УДК 538.24

РОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ В ФОРМИРОВАНИИ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ У КЛИНОВИДНОГО НАНОДВОЙНИКА

О. М. ОСТРИКОВ

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

Двойникование является одним из основных каналов пластической деформации твердых тел [1]–[3]. Оно, как правило, проявляется в случаях, когда затруднительно развитие скольжения, например, из-за ориентационного запрета и низких температур [1], [2]. В настоящее время нет однозначного мнения о роли двойникования в процессах разрушения двойникующихся материалов. Исследования, проведенные на кремнистом железе [4], показывают, что двойниковые прослойки, границы которых являются концентраторами больших внутренних напряжений, способствуют зарождению трещин. Этого не наблюдается у таких пластичных материалов, как висмут, сурьма [3], [5]–[7], где напряжения двойниковых границ активизируют процессы зарождения и развития полных дислокаций. Имеется мнение, что двойникование является резервом пластичности материалов, так как, вступая в действие на конечной стадии пластической деформации, оно в ходе деформирования материала отдаляет во времени процесс зарождения трещин и разрушения [8].

В настоящее время накоплен обширный экспериментальный материал по исследованию двойникования материалов [8]–[10]. При этом назрела необходимость в развитии математического моделирования и глубокого теоретического исследования механического двойникования [11]–[13]. При высоком уровне имеющихся экспериментальных работ по двойникованию имеется необходимость в развитии представлений о механизмах зарождения и развитии двойников, моделировании процессов, наблюдаемых при двойниковании. Особое место при этом занимают задачи, связанные с математическим моделированием процессов на начальной стадии развития двойника, так как данная стадия во многом определяет характер дальнейшего развития двойника.

Целью данной работы стало изучение влияния поверхности на напряженное состояние у клиновидного зародыша двойника.

Клиновидные двойники чаще образуются у поверхности кристалла при деформировании ее инденторами или штампами. Поэтому изучение роли поверхности в формировании напряженно-деформированного состояния у клиновидного двойника имеет важное практическое значение.

Вектор Бюргерса двойникующих дислокаций может быть разложен на две составляющие: винтовую ($b_в$) и краевую ($b_{кр}$), так как двойникующие дислокации являются частичными дислокациями [1]. Для определения вклада краевой составляющей решим плоскую задачу теории упругости, для которой справедливо уравнение [14]:

$$\left.\begin{aligned} &u_1 = u_1(x_1, x_2), u_2 = u_2(x_1, x_2), u_3 = 0 \\ &\partial u_1/\partial x_3 = 0, \partial u_2/\partial x_3 = 0, \partial u_3/\partial x_3 = 0, \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

где u_i – смещения, x_i (i = 1, 2, 3 или x, y, z) – прямоугольные декартовы координаты.

Исходя из условий (1), можно получить дополнительные характеристики плоского деформированного состояния [14]:

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2}=0\\ \frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{22}}{\partial x_2}=0.\end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

Система (2) получена из условия равновесия [14]:

$$\frac{\partial\sigma_{i1}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{i2}}{\partial x_2}+\frac{\partial\sigma_{i3}}{\partial x_3}+f_i^V=0,$$

или в более сжатом виде

$$\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j}+f_i^V=0,$$

где f_i^V – i-я компонента объемной силы, действующей на единицу объема.

Уравнения (2) выполняются, если

$$\left.\begin{aligned}\sigma_{11}&=\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}\\ \sigma_{22}&=\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}\\ \sigma_{12}&=-\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1 x_2},\end{aligned}\right\}$$

где ψ – функция напряжений Эйри.

Дифференцированием соотношений Коши [14]:

$$\varepsilon_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \qquad (3)$$

можно получить уравнение совместимости для случая плоской деформации

$$\frac{\partial^2\varepsilon_{11}}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2\varepsilon_{22}}{\partial x_1^2}=2\frac{\partial^2\varepsilon_{12}}{\partial x_1\partial x_2}. \qquad (4)$$

Подставляя в (4) значения ε_{ij} из

$$\left.\begin{aligned}\varepsilon_{11}&=\frac{1}{E}\left[\sigma_{11}-\nu(\sigma_{22}+\sigma_{33})\right]\\ \varepsilon_{22}&=\frac{1}{E}\left[\sigma_{22}-\nu(\sigma_{11}+\sigma_{33})\right]\\ \varepsilon_{33}&=\frac{1}{E}\left[\sigma_{33}-\nu(\sigma_{11}+\sigma_{22})\right]\\ \varepsilon_{23}&=\frac{1}{2\mu}\sigma_{23}\\ \varepsilon_{31}&=\frac{1}{2\mu}\sigma_{31}\\ \varepsilon_{12}&=\frac{1}{2\mu}\sigma_{12}\end{aligned}\right\}$$

и, используя соотношения

$$\left.\begin{aligned}
E &= \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\mu+\lambda} = \frac{9\mu B}{3B+\mu} = 2\mu(1+\nu)\\
\nu &= \frac{3B-2\mu}{2(3B+\mu)} = \frac{\lambda}{2(\mu+\lambda)} = \frac{E-2\mu}{2\mu}\\
\mu &= \frac{E}{2(1+\nu)}\\
\lambda &= \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} = \frac{2\nu\mu}{1-2\nu},
\end{aligned}\right\}$$

где

$$B = \frac{1}{K},\ \ K = \frac{3}{3\lambda+2\mu},$$

(здесь λ – коэффициент Ламе; μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; E – модуль Юнга), получим [15]:

$$\frac{\partial^4\psi}{\partial x_1^4} + 2\frac{\partial^4\psi}{\partial x_1^2\partial x_2^2} + \frac{\partial^4\psi}{\partial x_2^4} = 0. \qquad (5)$$

Уравнение (5) может быть представлено в виде [14]:

$$\nabla^4\psi = \nabla^2(\nabla^2\psi) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)^2\psi = 0. \qquad (6)$$

Прямая краевая дислокация создает плоское деформированное состояние, определяемое условиями [14]:

$$u_z = 0,\ \ \frac{\partial u_i}{\partial z} = 0.$$

Для функции напряжений Эйри уравнение (6) в полярных координатах, для краевой дислокации примет вид [14]:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)^2\psi = \beta_1 r^{-1}\sin\theta, \qquad (7)$$

где β_1 – константа.

Частным решением уравнения (7) является [14]:

$$\psi_{\text{кр}} = \frac{\beta_1}{2} r\sin\theta\ln r. \qquad (8)$$

Для модуля вектора Бюргерса краевой составляющей двойникующей дислокации справедливо соотношение [14]:

$$b_{\text{кр}} = -\int_{-\infty}^{\infty}\left[\varepsilon_{xx}(x,\eta) - \varepsilon_{xx}(x,-\eta)\right]dx,$$

где $\eta \to 0$ и η положительно.

С учетом (6), из закона Гука получим [14]:

$$b_{\text{кр}} = -\frac{2\pi(1-\nu)}{\mu}\frac{\beta_1}{2},\ \beta_1 = -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)}.$$

Тогда функция напряжений (8) примет вид [14]:

$$\psi_{\text{кр}} = -\frac{\mu b_{\text{кр}} y}{4\pi(1-\nu)}\ln\left(x^2 + y^2\right). \quad (9)$$

Для решаемой задачи о клиновидном двойнике на мезоскопическом уровне из (9) получим:

$$\psi_{\text{кр}} = -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{4\pi(1-\nu)}\left(\sum_{n=0}^{N}(y+nh)\ln\left((x-nd)^2+(y+nh)^2\right)+\right.$$

$$\left.+\sum_{m=1}^{M}(y-mh)\ln\left((x-md)^2+(y-mh)^2\right)\right), \quad (10)$$

где n и m – индексы суммирования; d и h – проекции, соответственно, на оси OX и OY отрезка, соединяющего две соседние дислокации (рис. 2); N и M – число дислокаций на каждой из границ двойника.

Согласно работе [16], данная задача может быть поставлена и в смещениях $\vec{u}$ с помощью двухмерной δ-функции в виде

$$\Delta\vec{u} + \frac{1}{1-2\nu}\nabla\text{div}\vec{u} = \left[\vec{\tau}\vec{b}\right]\delta\left(\vec{\xi}\right), \quad (11)$$

где $\vec{\tau}$ – вектор касательной к линии дислокации; $\vec{\xi}$ – двумерный радиус-вектор, который в заданной точке отсчитывается от линии дислокации в перпендикулярной вектору $\vec{\tau}$ плоскости.

Для прямолинейной краевой дислокации, когда проекции на оси x, y и z равны $b_x = b_{\text{кр}}$, $b_y = b_z = 0$, уравнение (11) примет вид [16]:

$$\Delta\vec{u} + \frac{1}{1-2\nu}\nabla\text{div}\vec{u} = -b_{\text{кр}}\vec{j}\delta\left(\vec{r}\right), \quad (12)$$

где $\vec{j}$ – единичный вектор вдоль оси y.

Для определения вклада находящейся у поверхности краевой составляющей двойникующей дислокации в напряженное состояние решение уравнения (5) будем искать в виде [14]:

$$\psi = X(x)Y(y). \quad (13)$$

Подстановка (13) в (5) дает уравнение вида

$$\frac{\partial^4 X}{\partial x^4} + \frac{2}{Y}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{X}{Y}\frac{\partial^4 Y}{\partial y^4} = 0.$$

Для того чтобы переменные разделялись, $\left(\partial^2 Y/\partial y^2\right)/Y$ и $\left(\partial^4 Y/\partial y^4\right)/Y$ не должны зависеть от y. Поэтому функцию Y целесообразно искать в виде [14]:

$$Y = \alpha_0\sin k_0 y + \beta_0\cos k_0 y. \quad (14)$$

Тогда дифференциальное уравнение для X примет вид:

$$\frac{\partial^4 X}{\partial x^4} - 2k_0^2 \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + k_0^4 X = 0.$$

Решение этого уравнения [14]:

$$X = (\alpha_0 + \alpha_1 x)e^{k_0 x} + (\gamma_0 + \gamma_1 x)e^{-k_0 x}. \quad (15)$$

Используя условия [14]:

$$\gamma_0 = \gamma_1 = 0 \text{ при } X \to 0 \text{ и } x \to -\infty,$$

$$\alpha_0 = 0 \text{ при } \sigma_{xx}(0, y) = 0 \text{ и } X(0, y) = 0,$$

при суперпозиции выражений (14) и (15) получается окончательное решение [14]:

$$\psi = \int_0^\infty \alpha_0(k_0) x e^{k_0 x} \sin k_0 y dk_0, \quad (16)$$

где слагаемое, пропорциональное $\cos k_0 y$, опущено. Это связано с тем, что должны быть четными по y функции [14]:

$$\sigma_{xy}^{+}(0, y) = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)} \frac{l(l^2 - y^2)}{r^4};$$

$$\sigma_{xy}^{-}(0, y) = -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)} \frac{l(l^2 - y^2)}{r^4},$$

где

$$r = (l^2 + y^2)^{1/2},$$

l – расстояние от дислокации до поверхности.

Тогда граничное условие для $\sigma_{xy}(0, y)$ дает [14]:

$$-\sigma_{xy}(0, y) = \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}\right)_{x=0} = \int_0^\infty \alpha_0(k_0) k_0 \cos k_0 y dk_0 = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)} \frac{l(l^2 - y^2)}{(l^2 + y^2)^2}.$$

Проводя обратное преобразование Фурье, получим [14]:

$$k_0 \alpha_0(k_0) = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi^2(1-\nu)} \int_0^\infty \frac{l(l^2 - y^2)}{(l^2 + y^2)^2} \cos k_0 y dy.$$

Окончательно компоненты тензора напряжений у двойникующей дислокации, находящейся у поверхности, имеют вид [14]:

$$\sigma_{xx} = -\frac{2\mu b_{\text{кр}} l x y}{\pi(1-\nu) r^6} \left[3(l - x)^2 - y^2\right];$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b_{\text{кр}} l}{\pi(1-\nu) r^6} \left[4(l - x)^3 + 6xy(l - x)^2 + 4y^3(l - x) - 2xy^3\right];$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{\mu b_{\text{кр}} l}{\pi(1-\nu) r^6}\left[(l-x)^4 + 2x(l-x)^3 - 6xy^2(l-x) - y^4\right];$$

$$\sigma_{zz} = \frac{4\mu\nu b_{\text{кр}} l}{\pi(1-\nu) r^6}\left[y(l-x)^3 + y^3(l-x)\right]. \qquad (17)$$

Соотношения (17) могут быть использованы для расчета напряженного состояния у нанодвойника, находящегося у поверхности кристалла. Для этого произведем следующие замены: $l \to L - nd$, $y \to y - mh$ и $y \to y + mh$. Тогда с учетом представленного на рис. 1 схематического дислокационного изображения клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности, получим:

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

$$\left.+\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=1}^{N-1}\frac{(L-nd)x(y+mh)\left[3(L-nd-x)^2-(y+mh)^2\right]}{\left((L-nd-x)^2+(y+mh)^2\right)^3}\right];$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)}\left[\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{L-nd}{\left((L-nd-x)^2+(y-mh)^2\right)^3}\left(4(L-nd-x)^3+\right.\right.$$

$$\left.+6x(y-mh)(L-nd-x)^2+4(y-mh)^3(L-nd-x)-2x(y-mh)^3\right)+$$

$$+\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=1}^{N-1}\frac{L-nd}{\left((L-nd-x)^2+(y+mh)^2\right)^3}\left(4(L-nd-x)^3+\right.$$

$$\left.\left.+6x(y+mh)(L-nd-x)^2+4(y+mh)^3(L-nd-x)-2x(y+mh)^3\right)\right];$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)}\left[\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{L-nd}{\left((L-nd-x)^2+(y-mh)^2\right)^3}\left((L-nd-x)^4+\right.\right.$$

$$\left.+2x(L-nd-x)^3-6x(y-mh)^2(L-nd-x)-(y-mh)^4\right)+$$

$$+\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=1}^{N-1}\frac{L-nd}{\left((L-nd-x)^2+(y+mh)^2\right)^3}\left((L-nd-x)^4+\right.$$

$$\left.\left.+2x(L-nd-x)^3+6x(y+mh)^2(L-nd-x)-(y+mh)^4\right)\right];$$

$$\sigma_{zz} = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{\pi(1-\nu)}\left[\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{(L-nd)\left[(y-mh)(L-nd-x)^3+(y-mh)^3(L-nd-x)\right]}{\left((L-nd-x)^2+(y-mh)^2\right)^3}+\right.$$

$$\left.+\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=1}^{N-1}\frac{(L-nd)\left[(y+mh)(L-nd-x)^3+(y+mh)^3(L-nd-x)\right]}{\left((L-nd-x)^2+(y+mh)^2\right)^3}\right].$$

Аналогично не трудно показать, что

$$\sigma_{xz}=\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi}\left[\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{y-mh}{\left(x-L+nd\right)^2+\left(y-mh\right)^2}-\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=1}^{N-1}\frac{y+mh}{\left(x-L+nd\right)^2+\left(y+mh\right)^2}\right];$$

$$\sigma_{yz}=\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi}\left[\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{x-L+nd}{\left(x-L+nd\right)^2+\left(y-mh\right)^2}-\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=1}^{N-1}\frac{x-L+nd}{\left(x-L+nd\right)^2+\left(y+mh\right)^2}\right].$$

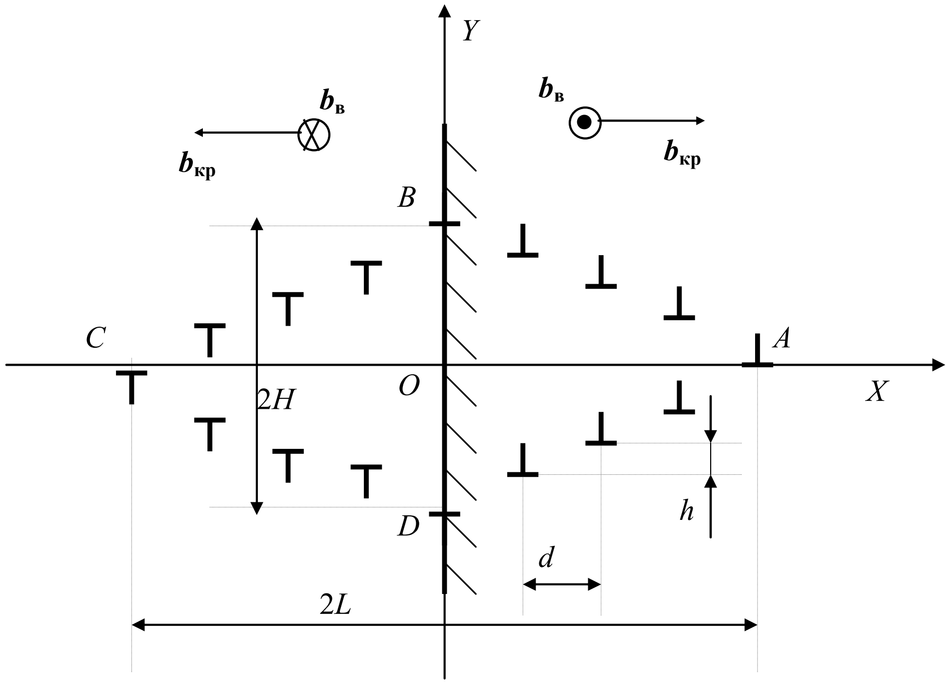

Рис. 1. Схематическое изображение распределения дислокаций в системе «клиновидный нанодвойник и нанодвойник-изображение»

Если пренебречь допущением того, что на поверхности кристалла должны равняться нулю напряжения, созданные двойником, находящимся у поверхности, можно получить приближенные соотношения для расчета напряжений в рассматриваемой задаче. Известно [14], что напряженное состояние у клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла, может быть найдено сложением напряжений двойникующих дислокаций клиновидного двойника и двойника-изображения, состоящего из дислокаций противоположного знака (рис. 2). Схематическое изображение взаимного расположения двойникующих дислокаций в такой совокупности двойников представлено на рис. 1. Пусть данные составляющие вектора Бюргерса будут направлены так, как это показано на рис. 1. Тогда исходя из соотношений для напряжений у единичной дислокации [14], используя принцип суперпозиции, не трудно показать, что для клиновидного зародыша двойника у поверхности кристалла справедливы следующие соотношения для компонент тензора напряжений:

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

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\frac{(y+nh)[3(x-nd+L)^2+(y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2+(y+nh)^2]^2}+$$

$$+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{(y-nh)[3(x+nd-L)^2+(y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2+(y-nh)^2]^2}-$$

$$\left.-\sum_{n=1}^{N}\frac{(y-nh)[3(x-nd+L)^2+(y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2+(y-nh)^2]^2}\right);$$

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

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\frac{(y+nh)[(x-nd+L)^2-(y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2+(y+nh)^2]^2}+$$

$$+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{(y-nh)[(x+nd-L)^2-(y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2+(y-nh)^2]^2}-$$

$$\left.-\sum_{n=1}^{N}\frac{(y-nh)[(x-nd+L)^2-(y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2+(y-nh)^2]^2}\right);$$

$$\sigma_{zz}=-\frac{\mu b_{\text{кр}}\nu}{2\pi(1-\nu)}\left(\sum_{n=0}^{N}\frac{y+nh}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}-\right.$$

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\frac{y+nh}{(x-nd+L)^2+(y+nh)^2}+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{y-nh}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}-$$

$$\left.-\sum_{n=1}^{N}\frac{y-nh}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}\right);$$

$$\sigma_{xy}=\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)}\left(\sum_{n=0}^{N}\frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2-(y+nh)^2]}{[(x+nd-L)^2+(y+nh)^2]^2}-\right.$$

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2-(y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2+(y+nh)^2]^2}+$$

$$+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{(x+nd-L)[(x+nd-L)^2-(y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2+(y-nh)^2]^2}-$$

$$\left.-\sum_{n=1}^{N}\frac{(x-nd+L)[(x-nd+L)^2-(y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2+(y-nh)^2]^2}\right);$$

$$\sigma_{xz}=-\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi}\left(\sum_{n=0}^{N}\frac{y+nh}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}-\right.$$

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\frac{y+nh}{(x-nd+L)^2+(y+nh)^2}+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{y-nh}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}-$$

$$\left.-\sum_{n=1}^{N}\frac{y-nh}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}\right);$$

$$\sigma_{yz} = \frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi}\left(\sum_{n=0}^{N}\frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2+(y+nh)^2}-\right.$$

$$-\sum_{n=0}^{N-1}\frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2+(y+nh)^2}+\sum_{n=1}^{N-1}\frac{x+nd-L}{(x+nd-L)^2+(y-nh)^2}-$$

$$\left.-\sum_{n=1}^{N}\frac{x-nd+L}{(x-nd+L)^2+(y-nh)^2}\right). \tag{18}$$

В суммах (18) учтено, что в точках A, B, C и D (рис. 2) может находиться только одна двойникующая дислокация.

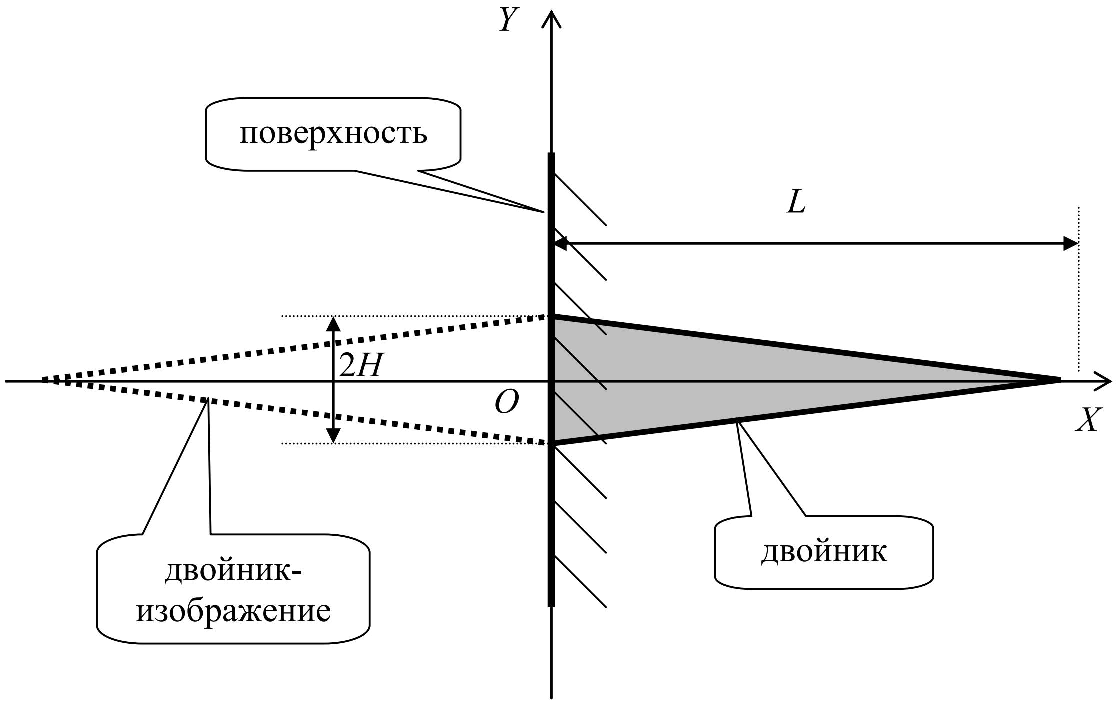

Рис. 2. Схематическое изображение взаимного расположения клиновидного механического нанодвойника, поверхности и двойника-изображения

Результаты расчетов представлены на рис. 3. Принималось: $0 < x < 30$, $-15 < y < 15$ (в мкм); $N = 100$; $d = 0{,}15$ мкм; $h = 0{,}05$ мкм. Для удобства вычислялись безразмерные величины:

$$\eta_{ij}(x,y) = \sigma_{ij}(x,y)\Big/\sigma_{ij}^{(0)}, \tag{19}$$

где

$$\sigma_{ij}^{(0)} = A_{ij}/L. \tag{20}$$

Здесь

$$A_{xx} = A_{yy} = A_{xy} = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)},\ A_{zz} = \frac{\mu\nu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)},\ A_{zx} = A_{zy} = \frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi}.$$

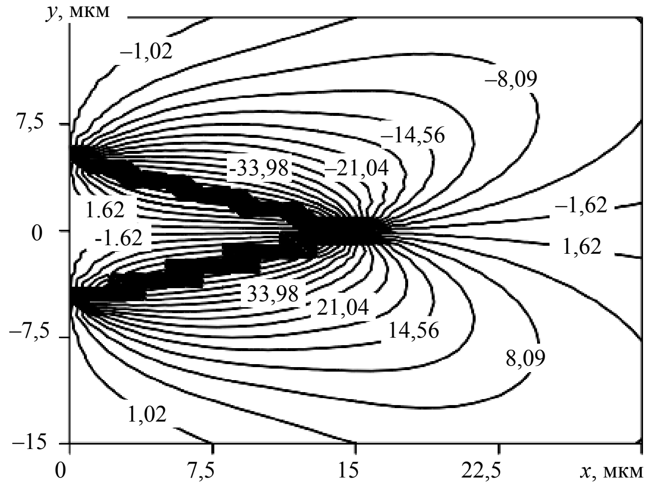

Рис. 3а. Распределение у клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности, характеризующего напряжения параметра η_{xx}

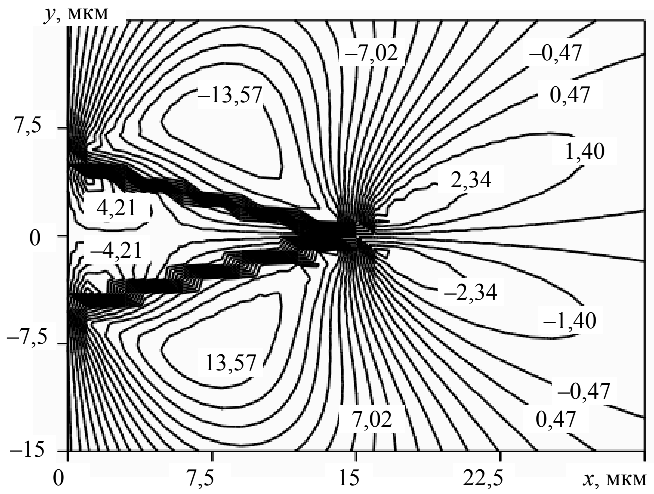

Рис. 3б. Распределение у клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности, характеризующего напряжения параметра η_{yy}

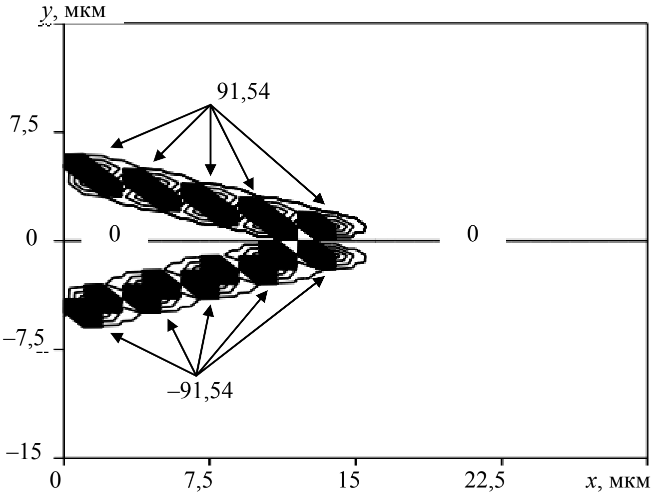

Рис. 3в. Распределение у клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности, характеризующего напряжения параметров η_{zz} и η_{xz}

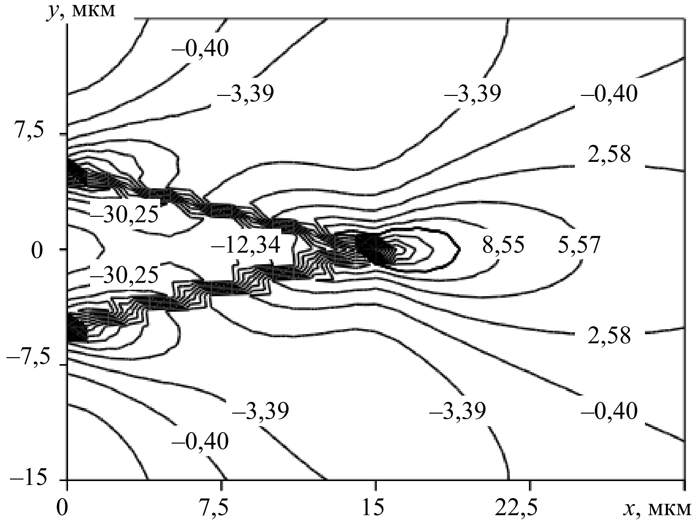

Рис. 3г. Распределение у клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности, характеризующего напряжения параметра η_{xy}

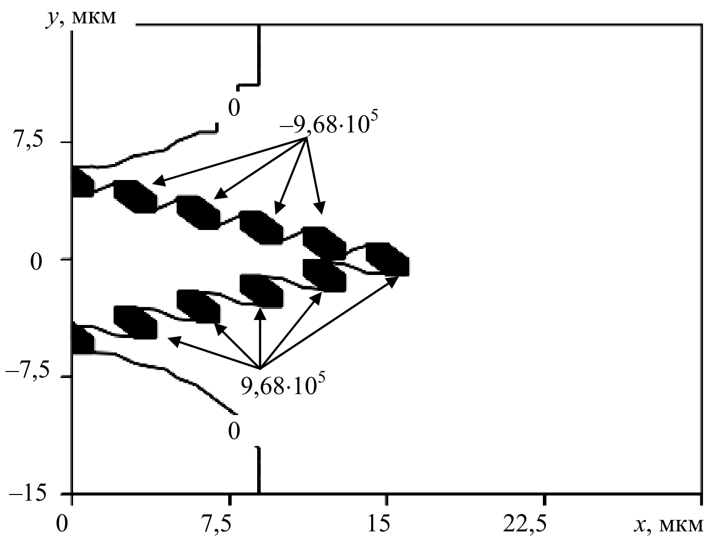

Рис. 3д. Распределение у клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности, характеризующего напряжения параметра η_{yz} (качественный эквивалент σ_{ij})

Из рис. 3 видно, что максимальные напряжения локализованы на двойниковых границах. Нормальные напряжения σ_{xx} знакопеременны относительно оси *OX* (рис. 3а). 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 нанодвойника. При сравнении конфигурации напряжений σ_{xx} у двойников, находящихся у поверхности и вдали от нее, следует отметить, что поверхность на данные напряжения существенного влияния не оказала.

Напряжения σ_{yy} знакопеременны не только относительно оси *OX*, границ двойника, но и относительно вершины двойника (рис. 3б). На данные напряжения, как и в предыдущем случае, поверхность существенного влияния не оказывает.

Заметно влияние поверхности на напряжения σ_{zz} и σ_{xz} (рис. 3в). В этом случае, по сравнению с нанодвойником, находящимся вдали от поверхности, напряжения локализуются у двойникующих дислокаций, не компенсируясь дальнодействующими напряжениями. Численное значение этих напряжений на порядок отличается от значений напряжений у нанодвойника вдали от поверхности. Общим в этом случае можно считать то, что у двойника у поверхности и вдали от нее, напряжения σ_{zz} и σ_{xz} знакопеременны относительно оси *OX* и вдоль нее равны нулю.

У поверхности также появляются изменения в конфигурации полей скалывающих напряжений σ_{xy} и σ_{yz} (рис. 3г и 3д). Напряжения σ_{xy} у клиновидного нанодвойника вдали от поверхности положительны внутри двойника и отрицательны снаружи, в то время как поверхность способствует перераспределению скалывающих напряжений σ_{xy} таким образом, что они положительны только у вершины двойникового клина. В случае напряжений σ_{yz} наблюдается их существенная локализация на двойниковых границах. При этом роль дальнодействующих напряжений σ_{yz} в общей картине напряжений снижается.

Следует отметить, что точность расчетов напряжений по формулам (18) достаточная, так как погрешность не превышает величину не учитываемых остаточных напряжений у пластически деформированной поверхности.

Таким образом, предложен способ расчета полей напряжений у клиновидного нанодвойника, находящегося у поверхности. Разработана дислокационная модель, позволяющая вести расчет напряжений у клиновидного двойника на таком масштабном уровне, когда возможен учет величины расстояния между двойникующими дислокациями. Показано, что поверхность не оказывает существенного влияния на конфигурацию полей нормальных напряжений у клиновидного нанодвойника. Это влияние существенно в случае скалывающих напряжений.

Литература

1. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – М. : АН СССР, 1960. – 262 с.
2. Полухин, П. И. Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – М. : Металлургия, 1982. – 584 с.
3. Остриков, О. М. Форма клиновидных двойников в локально деформируемых ионоимплантированных монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Сер. Черная металлургия. – 2006. – № 9. – С. 5–7.
4. Финкель, В. М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В. М. Финкель, В. А. Федоров, А. П. Королев. – Ростов н/Д, 1990. – 172 с.
5. 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.
6. 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.
7. Остриков, О. М. Особенности зарождения клиновидных двойников у отпечатка пирамиды Виккерса на поверхности (111) монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Материаловедение. – 2002. – № 1. – С. 17–20.

8. Савенко, В. С. Влияние импульсов тока на двойникование металлических кристаллов : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук / В. С. Савенко. – Минск, 1982. – 16 с.
9. Пинчук, А. И. Влияние электромагнитного поля на пластическую деформацию двойникованием кристаллов висмута : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук / А. И. Пинчук. – Минск, 1998. – 18 с.
10. Остриков, О. М. Двойникование ионно-имплантированных монокристаллов висмута : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук / О. М. Остриков. – Минск, 1999. – 17 с.
11. 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.
12. Остриков, О. М. Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О. М. Остриков // Вестн. Гомел. гос. техн. ун-та им. П. О. Сухого. – 2006. – № 2. – С. 10–18.
13. Остриков, О. М. Напряженное состояние у вершины клиновидного двойника / О. М. Остриков // Механика твердого тела. – 2004. – № 2. – С. 104–113.
14. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М. : Атомиздат, 1972. – 600 с.
15. Старовойтов, Э. И. Основы теории упругости, пластичности и вязкоупругости / Э. И. Старовойтов. – Гомель : БелГУТ, 2001. – 344 с.
16. Ландау, Л. Д. Теория упругости / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1987. – 246 с.

Получено 07.02.2012 г.