

УДК 538.24

РАСЧЕТ НА ОСНОВАНИИ МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ МОДЕЛИ УПРУГОЙ ЭНЕРГИИ КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА

О. М. ОСТРИКОВ

УО «Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого», пр. Октября, 48, 246746, г. Гомель, Беларусь.

На основании дислокационной мезоскопической модели проведен расчет упругой энергии клиновидного двойника. Показано, что при постоянной плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах упругая энергия двойника линейно растет с ростом его длины. Нелинейный характер данной зависимости приобретает при расстояниях между двойникующими дислокациями меньших 1 нм.

Введение

В настоящее время накоплен большой экспериментальный материал по исследованию двойникования кристаллов [1–3]. Однако, современная теория двойникования не позволяет в полной мере описывать механизмы данного физического явления. Это связано в первую очередь с теми существенными приближениями и допущениями, которые используются в моделировании процессов двойникования кристаллов. Поэтому развитие теории двойникования является актуальным и целесообразным.

Целью данной работы стал расчет упругой энергии клиновидного двойника с использованием модели такого масштабного уровня, когда нельзя пренебречь расстоянием между двойникующими дислокациями.

Постановка задачи и ее решение

Представим клиновидный двойник в виде совокупности двойникующих дислокаций, расположенных друг относительно друга так, как это показано на рис. 1. При этом двойникующие дислокации распределены вдоль двойниковых границ АВ и АС таким образом, что проекции отрезка R, соединяющего две соседние дислокации, на оси ОХ и ОУ равны соответственно d и h (см. рис. 1).

Двойникующие дислокации являются частичными дислокациями Шокли. Поэтому их вектор Бюргерса (\vec{b}) можно разложить на две составляющие: винтовую ($\vec{b}_в$) и краевую ($\vec{b}_кп$). Тогда упругая энергия клиновидного двойника на единицу длины всех двойникующих дислокаций может быть представлена суперпозицией энергий, обусловленных вкладом винтовой и краевой составляющих двойникующих дислокаций:

$$\frac{W_y}{\sum L_d} = \frac{W_y^{кп}}{\sum L_d} + \frac{W_y^в}{\sum L_d}, \quad (1)$$

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

Таким образом, примем допущение о том, что двойникующая дислокация состоит из совокупности винтовой и краевой дислокаций, линии которых совпадают и геометрическая сумма векторов Бюргерса которых равна вектору Бюргерса частичной двойникующей дислокации.

Упругая энергия единичной краевой дислокации на единицу ее длины определяется из соотношения [4]:

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

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; α – безразмерный параметр (для большинства металлов $\alpha = 4$ [4]), R_i – расстояние от i -ой двойникующей дислокации до поверхности [4], след которой на плоскости ХОУ на рис. 1 совпадает с осью ОУ. Примем $R_i = id$, где L – длина клиновидного двойника (см. рис. 1).

В случае винтовой дислокации справедливо выражение для упругой энергии [4]:

$$\frac{(W_y^в)_i}{L_d} = \frac{\mu b_v^2}{4\pi} \ln \frac{\alpha R_i}{b_v}. \quad (3)$$

Тогда, учитывая (2) и (3), для клиновидного двойника можно записать

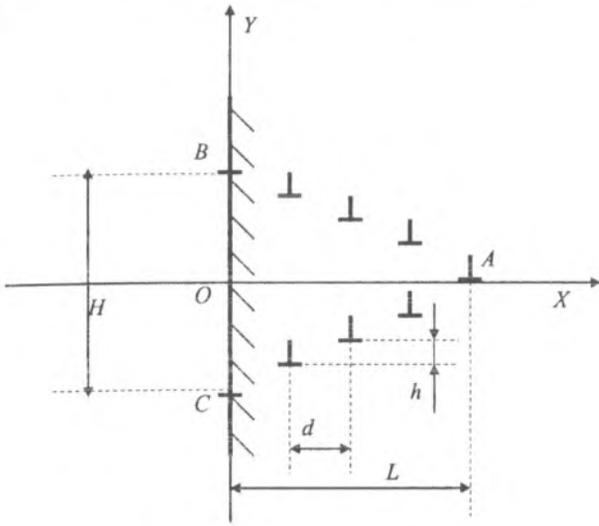


Рис. 1. Схематическое изображение взаимного расположения двойнивающих дислокаций в расчетной мезоскопической модели клиновидного двойника

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

Второе слагаемое в этом выражении подразумевает, что в вершине двойника находится только одна двойнивающая дислокация и данная часть соотношения определяет упругую энергию вершинной двойнивающей дислокации. В первом слагаемом выражения (4) от L отнимается id , что указывает на то, что каждая последующая дислокация двойниковой границы удаляется от вершины на расстояние id и на такое же расстояние приближается к поверхности.

Следует отметить, что в соотношении (4) отсутствует параметр h . Это обусловлено тем, что упругая энергия отдельных дислокаций зависит от расстояния от них до поверхности, но не зависит от проекции расстояния между дислокациями R на ось OY .

Результаты и их обсуждение

На рис. 2 и 3 представлены результаты расчетов для упругой энергии клиновидных двойников в железе. Принималось $b_b = b_{кр} = 0,124$ нм [5]; $\mu = 81$ ГПа [6]; $\nu = 0,29$ [6]. Упругая энергия клиновидных двойников в железе при постоянной плотности двойнивающих дислокаций на двойниковых границах (при $d = \text{const}$) линейно растет с увеличением длины двойника в интервале длин L от 1 до 100 мкм (рис. 2). С уменьшением расстояния между двойнивающими дислокациями скорость роста упругой энергии клиновидного двойника увеличивается. Это проявляется в увеличении угла наклона зависимости упругой энергии

двойника от его длины (рис. 2). Причем прирост данного угла наклона при $d = 5$ нм по сравнению с углом наклона графика зависимости при $d = 10$ нм значительно меньше, чем при $d = 1$ нм. Это свидетельствует о том, что в плане упругой энергии клиновидного двойника энергетически выгодно увеличение расстояния между двойнивающими дислокациями. То есть, энергетически выгоден рост клиновидного двойника не в результате трансляции головной двойнивающей дислокации, а за счет увеличения расстояния между двойнивающими дислокациями.

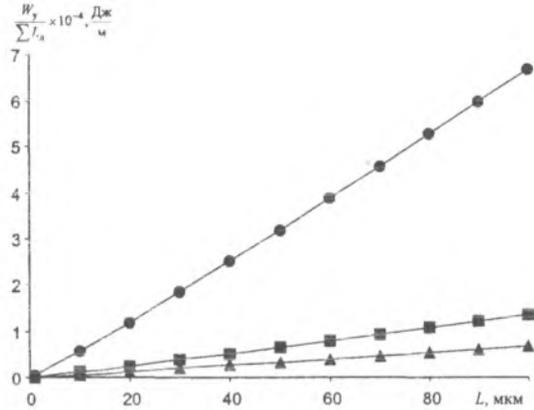


Рис. 2. Рассчитанные зависимости упругой энергии клиновидного двойника, отнесенной к длине всех двойнивающих дислокаций, от длины двойника в железе при различных значениях параметра d : ● - $d = 1$ нм; ■ - $d = 5$ нм и ▲ - $d = 10$ нм

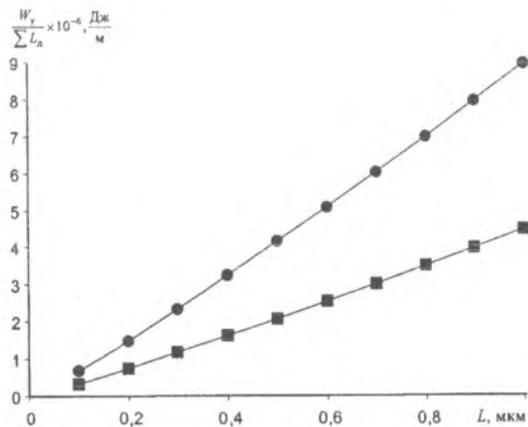


Рис. 3. Рассчитанные зависимости упругой энергии клиновидного двойника, отнесенной к длине всех двойнивающих дислокаций, от длины двойника в железе при $d = 0,5$ нм (●) и $d = 1$ нм (■) в случае малых длин двойников

Интересна ситуация, когда длина двойников меньше 1 мкм. Данные двойники характеризуют начальную стадию развития двойника [7] и названы в работах [8, 9] 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. 3). При $d = 0,5$ нм наблюдается незначительное отклонение зависимости $\frac{W_y}{\sum L_d}(L)$ от линейного вида. Скорость роста упругой энергии при

увеличении длины двойника в этом случае значительно выше, чем во всех рассмотренных ранее случаях. Это также подтверждает то, что для уменьшения упругой энергии клиновидному двойнику энергетически выгодно развиваться за счет увеличения расстояния между двойническими дислокациями.

Заключение

Таким образом, предложена мезоскопическая дислокационная модель клиновидного двойника. На основании данной модели получено аналитическое выражение для расчета упругой энергии клиновидного двойника. Проведен расчет упругой энергии клиновидного двойника в железе. Показано, что данная энергия при постоянной плотности двойнических дислокаций на двойниковых границах линейно растет с увеличением длины двойника. При малых расстояниях между двойническими дислокациями (меньше 1 нм) данная зависимость упругой энергии двойника от его длины приобретает нелинейный характер.

Литература

1. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – М.: АН СССР, 1960. – 262 с.
2. Остриков, О. М. Исследование механического двойникования монокристаллов сурьмы методом наноиндентирования / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Инженерно-физический журнал, 2003. – Т. 76, № 1. – С. 170–172.
3. Финкель, В. М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В. М. Финкель, В. А. Федоров, А. П. Королев. – Ростов-на-Дону, 1990. – 172 с.
4. Хирт Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
5. Новиков, И. И. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки / И. И. Новиков, К. М. Розин. – М.: Металлургия, 1990. – 336 с.
6. Иродов, И. Е. Задачи по общей физике / И. Е. Иродов. – М.: Наука, 1979. – 366 с.
7. 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.
8. Остриков, О. М. Нанодвойникование монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия, 2002, № 3. – С. 51–52.
9. Остриков О. М. Формирование наноразмерных фаз в нанодвойниках / О. М. Остриков // Вестник ГГТУ им. П. О. Сухого. – 2006, № 3. – С. 3–7.

Ostrikov O. M.

Calculation of elastic energy of tapered twin on basis of mesoscopic dislocation model.

The elastic energy of a tapered twin is calculated based on the dislocation mesoscopic model. It is shown that if the density of twin dislocations over twin boundaries is constant the twin elastic energy increases linearly with increasing the twin length. The dependence becomes non-linear when the distance between twin dislocations is less than 1 nm.

Поступила в редакцию 19.01.2007.

© О. М. Остриков, 2007.