

УДК 539.21

ВЛИЯНИЕ ЕДИНИЧНОГО КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА НА НАПРЯЖЕННОЕ СОСТОЯНИЕ, ОБУСЛОВЛЕННОЕ КРИВОЛИНЕЙНЫМИ ГРАНИЦАМИ ЗЕРНА ПОЛИКРИСТАЛЛА

Т. В. ДРОБЫШЕВСКАЯ

аспирант

Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого

О. М. Остриков

кандидат физико-математических наук, доцент

Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого

Изучено напряженное состояние, обусловленное формой и структурой границ зерна поликристалла, а также единичным клиновидным остаточным микродвойником в рассматриваемом зерне. Рассмотрено влияние на напряженное состояние таких факторов, как форма и дислокационная модель зеренных границ, а также наличие в теле зерна клиновидного двойника. Выявлено, что в случае отсутствия двойника в центре зерна локализация напряжений не наблюдается. Установлено, что форма границ зерна влияет на напряженное состояние в случае их моделирования в виде стенок полных дислокаций. Установлено, что единичный клиновидный двойник оказывает существенное влияние на распределение полей напряжений.

Ключевые слова: клиновидный двойник, зерно поликристалла, поля напряжений

Введение

Современные исследования подтверждают, что влияние на напряженное состояние поликристаллических материалов, а, соответственно, и на их деформационное поведение оказывают все виды дефектов кристаллической решетки. Однако одну из важнейших ролей в этом играют зеренные границы. Изучив влияние формы и структуры зеренных границ, а также взаимодействия зернограницных дислокаций с двойникующими на напряженное состояние зерен поликристалла, можно прогнозировать и предупреждать разрушения деталей машин, как в процессе их обработки, так и в процессе их использования.

Целью данной работы стало изучение напряженного состояния, обусловленного формой и структурой границ зерна поликристалла, а также единичным клиновидным микродвойником в рассматриваемом зерне.

Постановка задачи. Объектом данного исследования является напряженное состояние в шестиугольном зерне поликристалла, расположенном вдали от поверхности двойникующегося материала. Изучаемое напряженное состояние в целом обусловлено многими критериями. В данном исследовании рассмотрим

© Дробышевская Т. В., 2017

© Остриков О. М., 2017

влияние следующих факторов: форма зеренных границ (прямолинейные, выпуклые и вогнутые), дислокационная модель зеренных границ (стенка либо цепочка полных дислокаций), а также наличие в теле зерна единичного клиновидного двойника (рисунки 1 и 2). С целью недопущения громоздкости решения не будем учитывать напряжения, создаваемые концентратором напряжений у устья двойника, а также напряжения, обусловленные другими зернами поликристалла.

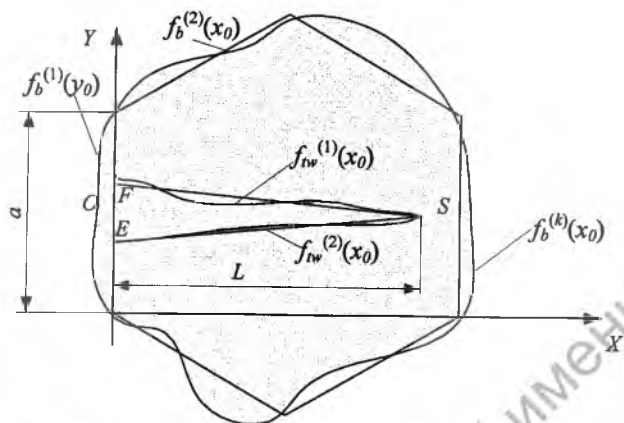


Рис. 1 – Схематическое изображение зерна поликристалла и клиновидного двойника в нем

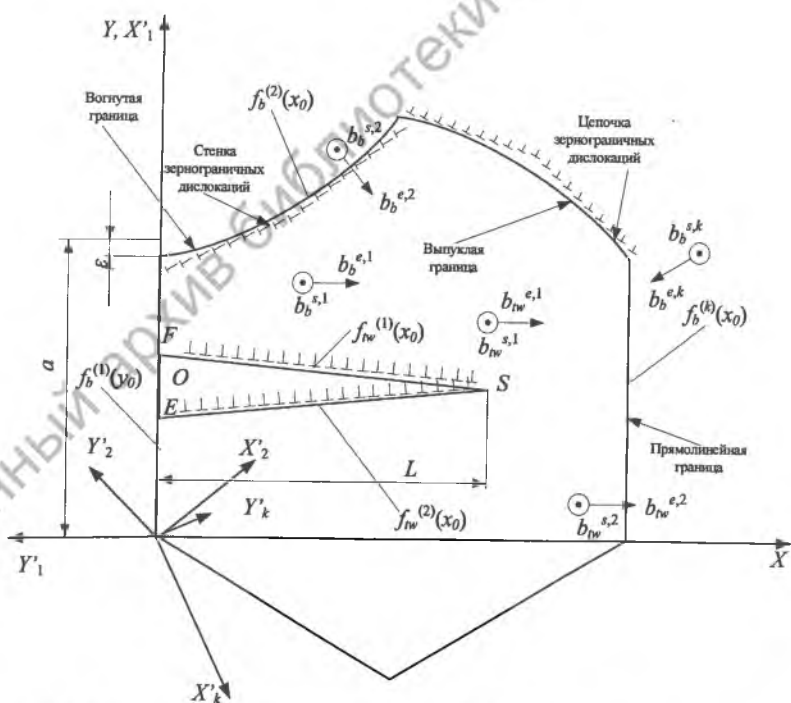


Рис. 2 – Схема взаимного расположения дислокаций, формы и структуры зеренных границ, компонент вектора Бюргерса и декартовых систем координат для расчета полей напряжений в зерне поликристалла

Компоненты тензора напряжений, характеризующего изучаемое напряженное состояние в зерне поликристалла, в соответствии с принципом суперпозиции [1] могут быть определены по формуле

$$\sigma_{ij} = \left(\sum_{m=1}^2 (\sigma_{ij}^{(m)})_{tw} (x, y) \right) + \left(\sum_{k=1}^6 (\sigma_{ij}^{(k)})_b (x, y) \right). \quad (1)$$

Здесь m – номер двойниковой границы; k – номер зеренной границы; i, j принимают значения x, y или z ; $(\sigma_{ij}^{(m)})_{tw} (x, y)$ и $(\sigma_{ij}^{(k)})_b (x, y)$ – напряжения, создаваемые двойниковыми и зеренными границами соответственно.

В ходе расчетов принимали, что дислокации на каждой из рассматриваемых границ параллельны друг другу и оси OZ , перпендикулярной плоскости рисунка 1.

Напряжения, создаваемые двойниковыми и зеренными границами, определяем как криволинейные интегралы вдоль профилей соответствующих границ. В рассматриваемом шестиугольном зерне прямолинейные границы описываются следующими уравнениями:

$$f_b^{(1)}(y_0) = 0, \quad (2)$$

$$f_b^{(2)}(x_0) = \frac{a \cdot x_0}{2 \operatorname{tg}(\alpha_k)} \quad (3)$$

$$f_b^{(k)}(x_0) = f_b^{(k-1)}(a - (\sin(\alpha_2) + \dots + \sin(\alpha_{k-1}))) - \frac{x_0 - a - (\sin(\alpha_2) + \dots + \sin(\alpha_{k-1}))}{\operatorname{tg}(\alpha_k)}, \quad (4)$$

где a – длина зеренной границы, α_k – угол поворота k -й зеренной границы относительно 1-й. Данные параметры определяем следующим образом:

$$a = 2R \sin\left(\frac{\pi}{6}\right), \quad (5)$$

$$\alpha_k = \pi - \frac{2\pi}{3}(k-1), \quad (6)$$

где R – радиус вписанной в зерно окружности; n – число граней у зерна.

В случае криволинейных (выпуклых и вогнутых) зеренных границ их уравнения описываются следующими уравнениями:

$$f_b^{(k)}(y_0) = C_{xk} \pm \sqrt{R_b^2 - (y_0 - C_{yk})^2}, \quad (7)$$

$$f_b^{(k)}(x_0) = C_{yk} \mp \sqrt{R_b^2 - (x_0 - C_{xk})^2}, \quad (8)$$

где C_{xk}, C_{yk} – координаты центра кривизны k -й зеренной границы; R_b – радиус кривизны зеренной границы. Для зерна с вогнутыми границами верхний знак применяется для границ 1, 2, 3, а нижний – для границ 4, 5, 6; для зерна с выпуклыми границами применение знаков обратное. Координаты центра кривизны k -й зеренной границы определяются из соотношений:

$$C_{xk} = a(\sin(\alpha_1) + \dots + \sin(\alpha_{k-1})) + \frac{a}{2} \sin(\alpha_k) + \cos(\alpha_k) \sqrt{R_b^2 - \left(\frac{a}{2}\right)^2}, \quad (9)$$

$$C_{yk} = -\frac{a}{2} + a(\cos(\alpha_1) + \dots + \cos(\alpha_{k-1})) + \frac{a}{2} \cos(\alpha_k) - \sin(\alpha_k) \sqrt{R_b^2 - \left(\frac{a}{2}\right)^2}. \quad (10)$$

где a и α_k – длина хорды, соединяющей вершины k -й зеренной границы, и угол ее поворота относительно хорды первой границы.

Методика расчетов представлена в [2; 3]. При расчетах компонент тензора напряжений будем учитывать представленную на рисунке 2 ориентировку винтовой и краевой составляющих векторов Бюргера. При этом плотности дислокаций на всех границах (зеренных и двойниковых) постоянны и равны ($\rho_b^{(k)} = C_1$, $\rho_{tw}^{(m)} = C_2$ соответственно).

Результаты расчетов и их обсуждение. С целью подтверждения правомерности принятой дислокационной модели и проведения анализа напряженного состояния в зерне поликристалла проводим расчет полей напряжений для железа (Fe). При этом принимаем: $b_b^e = b_b^s = 0,248$ нм; $b_{tw}^e = b_{tw}^s = 0,124$ нм [4]; $\mu = 81$ ГПа [5]; $\nu = 0,29$ [4]; $R = 70$ нм.

Ниже представлены распределения компоненты $\sigma_{xy}(x, y)$ тензора напряжений в зерне поликристалла, имеющего выпуклые (рисунок 3) и вогнутые (рисунок 4) границы, смоделированные стенкой полных дислокаций, и содержащего в своем теле единичный клиновидный двойник.

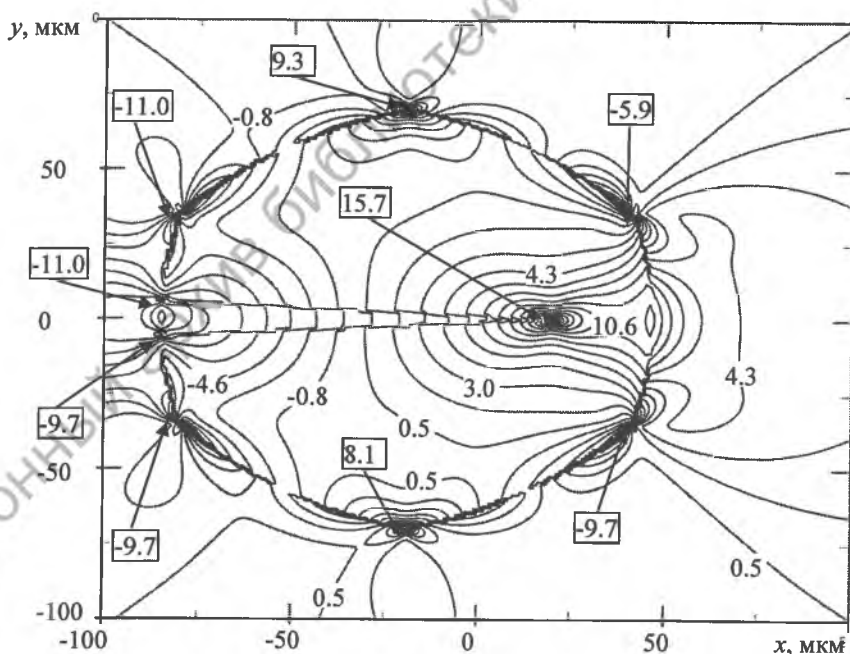


Рис. 3 – Распределение компоненты $\sigma_{xy}(x, y)$ тензора напряжений в зерне поликристалла, имеющего выпуклые границы, смоделированные стенкой полных дислокаций, и содержащего в своем теле единичный клиновидный двойник

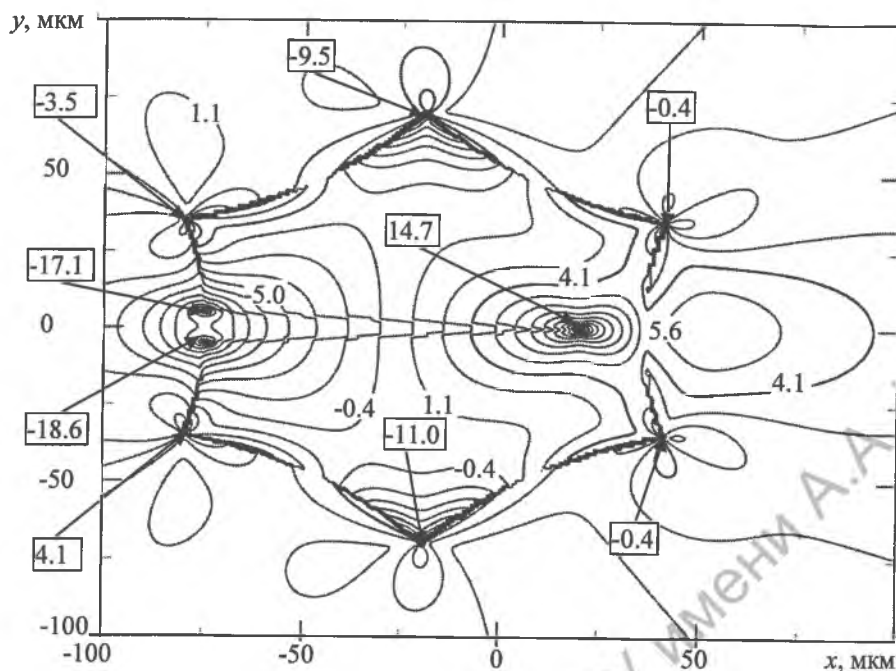


Рис. 4 – Распределение компоненты $\sigma_{yy}(x, y)$ тензора напряжений в зерне поликристалла, имеющего вогнутые границы, смоделированные стенкой полных дислокаций, и содержащего в своем теле единичный клиновидный двойник

В первую очередь рассмотрим зерно, не имеющее в своем теле остаточного клиновидного двойника. В случае моделирования границ зерна поликристалла в виде цепочек полных дислокаций распределения полей напряжений, имеют ряд характерных черт. Так, например, на них четко просматриваются основные элементы зерна, являющиеся концентраторами напряжений: границы и узловые точки.

Кроме того, именно указанные элементы соответствуют максимальным значениям нормальных (σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz}) и скалывающих (σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz}) компонент тензора напряжения.

В отношении знакопеременности напряжений можно отметить следующее. Нормальные напряжения (σ_{xx} , σ_{yy}) положительны внутри зерна и носят растягивающий характер. За пределами зерна имеет место следующее распределение напряжений. Слева и справа от зерна компонента σ_{xx} имеет растягивающий характер, σ_{yy} – сжимающий. Соответственно, сверху и снизу от зерна напряжения σ_{xx} отрицательны, а σ_{yy} положительны. При этом численные значения нормальных напряжений σ_{xx} , σ_{yy} внутри зерна выше, чем за его пределами. В центре зерна локализация нормальных напряжений не обнаружена. Напряжения σ_{zz} имеют место только на границах зерна, при этом внутри зерна и за его пределами они не локализованы. Данная компонента тензора напряжений (σ_{zz}) носит растягивающий характер.

Скальвающие напряжения σ_{xy} положительны в первой и третьей четвертях, а отрицательны – во второй и четвертой. Напряжения σ_{xz} положительны в первой и четвертой четвертях, а отрицательны – во второй и третьей. Компонента σ_{zy} в третьей и четвертой четвертях носит растягивающий характер, а в первой и второй – сжимающий. Внутри зерна концентрация скальвающих напряжений (σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz}) существенно ниже, чем за его пределами; при этом в центре зерна напряжения отсутствуют.

Важно отметить также тот факт, что в случае моделирования зеренных границ в виде цепочек полных дислокаций криволинейность данных границ не влияет на распределение полей напряжений.

В случае моделирования границ зерна в виде стенок полных дислокаций на распределения полей напряжений, характеризующих напряженно-деформированное состояние зерна, форма зеренных границ оказывает существенное влияние.

Так, в случае прямолинейных границ компоненты тензора напряжений σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} локализованы только в узловых точках зерна, а численные значения данных компонент незначительны. В случае криволинейных границ рассматриваемые компоненты (σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy}) имеют значения на порядок выше и локализованы на зеренных границах и в их окрестностях. Кроме того, на участках границ, наиболее удаленных от центра зерна, напряжения σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} также не локализованы (рисунки 3, 4). Это связано с тем, что данные компоненты тензора, создаваемые соседними дислокациями на данных участках (равно как и на прямолинейных границах), являются взаимно уравнивающими.

Следует также отметить, что четкой закономерности в отношении знакопеременности данных компонент тензора напряжений в случае моделирования границ зерна в виде стенки полных дислокации не выявлено при всех вариантах рассматриваемой формы границ.

Скальвающие напряжения (σ_{zy} , σ_{xz}) сконцентрированы на границах зерна и распределены большей частью за его пределами. При этом на границах, параллельных оси OX либо OY , концентрация соответствующей компоненты (σ_{zy} либо σ_{xz}) минимальна. Это связано с тем, что напряжения, создаваемые данными зернограницными дислокациями, частично компенсируются напряжениями на соседних границах зерна. Компонента σ_{zy} за пределами зерна носит растягивающий характер в первой и четвертой четвертях, а внутри зерна – во второй и третьей. Напряжения σ_{xz} знакопеременны относительно оси OX и имеют сжимающий характер в первой и второй четвертях.

Максимальные значения всех компонент тензора напряжений в случае моделирования зеренных границ в виде стенок полных дислокаций имеют место в узловых точках зерна.

Следует отметить, что все рассмотренные поля напряжений, смоделированные для зерна, не содержащего в своем теле двойник, имеют симметричность относительно осей, проходящих через центр зерна.

В случае наличия в теле зерна единичного клиновидного двойника имеет место существенное изменение распределения полей напряжений. Так, в первую очередь следует отметить тот факт, что его наличие определяет локализа-

цию напряжений в узловых точках двойника, а также на двойниковых границах и в их окрестностях. Соответственно, повышается концентрация напряжений внутри зерна. Численные значения напряжений также увеличиваются, при этом максимальные значения напряжений соответствуют расположению узловых точек двойника. Важно то, что наличие клиновидного двойника в теле зерна не влияет на знакопеременность распределения полей напряжений, однако нарушает симметричность распределения.

Рассмотрим подробнее изменения в напряженном состоянии зерна поликристалла, возникающие вследствие наличия в нем клиновидного остаточного двойника.

Так, при моделировании зеренных границ в виде цепочек полных дислокаций можно отметить следующее. Наибольшие значения нормальных и скалывающих компонент тензора напряжений, как и в случае без двойника, отмечены в узловых точках зерна и на его границах. При этом, как было уже отмечено выше, появляются дополнительные участки концентрации напряжений – вершина, устье двойника и его границы. Концентрация же напряжений в целом изменяется только в пределах зерна, изменения за его пределами незначительны [3].

В случае моделирования зеренных границ стенками полных дислокаций нормальные напряжения максимальны на двойниковых границах; скалывающие напряжения σ_{xy} – в узловых точках двойника (у вершины и устья двойника); а скалывающие напряжения σ_{zy} и σ_{xz} максимальны на зеренных границах (за исключением границ, параллельных осям OX и OY , соответственно в связи с их частичной компенсацией). Также в связи со взаимным уравниванием напряжений, вызванных соседними дислокациями, на участках криволинейных границ, наиболее удаленных от центра зерна, напряжения σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} также не локализованы. Концентрация напряжений за пределами зерна изменяется только в случае прямолинейных границ, в остальных случаях существенные изменения концентрации в сторону увеличения наблюдаются только внутри зерна.

Заключение

Таким образом, при рассмотрении зерна поликристалла, не содержащего в своем теле двойника, основные места концентрации напряжений – это границы и узловые точки зерна, а также участки за пределами зерна. При этом центр зерна является зоной, свободной от напряжений. Кроме того, форма границ зерна оказывает существенное влияние на распределение полей напряжений только в случае их моделирования в виде стенок полных дислокаций. Наличие единичного клиновидного двойника в зерне влечет за собой увеличение концентрации напряжений внутри зерна, а также увеличение численных значений компонент тензора напряжений. При этом концентрация напряжений за пределами зерна с учетом влияния рассматриваемого двойника существенно не изменяется. Кроме того, нарушается симметричность распределения полей напряжений, однако знакопеременность полей напряжений не изменяется. При этом следует отметить, что в случае моделирования границ зерна в виде цепочек полных дис-

локаций основным концентратором напряжений остается зерно – максимальные напряжения сконцентрированы именно на его элементах; а в случае моделирования в виде стенок полных дислокаций – максимальные напряжения соответствуют элементам двойника.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. **Остриков, О. М.** Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О. М. Остриков // Вестник ГГТУ им. П. О. Сухого. – 2006. – № 2 – С. 10–18.
2. **Остриков, О. М.** Механика двойникования твердых тел : монография / О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2008. – 301 с.
3. **Дробышевская, Т. В.** Задача о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным некогерентным двойником в пяти-, шести- и осемигранном зерне поликристалла с гексагональной структурой / Т. В. Дробышевская, О. М. Остриков // Физ. мезомех. – 2015. – Т. 18. – № 2. – С. 79–88.
4. **Полухин, П. И.** Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – Москва : Металлургия, 1982. – 584 с.
5. **Киттель, Ч.** Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. – Москва : Наука, 1978. – 792 с.

Поступила в редакцию 24.01.2017 г.

Контакты: omostrikov@mail.ru (Остриков Олег Михайлович)

Drobyshevskaya T., Ostrikov O. THE IMPACT OF A SINGLE WEDGE-SHAPED TWIN ON THE STATE OF STRESS DETERMINED BY THE CURVED BOUNDARIES OF THE POLYCRYSTAL GRAIN.

The article focuses on the state of stress determined by the shape and structure of the grain boundaries of a polycrystal as well as by a single wedge-shaped residual micro-twin in this grain. The effect of the following factors on the state of stress is viewed: the shape and the dislocation model of the grain boundaries, the presence of a wedge-shaped twin in the grain body. It has been revealed that if a twin is not present in the centre of the grain, stress localization is not observed. The shape of the grain boundaries affects the stress state if they are modelled as walls full of dislocations. It has been found out that a single wedge-shaped twin has a significant impact on the distribution of stress fields.

Keywords: wedge-shaped twin, polycrystal grain, stress field.