

УДК 548.24

ДИСЛОКАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ НЕТОНКОЙ ГРАНИЦЫ ДВОЙНИКОВОЙ ПРОСЛОЙКИ

канд. физ.-мат. наук **О.М. ОСТРИКОВ**

(Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого)

Развита теория границ остаточных двойников, а также границ раздела аустенит – мартенсит в материалах с памятью формы. Рассмотрены физические процессы, сопутствующие процессу роста двойниковых прослоек. Движение двойниковых границ рассмотрено на различных масштабных уровнях, использующих дискретное и непрерывное описание распределения двойникоующих дислокаций на движущейся двойниковой границе. Представлен энергетический анализ смещения двойниковых границ в призматических и цилиндрических образцах. Получены соотношения для расчета напряжений, смещений и деформаций у границы остаточной двойниковой прослойки. Выведено условие равновесия квазистатически движущейся двойниковой границы, позволяющее учитывать её форму.

Введение. В настоящее время интерес к двойникованию возрос в связи с тем, что оно является родственным явлением для бездиффузионных фазовых превращений в материалах с памятью формы, находящихся все более широкое практическое применение [1 – 3]. В области исследования двойникования и бездиффузионных фазовых превращений накоплен обширный экспериментальный материал, который дает исчерпывающее представление о физической сущности этих явлений. Однако теоретическое описание и математическое моделирование данных процессов еще требует развития. Основы теории двойникования были заложены в работах [4 – 6]. Развитие эта теория получила в работах [7 – 9] в направлении избавления от главного ее недостатка – приближения тонкого двойника, который ограничивал применимость теории к более широкому классу двойников, у которых ширина отличается от длины не более чем на один-два порядка, а не свыше трех порядков, как этого требует теория тонких двойников. Отсутствие необходимости использования приближения тонкого двойника привело к возможности моделирования явлений, протекающих внутри двойника. В частности, в работах [7 – 9] проведен расчет напряжений внутри клиновидного двойника, играющих важную роль в процессах массопереноса [10] и процессах междислокационного взаимодействия внутри двойника.

Открытие механических нанодвойников, у которых длина приблизительно равна ширине [11], а в отдельных случаях может быть и меньше ширины, потребовало развития теории двойникования другого масштабного уровня, когда неприменимо приближение непрерывного распределения двойникоующих дислокаций на двойниковых границах. В такой теории используются модели с дискретным распределением двойникоующих дислокаций [12; 13]. В работе [8] данные модели названы мезоскопическими, так как они занимают промежуточное положение между макроскопическими и атомными моделями двойникования. Ранее модели мезоскопического типа уже использовались, в частности в работе [14], но не для случая нанодвойникования.

В работе [15] модель тонкого двойника была применена к стадии остаточной двойниковой прослойки. До этой работы обсуждалось использование дислокационной модели только для упругой стадии двойникования или для остаточного двойника клиновидной формы [6]. В [15] рассматривалась одна из границ остаточной двойниковой прослойки с плоскопараллельными границами. Это завершающая стадия развития двойника, когда зародившиеся у одной поверхности двойникоующие дислокации выходят на противоположную поверхность кристалла. При этом формируется прослойка двойниковой ориентации, которая при снятии нагрузки может существовать в кристалле бесконечно долго. Под действием вновь приложенной нагрузки плоскопараллельные границы такой прослойки начинают смещаться по определенному закону, зависящему от структуры материала и способа его предварительной обработки. В настоящее время эта стадия двойникования представляет особый интерес, так как, например, в магнитных монокристаллах с памятью формы (сплавах Гейслера) именно эта стадия и определяет уникальное механическое поведение этих материалов, связанное с изменением их линейных размеров под действием внешней механической нагрузки или магнитного поля [1 – 3].

Целью данной работы стало развитие дислокационного описания движения границ остаточной двойниковой прослойки с позиций моделей нетонкого двойника.

Исходное состояние когерентной двойниковой границы. Под исходным состоянием когерентных двойниковых границ будем подразумевать статические плоскопараллельные границы остаточной двойниковой прослойки. Процессы, протекающие у границ на этой стадии, во многом определяют величину внешних напряжений, необходимых для начала роста двойниковой прослойки. Изучение этих процессов имеет важное значение с практической точки зрения. Так, например, в случае магнитных материалов с

памятью формы (сплавов Гейслера) подвижность двойниковых границ раздела аустенит – мартенсит определяет величину магнитного поля, необходимого для их смещения. Для улучшения характеристик узлов технических систем, использующих данные сплавы, интересно уменьшение величины магнитного поля, обеспечивающего необходимое перемещение границ, что может быть достигнуто увеличением подвижности двойниковых границ за счет изменения характера протекающих у них процессов.

На рисунке 1, а схематически изображена остаточная двойниковая прослойка с плоскопараллельными границами A_1A_2 и B_1B_2 . Пусть нагрузка P снята, и все двойникоующие дислокации вышли на поверхность. Тогда границы A_1A_2 и B_1B_2 в кристалле с идеальной структурой будут когерентными. Согласно [16], такая когерентная граница представляет собой плоский одноатомный дефект упаковки. Материнский материал на рисунке 1, а обозначен I, сдвойникованный материал – II. Такие же обозначения будем использовать и в математических формулах для обозначения принадлежности параметра или величины материнскому кристаллу или двойниковой прослойке.

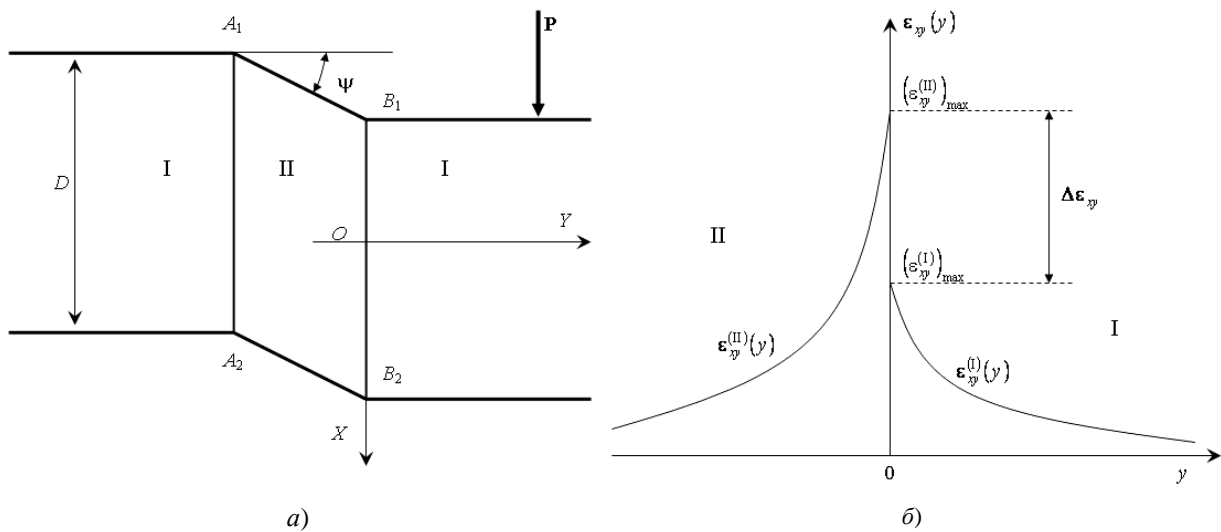


Рис. 1. Схематическое изображение остаточной двойниковой прослойки (а) с границами A_1A_2 и B_1B_2 и распределения сдвиговых деформаций у одной из двойниковых границ (б)

Наличие в сплошной среде границы раздела приводит к появлению на ней скачка деформаций $\Delta\epsilon_{ij}$ (i и j принимают значения x , y или z), несмотря даже на то, что по обе стороны границы материал имеет одинаковую структуру и химический состав. В этом случае скачок деформаций связан с анизотропией модулей упругости и изменением ориентировки выделенных кристаллографических направлений в результате поворота кристаллической решетки в процессе двойникования [4]. На рисунке 1, б точка $x=0$ находится на когерентной двойниковой границе. Тогда при

$$\Delta\epsilon_{xy} = (\epsilon_{xy}^{(II)})_{\max} > (\epsilon_{xy}^{(I)})_{\max} \quad (1)$$

скачок сдвиговых деформаций $\Delta\epsilon_{xy}$ на рассматриваемой границе может быть определен по формуле

$$\Delta\epsilon_{xy} = (\epsilon_{xy}^{(II)})_{\max} - (\epsilon_{xy}^{(I)})_{\max}, \quad (2)$$

где $(\epsilon_{xy}^{(I)})_{\max}$ и $(\epsilon_{xy}^{(II)})_{\max}$ – сдвиговые деформации на двойниковой границе со стороны материнского кристалла и со стороны сдвойникового объема соответственно (см. рис. 1, б).

Известно [16], что сдвиговые деформации связаны со сдвиговыми напряжениями с помощью соотношений типа

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(I)} &= 2\mu\epsilon_{xy}^{(I)}, \\ \sigma_{xy}^{(II)} &= 2\mu\epsilon_{xy}^{(II)}, \end{aligned} \quad (3)$$

где μ – модуль сдвига, который в нашем случае носит эффективный характер, чтобы избежать громоздких соотношений, приведенных в [4]. При этом погрешности, возникающие из-за использования приближения изотропной среды, будем учитывать в численных значениях величин $(\epsilon_{xy}^{(I)})_{\max}$ и $(\epsilon_{xy}^{(II)})_{\max}$.

Очевидно, что напряжения у двойниковой границы, вызванные скачком деформаций $\Delta\varepsilon_{xy}$, при удалении от границы будут монотонно убывающими (см. рис. 1, б). Это позволяет принять следующий закон убывания напряжений:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(I)} y &= 2\mu\varepsilon_{xy}^{(I)} y = \frac{2\mu(\varepsilon_{xy}^{(I)})_{max}}{y+1} \frac{1}{\lambda}, \\ \sigma_{xy}^{(II)} y &= 2\mu\varepsilon_{xy}^{(II)} y = \frac{2\mu(\varepsilon_{xy}^{(II)})_{max}}{y+1} \frac{1}{\lambda}, \end{aligned} \quad (4)$$

где λ – феноменологический параметр.

Закон (4) позволяет не прибегать к громоздким математическим выкладкам, которые были использованы в [4]. При этом результат (4) соответствует результатам, приведенным в [4]. Более того, в (4) с помощью величин $(\varepsilon_{xy}^{(I)})_{max}$ и $(\varepsilon_{xy}^{(II)})_{max}$ учтены и дополнительные силы поверхностного натяжения, которые в [15] оценены по формуле $\sigma \approx \alpha/r$, где α – поверхностная энергия, а r – параметр, имеющий значение 10^{-7} см.

После остановки двойниковых границ в начальный момент времени на них происходит тепловыделение за счет перехода кинетической энергии во внутреннюю энергию. Это приводит к появлению на двойниковой границе локального термического пика, который в свою очередь в результате термического расширения кристалла приводит к появлению термических напряжений. В металлах из-за их высокой теплопроводности данный термический пик существует доли секунды. Поэтому релаксация термических напряжений происходит очень быстро, но их роль высока в процессе взаимодействия двойниковых границ с дефектами кристаллической решетки на начальном этапе формирования равновесной формы остаточной двойниковой прослойки, когда состояние двойниковой границы нестабильно.

Распределение термических напряжений у границы находится по формуле [17]:

$$\sigma_{ij}^T = -K\alpha_T (T - T_0) \delta_{ij} + K\varepsilon_{ii} \delta_{ij} + 2\mu \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{ii} \right), \quad (5)$$

где α_T – коэффициент теплового расширения; T_0 – начальная температура кристалла; K – модуль всестороннего сжатия; T – температура кристалла, обусловленная остановкой двойниковой границы. Распределение этой температуры в плоском приближении может быть найдено с помощью криволинейного интеграла

$$T = \int_{L_{AB}} T_p ds, \quad (6)$$

который сводится к определенному интегралу

$$T(x, y, t) = \int_0^D \sqrt{1 + (f(\xi))^2} T_p(x, y, \xi, t) d\xi, \quad (7)$$

где [18]

$$T_p(x, y, \xi, t) = \frac{T_{max}}{4\pi a_T t} \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2 + (y-f(\xi))^2}{4a_T t}\right). \quad (8)$$

В (6) – (8) приняты следующие обозначения: L_{AB} – траектория, определяющая форму проекции двойниковой границы на плоскости XOY (см. рис. 1, а); T_p – температура точечного источника тепловыделения, находящегося на двойниковой границе; ds – линейный элемент проекции двойниковой границы; D – ширина образца; $f(\xi)$ – функция, описывающая форму двойниковой границы; ξ – параметр интегрирования; T_{max} – максимальная температура в термическом пике; a_T – коэффициент температуропроводности; t – время.

В общем случае форма двойниковой границы является функцией от времени, но при стационарном установившемся движении в связанной с границей системе координат эта форма в бездефектном кристалле практически не изменяется.

Наличие скачка $\Delta\varepsilon_{ii}$ нормальных деформаций на двойниковой границе приводит к активации процессов массопереноса, в ходе которых происходит перераспределение примесных атомов в зависимо-

сти от соотношения их радиусов и радиуса атомов матрицы. Концентрация примесных атомов возле двойниковой границы может быть рассчитана по формуле [19]

$$C(x, y) = C_0 \exp\left(-\frac{U(x, y)}{kT}\right), \quad (9)$$

где C_0 – концентрация примесей вдали от внутренних источников напряжений; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; U – энергия взаимодействия примесей с клиновидным двойником, которая находится по формуле [19]:

$$U(x, y) = -\frac{4}{3}\pi r^3 \varepsilon (\sigma_{xx}(x, y)) + (\sigma_{yy}(x, y) + \sigma_{zz}(x, y)), \quad (10)$$

где r – радиус атома матрицы; $\varepsilon = (r_0 - r)/r$ – малый параметр (r_0 – радиус атома легирующего компонента); σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{zz} – нормальные компоненты тензора напряжений, вызванных скачком нормальных деформаций на двойниковой границе.

Аналогично рассчитывается и распределение вакансий у двойниковой границы.

Наличие нормальных и сдвиговых напряжений, обусловленных двойниковой границей, изменяет и характер взаимодействия полных дислокаций, находящихся по обе стороны от границы. Дислокации одного знака притягиваются к границе двойника, а другого – отталкиваются от нее. В ходе этого процесса благоприятна аннигиляция дислокаций разного знака.

Распределение полных дислокаций у двойниковой границы может быть задано тензором плотности дислокаций, который, согласно [20; 21], определяется по формуле

$$\alpha_{ij} = \sum_q \tau_i^q b_j^q f^q, \quad (11)$$

где τ^q – единичный вектор, направленный по касательной к дислокационной линии; b^q – вектор Бюргера; f^q – функция распределения дислокаций; q обозначает систему скольжения, к которой принадлежит дислокация.

Учитывая, что плотность полных дислокаций связана с функцией их распределения формулой $\rho_d = \sum_q f^q$, из (11) следует [20; 21]

$$\rho_d = \sum_{ijq} (\tau_i^q b_j^q)^{-1} \alpha_{ij}. \quad (12)$$

Согласно данным работы [22], тензор плотности дислокаций связан с тензором пластической дисторсии β_{pj} соотношением

$$\alpha_{ij} = \varepsilon_{isp} \frac{\partial \beta_{pj}}{\partial x_s}. \quad (13)$$

С другой стороны, тензор пластической деформации связан с тензором пластической дисторсии по формуле [22]

$$\varepsilon_{ij}^p = \frac{1}{2}(\beta_{ij} + \beta_{ji}). \quad (14)$$

Тогда из (12) – (14) следует, что плотность полных дислокаций выше там, где больше величины пластической деформации. Известно [23], что пластическая деформация в двойникующихся материалах локализуется у двойниковых границ. Поэтому плотность полных дислокаций у границы двойника может быть описана экстремальной функцией с максимумом на границе раздела двойник – материнский кристалл или на границе раздела аустенит – мартенсит в материале с памятью формы.

В качестве примера такой функции можно привести

$$\rho_d(x, y) = \rho_0 A \int_0^D \sqrt{1 + f'(\xi)^2} \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2 + (y-f(\xi))^2}{B}\right) d\xi, \quad (15)$$

где ρ_0 – максимальная плотность дислокаций; A и B – феноменологические коэффициенты.

Таким образом, статическая граница двойниковой прослойки способствует увеличению у нее концентрации точечных и плотности линейных дефектов. Это приводит к уменьшению подвижности двой-

никовых границ. Рассматриваемый эффект зависит от времени нахождения двойниковой прослойки в неподвижном состоянии, так как миграция точечных и линейных дефектов в поле напряжений двойниковой границы является инертным процессом. С течением времени концентрация данных дефектов у границы растет, при этом растет и величина внешних напряжений, необходимых для смещения двойниковой границы из статического состояния.

Предел текучести двойниковых границ и дискретное дислокационное описание их движения. Понятие предела текучести двойниковых границ впервые было дано в работе [24]. При этом под пределом текучести σ_{ij}^m понимались сдвиговые напряжения, необходимые для смещения границ двойника на 1 мкм. Этим напряжениям соответствуют нормальные напряжения σ_{ii}^m , связанные со сдвиговыми напряжениями ориентационным фактором Шмида m_s следующим образом [25]:

$$\sigma_{ij}^m = m_s \sigma_{ii}^m. \quad (16)$$

Если принять за σ_{ij}^a сдвиговые напряжения, необходимые для смещения двойниковой прослойки на одно межатомное расстояние a в направлении, перпендикулярном двойниковой границе, можно записать

$$\sigma_{ij}^m = \kappa \sigma_{ij}^a, \quad i \neq j. \quad (17)$$

В данном соотношении для одной из двух границ двойниковой прослойки справедливо

$$\kappa = \frac{10^{-6} m}{2a}. \quad (18)$$

Величина σ_{ij}^a имеет важное значение для математического описания начальных стадий смещения границ остаточной двойниковой прослойки. Эта величина связана с нормальными напряжениями σ_{ii}^a , приложенными к образцу и приведшими к смещению границы на одно межатомное расстояние, соотношением $\sigma_{ij}^a = m_s \sigma_{ii}^a$.

Генерация первой петли двойнивающей дислокации у статической когерентной границы тесно связана с установившимися у нее описанными выше условиями. Наличие напряжений у границы раздела приводит к их локализации на неоднородностях, которые могут сформироваться с течением времени в результате диффузионных процессов, приведших к избыточной концентрации примесных атомов или вакансий, а также повышенной плотности полных дислокаций, обусловленных скачком деформаций на двойниковой границе. Как известно [21], локализация напряжений является необходимым условием для начала процесса генерации двойнивающих дислокаций.

Для начала генерации первой петли двойнивающей дислокации необходимы критические напряжения равные [16]

$$(\sigma_{ij}^a)_{max} = \frac{\alpha \mu b}{l}, \quad (19)$$

где α – безразмерный коэффициент ($0,5 < \alpha < 1,5$); b – модуль вектора Бюргера частичной двойнивающей дислокации; l – длина источника двойнивающей дислокации.

Как видно из формулы (19), определяющее значение в процессе генерации двойнивающих дислокаций имеет размер их источников. На этот параметр существенное влияние оказывают диффузионные и дислокационные процессы, протекающие у двойниковой границы. Миграция примесей, вакансий и полных дислокаций к статической двойниковой границе приводит к уменьшению l , а следовательно, и к увеличению $(\sigma_{ij}^a)_{max}$ и σ_{ij}^m . Так как указанные процессы инертны, то с увеличением времени выдержки кристалла со статической двойниковой прослойкой без нагрузки следует ожидать увеличение σ_{ij}^m .

Пусть под действием нагрузки \mathbf{P} в момент времени t_0 (рис. 2) на расстоянии a от статической когерентной границы в направлении оси OX (см. рис. 1, a) в несдвойникованной области зародилась двойнивающая дислокация, которая движется со скоростью \bar{v}_1 вдоль двойниковой границы в направлении оси OY (рис. 3, a). Через промежуток времени, равный $\Delta t_1 = D/v_1$ (рис. 2, a), дислокация выйдет на противоположную поверхность. Это приведет к полному смещению когерентной границы двойника на одно межатомное расстояние со скоростью $V_n = a/\Delta t_1$ (рис. 3, a). Зарождение новой двойнивающей дислокации произойдет через время Δt_1^{exp} . Данный цикл может повторяться N раз. При этом двойниковая граница сместится на расстояние Na .

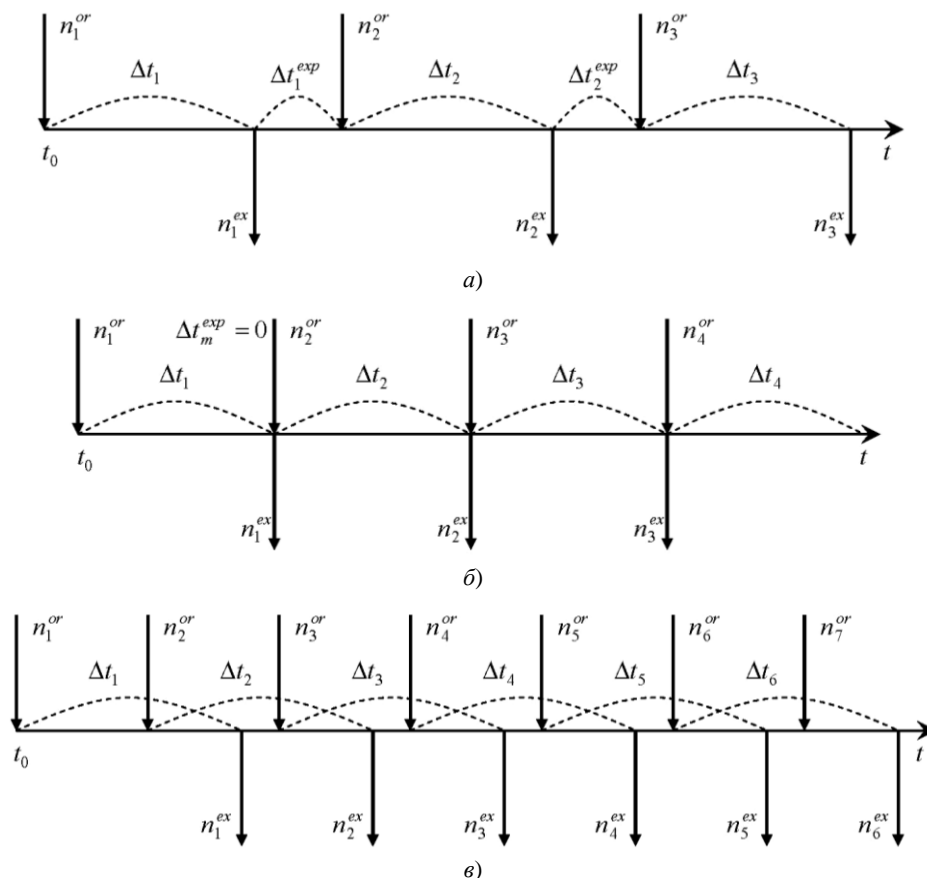


Рис. 2. Временные интервалы процессов генерирования и выхода на поверхность двойнивающих дислокаций, обеспечивающих движение двойниковой границы:

$a - \Delta t_i^{exp} \neq 0$; $b - \Delta t_i^{exp} = 0$; $v -$ за время выхода двойнивающей дислокации на поверхность на противоположной поверхности генерируется новая двойнивающая дислокация

Аналогично протекает процесс обратного смещения двойниковой границы в сторону сдвойниванного объема. Однако при этом двойнивающие дислокации зарождаются у границы в сдвойниванном объеме.

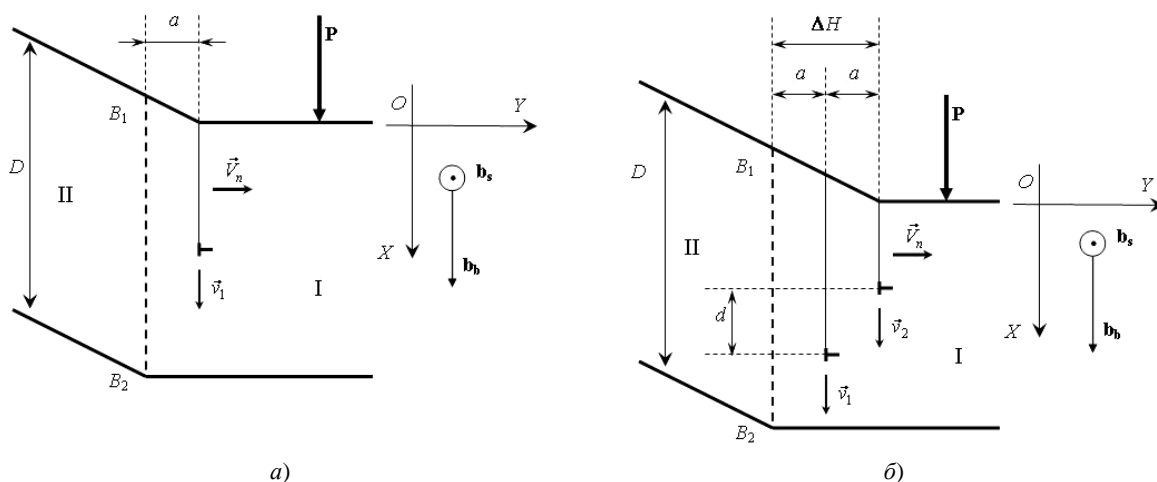


Рис. 3. Схематическое представление в плоскости, перпендикулярной плоскости двойнивания, процесса смещения двойниковой границы путем дискретного зарождения у деформируемой поверхности и движения к противоположной поверхности двойнивающих дислокаций:

$a -$ движение единичной двойнивающей дислокации и незавершенное смещение двойниковой границы на одно межатомное расстояние a ;
 $b -$ зарождение и движение второй двойнивающей дислокации до выхода на противоположную поверхность первой дислокации и незавершенное смещение двойниковой границы на два межатомных расстояния

Следует отметить, что на рисунке 2 на оси времени обозначениями n_m^{or} и n_m^{ex} (m – целое число) отмечены соответственно моменты времени зарождения и выхода на противоположную поверхность двойникующих дислокаций в процессе движения слабнекогерентной двойниковой границы.

Ситуация, когда $\Delta t_m^{exp} = 0$, показана на рисунке 3, б. За время Δt_m (до выхода на противоположную поверхность сгенерированной двойникующей дислокации) возможна генерация новой дислокации. Этот случай представлен на рисунке 2, б и рисунке 3, б. В результате при движении такая слабнекогерентная двойниковая граница будет состоять из двух двойникующих дислокаций. С увеличением количества двойникующих дислокаций, генерируемых за время Δt_m , растет степень некогерентности двойниковой границы. При высокой плотности двойникующих дислокаций на двойниковой границе целесообразен переход от дискретного к непрерывному дислокационному описанию ее движения.

Степень некогерентности η движущейся единичной границы двойниковой прослойки может быть определена по формуле

$$\eta = \frac{aN}{D} = \frac{\Delta H}{D}, \quad (20)$$

где N – число двойникующих дислокаций в движущейся двойниковой границе; ΔH – максимальное отклонение некогерентной границы от когерентной формы (см. рис. 3, б).

Увеличение степени некогерентности двойниковой границы приводит к росту создаваемых ею напряжений. При квазистатическом движении ($V_n \rightarrow 0$) такой границы, используя приближение дискретного дислокационного описания, пренебрегая поверхностными эффектами, с использованием методов, рассмотренных в [8], указанные напряжения, обусловленные только двойникующими дислокациями, могут быть рассчитаны по формулам:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(x, y) &= -\frac{\mu b_b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(y-na)[3(x-D+nd)^2 + (y-na)^2]}{[(x-D+nd)^2 + (y-na)^2]^2}, \\ \sigma_{yy}(x, y) &= \frac{\mu b_b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(y-na)[(x-D+nd)^2 - (y-na)^2]}{[(x-D+nd)^2 + (y-na)^2]^2} \\ \sigma_{zz}(x, y) &= -\frac{\mu b_b \nu}{2\pi(1-\nu)} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{y-na}{(x-D+nd)^2 + (y-na)^2} \\ \sigma_{xy}(x, y) &= \frac{\mu b_b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(x-D+nd)[(x-D+nd)^2 - (y-na)^2]}{[(x-D+nd)^2 + (y-na)^2]^2}, \\ \sigma_{xz}(x, y) &= -\frac{\mu b_s}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{y-na}{(x-D+nd)^2 + (y-na)^2}, \\ \sigma_{yz}(x, y) &= \frac{\mu b_s}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{x-D+nd}{(x-D+nd)^2 + (y-na)^2}, \end{aligned} \quad (21)$$

где b_b и b_s – соответственно краевая и винтовая составляющие двойникующей дислокации; ν – коэффициент Пуассона; n – индекс суммирования; d – проекция на ось OX (см. рис. 3, б) расстояния между двойникующими дислокациями, находящимися в соседних плоскостях.

Аналогично смещения u_i и деформации ε_{ij} в этом случае рассчитываются по формулам:

$$\begin{aligned} u_x(x, y) &= \frac{b_b}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\arctg \frac{y-na}{x-D+nd} + \frac{(x-D+nd) \cdot (y-na)}{2(1-\nu)((x-D+nd)^2 + (y-na)^2)} \right), \\ u_y(x, y) &= -\frac{b_b}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln((x-D+nd)^2 + (y-na)^2) + \frac{(x-D+nd)^2 - (y-na)^2}{4(1-\nu)((x-D+nd)^2 + (y-na)^2)} \right), \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} u_z(x, y) &= \frac{b_s}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \arctg \frac{y-na}{x-D+nd}; \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Учет роли поверхности приводит к более громоздким выражениям. При этом методика получения соотношений для расчета полей напряжений, смещений и деформаций аналогична той, с помощью которой были получены формулы (21) – (23).

Для расчета собственной упругой энергии единичной двойнивающей дислокации, зародившейся у когерентной двойниковой границы и развивающейся вдоль нее в соседней плоскости двойникования, необходимо рассмотрение случаев, представленных на рисунке 4. Для этого удобно использовать ограничения, связанные с формой образцов, в которых происходит процесс двойникования. Рассмотрим наиболее часто встречающиеся на практике варианты призматических и цилиндрических образцов. Такая форма образцов наиболее часто используется в экспериментах по изучению влияния нагрузок на поведение двойниковых прослоек или мартенситной фазы с подвижными границами [1 – 3; 21; 24].

В случае призматического образца (рис. 4, а, б, в) возможны три варианта зарождения и развития двойнивающей дислокации у когерентной двойниковой границы: зарождение двойнивающей дислокации у ребра (рис. 4, а), у грани (рис. 4, б) и вдали от ребер и граней (рис. 4, в) призматического образца. В цилиндрических образцах двойнивающие дислокации у когерентной двойниковой границы зарождаются либо у поверхности (рис. 4, з), либо вдали от нее (рис. 4, д).

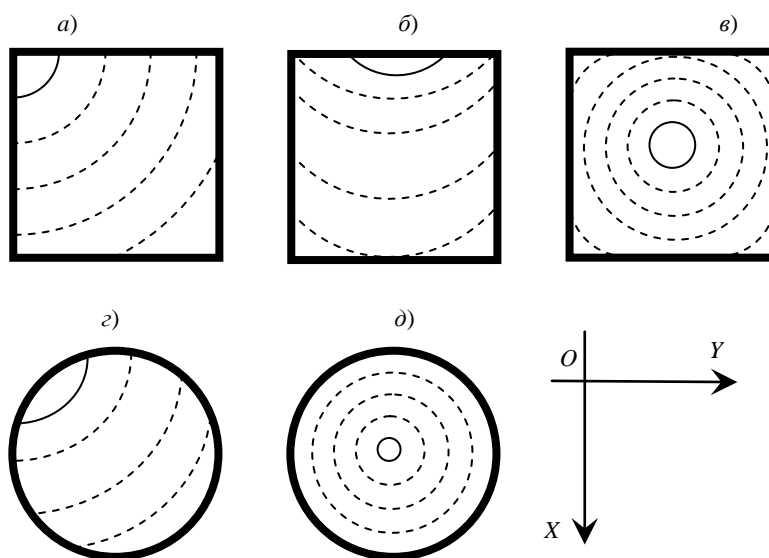


Рис. 4. Варианты зарождения и развития двойнивающей дислокации у когерентной двойниковой границы в плоскости, отстоящей от двойниковой границы на одно межатомное расстояние:

- а – двойнивающая дислокация зародилась у ребра призматического образца;
- б – двойнивающая дислокация зародилась у грани призматического образца;
- в – двойнивающая дислокация зародилась вдали от граней и ребер призматического образца;
- з – двойнивающая дислокация зародилась у поверхности цилиндрического образца;
- д – двойнивающая дислокация зародилась в цилиндрическом образце вдали от поверхности

В общем случае собственная энергия W_c двойнивающей дислокации определяется по формуле [16]:

$$W_c = \frac{\mu}{4\pi} \left[(\vec{b} \cdot \vec{\zeta})^2 + \frac{(\vec{b} \times \vec{\zeta})^2}{1-\nu} \right] L \ln \frac{L}{e\omega}, \quad (24)$$

где $\vec{\zeta}$ – единичный вектор, направленный вдоль линии двойнивающей дислокации; L – длина двойнивающей дислокации; $\omega = b/2\chi$ (здесь $\chi \approx 4$).

Из (24) следует, что [16]

$$W_c = \frac{\mu b^2}{4\pi} \left[\cos^2 \varphi + \frac{\sin^2 \varphi}{1-\nu} \right] L \ln \frac{L}{e\omega}, \quad (25)$$

где φ – угол между вектором Бюргерса и линией двойнивающей дислокации.

Тогда, учитывая, что

$$b = \sqrt{b_b^2 + b_s^2}, \quad \cos \varphi = \frac{b_s}{\sqrt{b_b^2 + b_s^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{b_b}{\sqrt{b_b^2 + b_s^2}}, \quad (26)$$

из (25) получим

$$W_c = \frac{\mu}{4\pi} \left[b_s^2 + \frac{b_b^2}{1-\nu} \right] L \ln \frac{L}{e\omega}. \quad (27)$$

Таким образом, видно, что W_c увеличивается с ростом L . Характер изменения L в процессе перемещения когерентной двойниковой границы существенно зависит от формы образца. Петля двойнивающей дислокации, находящейся у когерентной двойниковой границы, имеет длину $L = 2\pi R$ (здесь R – радиус окружности, образованной двойнивающей дислокацией). В общем случае длина полупетли двойнивающей дислокации равна $L = \beta R$ (β – центральный угол).

Если в призматическом образце двойнивающая дислокация зародилась у ребра призмы (рис. 4, а), имеющей квадратное сечение с длиной стороны D , то на начальном этапе роста дислокационной полупетли (рис. 5, а) ее длина может быть определена по формуле $L = \pi R/2$. Когда движущиеся по граням призмы концы полупетли достигают других ребер этих же граней, то длина двойнивающей дислокации равна $L = \pi D/2$. В данном случае это наибольшая длина двойнивающей дислокации. В этом состоянии дислокация имеет максимальную энергию, равную

$$W_{c \max} = \frac{\mu}{8} \left[b_s^2 + \frac{b_b^2}{1-\nu} \right] D \ln \frac{\pi D}{2e\omega}. \quad (28)$$

Далее концы полупетли переходят на другие грани призмы и угол β начинает уменьшаться ($\beta \rightarrow 0$), приводя к уменьшению собственной энергии двойнивающей дислокации по закону

$$W_c \beta \rightarrow 0 = \frac{\mu}{4\pi} \left[b_s^2 + \frac{b_b^2}{1-\nu} \right] \beta R \ln \frac{\beta R}{e\omega} \rightarrow 0. \quad (29)$$

Исчезновение двойнивающей дислокации происходит у ребра призмы, противоположного тому ребру, у которого дислокация зародилась. При этом происходит полное смещение когерентной двойниковой границы на одно межатомное расстояние.

Схожая картина наблюдается и тогда, когда сечением призмы является не квадрат, а прямоугольник. Отличие заключается в отсутствие одновременного перехода концов дислокационной полупетли на грани призмы, расположенных под углом к граням, по которым первоначально двигались концы дислокации.

При зарождении двойнивающей дислокации у грани призматического образца (см. рис. 4, б и рис. 5, б) на начальном этапе увеличения длины дислокационной полупетли наблюдается рост ее собственной энергии по закону (27) за счет увеличения параметра R . Когда концы дислокационной полупетли переходят на другие грани, ее длина становится равной $L = \pi R = \pi D/2$, а энергия принимает максимальное значение, определяемое по формуле (28). Это значение энергии сохраняется приблизительно постоянным до тех пор, пока дислокационная полупетля не достигнет грани призмы, противоположной той грани, у которой дислокация зародилась. Далее собственная энергия дислокации начинает уменьшаться за счет того, что последняя разделяется на две полупетли, длина которых уменьшается. Концы этих двух полупетель, двигаясь по расположенным под углом друг к другу граням призмы, устремляются к ее ребрам, где и завершается процесс выхода дислокации на поверхность. При этом двойниковая граница полностью смещается на одно межатомное расстояние.

При зарождении двойнивающей дислокации у когерентной двойниковой границы, но вдали от поверхности кристалла, формируется дислокационная петля с увеличивающимся с течением времени радиусом (см. рис. 4, в). Собственная энергия такой петли может быть рассчитана по формуле

$$W_c = \frac{\mu}{2} \left[b_s^2 + \frac{b_b^2}{1-\nu} \right] R \ln \frac{2\pi R}{e\omega}. \quad (30)$$

В случае образования петли у точки пересечения диагоналей квадратного сечения призматического образца максимальное значение эта энергия принимает при $R = D/2$.

Далее процесс связан с уменьшением W_c из-за разрывов дислокационной петли на поверхностях образца (рис. 4, в). Пример движения концов образовавшихся при этом дислокационных полупетель по граням призматического образца показан на рисунке 5, в.

Процессы образования и развития двойнивающих дислокаций у когерентной двойниковой границы в цилиндрических образцах (см. рис. 4, *з* и *д*) аналогичны случаям, имеющим место в призматических образцах и показанным на рисунке 4, *б* и *в*, а также на рисунке 5, *б* и *в*.

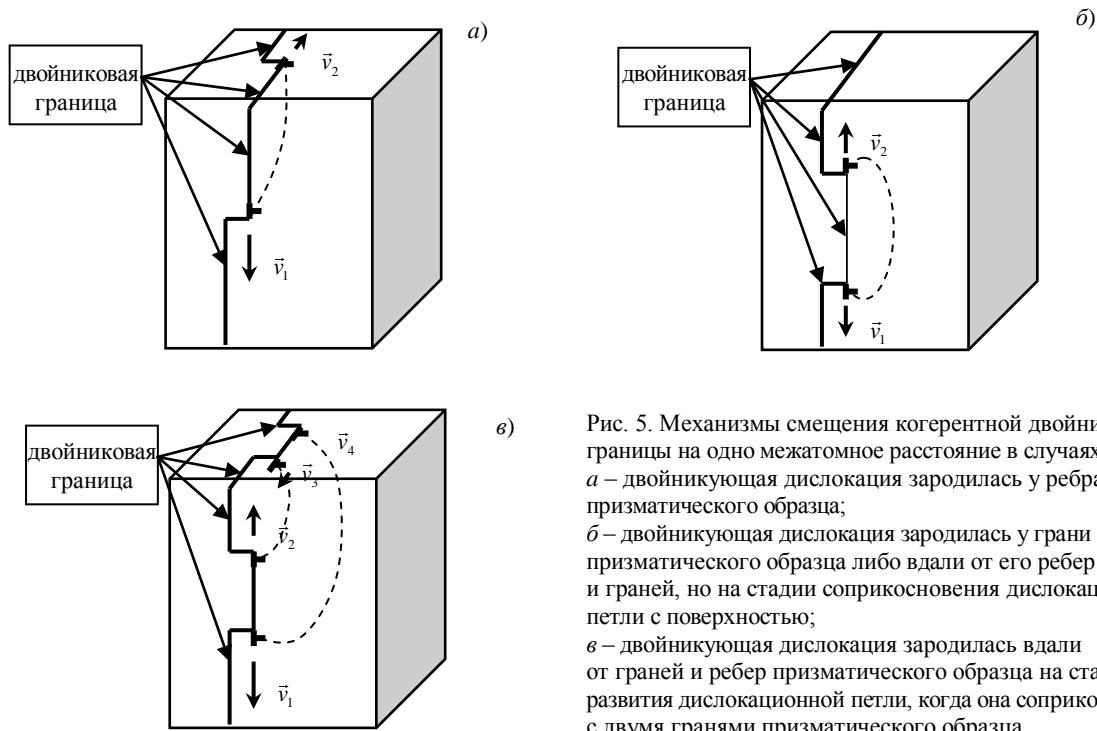


Рис. 5. Механизмы смещения когерентной двойниковой границы на одно межатомное расстояние в случаях: *а* – двойнивающая дислокация зародилась у ребра призматического образца; *б* – двойнивающая дислокация зародилась у грани призматического образца либо вдали от его ребер и граней, но на стадии соприкосновения дислокационной петли с поверхностью; *в* – двойнивающая дислокация зародилась вдали от граней и ребер призматического образца на стадии развития дислокационной петли, когда она соприкоснулась с двумя гранями призматического образца

Макроскопическое непрерывное дислокационное описание движения границы двойниковой прослойки. При малой подвижности или большой скорости генерации двойнивающих дислокаций, когда за время выхода на противоположную поверхность одной двойнивающей дислокации в соседних плоскостях генерируется достаточно большое количество двойнивающих дислокаций, чтобы их распределение вдоль двойниковой границы можно считать непрерывным, целесообразно использование приближения бесконечной малости расстояния между двойнивающими дислокациями и непрерывного их распределения на двойниковой границе. При установившемся движении границы с постоянной скоростью \vec{V}_n в бездефектном кристалле можно считать, что форма границы с течением времени не меняется и может быть описана функцией $f(\xi)$. В некоторый фиксированный момент времени обусловленные только двойнивающими дислокациями напряжения, создаваемые двойниковой границей, можно рассчитать по формуле

$$\sigma_{ij}(x, y) = \int_{\delta+a_0}^D \sqrt{1+(f'(\xi))^2} \rho(\xi) \sigma_{ij}^{(0)}(x, y, \xi) d\xi, \quad (31)$$

где ξ – параметр интегрирования; δ – величина ступеньки на поверхности кристалла, обусловленная отклонением двойниковой границы от когерентной формы; a_0 – глубина залегания источника двойнивающих дислокаций ($a_0 \approx 0$); $\rho(\xi)$ – плотность двойнивающих дислокаций на некогерентной двойниковой границе; $\sigma_{ij}^{(0)}(x, y, \xi)$ – напряжения, создаваемые единичной двойнивающей дислокацией, находящейся на двойниковой границе. Расчетные формулы для определения $\sigma_{ij}^{(0)}(x, y, \xi)$ представлены в работах [6–9].

Используя подходы и методы, приведенные в [6], в квазистатическом приближении при $\Delta H \ll D$ условие равновесия некогерентной двойниковой границы может быть представлено в виде:

$$b_b \sigma_{xy}(x, 0) + b_s \sigma_{xz}(x, 0) - G x + S(x) + b_b \sigma_{xy}^e(x, 0) + b_s \sigma_{xz}^e(x, 0) = 0, \quad (32)$$

где $G(x)$ – сила притяжения двойнивающей дислокации к поверхности; $S(x)$ – сила сопротивления движению двойнивающих дислокаций, определяющая характер пластической деформации (аналог силы трения); σ_{xy}^e и σ_{xz}^e – внешние упругие напряжения на оси OX .

Учитывая (31), условие (32) примет вид

$$\int_{\delta+a_0}^D \sqrt{1+(f'(\xi))^2} \cdot \rho \cdot \xi \cdot \frac{(x-\xi)(b_b B_b + b_s B_s)}{f^2(\xi) + (x-\xi)^2} d\xi - \int_{\delta+a_0}^D \sqrt{1+(f'(\xi))^2} \cdot \rho(\xi) \cdot \frac{(x+\xi)(b_b B_b + b_s B_s)}{f^2(\xi) + (x+\xi)^2} d\xi - 2b_b B_b \int_{\delta+a_0}^D \sqrt{1+(f'(\xi))^2} \cdot \rho(\xi) \cdot \frac{f^4(\xi) - 6xf^2(\xi)(x+\xi) + (x-\xi)(x+\xi)^3}{(f^2(\xi) + (x+\xi)^2)^3} \xi d\xi = F(x), \tag{33}$$

где $B_b = \frac{\mu b_b}{2\pi(1-\nu)}$; $B_s = \frac{\mu b_s}{2\pi}$; $F(x) = G(x) - S(x) - b_b \sigma_{xy}^e(x, 0) - b_s \sigma_{xz}^e(x, 0)$.

Вводя обозначения

$$K_1(x, \xi) = \frac{(x-\xi)(b_b B_b + b_s B_s)}{f^2(\xi) + (x-\xi)^2},$$

$$K_2(x, \xi) = \frac{(x+\xi)(b_b B_b + b_s B_s)}{f^2(\xi) + (x+\xi)^2},$$

$$K_3(x, \xi) = b_b B_b \frac{f^4(\xi) - 6xf^2(\xi)(x+\xi) + (x-\xi)(x+\xi)^3}{(f^2(\xi) + (x+\xi)^2)^3},$$

условие (33) можно записать в компактной форме:

$$\int_{\delta+a_0}^D \sqrt{1+(f'(\xi))^2} \cdot \rho(\xi) \cdot (K_1(x, \xi) - K_2(x, \xi) - \xi K_3(x, \xi)) d\xi = F(x). \tag{34}$$

Рассматриваемое условие равновесия двойниковой границы может быть дополнено соотношением [6]:

$$\int_{a_0}^D \rho(x) dx = \frac{\delta}{b_b} = \frac{\gamma}{b_s}, \tag{35}$$

где γ – сдвиг вдоль оси OZ , направленной перпендикулярно плоскости (рис. 6).

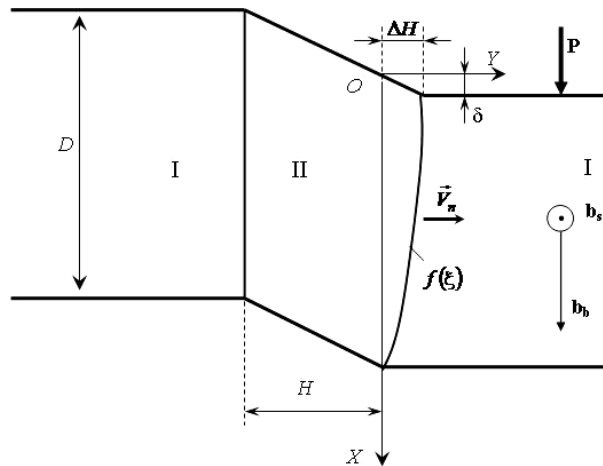


Рис. 6. Иллюстрация движения границы двойниковой прослойки в случае большой плотности двойнивающих дислокаций и непрерывного их распределения на двойниковой границе

Известно [15; 21] также, что

$$\Delta H(x) = a \int_x^D \rho(\xi) d\xi. \tag{36}$$

Полагая, что $f(\xi) = \Delta H \xi$, получим

$$\rho(x) = \frac{1}{a} \frac{d(\Delta H(x))}{dx} = \frac{1}{a} \frac{df(x)}{dx}. \quad (37)$$

В случае линейной функции $f(x)$ из (37) получим

$$\rho = \frac{\Delta H}{aD}. \quad (38)$$

Приведенные условия вместе с уравнением непрерывности [15]

$$\rho(x)v_m(x) = \frac{1}{a}V_n \quad (39)$$

полностью описывают стационарное движение границы двойниковой прослойки.

Заключение. Результатом проведенного исследования явилась дислокационная модель движения границы двойниковой прослойки (или границы раздела аустенит – мартенсит в материале с памятью формы). При этом использовано дискретное и непрерывное описание расположения двойникующих дислокаций на двойниковой границе.

Получены соотношения для расчета полей напряжений, смещений и деформаций у некогерентной и слабнекогерентной границы двойниковой прослойки.

Дано физическое описание ряда явлений, наблюдаемых у границы двойника. Рассмотрена энергетика процесса смещения когерентной двойниковой границы в результате движения вдоль нее двойникующих дислокаций. Получено условие равновесия некогерентной двойниковой границы, позволяющее учитывать ее форму. Это позволило продолжить развитие дислокационного описания движения границ остаточных двойниковых прослоек.

Автор выражает благодарность научному руководителю «AdaptaMat» (Финляндия, Хельсинки) А.Л. Соzinову за участие в обсуждении отдельных результатов данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase / A. Sozinov [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2002. – V. 80, № 10. – P. 1746 – 1748.
2. 6 % magnetic-field-induced strain by twin-boundary motion in ferromagnetic Ni-Mn-Ga / S.J. Murray [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2000. – V. 77. – P. 886 – 888.
3. Large magnetic-field-induced strains in Ni₂MnGa single crystals / K. Ullakko [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1996. – V. 69. – P. 1966 – 1968.
4. Лифшиц, И.М. О макроскопическом описании явления двойникового кристаллов / И.М. Лифшиц // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1948. – Т. 18, № 12. – С. 1134 – 1143.
5. Cottrell, A.H. A mechanism for the growth of deformation twins in crystals / A.H. Cottrell, B.A. Bilby // Phil. Mag. – 1951. – V. 42. – P. 573 – 581.
6. Косевич, А.М. О дислокационной модели двойникового / А.М. Косевич, Л.А. Пастур // Физика твердого тела. – 1961. – Т. 3, № 4. – С. 1291 – 1297.
7. Остриков, О.М. Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О.М. Остриков // Вестн. ГГТУ им. П.О. Сухого. – 2006, № 2. – С. 10 – 18.
8. Остриков, О.М. Механика двойникового твердых тел: моногр. / О.М. Остриков. – Гомель: УО «Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого», 2008. – 301 с.
9. Остриков, О.М. Учет формы границ клиновидного двойника в его макроскопической дислокационной модели / О.М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 2008. – Т. 106, № 5. – С. 471 – 476.
10. Остриков, О.М. Расчет распределения примеси и потоков ее миграции у клиновидного двойника на основании макроскопической дислокационной модели / О.М. Остриков // Изв. НАН Беларуси. Сер. физ.-техн. наук. – 2009. – № 4. – С. 62 – 65.
11. Остриков, О.М. Нанодвойникование монокристаллов висмута / О.М. Остриков // Изв. Высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2002. – № 3. – С. 51 – 52.
12. Остриков, О.М. Дислокационная модель нанодвойника / О.М. Остриков // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2008, № 5. – С. 124 – 129.

13. 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.
14. Финкель, В.М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В.М. Финкель, В.А. Федоров, А.П. Королев. – Ростов н/Д, 1990. – 172 с.
15. Бойко, В.С. Дислокационное описание движения границ остаточного двойника / В.С. Бойко // Физика твердого тела. – 1980. – Т. 22, № 4. – С. 1066 – 1071.
16. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
17. Ландау, Л.Д. Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1987. – 246 с.
18. Лариков, Л.Н. Структура и свойства металлов и сплавов. Диффузия в металлах и сплавах: справочник / Л.Н. Лариков, В.И. Исайчев. – Киев: Наук. думка, 1987. – 512 с.
19. Физика кристаллов с дефектами / А.А. Предводителев [и др.]. – М.: МГУ, 1986. – 240 с.
20. Ханнанов, Ш.Х. Модель идеальной релаксации термоупругих напряжений при выращивании монокристаллов / Ш.Х. Ханнанов, С.П. Никаноров, С.И. Баходдин // Физика твердого тела. – 2003. – Т. 45, № 6. – С. 1020 – 1023.
21. Косевич, А.М. Дислокации в теории упругости / А.М. Косевич. – Киев: Наук. думка, 1978. – 220 с.
22. Киселев, С.П. Внутренние напряжения в твердом теле с дислокациями / С.П. Киселев // Прикладная механика и техническая физика. – 2004. – Т. 45, № 4. – С. 131 – 136.
23. Лаврентьев, Ф.Ф. Взаимодействие дислокаций в цинке, висмуте и сурьме при двойниковании / Ф.Ф. Лаврентьев // Физика металлов и металловедение. – 1964. – Т. 18, № 3. – С. 428 – 436.
24. Гарбер, Р.И. Механическое двойникование кальцита / Р.И. Гарбер // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1940. – Т. 10, № 3. – С. 354 – 257.
25. Полухин, П.И. Физические основы пластической деформации / П.И. Полухин, С.С. Горелик, В.К. Воронцов. – М.: Металлургия, 1982. – 584 с.

Поступила 05.01.2013

DISLOCATION MODEL OF NOT THIN BORDER OF TWIN LAYERS

O. OSTRIKOV

The theory of borders of residual twins, and also interface of austenit/martensit in materials with memory of the form is developed. The physical processes accompanying the process of growth of twin layers are considered. Movement of twin borders is considered at various scale levels using the discrete and continuous description of distribution of twin dispositions on moving twin border. The power analysis of displacement of twin borders in prismatic and cylindrical samples is presented. Parities for calculation of pressure, displacement and deformations at border of residual twin layers are received. The balance condition of causetatic moving twin borders is deduced. The condition allows to consider the form of twin borders.