

01;05

Дислокационная модель некогерентного нетонкого двойника

© О.М. Остриков

Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого,
246746 Гомель, Белоруссия
e-mail: omostrikov@mail.ru

(Поступило в Редакцию 13 декабря 2011 г. В окончательной редакции 12 марта 2012 г.)

Получено условие равновесия нетонкого двойника на основании дислокационной модели, использующей приближение непрерывного распределения двойникоующих дислокаций на двойниковых границах. Показана применимость модели нетонкого двойника для упругой и неупругой стадий процесса двойникования. Установлено, что теория тонкого двойника является частным случаем разработанной дислокационной модели нетонкого двойника.

Введение

Механическое двойникование является многостадийным процессом [1]. Экспериментальными методами достаточно хорошо изучены все известные стадии процесса двойникования [1–5]. Хорошо развита теория упругого двойникования [6–8]. В работе [9] показана возможность ее применения и для стадии остаточного двойника. В существующих моделях в зависимости от масштабного уровня используется приближение непрерывного [5–9] или дискретного [5,10,11] распределения двойникоующих дислокаций на двойниковых границах. В работах [5,12] было предложено использовать модели дискретного распределения двойникоующих дислокаций на двойниковых границах для описания процесса механического нанодвойникования, экспериментально изученного в работе [4]. Недостатком моделей тонкого двойника является то, что практический интерес представляют двойники, у которых отношение ширины у устья и длины имеет порядок $10^{-2}–10^{-1}$, в то время как в случае тонкого двойника это соотношение имеет порядок $10^{-4}–10^{-3}$ [8]. Соотношение геометрических параметров порядка $10^{-2}–10^{-1}$ преимущественно имеют остаточные двойники, часто наблюдаемые на эксперименте [4,5,10]. Нетонкие двойники имеют высокую плотность двойникоующих дислокаций на границах. Это приводит к локализации больших внутренних напряжений и зарождению разрушения [10]. Поэтому изучение нетонких двойников имеет важное научное и практическое значение для разработки технологий обработки двойникоующихся материалов и управления процессом их разрушения, вызванным двойникованием.

Целью настоящей работы стало развитие дислокационной модели упругого и остаточного двойника клиновидной формы при непрерывном распределении двойникоующих дислокаций на двойниковых границах без использования приближения тонкого двойника.

Постановка задачи и условие равновесия

Расчетам смещений, деформаций и напряжений у клиновидного нетонкого двойника посвящен цикл работ [5,13–15]. Было показано, что в этом случае напряжения у нетонкого некогерентного двойника могут быть рассчитаны по формуле

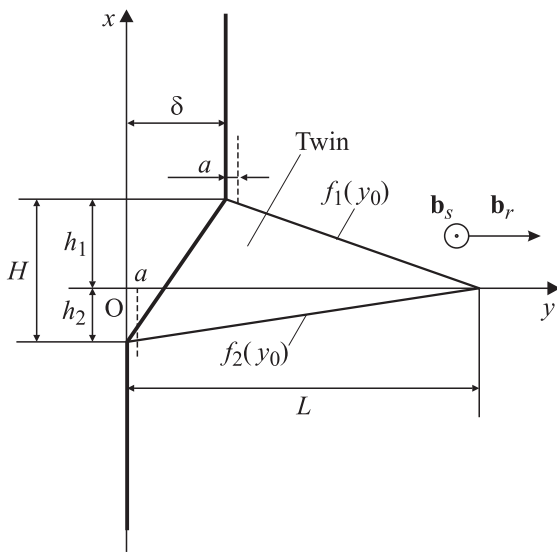
$$\sigma_{ij}(x, y) = \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(2)}(x, y), \quad (1)$$

где $\sigma_{ij}^{(1)}(x, y)$ и $\sigma_{ij}^{(2)}(x, y)$ — созданные каждой двойниковой границей распределения напряжений, определяемые из соотношений

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x, y) = \int_{\delta+a}^L \sqrt{1 + [f'_1(y_0)]^2} \rho_1(y_0) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, y_0) dy_0, \quad (2)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x, y) = \int_a^L \sqrt{1 + [f'_2(y_0)]^2} \rho_2(y_0) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, y_0) dy_0. \quad (3)$$

В соотношениях (2) и (3) L — длина двойника, δ — величина ступеньки, которая образуется на поверхности кристалла у устья двойника в результате поворота кристаллической решетки, a — малый параметр (как правило, $a \ll \delta$), определяющий глубину залегания источника двойникоующих дислокаций [8], $f_1(y_0)$ и $f_2(y_0)$ — функции, определяющие форму каждой двойниковой границы (см. рисунок), $\rho_1(y_0)$ и $\rho_2(y_0)$ — линейные плотности двойникоующих дислокаций на каждой двойниковой границе, y_0 — параметр интегрирования, $\sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, y_0)$ и $\sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, y_0)$ — напряжения, создаваемые единичной дислокацией, находящейся на одной или другой двойниковой границе в случае, когда двойник находится у поверхности кристалла. Эти напряжения по аналогии с [9], как это было показано в [5,15], находятся по



Схематическое изображение находящегося у поверхности нетонкого двойника клиновидной формы.

формулам

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{k,0}(x, y, y_0) = & -B_r \\ & \times \frac{(x - f_k(y_0))[(x - f_k(y_0))^2 - (y - y_0)^2]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} \\ & + B_r \frac{(x - f_k(y_0))[(x - f_k(y_0))^2 - (y + y_0)^2]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} + 4B_r \\ & \times \frac{(x - f_k(y_0))y_0[(x - f_k(y_0))^2(3y + 2y_0) - (y + y_0)^2(y - 2y_0)]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{k,0}(x, y, y_0) = & -B_r \\ & \times \frac{(x - f_k(y_0))[(x - f_k(y_0))^2 + 3(y - y_0)^2]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} \\ & + B_r \frac{(x - f_k(y_0))[(x - f_k(y_0))^2 + 3(y + y_0)^2]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} \\ & - 4B_r \frac{(x - f_k(y_0))yy_0[(x - f_k(y_0))^2 - 3(y + y_0)^2]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{k,0}(x, y, y_0) = & -B_r \\ & \times \frac{(y - y_0)[(x - f_k(y_0))^2 - (y - y_0)^2]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y - y_0)^2]^2} \\ & + B_r \frac{(y + y_0)[(x - f_k(y_0))^2 - (y + y_0)^2]}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^2} - 2B_r y_0 \\ & \times \frac{(x - f_k(y_0))^4 - 6(x - f_k(y_0))^2 y(y + y_0) + (y - y_0)(y + y_0)^3}{[(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2]^3}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xz}^{(k,0)}(x, y, y_0) = & B_s \left[\frac{y - y_0}{(x - f_k(y_0))^2 + (y - y_0)^2} \right. \\ & \left. - \frac{y + y_0}{(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2} \right], \\ \sigma_{yz}^{(k,0)}(x, y, y_0) = & B_s \left[\frac{x - f_k(y_0)}{(x - f_k(y_0))^2 + (y - y_0)^2} \right. \\ & \left. - \frac{x - f_k(y_0)}{(x - f_k(y_0))^2 + (y + y_0)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь k равно 1 или 2,

$$B_r = \frac{\mu b_r}{2\pi(1 - \nu)}, \quad B_s = \frac{\mu b_s}{2\pi},$$

μ — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, b_r и b_s — модули краевой и винтовой составляющих вектора Бюргера частичной двойнивающей дислокации. Ориентирование осей декартовой системы координат и составляющих вектора Бюргера двойнивающих дислокаций показано на рисунке.

Ширина двойника в точке y в случае нетонкого двойника определяется по формуле

$$H(y) = h_1(y) + h_2(y), \quad (5)$$

где

$$h_1(y) = c \int_y^L \rho_1(\xi) d\xi, \quad (6)$$

$$h_2(y) = c \int_y^L \rho_2(\xi) d\xi. \quad (7)$$

Здесь c — межплоскостное расстояние в направлении, перпендикулярном плоскости двойникования (ось Oy на рисунке — след плоскости двойникования), ξ — параметр интегрирования.

Подставляя (6) и (7) в (5), получим

$$H(y) = c \int_y^L (\rho_1(\xi) + \rho_2(\xi)) d\xi, \quad (8)$$

На двойнивающие дислокации, находящиеся у поверхности кристалла, действует сила притяжения, определяемая из соотношения [9]

$$F_s = - \frac{B_r b_r + B_s b_s}{2y}. \quad (9)$$

Тогда по аналогии с [9] для нетонкого некогерентного двойника запишем условие равновесия в виде

$$\begin{aligned} b_r \sigma_{xy}(0, y) + b_s \sigma_{xz}(0, y) - \frac{B_r b_r + B_s b_s}{2y} \\ + S(y) + b_r \sigma_{xy}^e(0, y) + b_s \sigma_{xz}^e(0, y) = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где σ_{xy}^e и σ_{xz}^e — внешние упругие напряжения, $S(y)$ — сила сопротивления движению двойнивающих дислокаций [9].

Подставляя (1) в (10) с учетом (2)–(4), получим условие равновесия в интегродифференциальной форме

$$\begin{aligned}
& \int_{\delta+a}^L \sqrt{1+(f'_1(\xi))^2} \rho_1(\xi) \frac{(y-\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_1^2(\xi) + (y-\xi)^2} d\xi \\
& + \int_a^L \sqrt{1+(f'_2(\xi))^2} \rho_2(\xi) \frac{(y-\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_2^2(\xi) + (y-\xi)^2} d\xi \\
& - \int_{\delta+a}^L \sqrt{1+(f'_1(\xi))^2} \rho_1(\xi) \frac{(y+\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_1^2(\xi) + (y+\xi)^2} d\xi \\
& - \int_a^L \sqrt{1+(f'_2(\xi))^2} \rho_2(\xi) \frac{(y+\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_2^2(\xi) + (y+\xi)^2} d\xi \\
& - 2b_r B_r \int_{\delta+a}^L \sqrt{1+(f'_1(\xi))^2} \rho_1(\xi) \\
& \times \frac{f_1^4(\xi) - 6y f_1^2(\xi)(y+\xi) + (y-\xi)(y+\xi)^3}{(f_1^2(\xi) + (y+\xi)^2)^3} \xi d\xi \\
& - 2b_r B_r \int_a^L \sqrt{1+(f'_2(\xi))^2} \rho_2(\xi) \\
& \times \frac{f_2^4(\xi) - 6y f_2^2(\xi)(y+\xi) + (y-\xi)(y+\xi)^3}{(f_2^2(\xi) + (y+\xi)^2)^3} \xi d\xi = f(y),
\end{aligned} \tag{11}$$

где

$$\begin{aligned}
f(y) = & \frac{B_r b_r + B_s b_s}{2y} - S(y) - b_r \sigma_{xy}^e(0, y) \\
& - b_s \sigma_{xz}^e(0, y), \tag{12}
\end{aligned}$$

В (11) функции плотностей двойникующих дислокаций должны удовлетворять условию нормировки

$$\int_a^L (\rho_1(y) + \rho_2(y)) dy = \frac{\delta}{b_r} = \frac{\beta}{b_s}, \tag{13}$$

где, согласно [9], β — сдвиг вдоль оси Oz , направленной перпендикулярно плоскости рисунка. Этот сдвиг происходит на поверхности кристалла в результате образования двойника.

Условию (11) можно придать более компактный вид

$$\begin{aligned}
& \int_{\delta+a}^L \sqrt{1+(f'_1(\xi))^2} \rho_1(\xi) (K_{11}(y, \xi) - K_{12}(y, \xi) \\
& - \xi K_{13}(y, \xi)) d\xi + \int_a^L \sqrt{1+(f'_2(\xi))^2} \rho_2(\xi) (K_{21}(y, \xi) \\
& - K_{22}(y, \xi) - \xi K_{23}(y, \xi)) d\xi = f(y), \tag{14}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
K_{11}(y, \xi) &= \frac{(y-\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_1^2(\xi) + (y-\xi)^2}, \\
K_{12}(y, \xi) &= \frac{(y+\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_1^2(\xi) + (y+\xi)^2}, \\
K_{13}(y, \xi) &= b_r B_r \\
& \times \frac{f_1^4(\xi) - 6y f_1^2(\xi)(y+\xi) + (y-\xi)(y+\xi)^3}{(f_1^2(\xi) + (y+\xi)^2)^3}, \\
K_{21}(y, \xi) &= \frac{(y-\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_2^2(\xi) + (y-\xi)^2}, \\
K_{22}(y, \xi) &= \frac{(y+\xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{f_2^2(\xi) + (y+\xi)^2}, \\
K_{23}(y, \xi) &= b_r B_r \\
& \times \frac{f_2^4(\xi) - 6y f_2^2(\xi)(y+\xi) + (y-\xi)(y+\xi)^3}{(f_2^2(\xi) + (y+\xi)^2)^3}. \tag{15}
\end{aligned}$$

Анализ условия равновесия

Аналитическое решение уравнения (14) получить довольно сложно. Поэтому целесообразно рассмотреть некоторых частных случаев. В первую очередь требует рассмотрения вариант, когда $f_1(\xi) = f_2(\xi) = 0$. Тогда, полагая $\rho_1(\xi) = \rho_2(\xi) = \rho(\xi)$, уравнение (14) примет вид

$$\text{V.p.} \int_a^L \frac{\rho(\xi) d\xi}{\xi - y} + \int_a^L \frac{\rho(\xi) d\xi}{\xi + y} + M \int_a^L \frac{\rho(\xi)(y - \xi) d\xi}{(\xi + y)^3} = \alpha F(y), \tag{16}$$

где, как и в [15],

$$F(y) = \frac{b_r \sigma_{xy}^e(0, y) + b_s \sigma_{xz}^e(0, y) + S(y)}{B_r b_r + B_s b_s} - \frac{1}{2y}, \tag{17}$$

$$M = \frac{B_r b_r}{B_r b_r + B_s b_s}. \tag{18}$$

Отличие уравнения (16) от сингулярного уравнения равновесия тонкого двойника, приведенного в работе [9],

заключается в наличии в (16) константы $\alpha = 1/2$. Появление такой константы обусловлено тем, в работе [9] при замене двух двойниковых границ одной не было учтено, что в такой одиночной границе дислокаций должно быть столько же, сколько их имеется у двух двойниковых границ, а именно в два раза больше, чем это принято в работе [9]. Либо мощность двойникующих дислокаций на объединенной границе должно быть в два раза выше, чем на каждой границе двойникового клина.

Возможность перехода уравнений (11) и (14) к уравнению (16) в предельном случае тонкого двойника показывает, что развиваемая модель нетонкого двойника является более общей, чем модель тонкого двойника, и содержит в себе последнюю как частный случай.

Как было показано в [9], сингулярное уравнение типа (16) сводится к уравнению Фредгольма

$$\rho(y) - \int_a^L N(y, \xi) \rho(\xi) d\xi = G(y), \quad (19)$$

где, как и в [9],

$$N(y, \xi) = \frac{1}{\pi^2 \sqrt{(y-a)(L-y)}} \text{V.p.} \times \int_a^L \left[\frac{1}{\eta + \xi} + M \frac{(\eta - \xi)\xi}{(\eta + \xi)^3} \right] \frac{\sqrt{(\eta-a)(L-y)}}{\eta - y} d\eta, \quad (20)$$

а $G(y)$ в случае нетонкого двойника отличается от приведенного в [9] соотношения на константу α и имеет вид

$$G(y) = \frac{\alpha}{\pi^2 \sqrt{(y-a)(L-y)}} \times \left\{ D - \text{V.p.} \int_z^L \frac{\sqrt{(\xi-a)(L-\xi)}}{\xi - y} f(\xi) d\xi \right\}. \quad (21)$$

Здесь D — константа.

С практической точки зрения интересно рассмотрение частных случаев, когда в уравнениях (11) или (14) задается форма границ, т.е. задаются функции $f_1(\xi)$ и $f_2(\xi)$, так как форма границ двойников легко определяется экспериментально. Полагая $f_1(\xi) = h_1(\xi)$ и $f_2(\xi) = h_2(\xi)$, зная форму двойниковых границ, из (6) и (7) можно определить плотность двойникующих дислокаций на каждой двойниковой границе по формулам, следующим из (6) и (7):

$$\rho_1(y) = -\frac{1}{c} \frac{dh_1(y)}{dy} = -\frac{1}{c} \frac{df_1(y)}{dy}, \quad (22)$$

$$\rho_2(y) = -\frac{1}{c} \frac{dh_2(y)}{dy} = -\frac{1}{c} \frac{df_2(y)}{dy}. \quad (23)$$

Данные соотношения позволяют соотношения (14) представить в виде

$$\int_{\delta+a}^L \sqrt{1 + (c\rho_1(\xi))^2} \rho_1(\xi) (K_{11}(y, \xi) - K_{12}(y, \xi) - \xi K_{13}(y, \xi)) d\xi + \int_a^L \sqrt{1 + (c\rho_2(\xi))^2} \rho_2(\xi) \times (K_{21}(y, \xi) - K_{22}(y, \xi) - \xi K_{23}(y, \xi)) d\xi = f(y). \quad (24)$$

Таким образом, интегродифференциальное условие равновесия (14) стало интегральным.

Пусть обе границы двойника прямолинейны и описываются функциями [5]

$$f_1(\xi) = \frac{H}{2} \left(1 - \frac{\xi}{L} \right), \quad (25)$$

$$f_2(\xi) = -\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\xi}{L} \right), \quad (26)$$

где H — ширина двойника у устья (принималось $h_1 = h_2 = \frac{H}{2}$).

Тогда из (22), (23) следует

$$\rho_1 = \rho_2 = \frac{H}{2cL}. \quad (27)$$

При получении формулы (27) правая часть в (22) и (23) бралась по модулю. Условие равновесия для случая прямолинейных границ двойника принимает вид

$$\int_{\delta+a}^L (K_{11}^{(\alpha)}(y, \xi) - K_{12}^{(\alpha)}(y, \xi) - \xi K_{13}^{(\alpha)}(y, \xi)) d\xi + \int_a^L (K_{21}^{(\alpha)}(y, \xi) - K_{22}^{(\alpha)}(y, \xi) - \xi K_{23}^{(\alpha)}(y, \xi)) d\xi = \frac{4cL^2}{H\sqrt{4L^2 + H^2}} f(y), \quad (28)$$

где

$$K_{11}^{(\alpha)}(y, \xi) = K_{21}^{(\alpha)}(y, \xi) = \frac{(y - \xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{\left(\frac{H}{2L}\right)^2 (L - \xi)^2 + (y - \xi)^2},$$

$$K_{12}^{(\alpha)}(y, \xi) = K_{22}^{(\alpha)}(y, \xi) = \frac{(y + \xi)(b_r B_r + b_s B_s)}{\left(\frac{H}{2L}\right)^2 (L - \xi)^2 + (y + \xi)^2},$$

$$K_{13}^{(\alpha)}(y, \xi) = K_{23}^{(\alpha)}(y, \xi) = b_r B_r \times \frac{\left(\frac{H}{2L}\right)^4 (L - \xi)^4 - 6y \left(\frac{H}{2L}\right)^2 (L - \xi)^2 (y + \xi) + (y - \xi)(y + \xi)^3}{\left(\left(\frac{H}{2L}\right)^2 (L - \xi)^2 + (y + \xi)^2\right)^3}. \quad (29)$$

Интегрирование в (28) приводит к громоздким выражениям. Поэтому целесообразно сделать ряд допущений, позволяющих существенно упростить математические выкладки. Во-первых, примем $a = 0$. Это возможно в связи с тем, что параметр a имеет порядок расстояния между соседними двойникующими дислокациями, которое в данной модели принято бесконечно малым, благодаря чему распределение двойникующих дислокаций на двойниковых границах полагается непрерывным. Во-вторых, это же допущение непрерывности распределения двойникующих дислокаций подразумевает, что длина двойника L достаточно большая, значительно больше, чем δ . Поэтому можно принять $\delta = 0$. В-третьих, предположим, что двойник образовался в результате чистого сдвига. Тогда $b_r = 0$ [9].

Такие допущения позволяют (28) представить в виде

$$f(y) = \frac{b_s B_s H}{c \sqrt{4L^2 + H^2}} \left[2 \ln \frac{y^2 + \frac{H^2}{4}}{y^2 - L^2} + \frac{H}{L} \left(\operatorname{arctg} \frac{y + \frac{H^2}{4}}{\frac{H}{2L}(y - L)} + \operatorname{arctg} \frac{y - \frac{H^2}{4}}{\frac{H}{2L}(y + L)} \right) \right]. \quad (30)$$

Сопоставляя (12) и (30), получим соотношение для расчета $S(y)$. Для остаточного винтового двойника задача упрощается, так как в этом случае, согласно [9], в (12) принимается $\sigma_{xz}^e = 0$.

Аналогичные расчеты могут быть проведены и для клиновидных двойников с криволинейными границами. При этом, как и в [5], форма границ может быть задана гиперболическими или параболическими функциями.

Заключение

Таким образом, впервые с использованием приближения непрерывного распределения двойникующих дислокаций на границах некогерентного двойника получено условие равновесия нетонкого двойника. При этом решена проблема теории двойников, не отвечающих требованиям приближения тонкого двойника. Показана применимость модели нетонкого двойника к упругой и неупругой стадии процесса двойникования. В качестве примера использования модели получена взаимосвязь силы неупругой природы, действующей на двойникующие дислокации, с геометрическими параметрами винтового остаточного двойника, имеющего прямолинейные границы.

Список литературы

- [1] Гарбер Р.И. // ЖЭТФ. 1947. Т. 17. № 1. С. 48–62.
- [2] Классен-Неклюдова М.В. Механическое двойникование кристаллов. М.: АН СССР, 1960. 262 с.
- [3] Лаврентьев Ф.Ф. // Физика металлов и металловедение. 1964. Т. 18. № 3. С. 428–436.
- [4] Остриков О.М. // Известия вузов. Черная металлургия. 2002. № 3. С. 51–52.
- [5] Остриков О.М. Механика двойникования твердых тел: монография. Гомель: Учреждение образования „Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого“, 2008. 301 с.
- [6] Лифшиц И.М. // ЖЭТФ. 1948. Т. 18. № 12. С. 1134–1143.
- [7] Косевич А.М., Бойко В.С. // УФН. 1971. Т. 104. № 2. С. 101–255.
- [8] Косевич А.М. Дислокации в теории упругости. Киев: Наук. думка, 1978. 220 с.
- [9] Косевич А.М., Пастур Л.А. // ФТТ. 1961. Т. 3. № 4. С. 1291–1297.
- [10] Финкель В.М., Федоров В.А., Королев А.П. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании. Ростов-на-Дону, 1990. 172 с.
- [11] Остриков О.М. // ПМТФ. 2002. Т. 43. № 4. С. 180–182.
- [12] Остриков О.М. // Известия РАН. Механика твердого тела. 2008. № 5. С. 124–129.
- [13] Остриков О.М. // Известия высших учебных заведений. Физика. 2009. № 4. С. 36–39.
- [14] Остриков О.М. // Известия РАН. Механика твердого тела. 2009. № 4. С. 52–58.
- [15] Остриков О.М. // ЖТФ. 2009. Т. 79. № 5. С. 137–139.