

МЕТОДИКА РАСЧЕТА НА ОСНОВАНИИ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ У ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКОГО ДВОЙНИКА, НАХОДЯЩЕГОСЯ ВДАЛИ ОТ ПОВЕРХНОСТИ ДВОЙНИКУЮЩЕГОСЯ МАТЕРИАЛА

Канд. физ.-мат. наук ОСТРИКОВ О. М.

УО «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого»

Разработанная в [1] дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника позволила решить проблему, имеющуюся в существующей в настоящее время дислокационной модели тонкого двойника [2], которая не давала возможности рассчитывать поля напряжений внутри двойника. Это существенно ограничивало область применения дислокационных моделей двойников, так как в большинстве случаев на практике приходится иметь дело с двойниками, ширина которых соизмерима с их длиной [3–5].

При деформировании двойникующихся материалов двойники в них, как правило, формируются группами [6, 7]. Поэтому практический интерес представляет решение задачи по математическому моделированию полисинтетического двойникования, являющегося результатом развития системы параллельных двойников. Полисинтетическому двойникованию подвержены материалы при их деформировании сжатием, растяжением или кручением [6], т. е. таким видам деформаций, которые часто встречаются при эксплуатации двойникующихся материалов.

Целью данной работы стала разработка методики расчета полей напряжений у полисинтетического двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла.

Решение такой задачи интересно для случая крупнозернистых поликристаллических материалов, когда при внешнем деформировании система параллельных двойников зарождается

на границах зерен. При этом отвлечемся от напряжений границ зерен и рассмотрим только те напряжения и эффекты, которые связаны только с двойникованием.

Для расчета полей напряжений $\sigma_{ij}(x, y)$ у единичного клиновидного двойника с произвольной формой границ в [1] были предложены следующие соотношения:

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

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) \times \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) dx_0; \quad (2)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) \times \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0) dx_0; \quad (3)$$

$$\sigma_{xx}^{(1,0)} = -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \times \frac{(y - f_1(x_0))[3(x - x_0)^2 + (y - f_1(x_0))^2]}{[(x - x_0)^2 + (y - f_1(x_0))^2]^2},$$

$$\sigma_{yy}^{(1,0)} = \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \times \frac{(y - f_1(x_0))[(x - x_0)^2 - (y - f_1(x_0))^2]}{[(x - x_0)^2 + (y - f_1(x_0))^2]^2},$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy}^{(1,0)} &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \times \\
 &\times \frac{(x-x_0)[(x-x_0)^2 - (y-f_1(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2]^2}; \\
 \sigma_{zz}^{(1,0)} &= -\frac{\mu b_{кр} \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2}; \\
 \sigma_{zx}^{(1,0)} &= -\frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2}; \\
 \sigma_{zy}^{(1,0)} &= \frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + (y-f_1(x_0))^2}; \\
 \sigma_{xx}^{(2,0)} &= -\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \times \\
 &\times \frac{(y-f_2(x_0))[3(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2]^2}; \\
 \sigma_{yy}^{(2,0)} &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \times \\
 &\times \frac{(y-f_2(x_0))[(x-x_0)^2 - (y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2]^2}; \\
 \sigma_{xy}^{(2,0)} &= \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \times \\
 &\times \frac{(x-x_0)[(x-x_0)^2 - (y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2]^2}; \\
 \sigma_{zz}^{(2,0)} &= -\frac{\mu b_{кр} \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y-f_2(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2}; \\
 \sigma_{zx}^{(2,0)} &= -\frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{y-f_2(x_0)}{(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2}; \\
 \sigma_{zy}^{(2,0)} &= \frac{\mu b_b}{2\pi} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + (y-f_2(x_0))^2}.
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

жения, создаваемые отдельными дислокациями, находящимися на разных двойниковых границах; μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; $b_{кр}$ и b_b – краевая и винтовая составляющие вектора Бюргера частичных двойникующих дислокаций.

Полученные соотношения могут быть положены в основу макроскопической дислокационной модели полисинтетического двойника в следующей модификации:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) &= \sum_{n=0}^N \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) \times \\
 &\times \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y - nD, x_0) dx_0;
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ij}^{(2)}(x, y) &= \sum_{n=0}^N \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) \times \\
 &\times \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y - nD, y_0) dx_0.
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

Здесь N связано с числом двойников в полисинтетическом двойнике. Так как суммирование ведется от нуля, рассчитываемое количество двойников будет на единицу больше, чем N .

Для использования (6) и (7) в (4) и (5) необходимо произвести замену $y \rightarrow y - nD$.

На рис. 1 схематически представлен полисинтетический двойник, для которого справедливы соотношения (6) и (7). Пусть направления краевой и винтовой составляющих вектора Бюргера двойникующих дислокаций по отношению к полисинтетическому двойнику будут такими, как это показано на рис. 1. В случае прямолинейных границ двойников в полисинтетическом двойнике имеют место следующие соотношения:

$$f_1(x_0) = \frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L} \right);
 \tag{8}$$

$$f_2(x_0) = -\frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L} \right).
 \tag{9}$$

При $\rho(x_0) = \rho_2(x_0) = \text{const} = \rho$ для скалывающих напряжений σ_{xy} получим результат, представленный на рис. 2. Принималось: $L = 100$ мкм; $H = 21$ мкм; $D = 31$ мкм; $N = 5$. Для

В данных соотношениях $\sigma_{ij}^{(1)}(x, y)$ и $\sigma_{ij}^{(2)}(x, y)$ – напряжения на каждой из двойниковых границ; L – длина двойника; $f_1(x_0)$, $f_2(x_0)$ – функции, определяющие профиль каждой из двойниковых границ; $\rho_1(x_0)$, $\rho_2(x_0)$ – плотности дислокаций на каждой двойниковой границе; $\sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0)$, $\sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0)$ – напря-

удобства рассчитывалась приведенная величина $\sigma_{xy}^*(x, y) = \sigma_{xy}(x, y) / \rho A$, где $A = \frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}$.

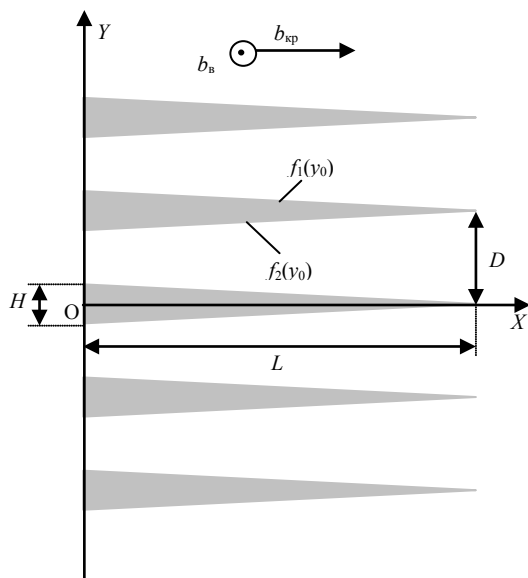


Рис. 1. Схематическое изображение полисинтетического двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла

Из рис. 2 видно, что напряжения локализуются на границах двойников, входящих в состав полисинтетического двойника, и у их вершин. У вершин двойников напряжения меняют знак на противоположный. С удалением от вершин двойников в сторону их роста также имеется область локализации положительных сдвиговых напряжений.

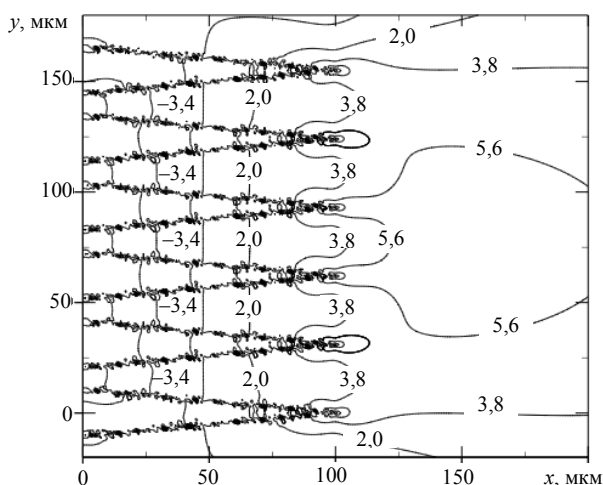


Рис. 2. Конфигурация полей сдвиговых напряжений σ_{xx} у полисинтетического двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла

Аналогичным образом можно рассчитать поля напряжений у полисинтетического двойника с различной формой двойниковых границ входящих в его состав двойников. Это осуществимо путем задания функций $f_1(x_0)$ и $f_2(x_0)$. Плотность же двойникующих дислокаций на двойниковых границах задается функциями $\rho_1(x_0)$ и $\rho_2(x_0)$.

ВЫВОД

На основании дислокационной макроскопической модели предложена методика расчета полей напряжений у полисинтетического двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла. Методика позволяет рассматривать напряженное состояние внутри двойников, не прибегая к приближению тонких двойников. В качестве примера приведен расчет скалывающихся напряжений у полисинтетического двойника с двойниками, имеющими прямолинейные границы при равномерном распределении двойникующих дислокаций на границах.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Остриков, О. М.** Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О. М. Остриков // Вестник ГГТУ им. П. О. Сухого. – 2006. – № 2. – С. 10–18.
2. **Косевич, А. М.** Дислокационная теория упругого двойникового кристаллов / А. М. Косевич, В. С. Бойко // Успехи физических наук. – 1971. – Т. 104, № 2. – С. 101–255.
3. **Остриков, О. М.** Форма клиновидных двойников в локально деформируемых ионноимплантированных монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2006. – № 9. – С. 5–7.
4. **Остриков, О. М.** Использование полипарацелиленовых тонких пленок при исследовании пластической деформации монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Прикладная механика и техническая физика. – 2006. – Т. 47, № 4. – С. 162–166.
5. **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.
6. **Классен-Неклюдова, М. В.** Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – М.: АН СССР, 1960. – 266 с.
7. **Остриков, О. М.** Исследование механического двойникового монокристаллов сурьмы методом нанопрофилирования / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Инженерно-физический журнал. – 2003. – Т. 76, № 1. – С. 170–172.

Поступила 30.10.2007