

## РАСЧЕТ ДЕФОРМАЦИЙ У ВЕРШИНЫ КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА НА ОСНОВАНИИ МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ МОДЕЛИ

*На основании мезоскопической дислокационной модели, согласно которой расстояние между двойническими дислокациями нельзя считать пренебрежимо малым, рассчитаны деформации у вершины клиновидного механического двойника. Показано, что деформации у вершины двойника могут менять знак своей величины не только в зависимости от соотношения плотностей дислокаций на противоположных двойниковых границах, но и в зависимости от соотношения величин параметров, определяющих расстояние между дислокациями.*

Дислокационная модель тонкого двойника, предложенная в [1], справедлива для ограниченного класса клиновидных двойников, для которых выполняется соотношение  $H/L < 10^{-4} - 10^{-3}$ , где  $H$  — ширина двойника у устья, а  $L$  — длина клиновидного двойника. Такие двойники чаще встречаются в таких материалах, как, например, титан, кремнистое железо. Как правило, на практике приходится иметь дело с двойниками, для которых  $H/L > 10^{-2} - 10^{-1}$  [2-7]. Теория таких двойников в настоящее время слабо развита. Особый интерес при этом составляет математическое моделирование начальных стадий двойникования, которые во многом определяют дальнейшее развитие двойников. Для двойников на стадии зарождения свойственно малое численное значение параметра  $L$ . В отдельных случаях при наличии стопоров на пути движения вершинной дислокации возможна ситуация, когда  $H > L$ .

Для моделей начальных стадий развития двойников присуще то, что двойники необходимо рассматривать на таком масштабном уровне, когда из-за малости размеров двойников, необходимо учитывать параметр, определяющий расстояние между двойническими дислокациями. Однако упрощения, которые дают такие модели, заключаются в возможности оперирования дискретными

величинами, а суммарный вклад в деформационную картину двойника, может быть определен суммированием дискретных вкладов компонентов, составляющих двойниковые границы.

Развитие клиновидных двойников во многом связано с напряженным и деформационным состоянием у его вершины. Поэтому целесообразной и актуальной представляется цель данной работы, заключающаяся в разработке способа расчета деформационного состояния у вершины клиновидного двойника на мезоскопическом масштабном уровне.

Рассмотрим клиновидный двойник формы, близкой к форме равнобедренного треугольника (рис. 1). Такие двойники возникают в деформируемых двойникующихся материалах в малодефектных областях. Смещения, которые создает единичный дискретный компонент границы такого двойника (двойникующая дислокация), могут быть определены из соотношений [8]:

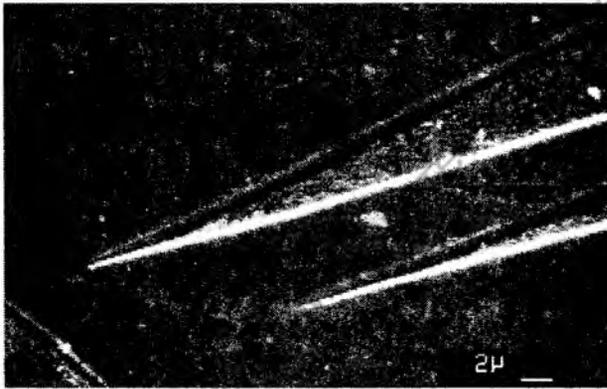


Рис. 1. Типичный вид клиновидных двойников формы равнобедренного треугольника (растровая электронная микроскопия с использованием NANOLAB-7)

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

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

$$u_z^d(x, y) = \frac{b_v}{2\pi} \arctg\left(\frac{y}{x}\right).$$

Здесь  $b_{кр}$  и  $b_v$  – краевая и винтовая составляющие вектора Бюргера двойникующих дислокаций;  $\nu$  – коэффициент Пуассона.

Дислокационная модель рассматриваемого двойника на мезоскопическом уровне схематически может быть представлена так, как это показано на рис. 2. Поля смещений, создаваемые каждой границей (ОА и ОВ (см. рис. 2)) такого двойника, находятся в результате суперпозиции смещений, формируемых каждой дислокацией границы и определяемых по формуле (1). Результирующие смещения, создаваемые обеими границами в общем случае могут быть определены, как

$$u_i(x, y) = \sum_n u_i^{OA}(x - nd, y + nh) + \sum_m u_i^{OB}(x - md, y - mh), \quad (2)$$

где  $i$  принимает значения  $x, y$  или  $z$ ;  $u_i^{OA}$  и  $u_i^{OB}$  – смещения, формируемые соответственно границами  $OA$  и  $OB$  клиновидного двойника (см. рис. 2).

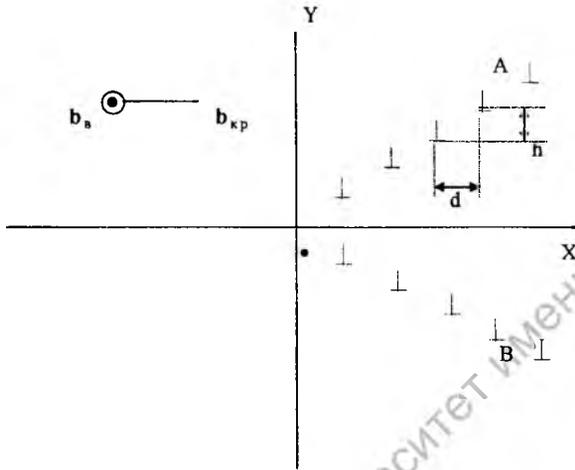


Рис. 2. Схема взаимного расположения дислокаций, их компонент вектора Бюргерса и декартовой системы координат для расчета полей напряжений и деформаций у клиновидного двойника

Учитывая (1) и (2), полагая ориентацию винтовой и краевой составляющих вектора Бюргерса такой, как на рис. 2, а именно, направление краевой составляющей совпадает с направлением оси  $OX$ , а винтовой – перпендикулярно плоскости рисунка (плоскости  $XOY$ ) в сторону наблюдателя (вдоль положительного направления оси  $OZ$  правой декартовой системы координат), для клиновидного двойника в однородной и изотропной среде получим:

$$u_x(x, y) = \frac{b_{sp}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \arctg\left(\frac{y + nh}{x - nd}\right) + \frac{(x - nd)(y + nh)}{2(1 - \nu)[(x - nd)^2 + (y + nh)^2]} \right) + \sum_{m=1}^M \left( \arctg\left(\frac{y - mh}{x - md}\right) + \frac{(x - md)(y - mh)}{2(1 - \nu)[(x - md)^2 + (y - mh)^2]} \right) \right],$$

$$u_y(x, y) = -\frac{b_{kp}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1 - 2\nu}{4(1 - \nu)} \ln((x - nd)^2 + (y + nh)^2) + \frac{(x - nd)^2 - (y + nh)^2}{4(1 - \nu)((x - nd)^2 + (y + nh)^2)} \right) + \sum_{m=1}^M \left( \frac{1 - 2\nu}{4(1 - \nu)} \ln((x - md)^2 + (y - mh)^2) + \frac{(x - md)^2 - (y - mh)^2}{4(1 - \nu)((x - md)^2 + (y - mh)^2)} \right) \right], \quad (3)$$

$$u_z(x, y) = \frac{b_a}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \arctg\left(\frac{y + nh}{x - nd}\right) + \sum_{m=1}^M \arctg\left(\frac{y - mh}{x - md}\right) \right].$$

Из данных соотношений могут быть определены и компоненты тензора деформаций  $u_{ij}$ . Для этого необходимо найти частные производные [8].

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (4)$$

В результате получим:

$$\begin{aligned} u_{xx}(x, y) = & \frac{b_{кр}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{(x-nd)^2(y+nh)}{(1-\nu)[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} \right) + \left( \sum_{m=1}^M \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} - \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. - \frac{(x-md)^2(y-mh)}{(1-\nu)[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right) \right] \\ u_{yy}(x, y) = & -\frac{b_{кр}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{(y+nh)[(x-nd)^2 - (y+nh)^2]}{2(1-\nu)[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} \right) + \left( \sum_{m=1}^M \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} - \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. - \frac{(y-mh)[(x-md)^2 - (y-mh)^2]}{2(1-\nu)[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right) \right], \quad (5) \end{aligned}$$

$$u_{zz}(x, y) = 0,$$

$$\begin{aligned} u_{xy}(x, y) = & \frac{b_{кр}}{2\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-nd}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{(x-nd)[(x-nd)^2 - 3(y+nh)^2]}{4(1-\nu)[(x-nd)^2 + (y+nh)^2]^2} \right) + \left( \sum_{m=1}^M \left( \frac{1}{4(1-\nu)} \frac{x-md}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{(x-md)[(x-md)^2 - 3(y-mh)^2]}{4(1-\nu)[(x-md)^2 + (y-mh)^2]^2} \right) \right], \end{aligned}$$

$$u_{xz}(x, y) = -\frac{b_b}{4\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right],$$

$$u_{yz}(x, y) = \frac{b_b}{4\pi} \left[ \sum_{n=0}^N \frac{x-nd}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{x-md}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right].$$

Для определения деформаций в вершине клиновидного двойника удалим из его вершины двойническую дислокацию и рассмотрим деформационное состояние, создаваемое в этой точке дислокациями двойниковых границ. Такое

удаление дислокации приведет к тому, что суммирование по  $n$  в (5) будет вестись не от нуля, как ранее, а от единицы. Чтобы определить напряжения и деформации в вершине двойника, необходимо также в (5) принять  $x = y = 0$ , так как в нашем случае вершина двойника находится в начале декартовой системы координат (рис. 2). В результате из (5) получим:

$$\begin{aligned}
 u_{xx}(0,0) &= \frac{b_{кр}}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \frac{h}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{1-\nu} \frac{d^2 h}{(d^2+h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) \right), \\
 u_{yy}(0,0) &= -\frac{b_{кр}}{2\pi} \frac{1}{2(1-\nu)} \left( (1-2\nu) \frac{h}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{h(d^2-h^2)}{(d^2+h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) \right), \\
 u_{xy}(0,0) &= -\frac{b_{кр}}{2\pi} \frac{1}{4(1-\nu)} \left( \frac{d}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{d(d^2-3h^2)}{(d^2+h^2)^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right) \right), \\
 u_{xz}(0,0) &= -\frac{b_b}{4\pi} \frac{h}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\
 u_{yz}(0,0) &= -\frac{b_b}{4\pi} \frac{d}{d^2+h^2} \left( \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right).
 \end{aligned} \tag{6}$$

В случае, когда  $N=M$ , из (6) следует

$$\begin{aligned}
 u_{xx} &= 0, \quad u_{yy} = 0, \quad u_{xz} = 0, \\
 u_{xy} &= -\frac{b_{кр}}{\pi} \frac{1}{4(1-\nu)} \left( \frac{d}{d^2+h^2} + \frac{d(d^2-3h^2)}{(d^2+h^2)^2} \right) \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}, \\
 u_{yz} &= -\frac{b_b}{\pi} \frac{d}{d^2+h^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}.
 \end{aligned} \tag{7}$$

Из-за симметричного относительно оси  $Ox$  (рис. 2) расположения дислокаций на двойниковых границах при  $N=M$  и постоянстве параметров  $d$  и  $h$ , компоненты тензора деформаций  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$  и  $u_{xz}$  равны нулю в связи с тем, что деформации дислокаций на двух двойниковых границах скомпенсированы. В то же время из-за расположения на двойниковых границах дислокаций одного знака деформации  $u_{xy}$ ,  $u_{yz}$  удваиваются. Рассмотрим эти деформации более под-

робно. Для этого введем безразмерный параметр

$$\chi_{ij}(x, y) = u_{ij}(x, y) / B_{ij}, \quad (8)$$

где  $B_{xx} = B_{xy} = B_{yy} = b_{кр} / 2\pi$ ,  $B_{xz} = B_{yz} = b_{в} / 2\pi$ . Этот параметр позволяет без ущерба общности абстрагироваться от численных значений вектора Бюргера двойникующих дислокаций, который индивидуален для каждого материала.

На рис. 3, а и б представлены зависимости  $\chi_{xy}$  и  $\chi_{yz}$  от числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах  $N$ . При расчете принималось  $d = 0,15$  мкм;  $h = 0,05$  мкм;  $\nu = 0,33$ . Видно, что с ростом  $N$  численные значения рассматриваемых деформаций монотонно растут по модулю. При больших значениях  $N$  скорость роста величины деформаций уменьшается. Это связано с тем, что растет длина двойника, а вместе с ней увеличивается расстояние от вершины двойника до прибавляемых к его устью дислокаций, который начинают вносить свой суммарный вклад в деформационное состояние в вершине двойника благодаря дальнедействующим деформациям, величина которых ниже, чем у близкодействующих.

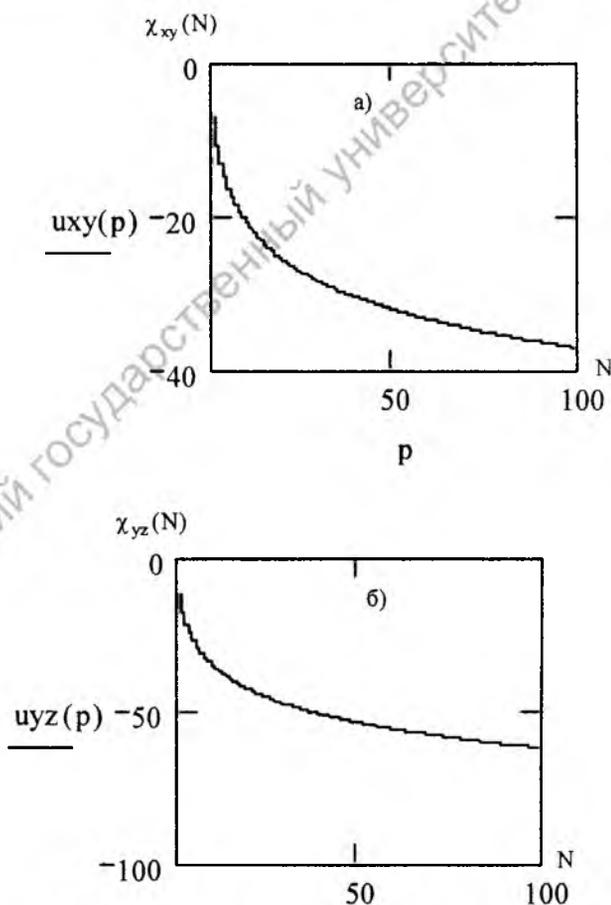


Рис. 3. Зависимости  $\chi_{xy}$  (а)  $\chi_{yz}$  (б) от числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах  $N$

При  $N \neq M$  деформации  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$ ,  $u_{xz}$  зависят от параметра

$$\Delta = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m}. \quad (9)$$

Причем при  $N < M$  получаем  $\Delta < 0$ . Это значит, что если на границе ОВ (рис. 2) дислокаций больше, чем на границе ОА, то деформации  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$ ,  $u_{xz}$  у вершины двойника будут менять знак своей величины на противоположный.

В плане анализа зависимости деформаций у вершины клиновидного двойника от параметров  $d$  и  $h$ , рассмотрим зависимости:

$$\frac{\chi_{ij}(d, h)}{\Delta}, \quad \frac{\chi_{ij}(d, h)}{\Sigma}, \quad (10)$$

где

$$\Sigma = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m}. \quad (11)$$

Зависимости (10) представлены на рис. 4. Как видно из данного рисунка, деформации  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$  и  $u_{xy}$  знакопеременны, а деформации  $u_{xz}$  и  $u_{yz}$  знак своей величины не меняют (здесь речь будем вести о деформациях, так как их конфигурация аналогична конфигурации зависимостей (10)).

Деформации  $u_{xx}$  у вершины двойника растут с уменьшением расстояния между двойникующими дислокациями (рис. 4, а). При  $d > h$  и при  $d > 1$  наблюдается  $u_{xx} < 0$ , а при  $d < h$  в основном  $u_{xx} > 0$ . Такая же ситуация наблюдается и в случае деформаций  $u_{xy}$  (рис. 4, в). В случае деформаций  $u_{yy}$  в зависимости от соотношения величин параметров  $d$  и  $h$  также наблюдается изменение знака деформаций. При  $d > h$  и  $d > 1$ ,  $u_{yy} > 0$ , а при  $d < h$ ,  $u_{yy} < 0$  (рис. 4, б).

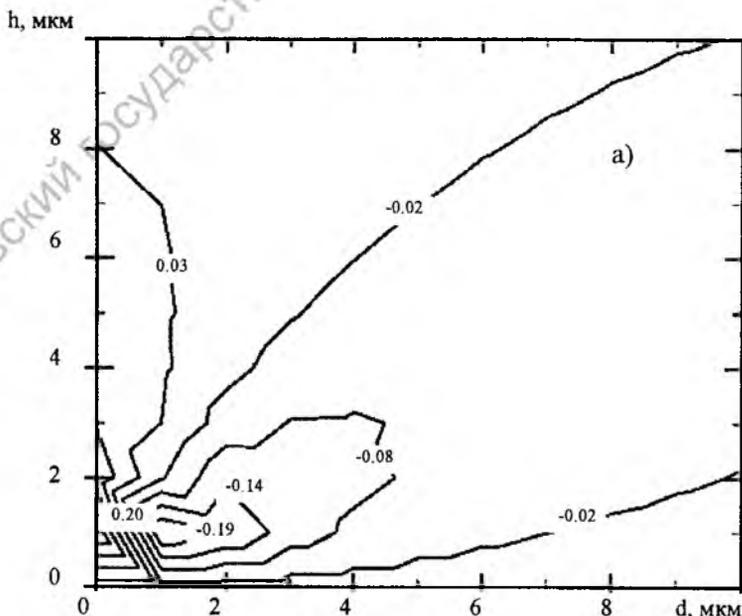


Рис. 4, а

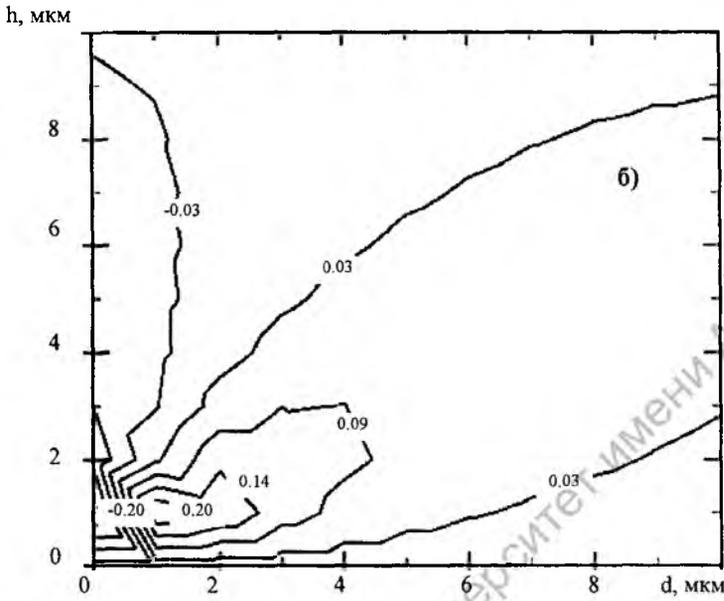


Рис. 4, б

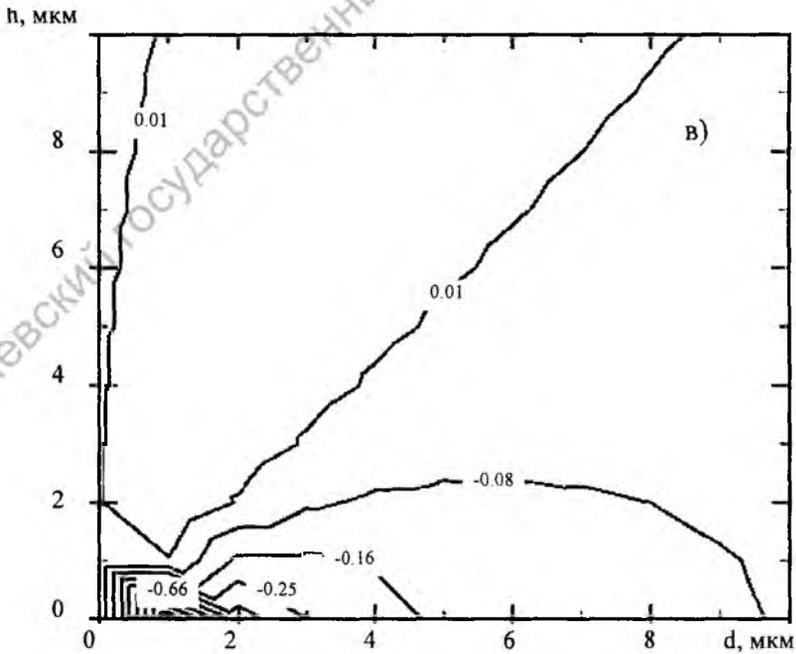


Рис. 4, в

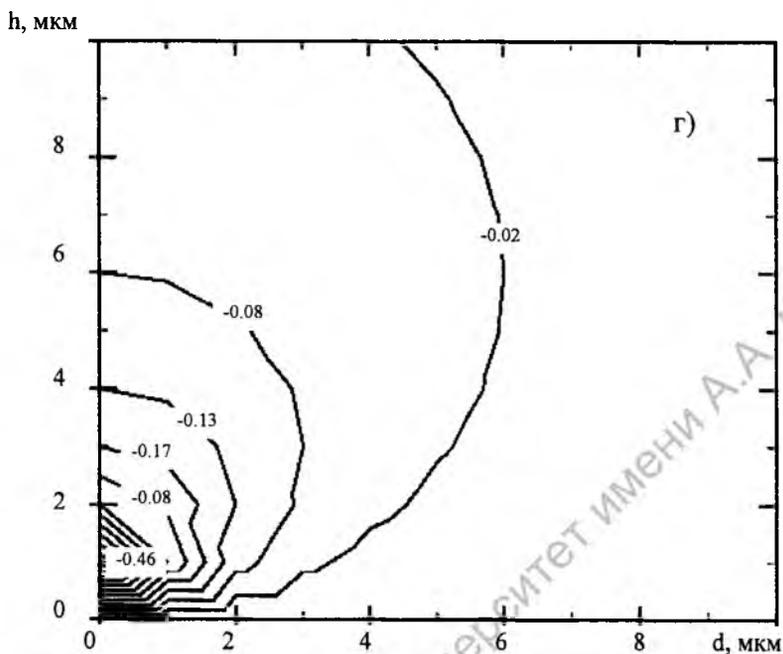


Рис. 4, г

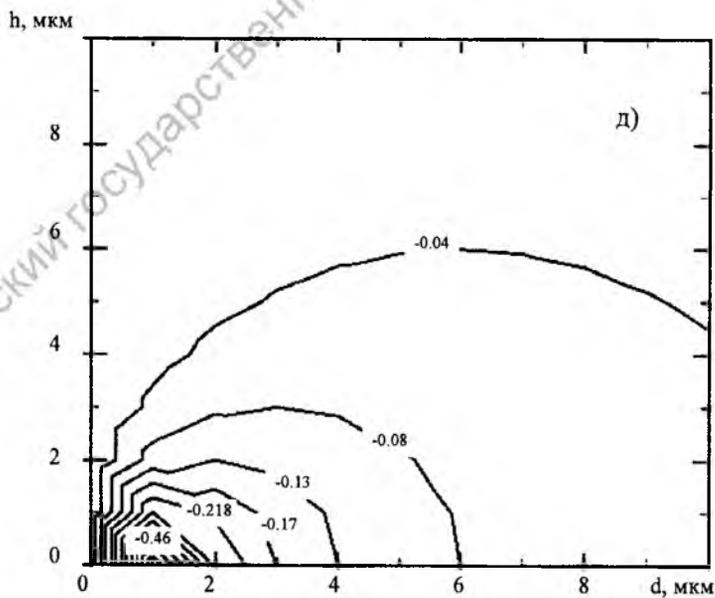


Рис. 4, д

Рис. 4. Распределения:  $\frac{\chi_{xx}(d, h)}{\Delta}$  (а);  $\frac{\chi_{yy}(d, h)}{\Delta}$  (б);  $\frac{\chi_{xy}(d, h)}{\Sigma}$  (в);  $\frac{\chi_{xz}(d, h)}{\Delta}$  (г) и  $\frac{\chi_{yz}(d, h)}{\Sigma}$  (д)

В зависимости от параметров  $d$  и  $h$  конфигурация деформаций  $u_{xz}$  и  $u_{yz}$  у вершины клиновидного двойника имеет отличный вид от конфигурации напряжений  $u_{xx}$ ,  $u_{yy}$  и  $u_{xy}$  (рис. 4, г и д). Высокая скорость роста деформаций  $u_{xz}$  наблюдается при уменьшении  $h$ , а у деформаций  $u_{yz}$  – при уменьшении  $d$ .

Таким образом, предложен способ расчета полей деформаций у вершины клиновидного механического двойника. Показано, что у деформации у вершины двойника могут изменять знак своей величины не только в зависимости от соотношения плотностей двойникоующих дислокаций на противоположных двойниковых границах, но и от параметров, определяющих расстояние между двойникоующими дислокациями.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Косевич, А.М.** Дислокационная теория упругого двойникоования кристаллов / А.М. Косевич, В.С. Бойко // Успехи физических наук. – 1971. – Т. 104. – № 2. – С. 101-255.
2. **Классен-Неклюдова, М.В.** Механическое двойникоование кристаллов / М.В. Классен-Неклюдова. – М.: АН СССР, 1960. – 262 с.
3. **Остриков, О.М.** Двойникоование ионно-имплантированных монокристаллов висмута: автореф. дис. ... к. ф.-м. н.: 01.04.07 / О.М. Остриков; БГУ. – Минск, 1999. – 17 с.
4. **Савенко, В.С.** Влияние импульсов тока на двойникоование металлических кристаллов: автореф. дис. ... к. ф.-м. н.: 01.04.07 / В.С. Савенко; АН БССР, Институт физики твердого тела и полупроводников. – Минск, 1982. – 16 с.
5. **Пинчук, А.И.** Влияние электромагнитного поля на пластическую деформацию двойникоованием кристаллов висмута: автореф. дис... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / А.И. Пинчук; БГУ. – Минск, 1998. – 18 с.
6. **Остриков, О.М.** Некоторые особенности формы клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой / О.М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 2000. – Т. 90. – № 1. – С. 91-95.
7. **Остриков, О.М.** Особенности зарождения клиновидных двойников у отпечатка пирамиды Викакса на поверхности (111) монокристаллов висмута / О.М. Остриков // Материаловедение. – 2002. – № 1. – С. 17-20.
8. **Хирт, Дж.** Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.