

УДК 536.24

## ВЛИЯНИЕ ПЛОТНОСТИ ДВОЙНИКУЮЩИХ ДИСЛОКАЦИЙ НА КОНФИГУРАЦИЮ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ ВБЛИЗИ КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА С РАЗЛИЧНОЙ ФОРМОЙ ГРАНИЦ

О. М. Остриков

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

На основе макроскопической дислокационной модели изучено влияние изменения плотности двойникующих дислокаций на одной из границ клиновидного двойника на конфигурацию создаваемых им полей напряжений. Показаны особенности нарушения симметрии распределения полей напряжений вблизи клиновидного двойника с различной формой границ при различии плотностей двойникующих дислокаций на границах двойников.

Ключевые слова: клиновидный двойник, макроскопическая дислокационная модель, плотность двойниковых дислокаций.

В работе [1] предложена дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника, которая в отличие от известной модели тонкого двойника [2] позволяет рассчитывать поля напряжений внутри него. При этом возможен учет как формы границ клиновидного двойника, так и особенностей распределения на них двойникующих дислокаций. В настоящее время моделирование процессов двойникования кристаллов является актуальным, поэтому целесообразно развитие дислокационной макроскопической модели, представленной в [1].

Целью данной работы является изучение влияния плотности распределения двойникующих дислокаций на двойниковых границах на конфигурацию полей напряжений вблизи клиновидного двойника. Исследование проводится на таком масштабном уровне, на котором расстояние между двойникующими дислокациями можно считать бесконечно малым.

Как показано в работе [1], поля напряжений вблизи двойника клиновидной формы можно определить по формуле

$$\sigma_{ij}(x, y) = \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) dx_0 + \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0) dx_0, \quad (1)$$

где  $L$  — длина двойника;  $f_1(x_0)$ ,  $f_2(x_0)$  — функции, описывающие форму границ клиновидного двойника (рис. 1);  $\rho_1(x_0)$ ,  $\rho_2(x_0)$  — плотности двойникующих дислокаций на границах двойника;  $\sigma_{ij}^{(1,0)}$ ,  $\sigma_{ij}^{(2,0)}$  — напряжения, создаваемые на двойниковых границах отдельными дислокациями. В случае двойника, находящегося вдали от поверхности кристалла, в

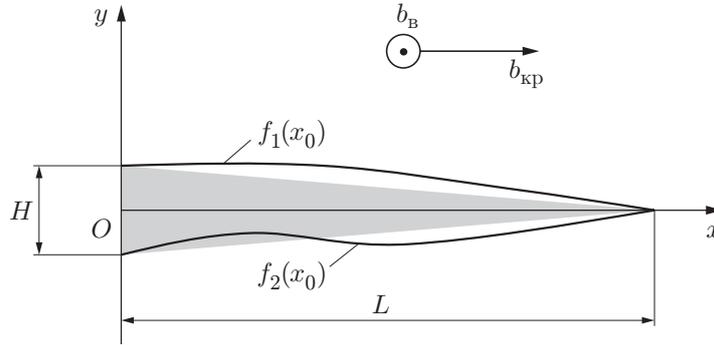


Рис. 1. Схема клиновидного двойника (заштрихованная область — идеальный двойник с прямолинейными границами)

приближении однородной изотропной среды напряжения  $\sigma_{ij}^{(1,0)}$ ,  $\sigma_{ij}^{(2,0)}$  определяются по формулам

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

Здесь  $\mu$  — модуль сдвига;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $b_{\text{кр}}$ ,  $b_{\text{в}}$  — краевая и винтовая составляющие вектора Бюргера частичных двойникующих дислокаций (рис. 1).

В данной работе не рассматриваются все варианты распределения двойникующих дислокаций на двойниковых границах и все варианты форм этих границ. Ограничимся исследованием задач, представляющих интерес с точки зрения физического анализа с учетом имеющихся экспериментальных данных о клиновидных двойниках.

В первую очередь следует рассмотреть двойники с прямолинейными границами. Такие двойники имеют вид вытянутых равнобедренных треугольников и характеризуют промежуточные стадии развития двойников в малодефектной области кристалла [3]. Поэтому увеличение плотности двойникующих дислокаций на определенных участках границ таких двойников может рассматриваться как процесс, предшествующий искривлению границы двойника. Это обусловлено тем, что увеличение ширины двойника приводит к увеличению степени некогерентности двойниковой границы и как следствие к увеличению плотности двойникующих дислокаций на выпуклых участках двойниковых границ. И наоборот, уменьшение ширины двойника в случае, например, вогнутой двойниковой границы приводит к уменьшению плотности двойникующих дислокаций на такой границе или ее участке. Поэтому, моделируя уменьшение или увеличение плотности двойникующих дислокаций на прямолинейной двойниковой границе, на основе модели, разработанной в [1], можно исследовать напряженное состояние вблизи клиновидного двойника на стадии, предшествующей искривлению его границы.

В случае прямолинейных границ функции  $f_1(x_0)$ ,  $f_2(x_0)$  в (1) имеют следующий вид:

$$f_1(x_0) = (H/2)(1 - x_0/L), \quad f_2(x_0) = -(H/2)(1 - x_0/L). \quad (2)$$

Здесь  $H$  — ширина двойника вблизи устья (см. рис. 1).

При  $\rho_1(x_0) = \rho_2(x_0) = \text{const} = \rho$  с учетом (2) из (1) получим

$$\sigma_{ij}(x, y) = \rho \sqrt{1 + \left(\frac{H}{2L}\right)^2} \int_0^L (\sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) + \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0)) dx_0.$$

Для представления результатов расчетов приведем распределение сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$ . Данная компонента тензора напряжений важна при изучении взаимодействия клиновидного двойника с краевыми дислокациями. Результаты расчета представим в виде распределения

$$\eta_{xy}(x, y) = \sigma_{xy}(x, y)/A_{xy},$$

где  $A_{xy} = \mu b_{\text{кр}}/[2\pi(1 - \nu)]$ , что позволяет провести анализ независимо от характеристик конкретных материалов.

Порядок величины плотности дислокаций оценивался по экспериментальным данным [4–6]. При этом использовалось расчетное соотношение

$$\rho = N/L = H/(2aL),$$

где  $N$  — число двойникующих дислокаций на двойниковой границе;  $a$  — параметр кристаллической решетки в направлении, перпендикулярном плоскости двойникования. Примем  $H = 31$  мкм,  $L = 100$  мкм,  $a = 0,31$  нм. Тогда  $\rho = 0,5 \cdot 10^9$  м<sup>-1</sup>. Это значение на три порядка больше, чем в примере, рассмотренном в [7], в котором длина двойника существенно превышала его ширину. Для таких двойников справедлива модель тонкого двойника. Модель, предлагаемая в данной работе, может быть применена также в случае, когда длина и ширина двойников соизмеримы. Такие двойники, как правило, имеют высокую плотность двойникующих дислокаций на границах.

Распределение сдвиговых напряжений в случае, когда на двух двойниковых границах плотность двойникующих дислокаций одинакова и форма границ описывается функциями (2), представлено на рис. 2, а. Наблюдается симметрия распределения полей сдвиговых напряжений относительно оси  $Ox$ . Вблизи вершины двойника напряжения  $\sigma_{xy}$  положительны, а вблизи устья — отрицательны. В средней части двойника сдвиговые напряжения близки к нулю.

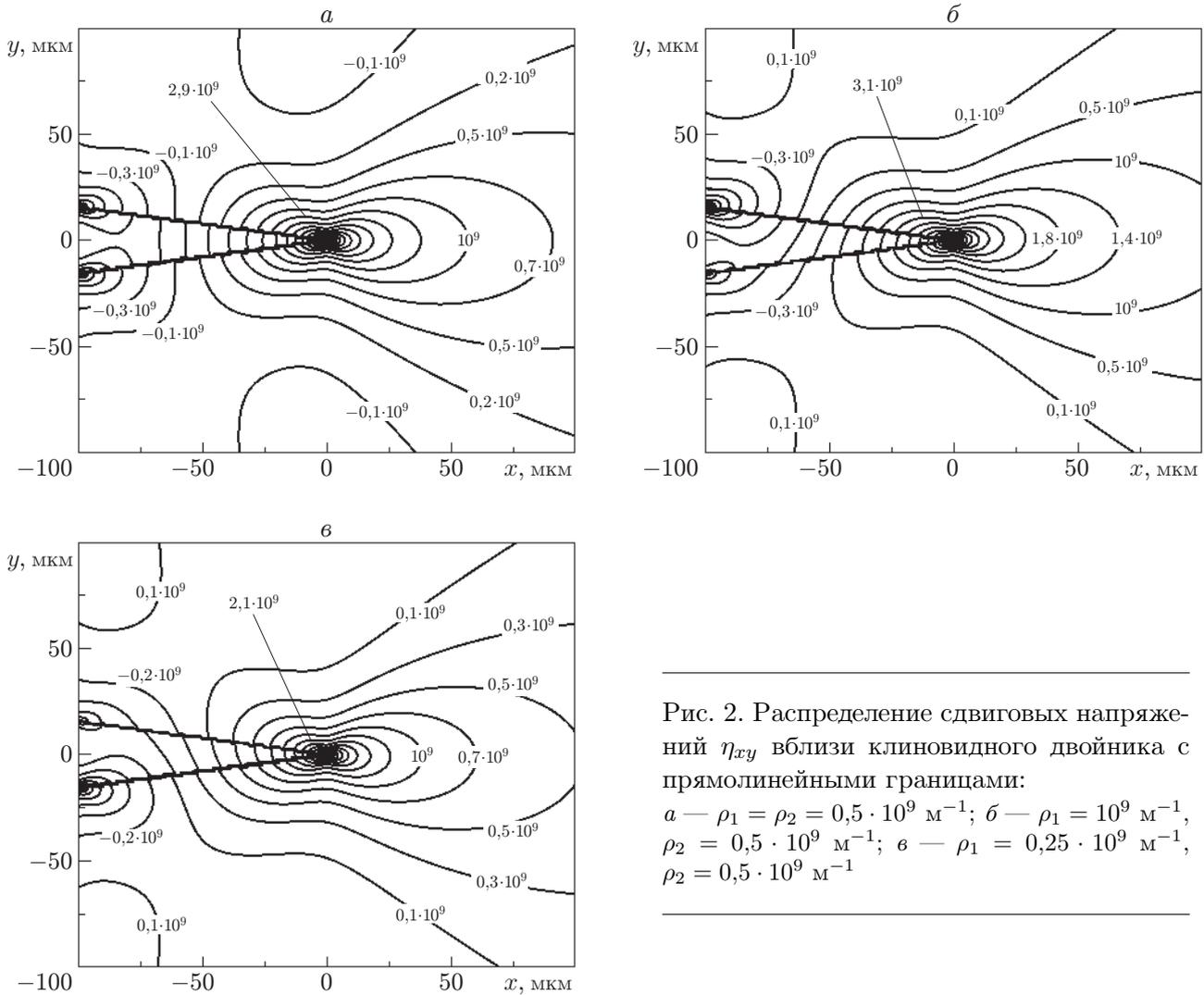


Рис. 2. Распределение сдвиговых напряжений  $\eta_{xy}$  вблизи клиновидного двойника с прямолинейными границами:

$a$  —  $\rho_1 = \rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ ;  $b$  —  $\rho_1 = 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ ;  $v$  —  $\rho_1 = 0,25 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$

В случае, когда на одной из границ плотность двойникующих дислокаций выше, чем на другой, наблюдается нарушение симметрии распределения рассматриваемых сдвиговых полей напряжений (рис. 2,  $b$ ), предшествующее искривлению двойниковой границы, на которой зафиксирована избыточная плотность двойникующих дислокаций. Такая граница становится выпуклой [3], ее профиль на плоскости  $xOy$  описывается функцией

$$f_1(x_0) = (H/2)\sqrt{1 - (x_0/L)^2}. \quad (3)$$

Результаты расчетов скальвующих напряжений (с использованием выражения (3) при избыточной плотности двойникующих дислокаций на искривленной границе представлены на рис. 3,  $a$ . При интенсивных деформациях кристалла на выпуклой границе часто возникают новые двойники и наблюдается ветвление имеющихся двойников [8].

Нарушение симметрии распределения напряжений  $\sigma_{xy}$  наблюдается и в случае уменьшения числа двойникующих дислокаций на двойниковой границе (см. рис. 2,  $v$ ). Это нарушение предшествует формированию вогнутой двойниковой границы, профиль которой описывается функцией

$$f_1(x_0) = (H/2)(x_0^2/L^2 - 2x_0/L + 1).$$

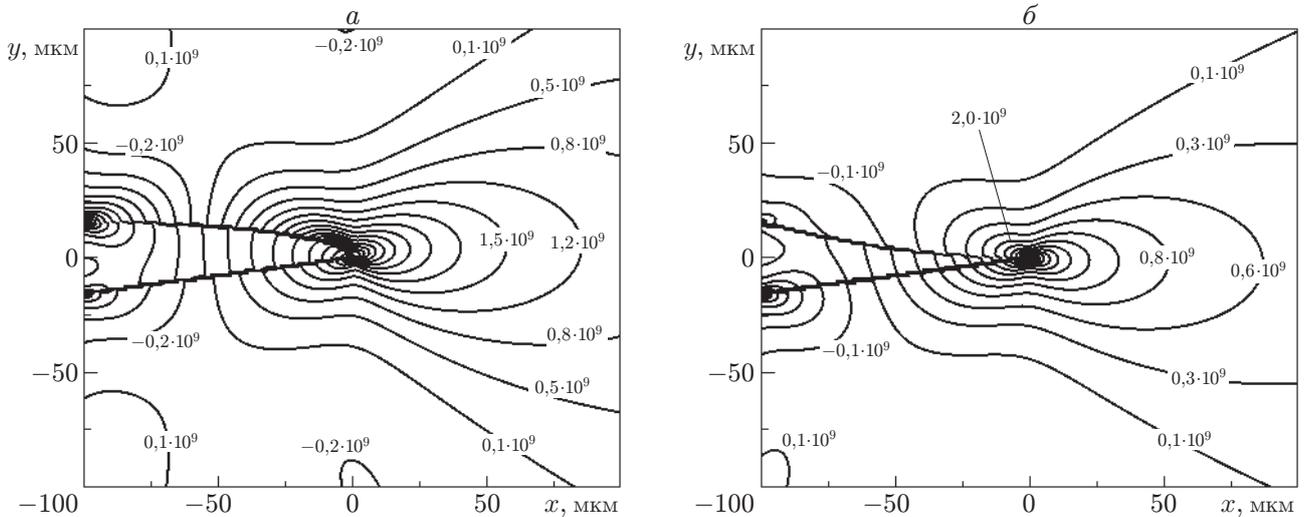


Рис. 3. Распределение сдвиговых напряжений  $\eta_{xy}$  вблизи клиновидного двойника:  $a$  — выпуклая двойниковая граница ( $\rho_1 = 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ );  $b$  — вогнутая двойниковая граница ( $\rho_1 = 10^9 \text{ м}^{-1}$ ,  $\rho_2 = 0,25 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ )

Распределение сдвиговых напряжений в случае вогнутой двойниковой границы представлено на рис. 3, б.

Целесообразность задания в начальных условиях искривления границ двойника обусловлена тем, что форма его границ зависит не только от поля внутренних напряжений в кристалле, но и от разности скоростей генерации двойникующих дислокаций на границах двойника. Разность скоростей может быть обусловлена, например, градиентом внешних напряжений вблизи устья двойника в направлении, перпендикулярном направлению развития двойника. При этом представляют интерес напряжения, созданные самим двойником.

Таким образом, исследовано влияние плотности двойникующих дислокаций на двойниковых границах на конфигурацию полей напряжений, рассчитанных на основе макроскопической дислокационной модели, вблизи клиновидного двойника с различной формой границ. Установлено, что изменение плотности двойникующих дислокаций на одной из границ двойника приводит к нарушению симметрии распределения вблизи него полей напряжений.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Остриков О. М.** Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника // Вестн. Гом. гос. техн. ун-та. 2006. № 2. С. 10–18.
2. **Косевич А. М., Бойко В. С.** Дислокационная теория упругого двойникового кристаллов // Успехи физ. наук. 1971. Т. 104, № 2. С. 101–255.
3. **Остриков О. М.** Некоторые особенности формы клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой // Физика металлов и металловедение. 2000. Т. 90, № 1. С. 91–95.
4. **Классен-Неклюдова М. В.** Механическое двойникование кристаллов. М.: Изд-во АН СССР, 1960.
5. **Остриков О. М.** Использование тонких полипараксилиленовых пленок при исследовании пластической деформации монокристаллов висмута // ПМТФ. 2006. Т. 47, № 4. С. 162–166.

6. **Остриков О. М., Дуб С. Н.** Исследование механического двойникования монокристаллов сурьмы методом наноиндентирования // Инж.-физ. журн. 2003. Т. 76, № 1. С. 170–172.
7. **Косевич А. М.** Дислокации в теории упругости. Киев: Наук. думка, 1978.
8. **Остриков О. М.** Ветвление клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой // Физика металлов и металловедение. 1999. Т. 87, № 1. С. 94–96.

*Поступила в редакцию 20/IV 2007 г.,  
в окончательном варианте — 13/VII 2007 г.*

---