

УДК 538.3

**СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАВИСИМОСТИ
ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДВОЙНИКОВ
ОТ ВЕЛИЧИНЫ ВНЕШНЕЙ СОСРЕДОТОЧЕННОЙ НАГРУЗКИ**

*канд. физ.-мат. наук, доц. О.М. ОСТРИКОВ
(Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого)*

Разработан способ определения взаимосвязи между величиной сосредоточенной нагрузки и длиной клиновидного двойника при различных значениях его ширины. Установлено, что при малых нагрузках рост длины двойников происходит более медленно, чем при более высоких нагрузках. При более высоких нагрузках (более 25 МПа) зависимость длины двойника от внешнего деформирования приобретает линейный характер. Результаты получены с использованием дислокационной модели двойника, рассматриваемого на таком масштабном уровне, когда распределение двойникующих дислокаций на границах считается дискретным. На этом масштабном уровне энергия клиновидного двойника является суперпозицией упругой (или собственной) энергии, энергии взаимодействия двойникующих дислокаций и энергии дефекта упаковки. При этом не рассматривается поверхностная энергия границы двойника, так как на данном масштабном уровне понятие непрерывной границы раздела теряет смысл.

В настоящее время накоплен обширный экспериментальный материал по исследованию механического двойникования кристаллов методом локализованного дозированного деформирования поверхности [1] – [5]. Экспериментально были установлены основные закономерности развития клиновидных двойников в монокристаллах в зависимости от интенсивности внешнего деформирующего воздействия. Эти результаты требуют теоретического физического обоснования на основе современных представлений о двойниковании кристаллов.

Целью данной работы стал вывод математического соотношения, связывающего геометрические параметры двойников с величиной внешней сосредоточенной нагрузки для получения возможности ведения сравнительного анализа полученных экспериментальных и теоретических результатов.

В работе [6] был предложен способ расчета энергии клиновидного двойника, находящегося у поверхности кристалла. Согласно предложенному способу, энергия клиновидного двойника, приходящаяся на суммарную длину всех двойникующих дислокаций, определяется из соотношения:

$$\frac{W}{\sum L_0} = \frac{W_y}{\sum L_0} + \frac{W_{\text{вз}}}{\sum L_0} + \frac{\gamma}{\sum L_0}, \tag{1}$$

где $\frac{W_y}{\sum L_0}$ – упругая энергия двойникующих дислокаций, приходящаяся на суммарную длину всех двойникующих дислокаций; $\frac{W_{\text{вз}}}{\sum L_0}$ – энергия взаимодействия между двойникующими дислокациями; $\frac{\gamma}{\sum L_0}$ – энергия дефектов упаковки, так как двойникующие дислокации являются частичными дислокациями Шокли.

Вектор Бюргерса (\vec{b}) частичных дислокаций Шокли можно разложить на две составляющие: винтовую (\vec{b}_e) и краевую (\vec{b}_{kp}). Тогда упругая энергия двойникующих дислокаций, приходящаяся на суммарную длину всех двойникующих дислокаций, согласно проведенным в [6] расчетам определяется по формуле:

$$\frac{W_y}{\sum L_0} = \frac{\mu}{2\pi} \sum_{i=1}^{N-1} \left(b_e^2 \ln \frac{\alpha L - id}{b_e} + \frac{b_{kp}^2}{1-\nu} \ln \frac{\alpha L - id}{b_{kp}} \right) + \frac{\mu}{4\pi} \left(b_e^2 \ln \frac{\alpha L}{b_e} + \frac{b_{kp}^2}{1-\nu} \ln \frac{\alpha L}{b_{kp}} \right). \tag{2}$$

Здесь L – длина двойника; d – проекция на ось Ox отрезка R , соединяющего две соседние дислокации; μ – модуль сдвига; i – индекс суммирования; N – число двойникующих дислокаций на двойниковой границе.

Для перехода в (2) к макроскопическим параметрам в [6] использовалось соотношение:

$$d = \frac{L}{N-1}. \tag{3}$$

Энергия взаимодействия двойникоующих дислокаций в [6] определялась по формуле:

$$\frac{W_{вз}}{\sum L_0} = - \left[\frac{\mu}{\pi} \left(\frac{b_{kp}^2}{1-\nu} \sum_{i=1}^N N-i \ln \frac{i \sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}{b_{kp} N-1} + b_6^2 \sum_{i=1}^N N-i \ln \frac{i \sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}{b_6 N-1} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\mu}{2\pi} \left(\frac{b_{kp}^2}{1-\nu} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{jH + \sqrt{iL^2 + \left(\frac{2j+i}{2}H\right)^2}}{b_{kp} N-1} + b_6^2 \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{jH + \sqrt{iL^2 + \left(\frac{2j+i}{2}H\right)^2}}{b_6 N-1} \right) \right], \quad (4)$$

где H – ширина двойника у устья.

Доля энергии клиновидного двойника, связанная с наличием у двойникоующих дислокаций дефекта упаковки, находится по формуле [6]:

$$\frac{\gamma}{\sum L_0} = \frac{\mu b_{kp}^2 + b_6^2 N \sqrt{d^2 + h^2}}{2\pi (1-\nu) d_0} = \frac{\mu b_{kp}^2 + b_6^2 N}{2\pi (1-\nu) d_0 N-1} \sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}, \quad (5)$$

где d_0 – равновесная ширина расщепленной дислокации.

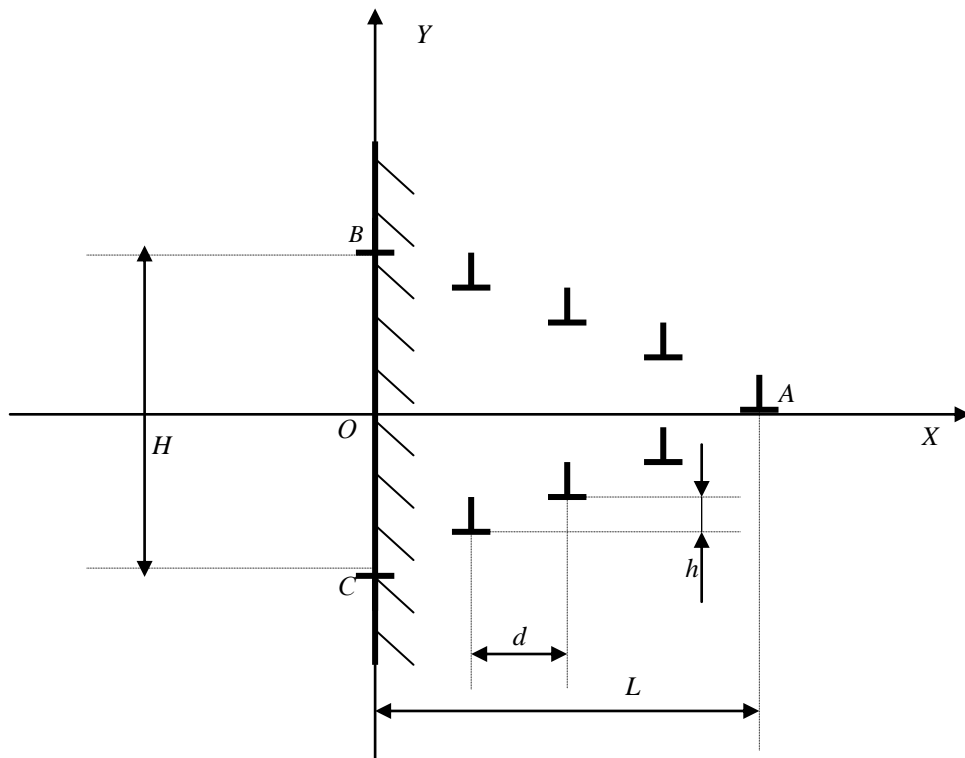


Рис. 1. Схематическое изображение взаимного расположения двойникоующих дислокаций в расчетной мезоскопической модели клиновидного двойника

Если в точке O на рисунке 1 вдоль оси OX действует сосредоточенная сила, то ее энергию можно рассчитать по формуле [7]:

$$U = \int U_0 dV, \quad (6)$$

где V – объем, а

$$U_0 = \frac{1}{2E} \sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2 - \frac{\mu}{E} \sigma_{xx} \sigma_{yy} + \frac{1}{G} \sigma_{xy}^2. \quad (7)$$

В данном соотношении компоненты тензора напряжений могут быть определены из выражений [8];

$$\sigma_{xx} = -\frac{2}{\pi} \left(\frac{y^2 Px + Qy}{x^2 + y^2} \right); \quad \sigma_{yy} = -\frac{2}{\pi} \left(\frac{x^2 Px + Qy}{x^2 + y^2} \right); \quad \sigma_{xy} = -\frac{2}{\pi} \left(\frac{xy Px + Qy}{x^2 + y^2} \right). \quad (8)$$

Если принять длину двойникующих дислокаций равной длине двойника L , то можно записать

$$\sum L_\delta = 2NL. \quad (9)$$

Тогда, если принять, что вся энергия деформирования идет на формирование двойника, справедливым становится равенство:

$$\frac{W}{\sum L_\delta} = \frac{W}{2NL} = \frac{U}{2NL}, \quad (10)$$

где

$$\frac{U}{2NL} = \frac{1}{2N} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty U_0(x, y) dx dy. \quad (11)$$

Тогда нетрудно показать, что при $Q=0$

$$P = \sqrt{\frac{\pi^2 H}{4aJ_p} \left(-\frac{W}{\sum L_\delta} (L, H) \right)}, \quad (12)$$

где

$$J_p = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[\frac{1}{2E} \frac{x^2(x^4 + y^4)}{(x^2 + y^2)^4} + \left(\frac{1}{\mu} - \frac{\nu}{E} \right) \frac{x^4 y^2}{(x^2 + y^2)^4} \right] dx dy. \quad (13)$$

Аналогично при $P=0$

$$Q = \sqrt{\frac{\pi^2 H}{4aJ_q} \left(-\frac{W}{\sum L_\delta} (L, H) \right)}, \quad (14)$$

где

$$J_q = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[\frac{1}{2E} \frac{y^2(x^4 + y^4)}{(x^2 + y^2)^4} + \left(\frac{1}{\mu} - \frac{\nu}{E} \right) \frac{x^2 y^4}{(x^2 + y^2)^4} \right] dx dy. \quad (15)$$

Результаты расчетов представлены на рисунке 2. Расчеты велись для двойника в кристалле железа. Принималось: $H = 5$ мкм; $N = 10^4$; $d_0 = 3$ нм; $E = 170$ ГПа; $\mu = 81$ ГПа; $\nu = 0,29$; $\alpha = 4$; $a = 0,25$ нм; $b_{кр} = b_\epsilon = 0,124$ нм. Было установлено, что $P = Q$ при различных значениях L и H .

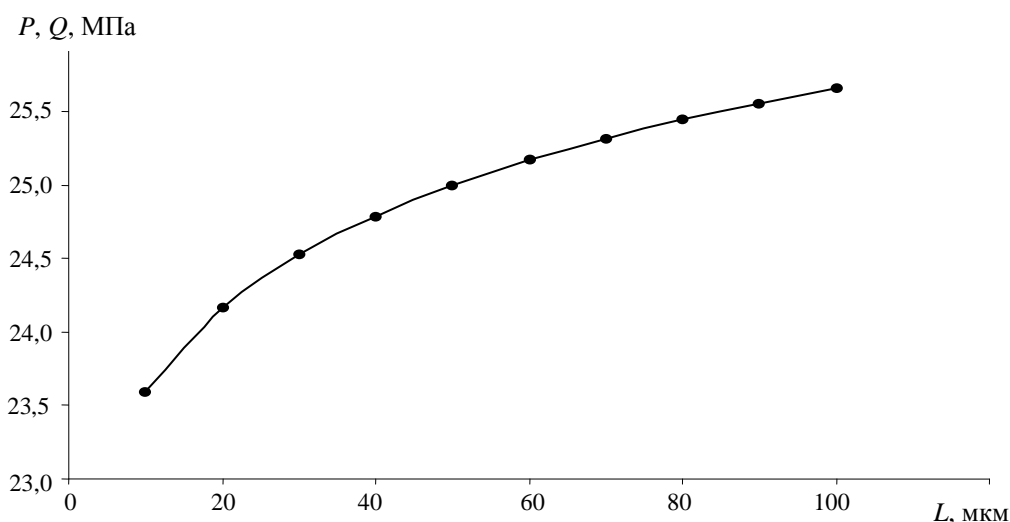


Рис. 2. Связь величины сосредоточенной нагрузки с длиной клиновидного двойника, полученная на основании расчета энергетического баланса

Из рисунка 2 видно, что с ростом величины сосредоточенной нагрузки длина двойника растет, что находится в хорошем согласии с известными экспериментальными данными [9 – 12]. При малых нагрузках рост длины двойников происходит более медленно, чем при более высоких нагрузках. Вероятно, это связано с большими энергетическими затратами на двойникование на начальных его стадиях из-за высокой роли на этом этапе энергии дефекта упаковки. При более высоких нагрузках (более 25 МПа) зависимость длины двойника от внешнего деформирования приобретает линейный характер. Это и наблюдается на эксперименте в исследуемом интервале нагрузок в рамках погрешности измерений [11].

Заключение. На основании энергетических расчетов получена связь между величиной сосредоточенной нагрузки и длиной клиновидного двойника при различных значениях его ширины. Установлено, что с ростом величины сосредоточенной нагрузки длина двойника увеличивается по приблизительно линейному закону, что хорошо согласуется с известными экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Классен-Неклюдова, М.В. Механическое двойникование кристаллов / М.В. Классен-Неклюдова. – М.: АН СССР, 1960. – 262 с.
2. Остриков, О.М. Закономерности развития клиновидных двойников в монокристаллах висмута, подвергнутых полисинтетическому двойникованию / О.М. Остриков // Прикладная механика и техническая физика. – 2008. – Т. 49, № 3. – С. 208 – 216.
3. 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.
4. 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.
5. Остриков, О.М. Влияние импульсов электрического тока на работу источников двойникоующих дислокаций в монокристаллах висмута / О.М. Остриков // Инженерно-физический журнал. – 1999. – Т. 72, № 3. – С. 592 – 594.
6. Остриков, О.М. Расчет энергии нанодвойника клиновидной формы в рамках дислокационной мезоскопической модели / О.М. Остриков // Журнал технической физики. – 2008. – Т. 78, № 2. – С. 58 – 62.
7. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
8. Джонсон, К. Механика контактного взаимодействия / К. Джонсон. – М.: Мир, 1989. – 510 с.
9. 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.
10. 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.
11. 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 // Журнал технической физики. – 2000. – Т. 70, № 12. – С. 39 – 42.
12. Косевич, В.М. Исследование двойникования металлических кристаллов с помощью сосредоточенной нагрузки / В.М. Косевич, В.И. Башмаков // Физика металлов и металловедение. – 1960. – Т. 9, № 2. – С. 288 – 293.

Поступила 31.10.2011

WAY OF DEFINITION OF DEPENDENCE OF GEOMETRICAL PARAMETRES OF TWINS FROM SIZE OF THE EXTERNAL CONCENTRATED LOADING

O. OSTRIKOV

The way of definition of interrelation between size of the concentrated loading and length wedge kind the twin is developed at various values of its width. It is established that at small loadings growth of length of twins occurs more slowly, than at higher loadings. At higher loadings (more than 25 МПа) dependence of length of the twin on external deformation gets linear character. Results are received with use dislocation model of the twin considered at such scale level when distribution twin dislocations on borders is considered discrete. At this scale level energy wedge kind the twin is superposition elastic (or own) energy, energy of interaction twin dislocations and energy of defect of packing. Thus superficial energy of border of the twin as at the given scale level the concept of continuous border of section loses meaning is not considered.