

УДК 539.3

ДВУХФУНКЦИОНАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ЛИНЗОВИДНОГО ДВОЙНИКА

Е. В. ШМАТОК,

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

Разработана дислокационная модель единичного нетонкого двойника линзовидной формы, находящегося вдали от поверхности кристалла. В модели использовано допущение непрерывного распределения двойникующих дислокаций на двойниковых границах. На основании модели определена конфигурация полей смещений и напряжений у линзовидного двойника.

Ключевые слова: линзовидный двойник, дислокационная модель

Введение

Процесс деформирования мартенситной фазы монокристалла Ni_2MnGa сопровождается образованием на поверхности следов поворота кристаллической решетки, обусловленного механическим двойникованием [1]. Некогерентные границы двойников создают поле напряжений, которое оказывает влияние на различные физические процессы [2]. Для прогнозирования данных процессов важное значение приобретает расчет напряженно-деформированного состояния, обусловленного некогерентными двойниками различной формы [2-5].

Целью данной работы стало моделирование напряженно-деформированного состояния монокристалла Ni_2MnGa , созданного единичным линзовидным двойником, находящимся вдали от поверхности кристалла.

Модель. При использовании приближения непрерывного распределения двойникующих дислокаций на двойниковых границах [2, 6], смещения u_i и напряжения σ_{ij} для обособленного единичного двойника рассчитываются по формулам:

$$u_i(x, y) = u_i^{(1)}(x, y) + u_i^{(2)}(x, y),$$

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(2)}(x, y),$$

где i, j принимают значения x, y или z ; $u_i^{(1)}(x, y)$, $u_i^{(2)}(x, y)$ и $\sigma_{ij}^{(1)}(x, y)$, $\sigma_{ij}^{(2)}(x, y)$ – соответственно смещения и напряжения, обусловленные первой и второй границей двойника, которые в соответствии с [2, 6], определяются по формулам:

$$u_i^{(1)}(x, y) = \int_{-L}^L \sqrt{1 + (f_1'(\xi))^2} \rho_1(\xi) u_i^{(1,0)}(x, y) d\xi,$$

© Шматок Е. В., 2016

© Остриков О. М., 2016

$$u_i^{(2)}(x,y) = \int_{-L}^L \sqrt{1 + (f_2'(\xi))^2} \rho_2(\xi) u_i^{(2,0)}(x,y) d\xi,$$

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x,y) = \int_{-L}^L \sqrt{1 + (f_1'(\xi))^2} \rho_1(\xi) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x,y) d\xi,$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x,y) = \int_{-L}^L \sqrt{1 + (f_2'(\xi))^2} \rho_2(\xi) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x,y) d\xi.$$

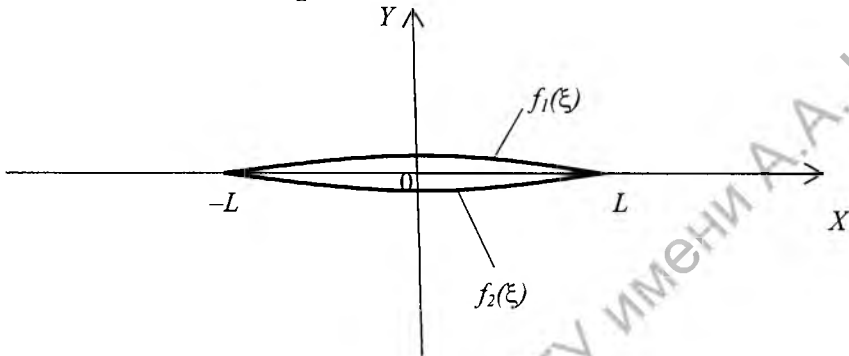


Рис. 1. Схема единичного линзовидного двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла

Здесь $f_1(\xi)$ и $f_2(\xi)$ – функции, с помощью которых задается форма двойниковых границ (рис. 1); $\rho_1(\xi)$ и $\rho_2(\xi)$ – плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах; ξ – параметр интегрирования; $u_{ij}^{(1,0)}(x,y)$, $u_{ij}^{(2,0)}(x,y)$, $\sigma_{ij}^{(1,0)}(x,y)$ и $\sigma_{ij}^{(2,0)}(x,y)$ – смещения и напряжения, обусловленные единичной двойникующей дислокацией, находящейся на первой, или второй границе двойника, и определяемые по формулам [2]:

$$u_x^{(1,0)}(x,y,\xi) = \frac{b_{кр}}{2\pi} \left[\arctg \frac{y - f_1(\xi)}{x - \xi} + \frac{(x - \xi)(y - f_1(\xi))}{2(1 - \nu)((x - \xi)^2 + (y - f_1(\xi))^2)} \right],$$

$$u_y^{(1,0)}(x,y,\xi) = -\frac{b_{кр}}{2\pi} \left[\frac{1 - 2\nu}{4(1 - \nu)} \ln((x - \xi)^2 + (y - f_1(\xi))^2) + \frac{(x - \xi)^2 - (y - f_1(\xi))^2}{4(1 - \nu)((x - \xi)^2 + (y - f_1(\xi))^2)} \right],$$

$$\begin{aligned}
& \sigma_{(2,0)}^{xy}(x, \gamma, \xi) = \frac{2\pi(1-\nu)}{i b_{kp}} \frac{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2]}{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2]} \\
& \sigma_{(2,0)}^{xx}(x, \gamma, \xi) = -\frac{2\pi(1-\nu)}{i b_{kp}} \frac{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2]}{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2]} \\
& n_{(2,0)}^z(x, \gamma, \xi) = \frac{\pi}{b} \operatorname{arctg} \frac{x-\xi}{\nu - f_2(\xi)}; \\
& \left[\frac{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2}{4(1-\nu)} \right] + \left[\frac{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2}{2(1-\nu)} \right] \\
& n_{(2,0)}^y(x, \gamma, \xi) = -\frac{\pi}{b} \operatorname{arctg} \frac{x-\xi}{1-2\nu} \left[\frac{2\pi}{1-2\nu} \ln \left(\frac{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2}{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2} \right) \right] \\
& n_{(2,0)}^x(x, \gamma, \xi) = \frac{\pi}{b} \operatorname{arctg} \frac{x-\xi}{\nu - f_2(\xi)} + \left[\frac{2\pi}{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_2(\xi))_z^2} \right] \\
& \sigma_{(1,0)}^{xy}(x, \gamma, \xi) = \frac{\pi}{i b} \frac{x-\xi}{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2}; \\
& \sigma_{(1,0)}^{xx}(x, \gamma, \xi) = -\frac{\pi}{i b} \frac{x-\xi}{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2}; \\
& \sigma_{(1,0)}^{zz}(x, \gamma, \xi) = -\frac{2\pi(1-\nu)}{i b_{kp}} \frac{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2}{(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2}; \\
& \sigma_{(1,0)}^{xy}(x, \gamma, \xi) = \frac{2\pi(1-\nu)}{i b_{kp}} \frac{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2]}{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2]} \\
& \sigma_{(1,0)}^{xx}(x, \gamma, \xi) = \frac{2\pi(1-\nu)}{i b_{kp}} \frac{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2]}{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2]} \\
& = \frac{2\pi(1-\nu)}{i b_{kp}} \frac{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2]}{[(x-\xi)_z^2 + (\nu - f_1(\xi))_z^2]} \\
& \sigma_{(1,0)}^{xx}(x, \gamma, \xi) = \\
& n_{(1,0)}^z(x, \gamma, \xi) = \frac{\pi}{b} \operatorname{arctg} \frac{x-\xi}{\nu - f_1(\xi)};
\end{aligned}$$

$$\sigma_{yy}^{(2,0)}(x, y, \xi) = \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y - f_2(\xi))[(x - \xi)^2 - (y - f_2(\xi))^2]}{[(x - \xi)^2 + (y - f_2(\xi))^2]^2},$$

$$\sigma_{zz}^{(2,0)}(x, y, \xi) = -\frac{\mu b_{кр} \nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{y - f_2(\xi)}{(x - \xi)^2 + (y - f_2(\xi))^2},$$

$$\sigma_{zx}^{(2,0)}(x, y, \xi) = -\frac{\mu b_{в}}{2\pi} \frac{y - f_2(\xi)}{(x - \xi)^2 + (y - f_2(\xi))^2},$$

$$\sigma_{zy}^{(2,0)}(x, y, \xi) = \frac{\mu b_{в}}{2\pi} \frac{x - \xi}{(x - \xi)^2 + (y - f_2(\xi))^2},$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; $b_{кр}$ и $b_{в}$ – модули векторов, соответственно, краевой и винтовой составляющих вектора Бюргерса частичной двойникующей дислокации.

Результаты расчетов и их обсуждение

На рис. 2 и 3 представлены расчетные результаты. Исходными данными для сплава Ni_2MnGa принимались следующие значения: $L = 60$ мкм; $H = 20$ мкм; $D = 45$ мкм; $\rho_1(\xi) = \rho_2(\xi) = \text{const} = \rho = 10^6$; $\nu = 0,3$; $\mu = 19,231$ ГПа; $b_{кр} = 2,91 \text{ \AA}$; $b_{в} = 2,74 \text{ \AA}$ [3–5].

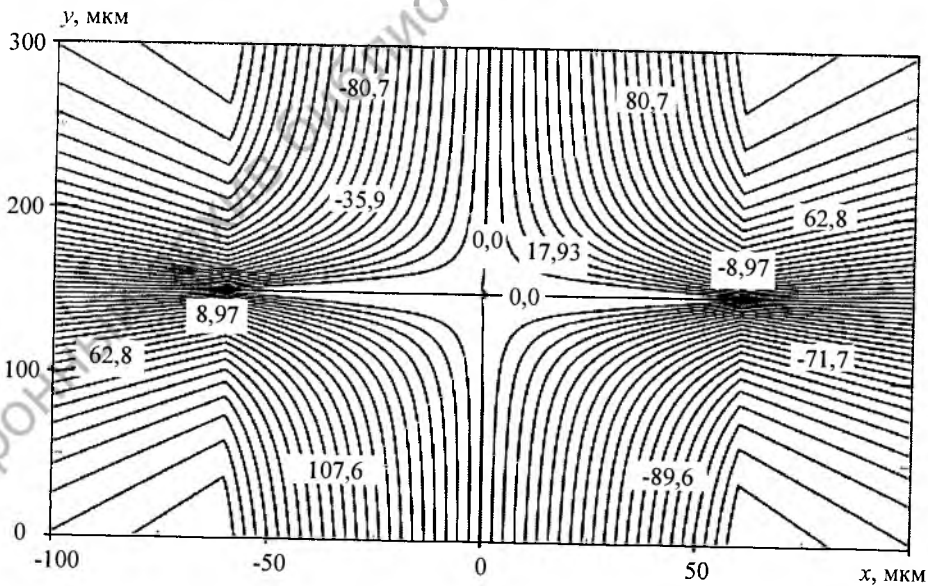


Рис. 2. Поля смещений u_i в монокристалле Ni_2MnGa , созданные единичным линзовидным двойником (нм): а) u_x ; б) u_y ; в) u_z

Рис. 2, а

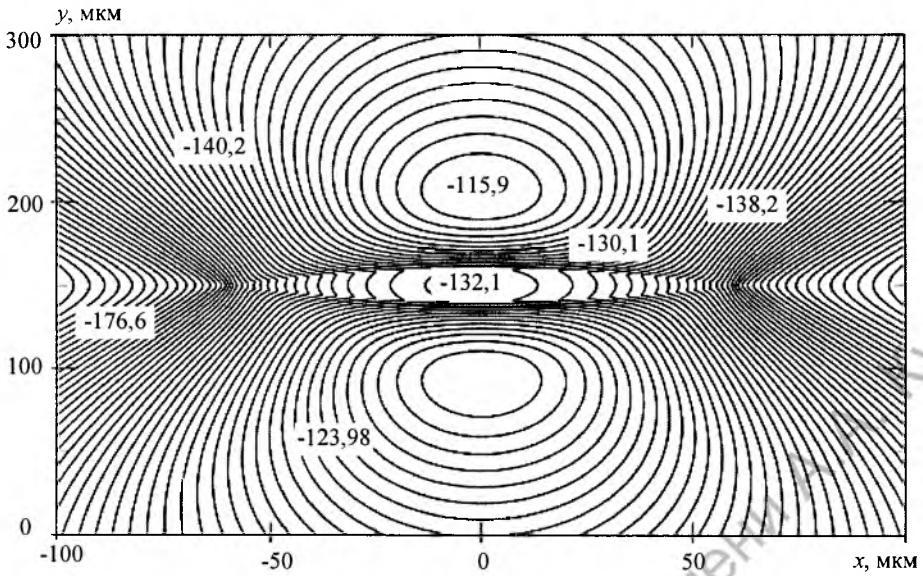


Рис. 2, б

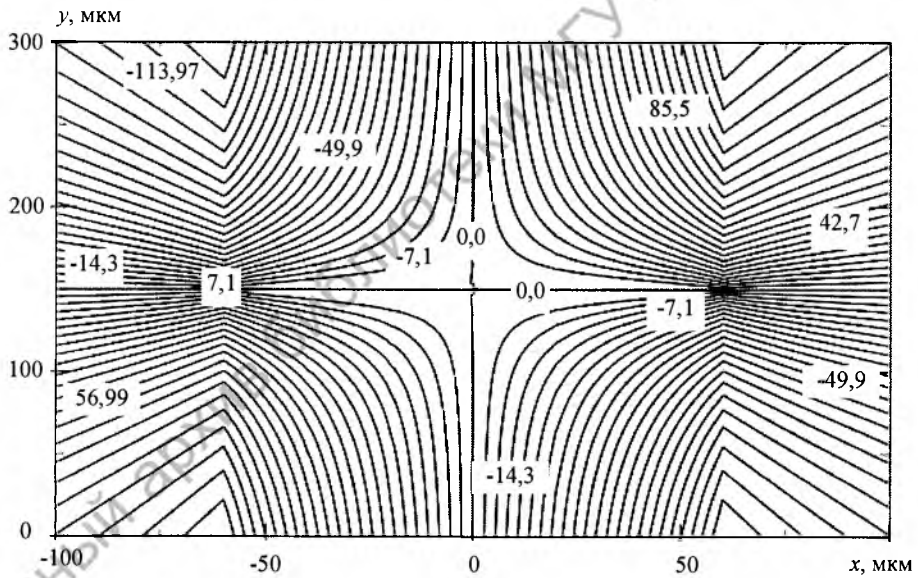


Рис. 2, в

Результаты расчета смещений u_i представлены на рис. 2. Картина линий равных величин для смещений u_x и u_z не имеет значительных различий (рис. 2, а и в). Разница заключается в численных значениях смещений в заданных точках. Также смещения u_x и u_z симметричны относительно начала системы координат.

Изометрические линии поля смещения u_y (рис. 2, б) существенно отличаются по форме от результатов расчета полей смещений u_x и u_z . Численные значения с наибольшим смещением имеют участки в области вершин двойников.

Результат расчета нормальной компоненты тензора напряжений σ_{xx} представлен на рис. 3, а. Здесь напряжения главным образом локализованы у границ и вершин двойника, где и наблюдаются их максимальные модульные значения. Данная особенность обусловлена конфигурацией поля напряжений нормальной компоненты у единичной двойникообразующей дислокации. Причем напряжения у границ двойника выше, чем у вершин. Общий уровень значений напряжений в материале вокруг двойника является симметричным по модульным значениям относительно координатных осей и возрастает по мере продвижения к центру декартовой системы координат.

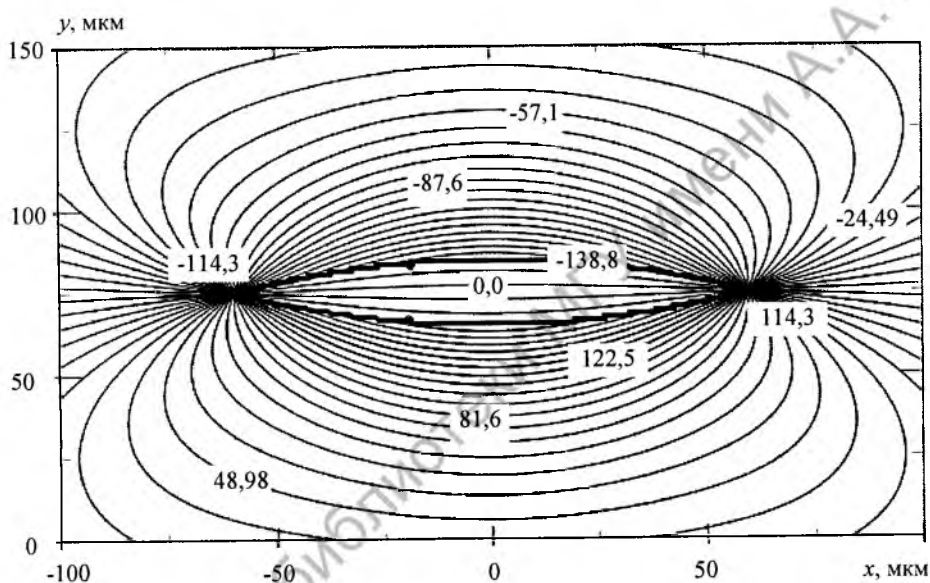


Рис. 3. Результаты расчетов полей напряжений σ_{ij} , созданных единичным линзовидным двойником в Ni_2MnGa (МПа): а) σ_{xx} ; б) σ_{xy} ; в) σ_{xz} ; г) σ_{yy} ; д) σ_{yz} ; е) σ_{zz}

Рис. 3, а

На рис. 3, б показан результат расчета сдвиговой компоненты тензора напряжений. Видно, что общий фронт напряжений изменяется в сторону возрастания, по мере продвижения в положительном направлении Ox .

Сдвиговая компонента σ_{xz} графически представлена на рис. 3, в. Здесь наблюдается схожесть конфигурации линий равных величин напряжений нормальной компоненте тензора напряжений σ_{xx} . Различие заключается в модульных численных значениях напряжений в ключевых и периферийных точках. В данном случае эти значения ниже нормальных напряжений в 2-3 раза. График сдвиговой компоненты σ_{xz} также симметричен относительно Ox и имеет нулевые значения напряжений в теле двойника.

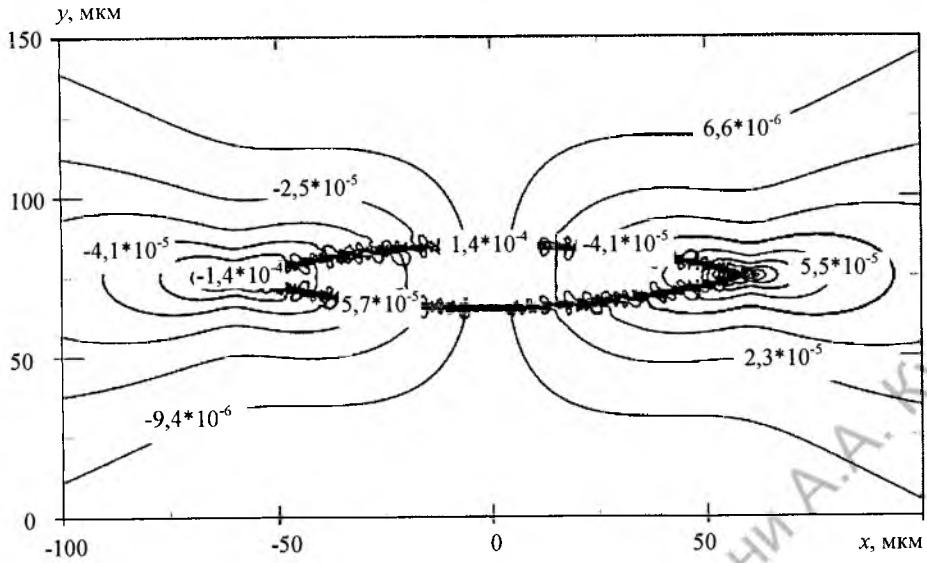


Рис. 3, б

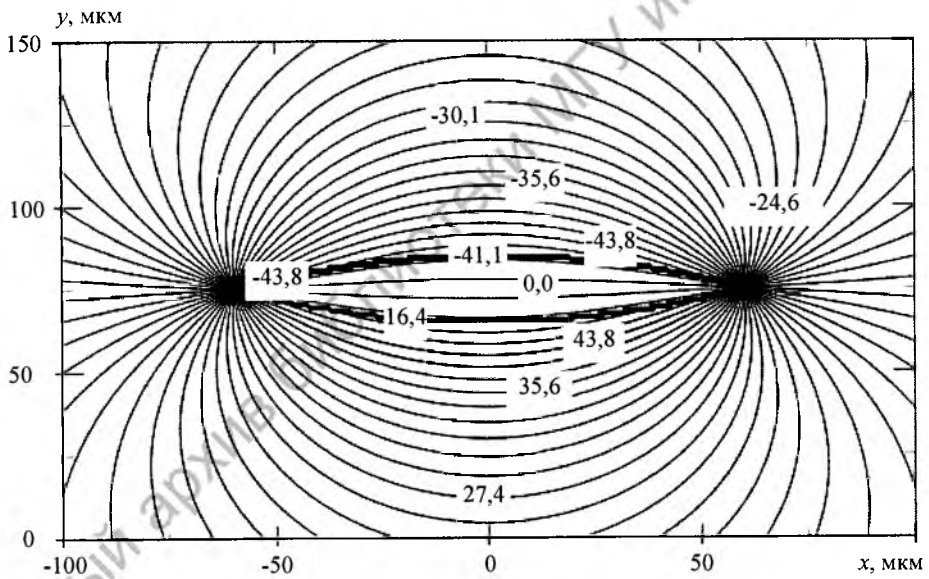


Рис. 3, в

Рис. 3, г представляет собой результат расчета нормальной компоненты σ_{yy} тензора напряжений. Картина напряжений данной компоненты имеет сложную конфигурацию обусловленную наличием четырех участков пиковых значений в окрестных областях у двойника. Экстремумы с меньшими численными значениями напряжений симметричны относительно оси OY . Два других пика имеют симметрию относительно оси OX . Численные значения напряжений в этих пиках противоположны по знаку и незначительно отличаются по модулю.

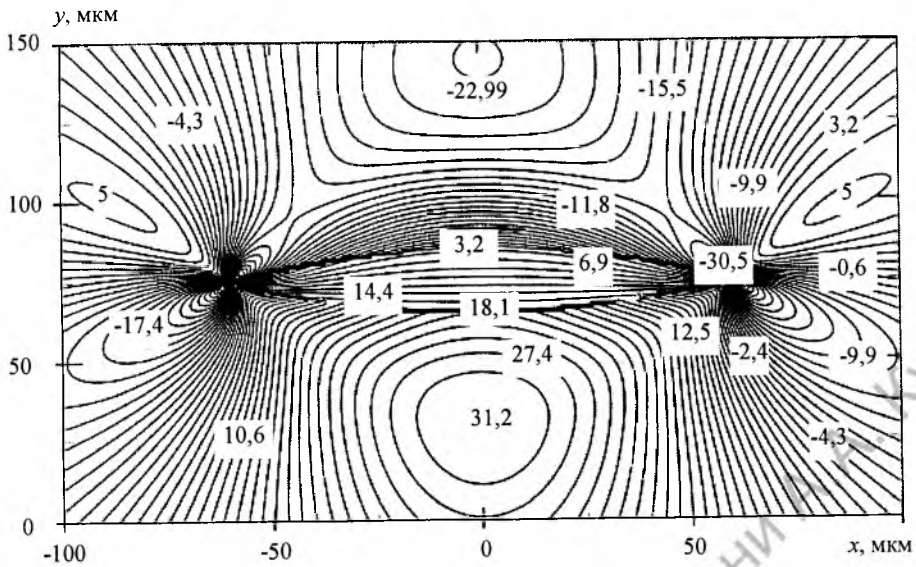


Рис. 3, г

На рис. 3, д представлен графический результат расчета сдвиговой компоненты σ_{yz} тензора напряжений. Данные напряжения по модулю симметричны относительно OY и в сравнении с другими компонентами имеют невысокие численные значения на границах двойника. Наибольшая локализация напряжений наблюдается у вершин двойника. Напряжения σ_{yz} постепенно убывают, по мере удаления от вершин двойника, в сторону прилегающих к ней участков.

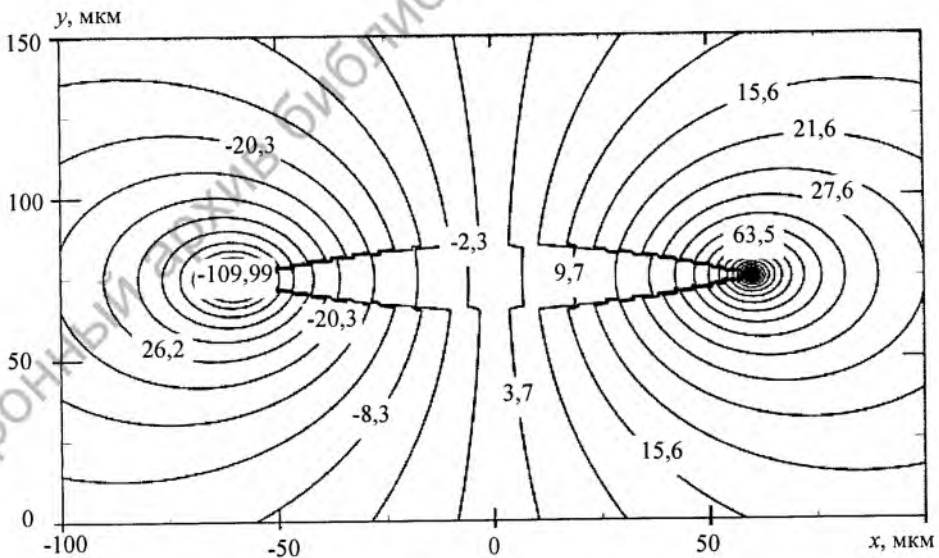


Рис. 3, д

Результат, представленный на рис. 3 е показывает распределение нормальной компоненты тензора напряжений σ_{zz} . Общий вид полей напряжений данной компоненты имеет схожесть с результатами расчетов компонент σ_{xx} (рис. 3, а) и σ_{xz} (рис. 3, в). Особенностью распределения данной компоненты является то, что она обладает наименьшими численными значениями напряжений, которые компонента σ_{xx} превосходит примерно в 4-6 раз, а компонента σ_{xz} – в 2-3 раза.

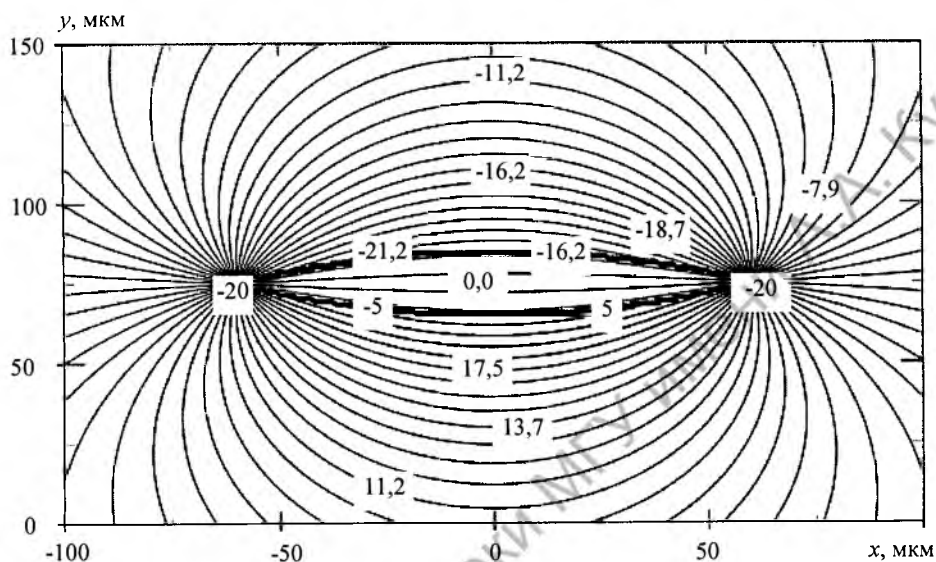


Рис. 3, е

Общими признаками у распределений всех компонент тензора напряжений являются: 1) локализация напряжений у границ и вершин двойника; 2) симметрия конфигурации поля напряжений в случае двойника правильной линзовидной формы; 3) общее убывание напряженного состояния по мере удаления от двойника.

Большая величина граничных дислокационных напряжений и высокая степень их локализации способна оказывать существенную роль на процессы развития и торможения трещин, аккомодацию напряжений деформации тела монокристалла, а также развитие других дислокационных и диффузионных процессов.

Заключение

Основываясь на принципе суперпозиции, разработан метод расчета полей смещений и напряжений для линзовидного остаточного механического двойника. Расчет напряжений проводился для мартенситной фазы Ni_2MnGa , в которой синтезирован данный механический остаточный двойник. В результате анализа результатов расчетов определены участки локализации напряжений и изучена конфигурация полей компонент смещений и напряжений в случае двойника линзовидной формы.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. **Остриков, О. М.** Исследование пластической деформации поверхности монокристалла Ni_2MnGa методом индентирования / О. М. Остриков, А. Л. Созинов, А. В. Сорока // Инженерно-физический журнал. – 2012. – Т. 85, № 5. – С. 1132–1141.
2. **Остриков, О. М.** Механика двойникования твердых тел : монография / О. М. Остриков. – Гомель : Учреждение образования “Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого”, 2008. – 301 с.
3. Giant magnetic-field-induced strain in NiMnGa seven-layered martensitic phase / A. Sozinov [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2002. – V. 80. – P. 1746–1748.
4. **Нечко, О.** Temperature dependence and temperature limits of magnetic shape memory effect / O. Heczko, L. Straka // Journal of Applied Physics. – 2003. – V. 94, № 11. – P. 7139–7143.
5. **Нечко, О.** Magnetic properties and domain structure of magnetic shape memory Ni-Mn-Ga alloy / O. Heczko, K. Jurek, K. Ullakko // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2001. – V. 226–230. – P. 996–998.
6. **Остриков, О. М.** Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О. М. Остриков // Вестник ГГТУ им. П. О. Сухого. – 2006. – № 2. – С. 10–18.

Поступила в редакцию 03.03.2016 г.

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

Shmatok E. V., Ostrikov O. M. DUALFUNCTION MODEL OF LENTICULAR TWIN.

The dislocation model of a single non-thin twin of the lenticular shape located away from the crystal surface has been constructed. The model uses the assumption of a continuous distribution of twinning dislocations at the twin boundaries. Based on the model the configuration of the displacement fields and stress of a lenticular twin is defined.

Key words: lenticular twin, dislocation model.