

01;05

## Расчет энергии нанодвойника клиновидной формы в рамках дислокационной мезоскопической модели

© О.М. Остриков

Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого,  
246746 Гомель, Белоруссия  
e-mail: ostrikov@gstu.gomel.by

(Поступило в Редакцию 28 марта 2007 г.)

На основании дислокационной мезоскопической модели проведен расчет полной энергии микро- и нанодвойника клиновидной формы. Полная энергия двойника представлялась суперпозицией упругой энергии, энергии взаимодействия двойниующих дислокаций и энергии дефектов упаковки частичных дислокаций клиновидного двойника. Установлено, что процесс развития двойника контролируется энергией взаимодействия двойниующих дислокаций, которая в случае микродвойника на пять порядков выше упругой энергии и на шесть порядков выше энергии дефектов упаковки. В случае нанодвойника с числом двойниующих дислокаций на двойниковой границе, меньшим двадцати, значения энергии дефектов упаковки, упругой энергии и энергии взаимодействия двойниующих дислокаций имеют один порядок. Поэтому процесс зарождения клиновидных двойников контролируется всеми рассматриваемыми энергиями, составляющими полную энергию клиновидного двойника. С ростом длины двойника при фиксированных ширине и числе двойниующих дислокаций на двойниковых границах полная энергия клиновидного двойника растет по модулю несмотря на уменьшение плотности двойниующих дислокаций на двойниковых границах. Это указывает на важную роль дальнедействующих полей напряжений двойниующих дислокаций в процессе развития клиновидного двойника.

PACS: 61.72.Mn, 61.72.Bb

### Введение

Развитие теории двойниования кристаллов в настоящее время является актуальным научным направлением. В первую очередь это связано с фундаментальностью явления двойниования, проявляющегося в определенных условиях деформирования у большого класса применяемых в технике материалов в [1–5]. К настоящему времени проведен большой объем экспериментальных исследований по изучению двойниования кристаллов и влиянию на характер его развития различных энергетических воздействий [1,6–9]. Однако существующая теория тонкого двойника [1,10] из-за принятых в ней ограничений не позволяет в полной мере описать явление двойниования. В работах [11–13] делалась попытка привлечения математического аппарата теории дисклинаций для описания механизмов двойниования, что является перспективным и указывает на назревшую в настоящее время в науке необходимость развития теории двойниования.

Целью данной работы стал расчет энергии заклинившегося клиновидного двойника с использованием классического подхода, основанного на теории дислокаций, в рамках такого масштабного уровня, который позволял бы учитывать численное значение параметра, определяющего расстояние между двойниующими дислокациями.

### Постановка задачи и ее решение

Представим клиновидный двойник, состоящий из совокупности двойниующих дислокаций, расположенных друг относительно друга так, как это показано на рис. 1. Для такой системы дислокаций в случае заклинившегося двойника энергия, приходящаяся на суммарную длину всех двойниующих дислокаций, может быть определена

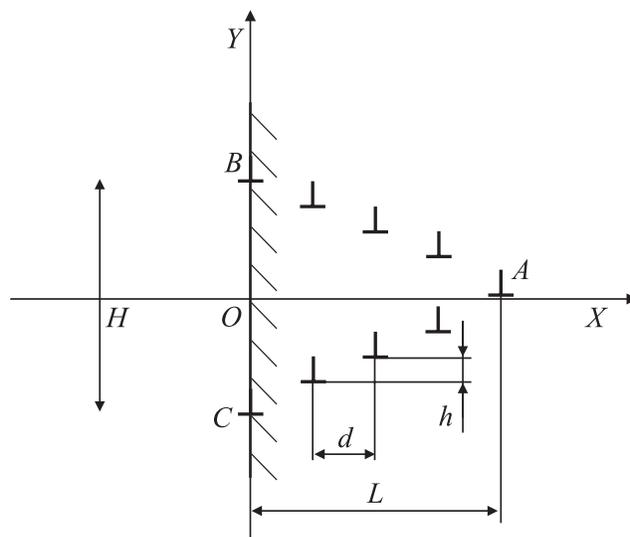


Рис. 1.

из соотношения

$$\frac{W}{\Sigma L_D} = \frac{W_E}{\Sigma L_D} + \frac{W_I}{\Sigma L_D} + \frac{\gamma}{\Sigma L_D}, \quad (1)$$

где  $\frac{W_E}{\Sigma L_D}$  — упругая энергия двойникующих дислокаций, приходящаяся на суммарную длину всех двойникующих дислокаций;  $\frac{W_I}{\Sigma L_D}$  — энергия взаимодействия между двойникующими дислокациями;  $\frac{\gamma}{\Sigma L_D}$  — энергия дефектов упаковки, так как двойникующие дислокации являются частичными дислокациями Шокли [1,14]. При этом их вектор Бюргерса ( $\mathbf{b}$ ) можно разложить на две составляющие: винтовую ( $\mathbf{b}_s$ ) и краевую ( $\mathbf{b}_{ed}$ ). Тогда упругую энергию двойникующих дислокаций, приходящуюся на суммарную длину всех двойникующих дислокаций, можно определить как

$$\frac{W_E}{\Sigma L_D} = \frac{W_E^{ed}}{\Sigma L_D} + \frac{W_E^s}{\Sigma L_D}, \quad (2)$$

где  $\frac{W_E^{ed}}{\Sigma L_D}$  и  $\frac{W_E^s}{\Sigma L_D}$  — упругие энергии, связанные с краевой и винтовой составляющими двойникующих дислокаций соответственно.

Упругая энергия единичной краевой дислокации на единицу ее длины ( $L_D$ ) определяется из соотношения [14]:

$$\frac{(W_E^{ed})_i}{L_D} = \frac{\mu b_{ed}^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{\alpha R_i}{b_{ed}}, \quad (3)$$

где  $\mu$  — модуль сдвига;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $\alpha$  — безразмерный параметр (для большинства металлов  $\alpha = 4$  [14]),  $R_i$  — расстояние от  $i$ -й двойникующей дислокации до поверхности, след которой на плоскости XOY (рис. 1) совпадает с осью OY. Примем  $R_i = L - id$  (здесь  $L$  — длина двойника).

В случае винтовой дислокации справедливо выражение для упругой энергии [14]:

$$\frac{(W_E^s)_i}{L_D} = \frac{\mu b_s^2}{4\pi} \ln \frac{\alpha R_i}{b_s}. \quad (4)$$

Тогда с учетом (2) для клиновидного двойника на мезоскопическом масштабном уровне справедливо следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \frac{W_E}{\Sigma L_D} = & \frac{\mu}{2\pi} \sum_{i=1}^{N-1} \left( b_s^2 \ln \frac{\alpha(L-id)}{b_s} \right. \\ & \left. + \frac{b_{ed}^2}{(1-\nu)} \ln \frac{\alpha(L-id)}{b_{ed}} \right) \\ & + \frac{\mu}{4\pi} \left( b_s^2 \ln \frac{\alpha L}{b_s} + \frac{b_{ed}^2}{(1-\nu)} \ln \frac{\alpha L}{b_{ed}} \right). \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь  $d$  — проекция на ось OX отрезка  $R$ , соединяющего две соседние дислокации;  $i$  — индекс суммирования;  $N$  — число двойникующих дислокаций на двойниковой границе.

Второе слагаемое в выражении (5) подразумевает, что в вершине двойника находится только одна двойникующая дислокация. В первом слагаемом от  $L$  отнимается  $id$ . Это описывает удаление от вершины двойника на расстояние  $id$  каждой последующей дислокации, приближающейся на такое же расстояние к поверхности.

Следует отметить, что в соотношении (5) отсутствует параметр  $h$ , определяющий проекцию отрезка  $R$  на ось OY (см. рис. 1). Это обусловлено тем, что упругая энергия отдельных дислокаций зависит от расстояния от них до поверхности, но не зависит от проекции этого расстояния на ось OX [14].

Для определения энергии взаимодействия двойникующих дислокаций разобьем ее на четыре слагаемых:

$$\frac{W_I}{\Sigma L_D} = \frac{W_I^{ed(1)}}{\Sigma L_D} + \frac{W_I^{ed(2)}}{\Sigma L_D} + \frac{W_I^s(1)}{\Sigma L_D} + \frac{W_I^s(2)}{\Sigma L_D}, \quad (6)$$

где  $\frac{W_I^{ed(1)}}{\Sigma L_D} + \frac{W_I^s(1)}{\Sigma L_D}$  — энергия взаимодействия двойникующих дислокаций, находящихся на одной двойниковой границе,  $\frac{W_I^{ed(2)}}{\Sigma L_D} + \frac{W_I^s(2)}{\Sigma L_D}$  — на разных двойниковых границах.

Согласно формуле Набарро, энергия взаимодействия между двумя дислокациями с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  на единицу длины дислокации определяется из соотношения [14]:

$$\begin{aligned} \frac{W_I}{L_D} = & - \frac{\mu(\mathbf{b}_1 \cdot \boldsymbol{\xi})(\mathbf{b}_2 \cdot \boldsymbol{\xi})}{2\pi} \ln \frac{R}{R_\alpha} \\ & - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} [(\mathbf{b}_1 \times \boldsymbol{\xi}) \cdot (\mathbf{b}_2 \times \boldsymbol{\xi})] \ln \frac{R}{R_\alpha} \\ & - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)R^2} [(\mathbf{b}_1 \times \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{R} \parallel (\mathbf{b}_2 \times \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{R}]. \quad (7) \end{aligned}$$

Здесь  $\boldsymbol{\xi}$  — вектор, направленный вдоль линии дислокации;  $R$  — расстояние между дислокациями;  $R_\alpha$  — некоторый малый параметр размерности длины.

Отсюда получим

$$\frac{W_I^{ed}}{L_D} = - \frac{\mu b_{ed}^2}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{R_\alpha}, \quad (8)$$

$$\frac{W_I^s}{L_D} = - \frac{\mu b_s^2}{2\pi} \ln \frac{R}{R_\alpha}. \quad (9)$$

$R_\alpha = b_{ed}$  из (8) для клиновидного двойника получим

$$\frac{W_I^{ed(1)}}{\Sigma L_D} = - \frac{\mu b_{ed}^2}{\pi(1-\nu)} \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{d^2+h^2}}{b_{ed}}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{W_I^{ed(2)}}{\Sigma L_D} = & - \frac{\mu b_{ed}^2}{2\pi(1-\nu)} \\ & \times \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{2jh + \sqrt{(id)^2 + ((2j+i)h)^2}}{b_{ed}}, \quad (11) \end{aligned}$$

где учтено, что

$$R = \sqrt{d^2 + h^2}. \quad (12)$$

В свою очередь, принимая в (9)  $R_\alpha = b_s$ , аналогичным образом получим

$$\frac{W_I^{s(1)}}{\Sigma L_D} = -\frac{\mu b_s^2}{\pi} \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{d^2 + h^2}}{b_s}, \quad (13)$$

$$\frac{W_I^{s(2)}}{\Sigma L_D} = -\frac{\mu b_s^2}{2\pi} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{2jh + \sqrt{(id)^2 + ((2j+i)h)^2}}{b_s}. \quad (14)$$

Используя замены

$$d = \frac{L}{N-1} \quad \text{и} \quad h = \frac{H}{2(N-1)}, \quad (15)$$

где  $H$  — ширина двойника у устья (см. рис. 1), для энергии взаимодействия двойникующих дислокаций, приходящейся на длину всех двойникующих дислокаций, можно записать соотношение

$$\begin{aligned} \frac{W_I}{\Sigma L_D} = & -\left[ \frac{\mu}{\pi} \left( \frac{b_{ed}^2}{1-\nu} \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}{b_{ed}(N-1)} \right. \right. \\ & + b_s^2 \sum_{i=1}^N (N-i) \ln \frac{i\sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}{b_s(N-1)} \left. \right) \\ & + \frac{\mu}{2\pi} \left( \frac{b_{ed}^2}{1-\nu} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{jH + \sqrt{(iL)^2 + \left(\frac{2j+i}{2}H\right)^2}}{b_{ed}(N-1)} \right. \\ & \left. \left. + b_s^2 \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \ln \frac{jH + \sqrt{(iL)^2 + \left(\frac{2j+i}{2}H\right)^2}}{b_s(N-1)} \right) \right]. \quad (16) \end{aligned}$$

Это соотношение связывает энергию взаимодействия с геометрическими параметрами  $L$  и  $H$  клиновидного двойника, которые могут быть определены экспериментально [5,9]. В большинстве случаев при эксперименте наблюдаются клиновидные двойники, для которых справедливо соотношение  $H < L$ . Однако на начальных стадиях развития двойников возможна ситуация, когда  $H > L$ . Это, в частности, свойственно нанодвойникам, рассмотренным в работе [15].

Доля энергии клиновидного двойника, связанная с наличием у двойникующих дислокаций дефекта упаковки, может быть найдена из формулы [16]:

$$\begin{aligned} \frac{\gamma}{\Sigma L_D} &= \frac{\mu(b_{ed}^2 + b_s^2)N\sqrt{d^2 + h^2}}{2\pi(1-\nu)d_0} \\ &= \frac{\mu(b_{ed}^2 + b_s^2)N}{2\pi(1-\nu)d_0(N-1)} \sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}, \quad (17) \end{aligned}$$

где  $d_0$  — равновесная ширина расщепленной дислокации.

В соотношении (17) учтено, что число дефектов упаковки у дислокаций границы клиновидного двойника в два раза меньше, чем количество дислокаций на ней.

Подставив (5), (16) и (17) в (1) и учитывая для (5) замену (15), получим выражение для полной энергии заклинившегося двойника клиновидной формы в виде зависимости

$$\frac{W}{\Sigma L_D} (L, H).$$

## Результаты и их обсуждение

Результаты расчета полной энергии в зависимости от длины клиновидного двойника при заданной его ширине представлены на рис. 2 и 3. При этом число двойникующих дислокаций на двойниковой границе рассчитывалось по формуле

$$N = \frac{H}{2a}. \quad (18)$$

Здесь  $a$  — межатомное расстояние в плоскости, перпендикулярной плоскости двойникования. Принималось  $a = 0.25$  нм [16], что соответствует межатомному расстоянию в монокристаллах железа.

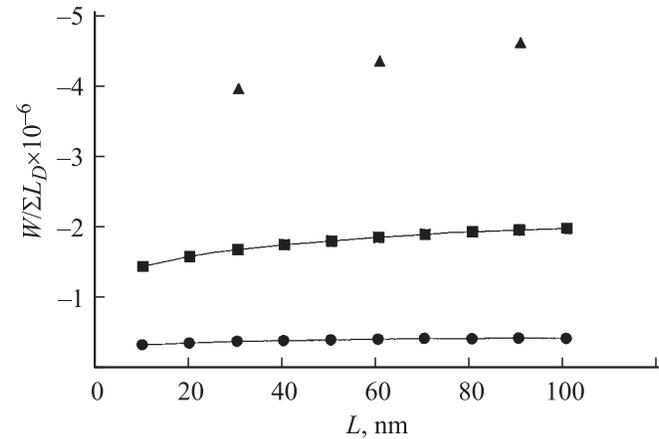


Рис. 2.

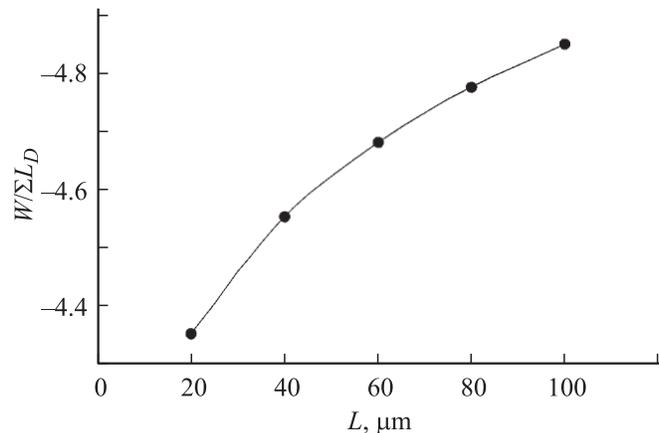


Рис. 3.

При постоянной ширине двойника рост его длины возможен только за счет увеличения расстояния между двойническими дислокациями:

$$L = Nd. \tag{19}$$

Поэтому представленный на рис. 2 и 3 параметр  $L$  в расчетных задачах регулировался величиной  $d$  при фиксированном числе  $N$ . Зависимость параметра  $d$  от длины клиновидного нанодвойника при заданной его ширине у устья представлена на рис. 4.

В случае тонкого двойника плотность двойнических дислокаций на двойниковых границах определяется из соотношения [10]:

$$\rho = \frac{N}{L}. \tag{20}$$

На мезоскопическом уровне, используемом в данной работе, необходим учет ширины двойника. При этом плотность двойнических дислокаций на двойниковых границах находится как отношение числа дислокаций на границе к длине границы, а не длине двойника, как в (20):

$$\rho = \frac{N}{\sqrt{L^2 + \frac{H^2}{4}}}. \tag{21}$$

Расчетные значения плотности двойнических дислокаций на двойниковых границах для двойника с  $H = 10 \mu\text{m}$  представлены в таблице. В таблице также представлена связь между длиной микродвойника и расстоянием между двойническими дислокациями при фиксированной ( $10 \mu\text{m}$ ) ширине двойника у устья.

Расчеты показали, что вклад упругой энергии и энергии дефектов упаковки соизмерим с энергией взаимодействия двойнических дислокаций лишь в случае нанодвойников, когда количество двойнических дислокаций на двойниковой границе не превышает 20. В случае микродвойников доминирующим вкладом в суммарную энергию клиновидного двойника обладает энергия взаимодействия двойнических дислокаций, которая по модулю превосходит упругую энергию на пять,

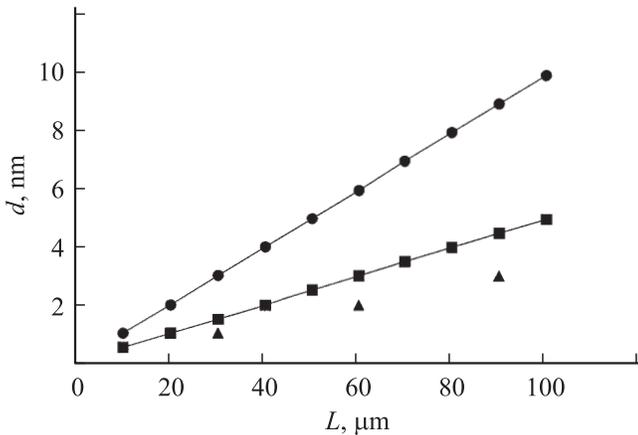


Рис. 4.

Связь между длиной двойника с расстоянием между двойническими дислокациями и их плотностью на двойниковых границах в случае клиновидного двойника с шириной у устья  $10 \mu\text{m}$  в кристалле железа

$L, \mu\text{m}$	$d, \text{nm}$	$\rho, 10^{-8} \text{m}^{-1}$
20	1	9.701
40	2	4.961
60	3	3.322
80	4	2.495
100	5	1.998

а энергию дефектов упаковки — на шесть порядков. Поэтому нельзя согласиться с мнением о том, что энергия дефектов упаковки полностью определяет процесс двойникового кристаллов [17]. Данная энергия всегда ниже энергии взаимодействия двойнических дислокаций и вносит соизмеримый вклад лишь на этапах зарождения двойников. Процессы развития двойников существенным образом контролируются взаимодействием двойнических дислокаций.

Из рис. 2 и 3 видно, что с ростом длины двойника при фиксированной его ширине (т.е. при уменьшении плотности двойнических дислокаций на двойниковых границах, но при фиксированном количестве двойнических дислокаций) модуль полной энергии двойника клиновидной формы растет. Скорость роста этой энергии выше в случае малых длин двойников при фиксированной их ширине. Это указывает на то, что интенсивности увеличения энергии двойника способствует рост плотности двойнических дислокаций на двойниковых границах. Особенно это заметно при сопоставлении результатов, представленных на рис. 3 и таблице.

Увеличение модуля полной энергии клиновидного двойника при увеличении длины двойника и уменьшении плотности двойнических дислокаций на двойниковых границах при фиксированном количестве дислокаций указывает на то, что плотность последних все же не всегда является определяющей в процессах развития двойников. Полученные результаты показывают высокую роль в развитии двойников дальнедействующих полей напряжений двойнических дислокаций, обеспечивающих высокую энергетику их взаимодействия.

## Заключение

Таким образом, с использованием дислокационной мезоскопической модели произведен расчет полной энергии клиновидного двойника. Показано, что на начальном этапе развития двойника и его зарождения важную роль играют упругая энергия двойника, энергия взаимодействия и энергия дефектов упаковки. В процессе развития микродвойника доминирующую роль играет характер взаимодействия двойнических дислокаций. С ростом длины двойника при фиксированной его ширине модуль

полной энергии клиновидного двойника растет. Это указывает на важную роль дальнедействующих полей напряжений двойникующих дислокаций в процессе развития клиновидных двойников.

## Список литературы

- [1] *Классен-Неклюдова М.В.* Механическое двойникование кристаллов. М.: АН СССР, 1960. 262 с.
- [2] *Финкель В.М., Савельев А.М., Королев А.П.* // Физика металлов и металловедение. 1979. Т. 47. № 2. С. 411–419.
- [3] *Дашевский М.Я., Кибизов Р.В.* // Кристаллография. 1996. Т. 41. № 3. С. 522–533.
- [4] *Остриков А.М., Дуб С.Н.* // ИФЖ. 2003. Т. 76. № 1. С. 170–172.
- [5] *Остриков А.М.* // Физика металлов и металловедение. 2000. Т. 90. № 1. С. 91–95.
- [6] *Карькина Л.Е., Ноткин А.Б.* // Физика металлов и металловедение. 1993. Т. 75. № 3. С. 147–154.
- [7] *Гарбер Р.И.* // ФТТ. 1959. Т. 1. № 5. С. 814–825.
- [8] *Остриков О.М.* // Прикладная механика и техническая физика. 2006. Т. 47. № 4. С. 162–166.
- [9] *Остриков О.М.* // Изв. вузов. Черная металлургия. 2006. № 9. С. 5–7.
- [10] *Косевич А.М., Бойко В.С.* // УФН. 1971. Т. 104. № 2. С. 201–254.
- [11] *Muellner P., Romanov A.E.* // Acta mater. 2000. Vol. 48. P. 2323–2337.
- [12] *Muellner P., Solenthaler C.* // Phil. Mag. Lett. 1994. Vol. 69. N 3. P. 111–113.
- [13] *Muellner P., Solenthaler C.* // Phil. Mag. Lett. 1994. Vol. 69. N 4. P. 171–175.
- [14] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
- [15] *Остриков О.М.* // Изв. вузов. Черная металлургия. 2002. № 3. С. 51–52.
- [16] *Полухин П.И., Горелик С.С., Воронцов В.К.* Физические основы пластической деформации. М.: Металлургия, 1982. 584 с.
- [17] *Анищик В.М., Жукова С.И.* // Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. 1982. № 1. С. 34–37.