УДК 548.24

ДИСЛОКАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛОС СДВИГА В АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛАХ

М. Н. Верещагин, О. М. Остриков

Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого,
246746 Гомель, Беларусь

Предложена дислокационная модель для полисинтетической полосы сдвига в аморфном материале. Рассчитаны поля напряжений вблизи полисинтетической полосы сдвига. Определено распределение примесей в аморфной бинарной среде Fe–B, содержащей полисинтетическую полосу сдвига.

Ключевые слова: аморфные материалы, полисинтетические полосы сдвига, модель расчета.

Основным каналом пластической деформации аморфных материалов являются полосы сдвига [1–3]. Как правило, они зарождаются группами и развиваются в деформируемом аморфном материале вдоль направлений максимальных сдвиговых напряжений. Под полисинтетическими полосами сдвига будем понимать группу параллельных полос сдвига. Очевидно, что в реальной ситуации параллельные полосы сдвига встречаются редко. Чаще они расположены под углом друг к другу. При одноосном растяжении или сжатии этот угол мал. Таким образом, понятие полисинтетических полос сдвига относится к идеальной системе, которая при малой разориентации полос сдвига близка к реальной системе.

В настоящее время теория полисинтетических полос сдвига не разработана, несмотря на то что группы полос сдвига являются концентраторами больших напряжений и очагами зарождения трещин.

Целью данной работы является расчет на основе дислокационной модели полей напряжений вблизи параллельных полос сдвига, а также определение областей локализации примесей вблизи рассматриваемых дефектов.

На основе анализа изображения полосы сдвига, полученного методом высокоразрешающей электронной микроскопии [1], можно предложить схему полосы в виде, представленном на рис. 1,*а*. Из рис. 1,*а* следует, что полоса сдвига состоит из пор и областей сцепления материала, расположенных по разные стороны плоскости сдвига. Согласно предлагаемой дислокационной модели поля напряжений в областях сцепления материала создаются скоплением краевых дислокаций, поэтому полосы сдвига можно представить в виде последовательно чередующихся пор и цепочек дислокаций (рис. 1,*б*).

Для упрощения расчетов длина цепочек дислокаций L и размеры пор l полагаются постоянными (рис. 1,*б*). В общем случае значения L и l могут быть различными. Будем пренебрегать краевыми эффектами, связанными с наличием в полосе сдвига пор, что также значительно упростит выражения для расчета полей напряжений вблизи полос сдвига.

Начало прямоугольной декартовой системы координат (рис. 1,*б*) соответствует вершине скоплений дислокаций. Ось OX направлена вдоль плоскости сдвига, ось OY — перпендикулярно ей. Зная напряжения вблизи единичной дислокации [4], с учетом принципа суперпозиции компоненты тензора напряжений для рассматриваемой полосы сдвига мож-

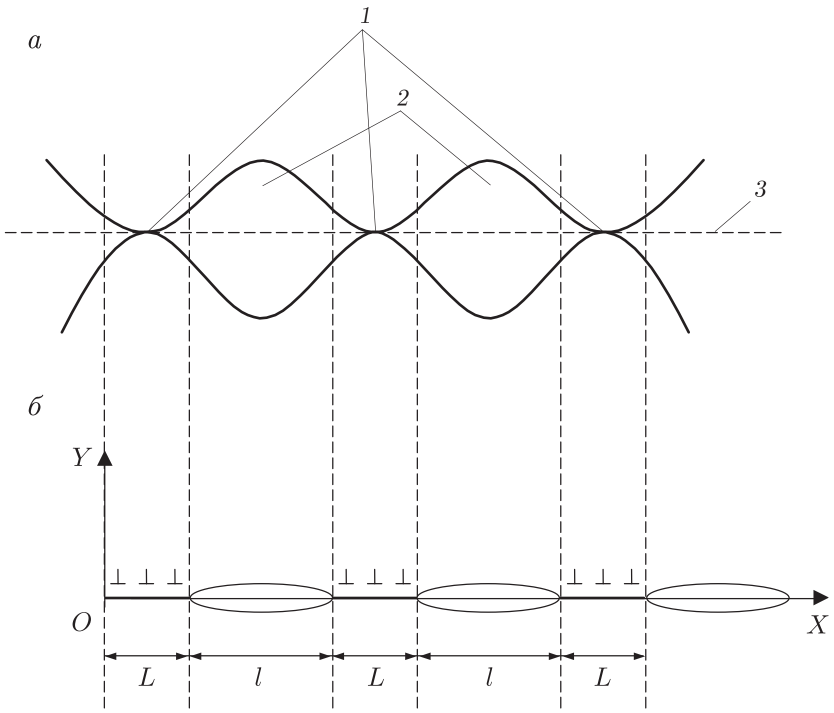

Рис. 1. Схематическое изображение (*а*) и дислокационная модель (*б*) полосы сдвига:

1 — области сцепления материала, расположенные по разные стороны плоскости сдвига; *2* — поры; *3* — плоскость сдвига

но найти из соотношений

$$\sigma_{xx} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\sum_{k=0}^{K}\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\frac{y[3(x+nd+m(l+Nd))^2+(y+kh)^2]}{[(x+nd+m(l+Nd))^2+(y+kh)^2]^2},$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\sum_{k=0}^{K}\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\frac{y[(x+nd+m(l+Nd))^2-(y+kh)^2]}{[(x+nd+m(l+Nd))^2+(y+kh)^2]^2},$$

$$\sigma_{zz} = -\frac{\mu b\nu}{\pi(1-\nu)}\sum_{k=0}^{K}\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\frac{(y+kh)^2}{(x+nd+m(l+Nd))^2+(y+kh)^2}, \quad (1)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\sum_{k=0}^{K}\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\frac{(x+nd+m(l+Nd))[(x+nd+m(l+Nd))^2-(y+kh)^2]}{[(x+nd+m(l+Nd))^2+(y+kh)^2]^2},$$

где μ — модуль сдвига; b — вектор Бюргерса; ν — коэффициент Пуассона; $M = L_{\text{пс}}/(L+l)$ — число пор; $L_{\text{пс}}$ — длина полосы сдвига; $N = L/d$ — число дислокаций в скоплении; d — расстояние между дислокациями в скоплении; K — количество полос сдвига, формирующих полисинтетическую полосу сдвига; k, m, n — индексы суммирования.

Параметры полисинтетических полос сдвига приведены на рис. 2. Длина всех полос сдвига полагается одинаковой и равной $L_{\text{пс}}$, расстояние между ними также одинаково и равно h.

Следует отметить, что при $K = 0$ по формуле (1) ведется расчет полей напряжений вблизи единичной полосы сдвига.

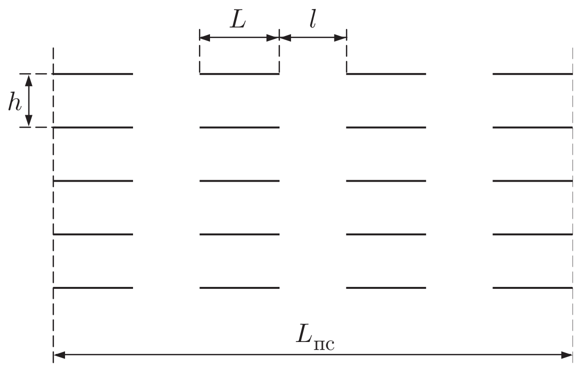

Рис. 2. Схематическое изображение полисинтетических полос сдвига

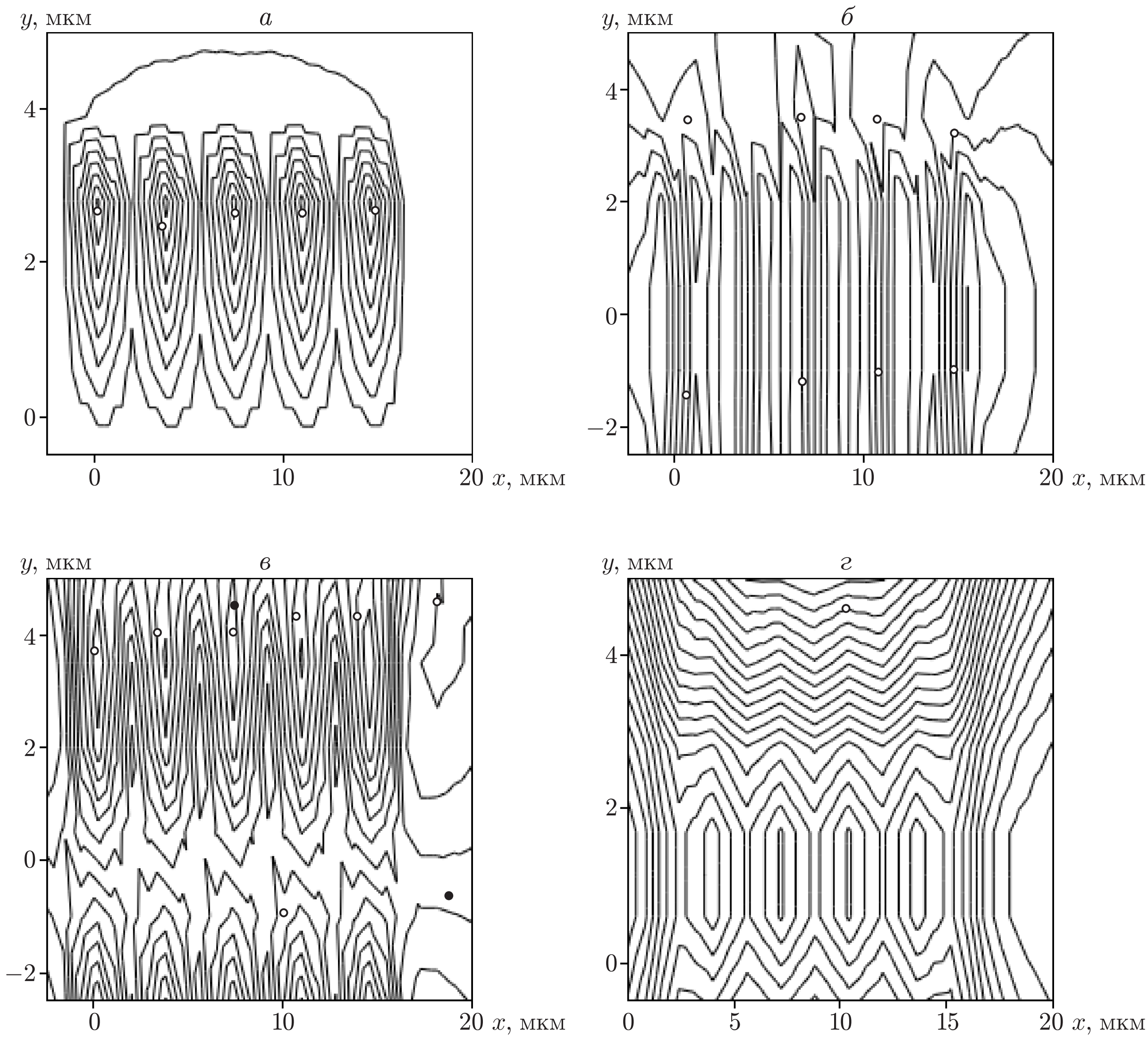

Рис. 3. Конфигурация полей напряжений вблизи полисинтетической полосы сдвига при $d = 0{,}2$ мкм; $l = 2$ мкм; $h = 1$ мкм; $M = 4$; $N = 10$; $K = 3$:
а — $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(x, y)$; *б* — $\sigma_{xy} = \sigma_{xy}(x, y)$; *в* — $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}(x, y)$; *г* — $\sigma_{zz} = \sigma_{zz}(x, y)$

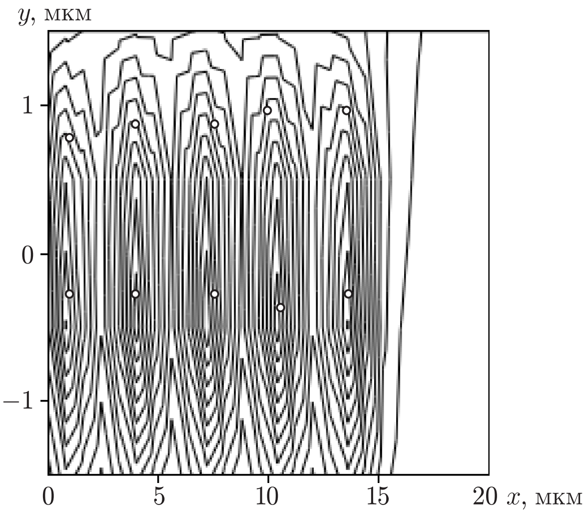

Рис. 4. Распределение примесей вблизи полисинтетической полосы сдвига

Результаты расчетов представлены на рис. 3. Темные и светлые точки соответствуют областям минимальных и максимальных значений напряжений. В рассматриваемой области напряжения σ_{xx} отрицательны и локализованы в областях сцепления материала, находящихся по разные стороны плоскости сдвига (рис. 3,*а*). В данном случае эти области расположены друг над другом (см. рис. 2).

Симметричное расположение скоплений дислокаций влияет на распределение и других рассматриваемых напряжений. Напряжения σ_{yy} знакопеременные (см. рис. 3,*в*). Следует отметить, что высокий уровень напряжений наблюдается не только в непосредственной близости полос сдвига, но и вдали от них. Это способствует зарождению в данных областях новых полос сдвига (или трещин).

Распределение примесей вблизи полисинтетической полосы сдвига находится из соотношения [5]

$$C = C_0 \exp\left(-U/(kT)\right),$$

где C_0 — концентрация примеси вдали от внутренних источников напряжений; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура. Энергия U взаимодействия примеси с полисинтетической полосой сдвига определяется по формуле

$$U = -(4/3)\pi r^3 \varepsilon(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}),$$

где r — радиус атома матрицы; $\varepsilon = (r_0 - r)/r$ — малый параметр; r_0 — радиус атома примеси; σ_{xx}, σ_{yy}, σ_{zz} — нормальные напряжения, определяемые из соотношений (1).

Результаты расчетов представлены на рис. 4. Расчет производился для бинарного сплава Fe–B с соотношением атомов Fe : B = 0,75 : 0,25 при $b = 2{,}87 \cdot 10^{-10}$ м; $\mu = 0{,}168$; $\nu = 0{,}33$; $r = 1{,}27 \cdot 10^{-10}$ м; $r_0 = 0{,}97 \cdot 10^{-10}$ м; $k = 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К; $T = 300$ К. Остальные параметры те же, что на рис. 3. Важным результатом расчетов является то, что максимальная концентрация примеси наблюдается не в центральной части полисинтетической полосы, а на некотором удалении от нее (рис. 4).

Таким образом, предложена дислокационная модель полисинтетической полосы сдвига, часто возникающей в аморфном материале при его деформировании. Получены аналитические выражения для расчета полей напряжений и распределения примесей вблизи полисинтетической полосы сдвига аморфного материала. Установлено, что как напряжения, так и примеси локализуются на некотором удалении от геометрического центра полисинтетической полосы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Глезер А. М., Молотилов Б. В.** Структура и механические свойства аморфных сплавов. М.: Металлургия, 1992.
2. **Верещагин М. Н., Шепелевич В. Г., Остриков О. М., Цыбранкова С. Н.** Исследование методом локального деформирования особенностей пластической деформации аморфного сплава Fe–Cr–Mo–V–B–Si // Кристаллография. 2002. Т. 47, № 4. С. 691–696.
3. **Верещагин М. Н., Шепелевич В. Г., Остриков О. М., Цыбранкова С. Н.** Особенности пластической деформации при индентировании пирамидой Виккерса поверхности аморфного сплава Fe–Cr–Mo–V–B–Si // Физика металлов и металловедение. 2002. Т. 93, № 5. С. 101–104.
4. **Хирт Дж., Лоте И.** Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
5. **Савенко В. С., Остриков О. М.** Влияние электрического тока на распределение примесей у двойниковой границы // Изв. вузов. Чер. металлургия. 1998. № 6. С. 12–14.

Поступила в редакцию 22/VII 2002 г.,
в окончательном варианте — 23/X 2002 г.