_H – среднеквадратичное отклонение величины H.

Тогда вероятность появления у деформирующего поверхность индентора N клиновидных двойников с геометрическими параметрами L и H, образующими область значений D, может быть определена с помощью тройного интеграла:

$$P((N, L, H) \subset D) = \iiint\limits_{(D)} f(N, L, H) dN dL dH. \tag{9}$$

Как показали экспериментальные данные, распределение двойников по длинам не всегда имеет один максимум [6], [7], [17]–[19]. В зависимости от условий локального деформирования в общем случае таких максимумов может быть K штук. На количество максимумов оказывает влияние анизотропия деформируемых кристаллов, форма индентора, пропускание в момент деформирования электрического тока и др. Вид функции распределения двойников по длинам схематически можно представить так, как это показано на рис. 2. В случае отсутствия равенства математического ожидания и дисперсии такую функцию можно описать суперпозицией нормальных распределений длин двойников K групп. На рис. 2 каждое такое нормальное распределение схематически показано пунктирной линией.

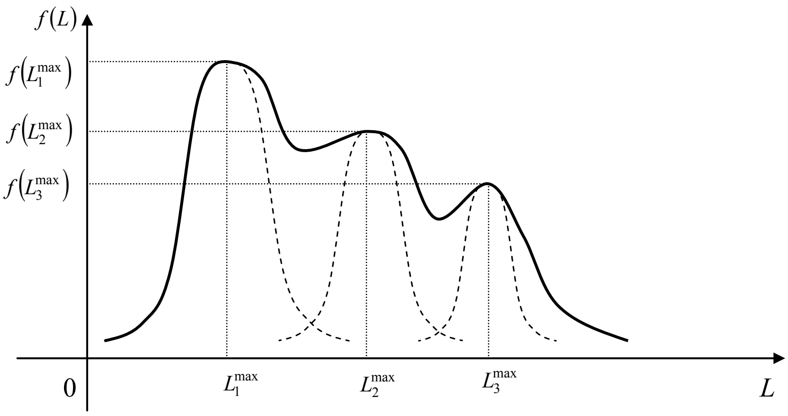

Рис. 2. Схематическое изображение типичного распределения двойников по длинам

Предполагается, что в каждой группе находятся двойники, вклад в увеличение или уменьшение длины которых внес какой-либо один из ранее перечисленных факторов. Тогда распределение двойников по длинам при невыполнении условия (2) можно записать в следующем виде:

$$f(L)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=1}^{K}\frac{e^{-\frac{(L_j-m_{Lj})}{2D_{L_j}^2}}}{D_{L_j}}, \tag{10}$$

где L_j – длины двойников j-й группы; m_{Lj} и D_{Lj} – математическое ожидание и дисперсия величины L_j; $L=\sum_{j=1}^{K}L_j$.

Функция (10) полностью описывает сложное распределение двойников по длинам, схематически показанное на рис. 2.

В плане создания математической основы для компьютерного моделирования процесса двойникования при локальном дозированном деформировании поверхности двойникующегося материала интересна задача по определению точки на контуре отпечатка индентора, в которой будет находиться середина основания двойника. На рис. 3, *а* схематически показан отпечаток пирамиды Виккерса на поверхности деформируемого монокристалла и система возникающих у него клиновидных двойников. Для удобства целесообразно использование развертки контура отпечатка индентора, которая показана на рис. 3, *б* в виде отрезка, разбитого на участки, соответствующие длине стороны отпечатка. Направим вдоль этого отрезка ось x и исключим ситуацию, когда двойники образуются вдали от отпечатка индентора [7], [20], так как в случае, например, деформирования поверхности (111) монокристалла висмута вдали от отпечатка индентора двойники образуются крайне редко. Зададим плотность вероятности образования двойника в той или иной точке контура отпечатка индентора $f(x)$. Тогда при более частом появлении двойников у вершин четырехугольника функция плотности вероятности $f(x)$ в первом приближении будет иметь вид, представленный на рис. 3, *б* сплошной линией. При более частом появлении двойников у середины отрезка стороны отпечатка пирамиды вид функции $f(x)$ представлен рис. 3, *б* пунктирной линией. В этих случаях функцию плотности вероятности появления двойника в точке, принадлежащей *i*-й стороне отпечатка, в первом приближении целесообразно принимать параболической. Пусть данная функция имеет вид:

$$f_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i, \tag{11}$$

где a_i, b_i, c_i – феноменологические коэффициенты.

В рассматриваемой задаче (рис. 3) функция (11) примет следующий вид:

$$f_i(x) = \begin{cases} a_{AB}x^2 + b_{AB}x + c_{AB} \text{ при } A < x < B \\ a_{BC}x^2 + b_{BC}x + c_{BC} \text{ при } B < x > C \\ a_{CD}x^2 + b_{CD}x + c_{CD} \text{ при } C < x < D \\ a_{DA}x^2 + b_{DA}x + c_{DA} \text{ при } D < x < A. \end{cases} \tag{12}$$

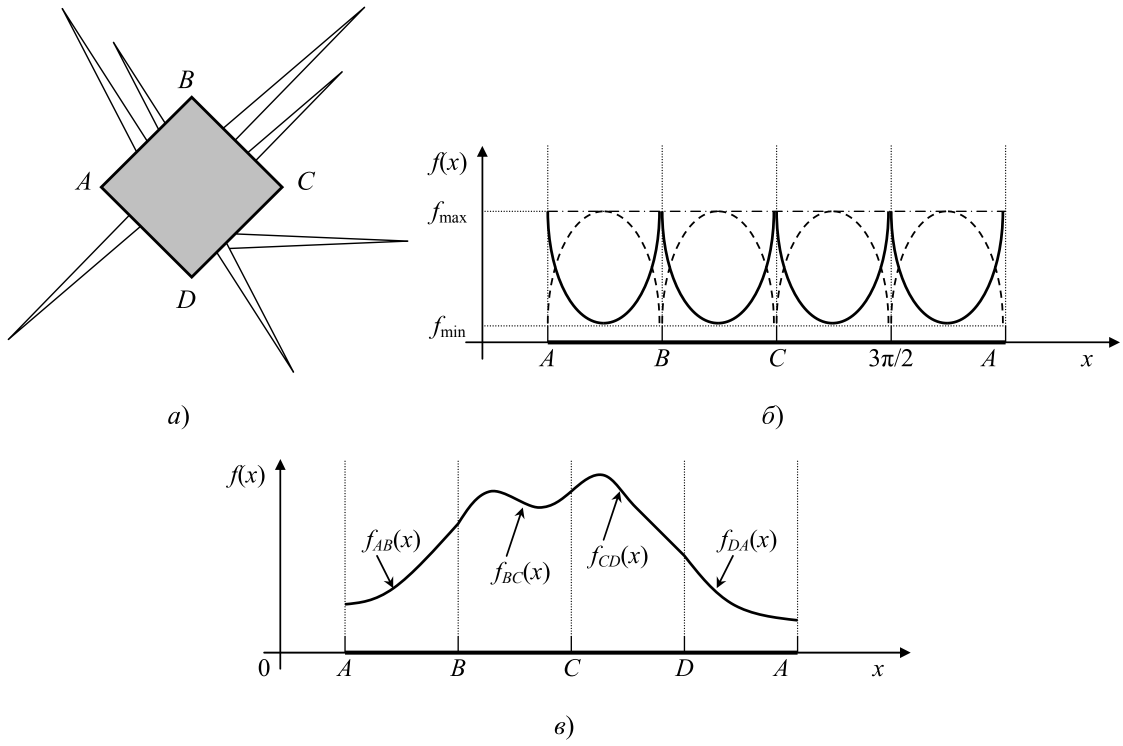

Рис. 3. Схема для модели, позволяющей прогнозировать место зарождения двойников или полос сдвига у отпечатка пирамиды Виккерса: *а* – отпечаток пирамиды Виккерса и ансамбль клиновидных двойников вокруг него; *б* – плотность вероятности зарождения двойников на развертке контура отпечатка индентора в случае более частого появления двойников у вершин отпечатка (сплошная линия) и у средней его части (пунктирная линия); *в* – плотность вероятности зарождения двойников на развертке контура отпечатка индентора в общем случае

Функция $f_i(x)$ экстремальна. На оси x положение *i*-го экстремума находится по формуле [13]:

$$(x_0)_i = -\frac{b_i}{2a_i}. \qquad (13)$$

В случае, когда более часто двойники возникают у вершин отпечатка пирамиды Виккерса, функция $f_i(x)$ в экстремальных точках принимает значения [14]:

$$f_i((x_0)_i) = f_{\min} = \frac{4a_ic_i - b_i^2}{4a_i}. \qquad (14)$$

Аналогичные соотношения можно использовать и в случае более вероятного появления двойников у середины стороны отпечатка индентора, но в данном случае в этой части отпечатка будут наблюдаться максимальные значения функций $f_i(x)$.

В общем случае функция $f(x)$ имеет произвольный вид (рис. 3, *в*). Однако и в этом случае ее удобно разбить на части $f_{AB}(x)$, $f_{BC}(x)$, $f_{CD}(x)$ и $f_{DA}(x)$, соответствующие четырем сторонам отпечатка пирамиды Виккерса.

На рис. 4, *а* схематически представлен отпечаток сферического (аналогично для конического) индентора с системой клиновидных двойников вокруг него. В данном случае также удобно разбить контур отпечатка индентора на участки. Пусть определяющими точками такого разбиения будут квадранты окружности. На рис. 4, *б* вдоль оси *x* расположена развертка контура отпечатка длиной *l*, поделенная на четыре отрезка, концы которых соответствуют расположению точек квадранта окружности.

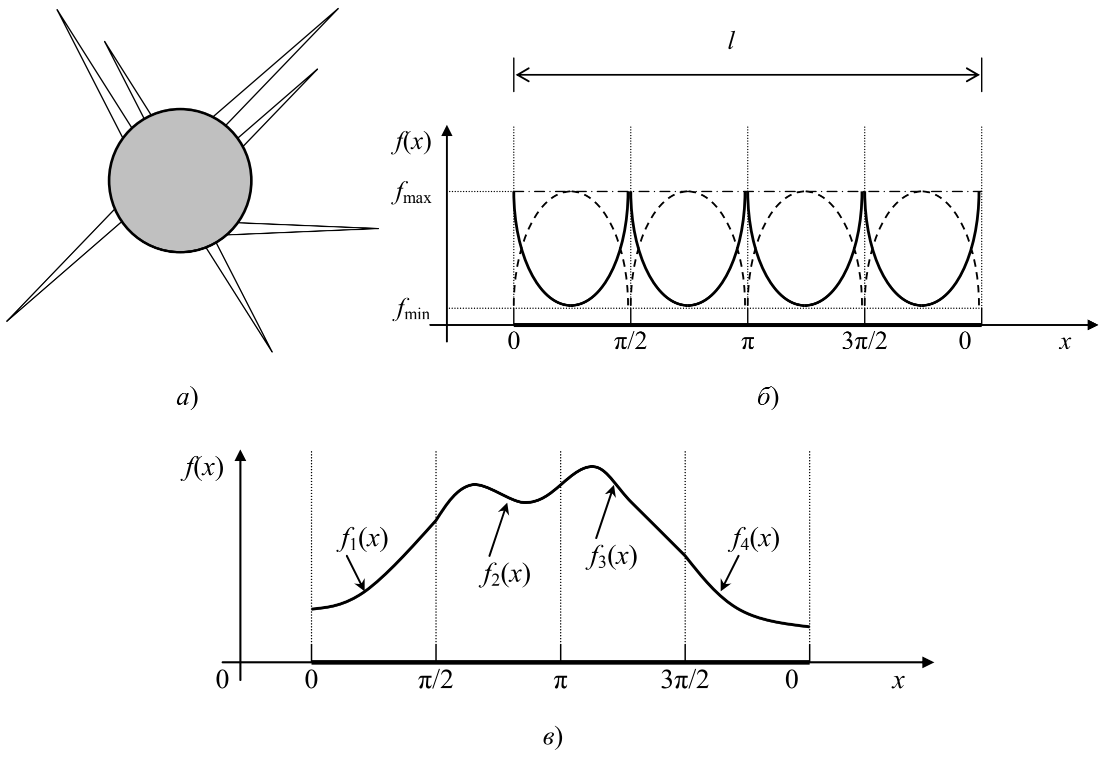

Рис. 4. Схема для модели, позволяющей прогнозировать место зарождения двойников или полос сдвига у отпечатка сферического (или конического) индентора: *а* – отпечаток индентора и ансамбль клиновидных двойников вокруг него; *б* – плотность вероятности зарождения двойников на развертке контура отпечатка индентора в случае более частого появления двойников у квадрантных точек (сплошная линия) и у средней части отрезка, ограниченного квадрантными точками (пунктирная линия); *в* – плотность вероятности зарождения двойников на развертке контура отпечатка сферического (или конического) индентора в общем случае

Ввиду анизотропии деформируемого монокристалла вероятность появления двойников в различных областях контура отпечатка разная. Как и в предыдущем случае (рис. 3, *б*), в первом приближении для функции $f(x)$ может быть использована квадратичная зависимость, как это схематически показано на рис. 4, *б*. В общем случае функция $f(x)$ произвольна и может быть представлена суперпозицией функций $f_1(x)$, $f_2(x)$, $f_3(x)$ и $f_4(x)$ (рис. 4, *в*).

Заключение

Таким образом, разработана вероятностно-статистическая модель двойникования монокристаллов при индентировании их поверхности. Модель пригодна для разработки программ для компьютерного моделирования остаточной двойниковой картины, возникающей у отпечатка индентора двойникующихся монокристаллов. Показано, что для математического описания распределения двойников по длинам, при наличии нескольких максимумов у этого распределения, необходимо использование суперпозиции нормальных распределений, число которых равно числу максимумов. Модель может быть использована и для случая негомогенной пластической деформации аморфных материалов. Разработан метод прогнозирования области зарождения двойников или полос сдвига у отпечатка индентора.

Литература

1. Yoo, M. H. Twinning in zinc by indentation / M. H. Yoo, C. T. Wei // J. Appl. Phys. – 1967. – Vol. 38, № 7. – P. 2974–2976.
2. Бойко, В. С. Динамика развития двойника под сосредоточенной нагрузкой / В. С. Бойко, Р. И. Гарбер, В. Ф. Кившик // Физика твердого тела. – 1975. – Т. 17, № 2. – С. 3655–3657.
3. Lubenets, S. V. Dynamics of twinning in metals and alloys / S. V. Lubenets, V. I. Startsev, L. S. Fomenko // Phys. Stat. Sol. (a). – 1985. – Vol. 92, № 11. – P. 12–55.
4. Влияние импульсов электрического тока на двойникование монокристаллов висмута, облученных ионами углерода / В. С. Савенко [и др.] // Физика металлов и металловедение. – 1998. – Т. 85, № 5. – С. 96–105.
5. Двойникование монокристаллов висмута, облученных ионами бора / В. С. Савенко [и др.] // Письма в журн. техн. физики. – 1998. – Т. 24, № 8. – С. 1–9.
6. Савенко, В. С. Применение статистического метода для изучения кинетики образования клиновидных двойников в кристаллах висмута при наложении на них электрических и магнитных полей / В. С. Савенко // Изв. НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 1998. – № 2. – С. 96–98.
7. Остриков, О. М. Механика двойникования твердых тел : монография / О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2008. – 301 с.
8. Особенности пластической деформации при индентировании пирамидой Виккерса поверхности аморфного сплава Fe-Cr-Mo-V-B-Si / М. Н. Верещагин [и др.] // Физика металлов и металловедение. – 2002. – Т. 93, № 5. – С. 101–104.
9. Исследование методом локального деформирования особенностей пластической деформации аморфного сплава Fe-Cr-Mo-V-B-Si / М. Н. Верещагин [и др.] // Кристаллография. – 2002. – Т. 47, № 4. – С. 691–696.
10. Верещагин, М. Н. Негомогенная пластическая деформация аморфных сплавов на основе железа : монография / М. Н. Верещагин, В. Г. Шепелевич, О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2004. – 134 с.

11. Способ определения интенсивности выкрашивания материалов : пат. № а 20030020BY, МПК7 G 01 N 3/08. / М. Н. Верещагин [и др.]. – заявл. 10.01.03 ; опубл. 30.09.04. Афіцыйны бюл. / Дзярж. пат. ведамства Рэсп. Беларусь. – 2004. – № 3. – С. 61.
12. 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.
13. Вентцель, Е. С. Теория вероятностей / Е. С. Вентцель. – М. : Академия, 2003. – 576 с.
14. Корн, Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – М. : Наука, 1974. – 832 с.
15. Боржковская, В. М. Исследование структуры линий скольжения в монокристаллах LiF при послойной полировке и травлении с применением статистических методов обработки экспериментальных данных / В. М. Боржковская, А. И. Ландау, М. А. Давыдов // Кристаллография. – 1968. – Т. 13, № 4. – С. 655–661.
16. Физический практикум / под ред. Г. С. Кембровского. – Минск : Университетское, 1986. – 352 с.
17. Применение статистического метода к изучению электростимулированного двойникования кристаллов висмута / В. С. Савенко [и др.] // Действие электромагнитных полей на пластичность и прочность материалов : тез. докл. конф. – Воронеж : ВГТУ, 1996. – С. 21.
18. 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.
19. Остриков, О. М. Двойникование ионно-имплантированных монокристаллов висмута : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук / О. М. Остриков. – Минск : БГУ, 1999. – 17 с.
20. 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.

Получено 03.04.2013 г.