

УДК 538.3

МЕЗОСКОПИЧЕСКАЯ ДИСЛОКАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ РАЗВИВАЮЩЕГОСЯ КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА

О. М. ОСТРИКОВ

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

Закономерности развития клиновидных двойников стали предметом экспериментальных исследований многих работ [1]–[3]. Несмотря на имеющиеся в настоящее время результаты по математическому моделированию двойникового кристаллов [1]–[5], теория двойникового еще далека от своего завершения. Это определяет целесообразность выработки физических представлений о двойниковании. Важную роль приобретают задачи, решение которых позволяет прогнозировать развитие двойникового, так как двойниковые границы являются концентраторами больших внутренних напряжений, способствующих зарождению трещин тогда, когда резерв прочности материала еще не исчерпан.

Целью данной работы стало изучение на мезоскопическом уровне эволюции напряженного состояния у 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 [6]:

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

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

$$\sigma_{yy} = \frac{b_{кр} y c_t^2}{\pi v^2} \left[\frac{\gamma_t (\lambda - \gamma_t^2 (\lambda + 2\mu))}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2} + \frac{\mu \gamma_t (1 + \gamma_t^2)}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2} \right]; \quad (3)$$

$$\sigma_{zz} = \nu (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}); \quad (4)$$

$$\sigma_{xz} = -\frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{\gamma_t y}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2}; \quad (5)$$

$$\sigma_{yz} = \frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{\gamma_t (x - vt)}{(x - vt)^2 + \gamma_t^2 y^2}, \quad (6)$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; $b_{кр}$ и b_b – краевая и винтовая составляющие вектора Бюргера частичной двойнивающей дислокации; v – скорость

движения дислокации; t – время; c_t и c_l – скорости распространения поперечной и продольной звуковых волн, определяемые по формулам:

$$c_t = \left(\frac{\mu}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}}; \quad c_l = \left(\frac{\lambda + 2\mu}{\rho_0} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

где ρ_0 – плотность среды, в которой движется дислокация; c_t и c_l связаны с γ_t и γ_l соотношениями:

$$\gamma_t = \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2} \right)^{\frac{1}{2}}; \quad \gamma_l = \left(1 - \frac{v^2}{c_l^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (8)$$

На рис. 1 схематически представлен клиновидный двойник в виде совокупности двойнивающих дислокаций.

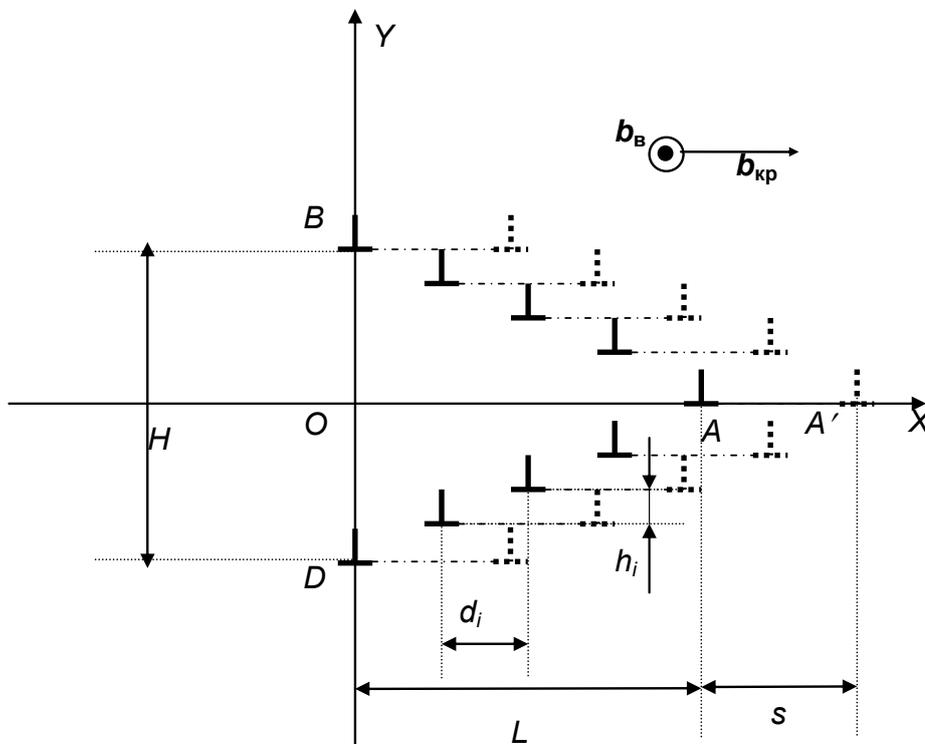


Рис. 1. Схематическое изображение клиновидного двойника в виде совокупности двойнивающих дислокаций

Пусть краевая и винтовая составляющие двойнивающих дислокаций будут направлены так, как это показано на рис. 1. Для такой движущейся с постоянной скоростью системы дислокаций после снятия внешних напряжений в случае однородной и изотропной упругой среды можно записать следующие соотношения для определения компонент тензора напряжений:

$$\sigma_{xy}(x, y) = \frac{\mu b_{кр} c_t^2}{2\pi v^2} \left\{ \sum_{n=0}^N \left[\frac{(1 + \gamma_t^2)^2 (x - L + nd_1 - vt)}{\gamma_t [(x - L + nd_1 - vt)^2 + \gamma_t^2 (y + nh_1)^2]} \right] \right\}$$

$$-\frac{4\gamma_l(x-L+nd_1-vt)}{(x-L+nd_1-vt)^2+\gamma_l^2(y+nh_1)^2}\Bigg]+ \sum_{m=1}^M \left[\frac{(1+\gamma_l^2)^2(x-L+md_2-vt)}{\gamma_l[(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2]} - \frac{4\gamma_l(x-L+md_2-vt)}{(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2} \right] \Bigg\}; \quad (9)$$

$$\sigma_{xx}(x,y) = \frac{b_{кр}c_t^2}{\pi v^2} \left\{ \sum_{n=0}^N \left[\frac{\gamma_l(\lambda+2\mu-\gamma_l^2\lambda)(y+nh_1)}{(x-L+nd_1-vt)^2+\gamma_l^2(y+nh_1)^2} - \frac{\mu\gamma_l(1+\gamma_l^2)(y+nh_1)}{(x-L+nd_1-vt)^2+\gamma_l^2(y+nh_1)^2} \right] + \sum_{m=1}^M \left[\frac{\gamma_l(\lambda+2\mu-\gamma_l^2\lambda)(y-mh_2)}{(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2} - \frac{\mu\gamma_l(1+\gamma_l^2)(y-mh_2)}{(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2} \right] \right\}; \quad (10)$$

$$\sigma_{yy}(x,y) = \frac{b_{кр}c_t^2}{\pi v^2} \left\{ \sum_{n=0}^N \left[\frac{\gamma_l(\lambda-\gamma_l^2(\lambda+2\mu))(y+nh_1)}{(x-L+nd_1-vt)^2+\gamma_l^2(y+nh_1)^2} + \frac{\mu\gamma_l(1+\gamma_l^2)(y+nh_1)}{(x-L+nd_1-vt)^2+\gamma_l^2(y+nh_1)^2} \right] + \sum_{m=1}^M \left[\frac{\gamma_l(\lambda-\gamma_l^2(\lambda+2\mu))(y-mh_2)}{(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2} + \frac{\mu\gamma_l(1+\gamma_l^2)(y-mh_2)}{(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2} \right] \right\}; \quad (11)$$

$$\sigma_{zz}(x,y) = v(\sigma_{xx}(x,y) + \sigma_{yy}(x,y)); \quad (12)$$

$$\sigma_{xz}(x,y) = -\frac{\mu b_B}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\gamma_l(y+nh_1)}{(x-L+nd_1-vt)^2+\gamma_l^2(y+nh_1)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{\gamma_l(y-mh_2)}{(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2} \right\}; \quad (13)$$

$$\sigma_{yz}(x,y) = \frac{\mu b_B}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\gamma_l(x-L+nd_1-vt)}{(x-L+nd_1-vt)^2+\gamma_l^2(y+nh_1)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{\gamma_l(x-L+md_2-vt)}{(x-L+md_2-vt)^2+\gamma_l^2(y-mh_2)^2} \right\}; \quad (14)$$

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.

Простейшей задачей, которую позволяют решать соотношения (9)–(14), является расчет напряжений у развивающегося двойника, у которого прекратилась генерация

двойникующих дислокаций. При этом в (9)–(14) N и M остаются постоянными в любой отличной от нуля момент времени (если за нулевое значение принято время начала развития двойника). Схематически данный процесс представлен на рис. 2.

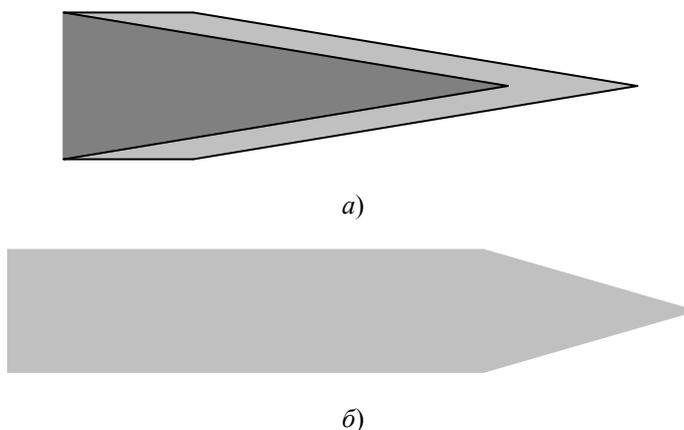


Рис. 2. Схематическое изображение процесса роста клиновидного двойника в условиях отсутствия генерации дополнительных двойникующих дислокаций: *а* – исходное состояние и начальный этап роста двойника; *б* – конечная стадия развития двойника

На эксперименте такой случай наблюдается, например, при пропускании через электропроводящий кристалл с двойниками импульсного электрического тока [7]. 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.

В рассмотренном примере увеличения длины двойников под действием электрического тока скорость движения двойникующих дислокаций, как правило, не высокая. 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 [7]. В этом случае можно принять допущение $v \approx c_l \approx c_t$. Тогда из (8) следует, что $\gamma_l \rightarrow 0$ и $\gamma_t \rightarrow 0$. Из соотношений (9)–(14) 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.

На эксперименте чаще реализуется ситуация, когда рост двойника сопровождается генерацией двойникующих дислокаций, что проявляется в увеличении ширины двойника [7]. За время генерации (t_r) двух двойникующих дислокаций (по одной на каждой из двойниковых границ) длина двойника возрастет на величину s (рис. 1). В этом случае

$$s = vt_r. \quad (15)$$

Изменение числа двойникующих дислокаций при условии их дискретно-порционного генерирования может быть задано соотношением

$$N(t) = \left(N_0 + D \left(\frac{t}{t_r} \right) \right), \quad (16)$$

где N_0 – число двойнящихся дислокаций на двойниковых границах до начала повторного развития двойника; $D \left(\frac{t}{t_r} \right)$ – так называемая возрастающая функция антье [8], имеющая вид, представленный на рис. 3.

В этом случае развитие двойника будет происходить по схеме, представленной на рис. 4.

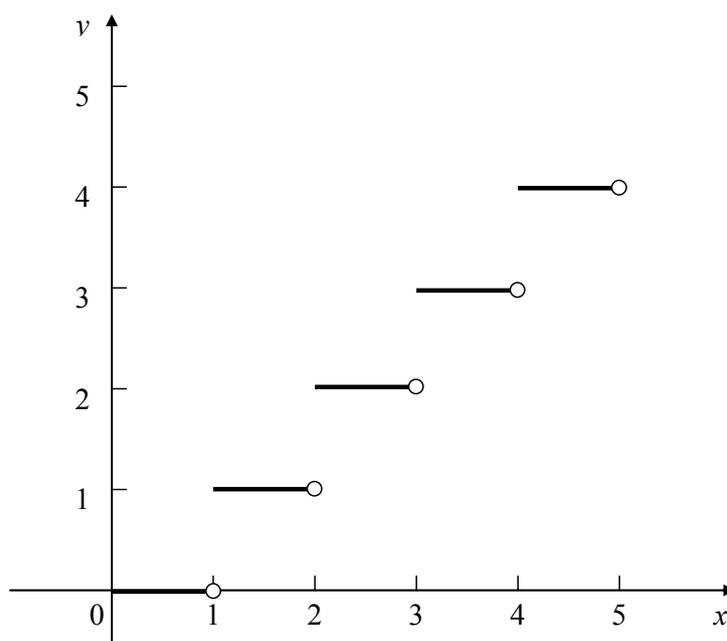


Рис. 3. Вид функции, описывающей рост числа двойнящихся дислокаций

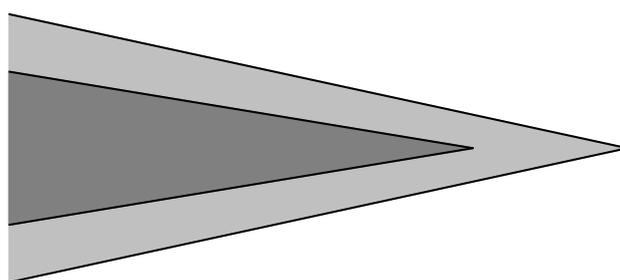


Рис. 4. Схематическое изображение роста клиновидного двойника с одновременной генерацией двойнящихся дислокаций (темный цвет – начальная стадия; светлый – конечная)

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

$$N(t) = v_r t, \quad (17)$$

где v_r – скорость генерации двойнящихся дислокаций, определяющая количество двойнящихся 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:

$$v_n = \frac{H}{t} = \frac{Nh_1 + Mh_2}{t} = 2h \frac{N}{t} = 2hv_r. \quad (18)$$

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 возле устья двойника.

Таким образом, на основании дислокационной мезоскопической модели предложен способ расчета полей напряжений у развивающегося клиновидного двойника. Рассмотрены случаи развития двойника без генерации дополнительных двойникоующих дислокаций и с их генерацией при одновременном росте длины двойника. Установлено, что в случае отсутствия генерации дополнительных двойникоующих дислокаций фронт напряжений мигрирует за движущимся скоплением двойникоующих дислокаций. При развитии двойника, сопровождающемся одновременной генерацией двойникоующих дислокаций, высокий уровень напряжений сохраняется и возле устья двойника.

Литература

1. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – Москва : АН СССР, 1960. – 262 с.
2. 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.
3. Гарбер, Р. И. Механизм двойникования натронной селитры при пластической деформации / Р. И. Гарбер // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1947. – Т. 17, № 1. – С. 48–62.
4. Лифшиц, И. М. О макроскопическом описании явления двойникования кристаллов / И. М. Лифшиц // Журн. эксперимент. и теорет. физики. – 1948. – Т. 18, № 12. – С. 1134–1143.
5. Косевич, А. М. Дислокационная теория упругого двойникования кристаллов / А. М. Косевич, В. С. Бойко // Успехи физ. наук. – 1971. – Т. 104, № 2. – С. 101–255.
6. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – Москва : Атомиздат, 1972. – 600 с.
7. 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.
8. Воднев, В. Т. Основные математические формулы : справочник / В. Т. Воднев, А. Ф. Наумович, Н. Ф. Наумович. – Минск : Выш. шк., 1988. – 269 с.

Получено 20.02.2009 г.