

ЛИНЕЙНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ДИСКЛИНАЦИЙ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ И НАНОКРИСТАЛЛАХ

М.Ю.Гуткин, К.Н.Микаелян, И.А.Овидько

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург
Поступило в Редакцию 29 июня 1994 г.

Поведение дисклинаций в поликристаллах и нанокристаллах является предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований (например, [1-4]). Особый интерес представляет изучение свойств расщепляющихся дисклинаций. Согласно [5-7], дисклинации в тройных стыках границ зерен (ГЗ) в поликристаллах и нанокристаллах способны расщепляться на объемные ансамбли дисклинаций меньшей мощности, что уменьшает упругую энергию системы и сопровождается локальной аморфизацией вблизи таких стыков. В малых частицах с пентагональной симметрией процесс элементарного расщепления совершенной дисклинации на две частичные является одним из эффективных каналов релаксации упругой энергии [4]. В общем случае наряду с рассмотренными в [4-7] объемным и элементарным процессами расщепления дисклинаций в поликристаллах и нанокристаллах возможно и линейное расщепление, т.е. расщепление исходной дисклинации в ГЗ на ряд дисклинаций меньшей мощности (рис. 1), расположенный вдоль линии ГЗ. Основная цель настоящей работы — теоретический анализ энергетических характеристик процесса линейного расщепления дисклинаций.

Рассмотрим линейное расщепление исходной клиновидной дисклинации мощностью ω в ГЗ на дисклинации (рис. 1), которые: 1) расположены в ряд вдоль ГЗ на расстоянии R_d друг от друга в цилиндре радиусом R , т.е. радиус-вектор i -й дисклинации $R_i = iR_d$, где $i = 0, \dots, N-1$; 2) имеют одинаковую положительную мощность γ , т.е. $\gamma_i = \omega/N = \gamma$. Используя формулу для энергии парного взаимодействия между двумя произвольно расположенными в цилиндре со свободной от нагрузки

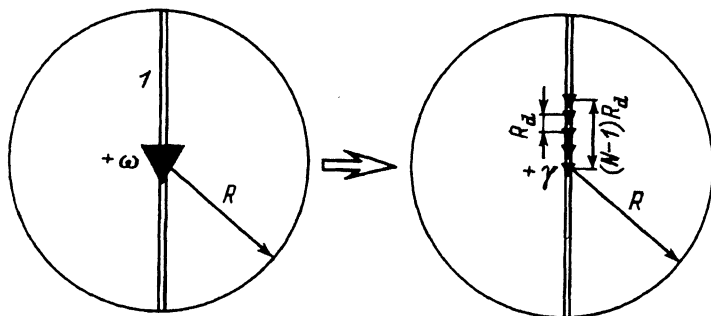


Рис. 1. Линейное расщепление исходной зернограничной дисклинации на N расположенных в ряд дисклинаций мощностью $\gamma = \omega/N$.
1 — граница зерна.

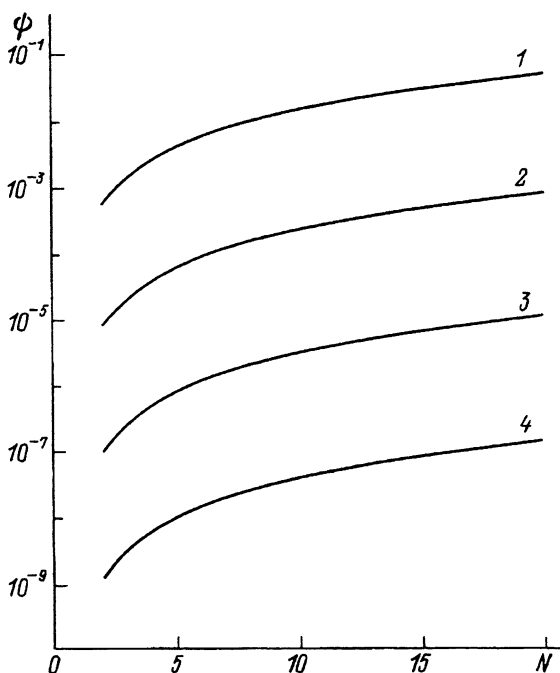


Рис. 2. Зависимость функции $\Psi(N)$, характеризующей выигрыш в энергии системы при расщеплении зернограничной дисклинации, от числа образовавшихся при этом дисклинаций N при $R_d/R = 10^{-2}$ (1), 10^{-3} (2), 10^{-4} (3), 10^{-5} (4).

поверхностью клиновыми дисклинациями [1,8], запишем полную упругую энергию N параллельных оси цилиндра дисклинаций в виде

$$W_N = \frac{G(N\gamma)^2 R^2}{16\pi(1-\nu)} \left\{ 1 - \frac{R_d^2}{R^2 N^2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \times \right. \\ \left. \times \left[i^2 + j^2 - \frac{i^2 j^2 R_d^2}{R^2} + (i-j)^2 \ln \frac{i^2 j^2 R_d^4 - 2ij(i-j)^2 R_d^2 R^2 + R^4}{(1-j)^2 R_d^2 R^2} \right] \right\}, \quad (1)$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, i, j — индексы суммированных дисклинаций. Первое слагаемое — единица — в (1) соответствует собственной упругой энергии исходной зернограничной дисклинации (рис. 1) мощностью $\omega = N\gamma$, второе — выигрышу ΔW в полной энергии системы, обусловленному расщеплением исходной дисклинации.

На первой стадии линейного расщепления $(N-1)R_d \ll R$. При этом в выражении для ΔW можно пренебречь третьим слагаемым в квадратных скобках, а также первым и вторым слагаемыми в числителе выражения под логарифмом, после чего ΔW представим в виде

$$\Delta W = -\frac{G(N\gamma)^2 R^2}{16\pi(1-\nu)} \Psi(N), \quad (2)$$

где

$$\Psi(N) = \frac{R_d^2}{R^2 N^2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \left[i^2 + j^2 + 2(i-j)^2 \ln \frac{R}{|i-j|R_d} \right]. \quad (3)$$

Зависимость $\Psi(N)$ приведена на рис. 2, откуда видно, что выигрыш в энергии при линейном расщеплении дисклинаций тем больше, чем больше число N образовавшихся при этом новых дисклинаций и отношение R_d/R расстояния между ними к радиусу цилиндра. Можно показать, что данный вывод не меняется и в той ситуации, когда соотношение $(N-1)R_d \ll R$ не выполняется.

В случае, когда ряд дисклинаций (рис. 1) имеет фиксированную длину R_m (ограниченную, например, длиной ГЗ), радиус-вектор i -й дисклинации есть $R_i = iR_m/(N-1)$ и функция $\Psi(N)$ трансформируется в функцию

$$\tilde{\Psi}(N) = \frac{R_m^2}{R^2 N^2 (N-1)^2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} \left[i^2 + j^2 + 2(i-j)^2 \ln \frac{(N-1)R}{|i-j|R_m} \right]. \quad (4)$$

$\tilde{\Psi}(N)$ имеет максимум при $N = 2$, определяя энергетическую предпочтительность элементарного линейного расщепления исходной зернограничной дисклинации на две дисклинации, расположенные на максимально большом допустимом расстоянии R_m друг от друга.

Таким образом, линейное расщепление дисклинаций (рис. 1) в зернограничной фазе поликристаллов и нанокристаллов представляет собой эффективный канал релаксации упругой энергии. Такое расщепление сопровождается изменением зернограничной структуры (в ГЗ образуется «дефект упаковки» между дисклинациями), уменьшает вероятность зарождения вблизи ГЗ микротрещин, стимулирует зернограничную диффузию и генерирование дислокаций. Анализ этих процессов — предмет дальнейших исследований авторов настоящей работы.

Авторы благодарны Российскому фонду фундаментальных исследований (грант 93-02-17411) и Фонду Дж. Сороса (грант R4S000) за поддержку при написании этой работы.

Список литературы

- [1] Romanov A.E., Vladimirov V.I. // Dislocations in Solids. V. 9 / Ed. F.R.N.Nabarro. Amsterdam: Elsevier, 1992. P. 191–402.
- [2] Дисклинации и ротационная деформация твердых тел / Под ред. А.Е.Романова. Л.: Изд-во ФТИ, 1990. 226 с.
- [3] Gryaznov V.G., Tanakov M.Yu., Trusov L.I. // J. Mater. Sci. 1992. V. 27. P. 4829–4841.
- [4] Gryaznov V.G., Trusov L.I. // Prog. Mater. Sci. 1993. V. 37. N 4. P. 289–401.
- [5] Овидько И.А., Осипов А.В. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 1. С. 288–292.
- [6] Osipov A.V., Ovid'ko I.A. // Appl. Phys. A. 1992. V. 54. N 3. P. 517–519.
- [7] Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. // Phil. Mag. 1994. In press.
- [8] Романов А.Е. // Экспериментальное исследование и теоретическое описание дисклинаций / Под ред. В.И.Владимирова. Л.: Изд-во ФТИ, 1984. С. 110–135.