УДК 548.24

О.М. ОСТРИКОВ

КИНЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД В МОДЕЛИ ЕДИНИЧНЫХ ДВОЙНИКОВ КЛИНОВИДНОЙ ФОРМЫ

На основе известных экспериментальных данных впервые предложена модель, описывающая кинетику развития единичного некогерентного двойника клиновидной формы. Впервые получены кинетические уравнения для единичного двойника. Модель позволила вывести соотношения для расчета длительности процесса развития двойника и нормальной скорости его роста. Установлено, что время формирования единичного двойника прямо пропорционально мощности источника двойникующих дислокаций и обратно пропорционально скорости генерации двойникующих дислокаций. Нормальная скорость роста двойника связана со временем по экспоненциальному закону.

Введение

В настоящее время интерес к двойникованию возрос в связи с исследованием физических свойств материалов с памятью формы [1] – [3]. Это свойство памяти формы полностью обеспечивается родственным двойникованию явлением, называемым бездиффузионным фазовым мартенситным превращением. Процессы на границе раздела мартенсита и аустенита аналогичны процессам на двойниковой границе. Поэтому в приближении равенства модулей упругости мартенсита и аустенита, как и в случае приближения изотропности среды по обе стороны двойниковой границы, для количественного описания явления памяти формы с успехом может быть использована теория двойникования [4].

При своем развитии двойники проходят стадию клиновидной или линзовидной формы [5]. При этом линзовидную форму, как это было показано в работе [4], можно представить совокупностью двух клиновидных двойников одинаковой ширины у устья и развивающихся из одной точки в противоположных направлениях. Таким образом, исследование клиновидной формы двойников является общим случаем, который может быть применен в случае линзовидного двойника. Рост двойников существенно зависит от процесса генерации частичных двойникующих дислокаций. Этот процесс имеет много общего с кинетическими, например, химическими реакциями и может быть описан аналогичными уравнениями [6]. Поэтому целью работы является обоснование математической модели процесса генерации двойникующих дислокаций.

Основная часть

Представим процесс генерирования двойникующих дислокаций как параллельную кинетическую реакцию, протекающую на двух двойниковых границах (рис. 1). Предположим, что в деформируемом твердом теле активировался источник двойникующих дислокаций, который испускает

Электронный архив библиотеки МГУ имени А.А. Кулешова

$N_и$ двойникующих дислокаций. Эти дислокации сформировали две двойниковые границы. При этом на формирование первой границы расходовалось N_1 дислокаций источника, а на образование второй границы – N_2 двойникующих дислокаций.

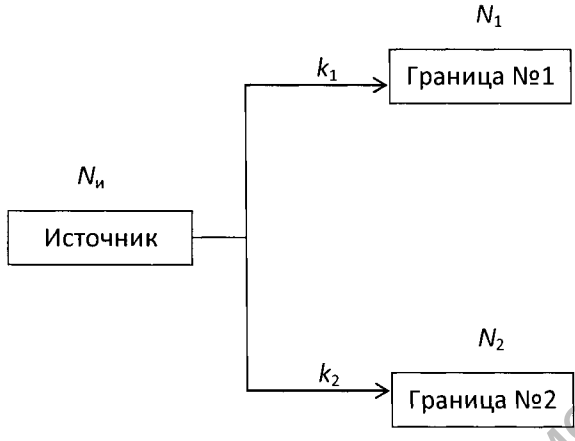

Рис. 1. Схематическое изображение параллельной кинетической реакции развития двойника клиновидной формы

Такой процесс можно описать следующей системой кинетических уравнений (по аналогии с [6]):

$$\begin{cases} \dfrac{dN_и}{dt} = -(k_1 + k_2)N_и \\ \dfrac{dN_1}{dt} = k_1 N_и + \alpha_1 N_1 + \beta_1 N_1^{3/2} - \gamma_1 N_1^2 \\ \dfrac{dN_2}{dt} = k_2 N_и + \alpha_2 N_2 + \beta_2 N_2^{3/2} - \gamma_2 N_2^2 \end{cases}, \qquad (1)$$

где t – время, а k_1 и k_2 имеют физический смысл скоростей генерации двойникующих дислокаций на первой и второй границе двойника соответственно; α_1 и α_2 – коэффициенты размножения двойникующих дислокаций на неоднородностях структуры у первой и второй границы двойника соответственно; β_1 и β_2 – коэффициенты размножения двойникующих дислокаций на первой и второй двойниковой границе; γ_1 и γ_2 – коэффициенты аннигиляции двойникующих дислокаций на первой и второй границе двойника соответственно.

Систему уравнений (1) для бесконечно большого количества дислокаций аналогичным образом можно записать не для числа, а для плотности двойникующих дислокаций и их источников. Пренебрегая процессами размножения двойникующих дислокаций на двойниковых границах и на неоднородностях структуры кристалла, а также процессом аннигиг-

Электронный архив библиотеки МГУ имени А.А. Кулешова

ляции двойникующих дислокаций из системы (1) получим систему линейных кинетических уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{dN_и}{dt} = -(k_1 + k_2) N_и, \\ \dfrac{dN_1}{dt} = k_1 N_и, \\ \dfrac{dN_2}{dt} = k_2 N_и. \end{cases} \tag{2}$$

Разделяя переменные в первом уравнении системы (2), интегрируя правую и левую часть, получим:

$$\int_{(N_и)_{max}}^{N_и} \frac{dN_и}{N_и} = -\int_0^t (k_1 + k_2)\, dt, \tag{3}$$

где $(N_и)_{max}$ – максимальное число двойникующих дислокаций в источнике.

После интегрирования (3) получим

$$N_и(t) = (N_и)_{max}\, e^{-(k_1+k_2)t}. \tag{4}$$

Приняв в (4) $t = t_{дв}$, где $t_{дв}$ – время формирования двойника клиновидной формы или время генерации источником двойникующих дислокаций, получим

$$N_и(t_{дв}) = \delta = (N_и)_{max}\, e^{-(k_1+k_2)t_{дв}}, \tag{5}$$

где δ – величина, характеризующая истощение источника двойникующих дислокаций. Примем $\delta = 1$, т.е. пусть источник прекращает генерацию двойникующих дислокаций, когда в нем остается одна двойникующая дислокация. Тогда из (5) получим

$$t_{дв} = \frac{(N_и)_{max}}{k_1 + k_2}. \tag{6}$$

Согласно экспериментальным данным [7] среднее время образования двойника длиной около 100 мкм в сурьме $t_{дв} =$ 0,8 с. Для двойника с шириной у устья $H =$ 20 мкм в монокристалле сурьмы, имеющем в плоскости, перпендикулярной плоскости двойникования, межатомное расстояние $a = 2 \cdot 10^{-10}$ м, скорость генерации двойникующих дислокаций будет иметь величину $k = k_1 + k_2 = 1{,}25 \cdot 10^5$ с$^{-1}$.

Из второго и третьего уравнений системы (2) получим

$$dN_1 = k_1 N_и dt, \tag{7}$$

$$dN_2 = k_2 N_и dt. \tag{8}$$

Электронный архив библиотеки МГУ имени А.А. Кулешова

Подставляя в (7), (8) выражение для $N_и$ из (4), получим

$$dN_1 = k_1 \left(N_и\right)_{\max} e^{-(k_1+k_2)t} dt\,, \tag{9}$$

$$dN_2 = k_2 \left(N_и\right)_{\max} e^{-(k_1+k_2)t} dt\,. \tag{10}$$

Интегрируя (8) и (9), имеем

$$N_1(t) = \frac{k_1 \left(N_и\right)_{\max}}{k_1 + k_2}\left[1 - e^{-(k_1+k_2)t}\right], \tag{11}$$

$$N_2(t) = \frac{k_2 \left(N_и\right)_{\max}}{k_1 + k_2}\left[1 - e^{-(k_1+k_2)t}\right]. \tag{12}$$

Соотношения (11) и (12) с учетом (4) могут быть представлены в виде:

$$N_1(t) = \frac{k_1}{k_1 + k_2}\left[\left(N_и\right)_{\max} - N_и(t)\right], \tag{13}$$

$$N_2(t) = \frac{k_2}{k_1 + k_2}\left[\left(N_и\right)_{\max} - N_и(t)\right]. \tag{14}$$

Отношение (11) к (12), или (13) к (14) дает

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{k_1}{k_2}. \tag{15}$$

Из (15), в частности, следует, что если скорости генерации двойникующих дислокаций на обоих двойниковых границах равны ($k_1 = k_2$), то и количество дислокаций на этих границах будет одинаковым ($N_1 = N_2$). Такие двойники, как правило, в бездефектной области кристалла при заклинивании имеют границы прямолинейной формы [8]. Если же $k_1 \neq k_2$, то на границе, на которой скорость генерации двойникующих дислокаций выше, их число будет больше, что приводит к приобретению границей выпуклой формы [8]. На другой же границе будет наблюдаться вогнутость [8].

Известно [9], что число двойникующих дислокаций на границах клиновидного двойника связана с его шириной следующими соотношениями

$$N_1 = \frac{H_1}{a},\ N_2 = \frac{H_2}{a}, \tag{16}$$

где H_1 и H_2 – геометрические параметры двойника, представленные на рис. 2. Из рис. 2 очевидно, что ширина клиновидного двойника у устья равна

$$H = H_1 + H_2. \tag{17}$$

Нетрудно показать, что из (16) и (17) следует

$$N_и = N_1 + N_2. \tag{18}$$

Электронный архив библиотеки МГУ имени А.А. Кулешова

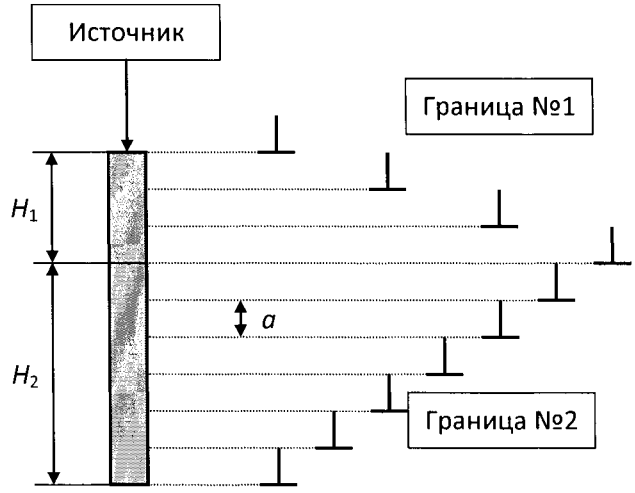

Рис. 2. Схематическое изображение источника двойникующих дислокаций и границ клиновидного двойника в виде совокупности двойникующих дислокаций

Используя соотношения (16) – (18) и (11), (12) для нормальной (перпендикулярной направлению движения вершинной дислокации двойникового клина) скорости роста рассматриваемого двойника получаем

$$V_n = \frac{dH}{dt} = a\frac{dN_и}{dt} = a\frac{d}{dt}\left(N_1(t) + N_2(t)\right) = a\left(N_и\right)_{\max}\left(k_1 + k_2\right)e^{-(k_1+k_2)t}. \quad (19)$$

При $k_1 = k_2 = k$ из (19) имеем

$$V_n = 2ak\left(N_и\right)_{\max} e^{-2kt}. \quad (20)$$

Из (19) и (20) следует, что нормальная скорость роста клиновидного двойника не является постоянной величиной, а в зависимости от времени убывает по экспоненциальному закону.

Из (20) не трудно получить формулу для расчета стартовых скоростей двойникующих дислокаций. Для этого нужно принять $t = 0$. Тогда

$$V_n = 2ak\left(N_и\right)_{\max}, \quad (21)$$

или, учитывая (16) – (18),

$$V_n = 2kH. \quad (22)$$

Для рассмотренного выше двойника шириной у устья 20 мкм из (22) получим V_n = 5 м/с, что соответствует известным экспериментальным данным [9], [10].

Таким образом, используя принцип аналогии кинетических реакций, получены уравнения кинетики дислокационных процессов при формировании двойника клиновидной формы. С использованием данных уравнений получены формулы для расчета времени процесса двойникования и нормальной скорости роста двойника.

Электронный архив библиотеки МГУ имени А.А. Кулешова

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase / A. Sozinov [et all.] // 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 all.] // Appl. Phys. Lett. – 2000. – V. 77. – P. 886–888.
3. Large magnetic-field-induced strains in Ni_2MnGa single crystals / K. Ullakko [et all.] // Appl. Phys. Lett. – 1996. – V. 69. – P. 1966–1968.
4. ***Остриков, О.М.*** Механика двойникования твердых тел : монография / О.М. Остриков. – Гомель : УО "ГГТУ им. П.О. Сухого", 2008. – 301 с.
5. ***Солдатов, В.П.*** Механизм расширения двойниковой прослойки в кристаллах кальцита / В.П. Солдатов, В.И. Старцев, Н.М. Чайковская // Физика твердого тела. – 1971. – Т. 13. – № 11. – С. 3153–3159.
6. ***Стромберг, А.Г.*** Физическая химия / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко. – М. : Высш. шк., 1988. – 496 с.
7. ***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.
8. ***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.
9. ***Косевич, А.М.*** Дислокационная теория упругого двойникования кристаллов / А.М. Косевич, В.С. Бойко // Успехи физических наук. – 1971. – Т. 104. – № 2. – С. 101–255.
10. ***Солдатов, В.П.*** Механизм расширения двойниковой прослойки в кристаллах кальцита / В.П. Солдатов, В.И. Старцев, Н.М. Чайковская // Физика твердого тела. – 1971. – Т. 13. – № 11. – С. 3153–3159.

Поступила в редакцию 01.02.2012 г.

Электронный архив библиотеки МГУ имени А.А. Кулешова