

DOI: 10.21122/2227-1031-2017-16-4-335-342

УДК 539.3

Условие равновесия остаточного краевого клиновидного нанодвойника в постдеформированном твердом теле

Докт. физ.-мат. наук, проф. Ю. В. Василевич¹⁾, канд. физ.-мат. наук, доц. О. М. Остриков²⁾

¹⁾Белорусский национальный технический университет (Минск, Республика Беларусь),

²⁾Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого (Гомель, Республика Беларусь)

© Белорусский национальный технический университет, 2017
Belarusian National Technical University, 2017

Реферат. Выведено условие равновесия остаточного краевого клиновидного нанодвойника в деформированном твердом теле. Вывод условия основан на необходимости равновесия баланса сил, действующих на каждую двойникующую дислокацию со стороны остальных дислокаций двойника. При этом не учитывали дислокационную структуру и напряженное состояние у устья нанодвойника. Использовали результаты теории дислокаций, полученные в рамках теории упругости и механики сплошных сред. Рассматривали составляющую результирующей силы, действующую в плоскости двойникования, в рамках допущения отсутствия движения двойникующих дислокаций в перпендикулярном плоскости двойникования направлении. В модели принимали дискретное распределение двойникующих дислокаций на двойниковых границах. Для уменьшения громоздкости расчетов рассматривали ограниченное число двойникующих дислокаций и принимали допущение о малости величины винтовой составляющей вектора Бюргерса, т. е. рассматривали краевой нанодвойник. Для уменьшения количества уравнений в системе условий равновесия использовали симметричность сдвиговой компоненты тензора напряжений. Вводили ограничение на порядок расположения двойникующих дислокаций на двойниковых границах. При этом полагали расположение пар двойникующих дислокаций разных двойниковых границ в одной плоскости, перпендикулярной плоскости двойникования. Учитывали, что в одной плоскости двойникования может находиться только одна двойникующая дислокация. Расчетами показано, что в идеальном ненагруженном кристалле возможно устойчивое и неустойчивое равновесие краевого нанодвойника. Устойчивое равновесие обеспечивается выстраиванием двойникующих дислокаций в стенку. Это приводит к исчезновению двойника в результате аннигиляции дислокаций границ двойника с его дислокациями у устья. Для обеспечения неустойчивого равновесия клиновидного краевого нанодвойника необходимо, чтобы вдоль длины двойника расстояние между двойникующими дислокациями равнялось межплоскостному расстоянию.

Ключевые слова: механическое двойникование, остаточный нанодвойник, условие равновесия, двойникующая дислокация, краевой двойник

Для цитирования: Василевич, Ю. В. Условие равновесия остаточного краевого клиновидного нанодвойника в постдеформированном твердом теле / Ю. В. Василевич, О. М. Остриков // *Наука и техника*. 2017. Т. 16, № 4. С. 335–342. DOI: 10.21122/2227-1031-2017-16-4-335-342

Адрес для переписки

Василевич Юрий Владимирович
Белорусский национальный технический университет
просп. Независимости, 65,
220013, г. Минск, Республика Беларусь
Тел.: +375 17 293-92-36
smat@bntu.by

Address for correspondence

Vasilevich Yuriy V.
Belarusian National Technical University
65 Nezavisimosti Ave.,
220013, Minsk, Republic of Belarus
Tel.: +375 17 293-92-36
smat@bntu.by

Equilibrium Condition of Residual Edge Wedge-Type Nanotwin in Post-Deformed Solid Body

Yu. V. Vasilevich¹⁾, O. M. Ostrikov²⁾

¹⁾Belarusian National Technical University (Minsk, Republic of Belarus),

²⁾P. O. Sukhoi State Technical University of Gomel (Gomel, Republic of Belarus)

Abstract. An equilibrium condition of residual edge wedge-type nanotwin in a deformed solid body has been derived in the paper. The condition conclusion is based on the necessity to ensure an equilibrium of force balance acting on every twinning dislocation from the side of the rest twin dislocations. In this case dislocation structure and stress condition at nanotwin mouth have not been taken into account. Results of dislocation theory obtained in the framework of elasticity theory and continuum mechanics have been used in the paper. The paper has considered a component of the resultant force acting in a twinning plane under an assumption that there is no motion of twinning dislocations in the direction which is perpendicular to the twinning plane. The following condition has been made in the model: a discrete distribution of twinning dislocations at twin boundaries. In order to reduce cumbersome calculations a limited number of twinning dislocations has been considered in the paper and an assumption has been made about small value of a helical component in the Burgers vector, in other words the paper has considered an edge nanotwin. In order to decrease a number of equations in the system of equilibrium conditions a symmetric property of a shear component in a stress tensor has been used in the paper. The paper contains description how restrictions on the order of twinning dislocation arrangement on twin boundaries have been imposed. In this case it has been assumed that an arrangement of twinning dislocation pairs in different twin boundaries is in one plane which is perpendicular to the twinning plane. It is necessary to keep in mind that only one twinning dislocation can be located in one twinning plane. Calculations have shown that it is possible to ensure a stable and unstable equilibrium of an edge nanotwin in an ideal unloaded crystal. Sustainable balance is provided by alignment of twinning dislocations in a wall. This leads to a twin disappearance due to annihilation of twin boundary dislocations with its dislocations at the mouth. In order to ensure an unstable equilibrium of a wedge edge nanotwin it is necessary that the distance between twinning dislocations along the length of the twin is equal to interplanar distance.

Keywords: mechanical twinning, residual nanotwin, equilibrium condition, twinning dislocation, edge twin

For citation: Vasilevich Yu. V., Ostrikov O. M. (2017) Equilibrium Condition of Residual Edge Wedge-Type Nanotwin in Post-Deformed Solid Body. *Science and Technique*. 16 (4), 335–342. DOI: 10.21122/2227-1031-2017-16-4-335-342 (in Russian)

Введение

Нанодвойникование – новое физическое явление, научный интерес к которому постоянно растет [1–10]. В настоящее время экспериментально оно изучено достаточно хорошо. Назрела необходимость в математическом описании процесса нанодвойникования и разработке метода прогнозирования поведения нанодвойников в деформируемом или деформированном твердом теле. В особый класс моделей нанодвойников можно выделить модели, использующие методы механики деформируемого твердого тела. Такие модели открывают возможности в решении прикладных технических задач, например по повышению точности прогнозирования областей зарождения разрушения деформируемых твердых тел. В этом плане в [11, 12] уже предложен метод расчета напряженно-деформированного состояния, обусловленного нанодвойником.

Целью исследований авторов стало теоретическое рассмотрение в рамках механики сплошных сред возможности существования остаточного краевого нанодвойника в предварительно деформированном твердом теле.

Постановка задачи

Рассмотрим краевой нанодвойник. Двойникующие дислокации краевого двойника не

имеют винтовой составляющей вектора Бюргерса, либо эта составляющая по величине близка к нулю. Детальное экспериментальное изучение такого типа двойников приведено в [13].

Схематическое изображение клиновидного нанодвойника с произвольным расположением двойникующих дислокаций на двойниковых границах представлено на рис. 1. Построение схемы рис. 1 аналогично подходам, использованным в [13]. При этом линии двойникующих дислокаций прямолинейны, бесконечны и параллельны друг другу и оси OZ , перпендикулярной плоскости. Такой подход использовался в [9, 10, 14, 15] для моделирования нанозерен и нанодвойников, имеющих конечные размеры вдоль оси OZ . Это связано с тем, что в большинстве случаев решается плоская задача, когда поля напряжений и связанные с ними силовые поля рассматриваются только в плоскости HOY . При этом полагается, что отрезки дислокаций, находящиеся вблизи плоскости HOY , имеют малую кривизну, либо двойник симметричен относительно данной плоскости, что способствует малым погрешностям в расчетах полей напряжений в рассматриваемой плоскости.

Пусть краевая составляющая вектора Бюргерса двойникующих дислокаций краевого нанодвойника направлена вдоль оси OX (рис. 1). Очевидно, что двойник образован двумя типа-

ми дислокаций, отличающихся своим знаком. Пусть дислокации обратного знака вместе с концентратором напряжений, благодаря которому образовался нанодвойник, находятся у его устья. Не будем рассматривать данные источники напряжений в статье либо будем считать их роль незначительной. Ограничимся рассмотрением только двойникующих дислокаций двойниковых границ.

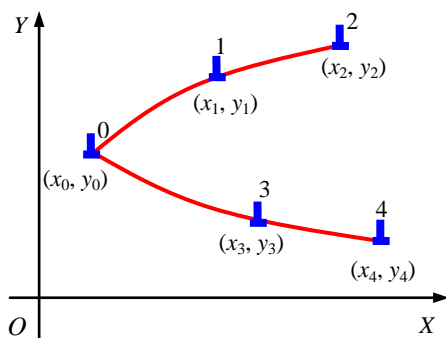


Рис. 1. Схематическое изображение клиновидного нанодвойника с произвольным расположением двойникующих дислокаций на двойниковых границах

Fig. 1. Schematic diagram of wedge-type nanodoublet with random arrangement of twinning dislocations at twin boundaries

Координаты каждой двойникующей дислокации зададим как (x_i, y_i) , где i изменяется от нуля до N . Для уменьшения громоздкости вычислений примем $N = 4$. Тогда количество двойникующих дислокаций, образующих двойник, равно пяти.

Результаты расчетов и их обсуждение

При произвольном распределении дислокаций на границах двойника каждая дислокация создает поле сдвиговых напряжений, в общем случае определяемое по формулам:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{(0)} &= \sigma_{xy}^{(0)}(x - x_0, y - y_0); \\ \sigma_{xy}^{(1)} &= \sigma_{xy}^{(1)}(x - x_1, y - y_1); \\ \sigma_{xy}^{(2)} &= \sigma_{xy}^{(2)}(x - x_2, y - y_2); \\ \sigma_{xy}^{(3)} &= \sigma_{xy}^{(3)}(x - x_3, y - y_3); \\ \sigma_{xy}^{(4)} &= \sigma_{xy}^{(4)}(x - x_4, y - y_4), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\sigma_{xy}^{(i)} = \sigma_{xy}^{(i)}(x - x_i, y - y_i)$ – сдвиговая компонента тензора напряжений, создаваемых i -й дислокацией нанодвойника.

Для нахождения нанодвойника в равновесии необходимо [16], чтобы силы, действующие на каждую двойникующую дислокацию со стороны других дислокаций, были равны нулю:

$$F_0 = b_{кр} \left(\sigma_{xy}^{(1)}(x_0 - x_1, y_0 - y_1) + \sigma_{xy}^{(2)}(x_0 - x_2, y_0 - y_2) + \sigma_{xy}^{(3)}(x_0 - x_3, y_0 - y_3) + \sigma_{xy}^{(4)}(x_0 - x_4, y_0 - y_4) \right) = 0;$$

$$F_1 = b_{кр} \left(\sigma_{xy}^{(0)}(x_1 - x_0, y_1 - y_0) + \sigma_{xy}^{(2)}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) + \sigma_{xy}^{(3)}(x_1 - x_3, y_1 - y_3) + \sigma_{xy}^{(4)}(x_1 - x_4, y_1 - y_4) \right) = 0; \quad (2)$$

$$F_2 = b_{кр} \left(\sigma_{xy}^{(0)}(x_2 - x_0, y_2 - y_0) + \sigma_{xy}^{(1)}(x_2 - x_1, y_2 - y_1) + \sigma_{xy}^{(3)}(x_2 - x_3, y_2 - y_3) + \sigma_{xy}^{(4)}(x_2 - x_4, y_2 - y_4) \right) = 0;$$

$$F_3 = b_{кр} \left(\sigma_{xy}^{(0)}(x_3 - x_0, y_3 - y_0) + \sigma_{xy}^{(1)}(x_3 - x_1, y_3 - y_1) + \sigma_{xy}^{(2)}(x_3 - x_2, y_3 - y_2) + \sigma_{xy}^{(4)}(x_3 - x_4, y_3 - y_4) \right) = 0;$$

$$F_4 = b_{кр} \left(\sigma_{xy}^{(0)}(x_4 - x_0, y_4 - y_0) + \sigma_{xy}^{(1)}(x_4 - x_1, y_4 - y_1) + \sigma_{xy}^{(2)}(x_4 - x_2, y_4 - y_2) + \sigma_{xy}^{(3)}(x_4 - x_3, y_4 - y_3) \right) = 0,$$

где F_i – сила, действующая на i -ю двойникующую дислокацию со стороны остальных дислокаций нанодвойника; $b_{кр}$ – модуль краевой составляющей вектора Бюргерса двойникующей дислокации.

Выше рассматривали только сдвиговую компоненту тензора напряжений, так как, согласно [16], проекция силы F_i на ось OX определяется по формуле

$$F_x = b_{кр} \sigma_{xy}, \quad (3)$$

которая также может быть представлена в виде

$$F_x = \frac{\mu b_{кр}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (4)$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона.

Рассмотрение проекции силы F_i на ось OY (т. е. F_y) нецелесообразно, поскольку каждая двойникующая дислокация перемещается только в своей плоскости двойникования вдоль оси OX , а вдоль оси OY движение рассматриваемых дислокаций не осуществляется.

Полагая далее $F_i = (F_i)_x$ и учитывая (4), из (2) получим:

$$\begin{aligned}
 F_0 &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{(x_0 - x_1)\left((x_0 - x_1)^2 - (y_0 - y_1)^2\right)}{\left((x_0 - x_1)^2 + (y_0 - y_1)^2\right)^2} + \frac{(x_0 - x_2)\left((x_0 - x_2)^2 - (y_0 - y_2)^2\right)}{\left((x_0 - x_2)^2 + (y_0 - y_2)^2\right)^2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x_0 - x_3)\left((x_0 - x_3)^2 - (y_0 - y_3)^2\right)}{\left((x_0 - x_3)^2 + (y_0 - y_3)^2\right)^2} + \frac{(x_0 - x_4)\left((x_0 - x_4)^2 - (y_0 - y_4)^2\right)}{\left((x_0 - x_4)^2 + (y_0 - y_4)^2\right)^2} \right\} = 0; \\
 F_1 &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{(x_1 - x_0)\left((x_1 - x_0)^2 - (y_1 - y_0)^2\right)}{\left((x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2\right)^2} + \frac{(x_1 - x_2)\left((x_1 - x_2)^2 - (y_1 - y_2)^2\right)}{\left((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2\right)^2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x_1 - x_3)\left((x_1 - x_3)^2 - (y_1 - y_3)^2\right)}{\left((x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2\right)^2} + \frac{(x_1 - x_4)\left((x_1 - x_4)^2 - (y_1 - y_4)^2\right)}{\left((x_1 - x_4)^2 + (y_1 - y_4)^2\right)^2} \right\} = 0; \\
 F_2 &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{(x_2 - x_0)\left((x_2 - x_0)^2 - (y_2 - y_0)^2\right)}{\left((x_2 - x_0)^2 + (y_2 - y_0)^2\right)^2} + \frac{(x_2 - x_1)\left((x_2 - x_1)^2 - (y_2 - y_1)^2\right)}{\left((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2\right)^2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x_2 - x_3)\left((x_2 - x_3)^2 - (y_2 - y_3)^2\right)}{\left((x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2\right)^2} + \frac{(x_2 - x_4)\left((x_2 - x_4)^2 - (y_2 - y_4)^2\right)}{\left((x_2 - x_4)^2 + (y_2 - y_4)^2\right)^2} \right\} = 0; \\
 F_3 &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{(x_3 - x_0)\left((x_3 - x_0)^2 - (y_3 - y_0)^2\right)}{\left((x_3 - x_0)^2 + (y_3 - y_0)^2\right)^2} + \frac{(x_3 - x_1)\left((x_3 - x_1)^2 - (y_3 - y_1)^2\right)}{\left((x_3 - x_1)^2 + (y_3 - y_1)^2\right)^2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x_3 - x_2)\left((x_3 - x_2)^2 - (y_3 - y_2)^2\right)}{\left((x_3 - x_2)^2 + (y_3 - y_2)^2\right)^2} + \frac{(x_3 - x_4)\left((x_3 - x_4)^2 - (y_3 - y_4)^2\right)}{\left((x_3 - x_4)^2 + (y_3 - y_4)^2\right)^2} \right\} = 0; \\
 F_4 &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \frac{(x_4 - x_0)\left((x_4 - x_0)^2 - (y_4 - y_0)^2\right)}{\left((x_4 - x_0)^2 + (y_4 - y_0)^2\right)^2} + \frac{(x_4 - x_1)\left((x_4 - x_1)^2 - (y_4 - y_1)^2\right)}{\left((x_4 - x_1)^2 + (y_4 - y_1)^2\right)^2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{(x_4 - x_2)\left((x_4 - x_2)^2 - (y_4 - y_2)^2\right)}{\left((x_4 - x_2)^2 + (y_4 - y_2)^2\right)^2} + \frac{(x_4 - x_3)\left((x_4 - x_3)^2 - (y_4 - y_3)^2\right)}{\left((x_4 - x_3)^2 + (y_4 - y_3)^2\right)^2} \right\} = 0.
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

Введем обозначения:

$$a_{01} = \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_0 - x_1)\left((x_0 - x_1)^2 - (y_0 - y_1)^2\right)}{\left((x_0 - x_1)^2 + (y_0 - y_1)^2\right)^2}; \quad a_{02} = \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_0 - x_2)\left((x_0 - x_2)^2 - (y_0 - y_2)^2\right)}{\left((x_0 - x_2)^2 + (y_0 - y_2)^2\right)^2};$$

$$\begin{aligned}
 a_{03} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_0 - x_3) \left((x_0 - x_3)^2 - (y_0 - y_3)^2 \right)}{\left((x_0 - x_3)^2 + (y_0 - y_3)^2 \right)^2}; & a_{04} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_0 - x_4) \left((x_0 - x_4)^2 - (y_0 - y_4)^2 \right)}{\left((x_0 - x_4)^2 + (y_0 - y_4)^2 \right)^2}; \\
 a_{12} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_1 - x_2) \left((x_1 - x_2)^2 - (y_1 - y_2)^2 \right)}{\left((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 \right)^2}; & a_{13} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_1 - x_3) \left((x_1 - x_3)^2 - (y_1 - y_3)^2 \right)}{\left((x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2 \right)^2}; \\
 a_{14} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_1 - x_4) \left((x_1 - x_4)^2 - (y_1 - y_4)^2 \right)}{\left((x_1 - x_4)^2 + (y_1 - y_4)^2 \right)^2}; & a_{23} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_2 - x_3) \left((x_2 - x_3)^2 - (y_2 - y_3)^2 \right)}{\left((x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2 \right)^2}; \\
 a_{24} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_2 - x_4) \left((x_2 - x_4)^2 - (y_2 - y_4)^2 \right)}{\left((x_2 - x_4)^2 + (y_2 - y_4)^2 \right)^2}; & a_{34} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_3 - x_4) \left((x_3 - x_4)^2 - (y_3 - y_4)^2 \right)}{\left((x_3 - x_4)^2 + (y_3 - y_4)^2 \right)^2}; \\
 a_{10} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_1 - x_0) \left((x_1 - x_0)^2 - (y_1 - y_0)^2 \right)}{\left((x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2 \right)^2}; & a_{20} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_2 - x_0) \left((x_2 - x_0)^2 - (y_2 - y_0)^2 \right)}{\left((x_2 - x_0)^2 + (y_2 - y_0)^2 \right)^2}; \\
 a_{30} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_3 - x_0) \left((x_3 - x_0)^2 - (y_3 - y_0)^2 \right)}{\left((x_3 - x_0)^2 + (y_3 - y_0)^2 \right)^2}; & a_{40} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_4 - x_0) \left((x_4 - x_0)^2 - (y_4 - y_0)^2 \right)}{\left((x_4 - x_0)^2 + (y_4 - y_0)^2 \right)^2}; \\
 a_{21} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_2 - x_1) \left((x_2 - x_1)^2 - (y_2 - y_1)^2 \right)}{\left((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 \right)^2}; & a_{31} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_3 - x_1) \left((x_3 - x_1)^2 - (y_3 - y_1)^2 \right)}{\left((x_3 - x_1)^2 + (y_3 - y_1)^2 \right)^2}; \\
 a_{41} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_4 - x_1) \left((x_4 - x_1)^2 - (y_4 - y_1)^2 \right)}{\left((x_4 - x_1)^2 + (y_4 - y_1)^2 \right)^2}; & a_{32} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_3 - x_2) \left((x_3 - x_2)^2 - (y_3 - y_2)^2 \right)}{\left((x_3 - x_2)^2 + (y_3 - y_2)^2 \right)^2}; \\
 a_{42} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_4 - x_2) \left((x_4 - x_2)^2 - (y_4 - y_2)^2 \right)}{\left((x_4 - x_2)^2 + (y_4 - y_2)^2 \right)^2}; & a_{43} &= \frac{\mu b_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_4 - x_3) \left((x_4 - x_3)^2 - (y_4 - y_3)^2 \right)}{\left((x_4 - x_3)^2 + (y_4 - y_3)^2 \right)^2}.
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

Это позволяет из (5) получить систему алгебраических уравнений:

$$\begin{cases}
 a_{01} + a_{02} + a_{03} + a_{04} = 0; \\
 a_{10} + a_{12} + a_{13} + a_{14} = 0; \\
 a_{20} + a_{21} + a_{23} + a_{24} = 0; \\
 a_{30} + a_{31} + a_{32} + a_{34} = 0; \\
 a_{40} + a_{41} + a_{42} + a_{43} = 0,
 \end{cases}
 \tag{7}$$

в которой:

$$\begin{aligned}
 a_{01} &= -a_{10}; & a_{02} &= -a_{20}; & a_{03} &= -a_{30}; & a_{04} &= -a_{40}; \\
 a_{12} &= -a_{21}; & a_{13} &= -a_{31}; & a_{14} &= -a_{41}; \\
 a_{23} &= -a_{32}; & a_{24} &= -a_{42}; & a_{34} &= -a_{43}.
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

Учитывая (8), из (7) получаем:

$$\begin{cases} a_{01} + a_{02} + a_{03} + a_{04} = 0; \\ a_{01} - a_{12} - a_{13} - a_{14} = 0; \\ a_{02} + a_{12} - a_{23} - a_{24} = 0; \\ a_{03} + a_{13} + a_{23} - a_{34} = 0; \\ a_{04} + a_{14} + a_{24} + a_{34} = 0. \end{cases} \quad (9)$$

В системе (9) неизвестных больше, чем входящих в нее уравнений. Это делает (9) трудно разрешимой без использования дополнительных условий и допущений. В качестве такого допущения примем дислокации 1 и 3, 2 и 4 расположенными соответственно в одних и тех же плоскостях, перпендикулярных плоскости XOY (рис. 2). Следы таких плоскостей (параллельные оси OY) на рис. 2 показаны пунктирными линиями.

Тогда с учетом того, что

$$\begin{aligned} |y_0 - y_1| &= |y_1 - y_0| = |y_0 - y_3| = |y_3 - y_0| = a; \\ |y_1 - y_2| &= |y_2 - y_1| = |y_3 - y_4| = |y_4 - y_3| = a; \\ |y_0 - y_2| &= |y_2 - y_0| = |y_0 - y_4| = |y_4 - y_0| = 2a; \\ |y_1 - y_3| &= |y_3 - y_1| = 2a; \\ |y_1 - y_4| &= |y_4 - y_1| = |y_2 - y_3| = |y_3 - y_2| = 3a; \\ |y_2 - y_4| &= |y_4 - y_2| = 4a, \end{aligned} \quad (10)$$

можно записать:

$$a_{01} = a_{03}; \quad a_{02} = a_{04}; \quad a_{12} = a_{34}; \quad a_{14} = a_{23}. \quad (11)$$

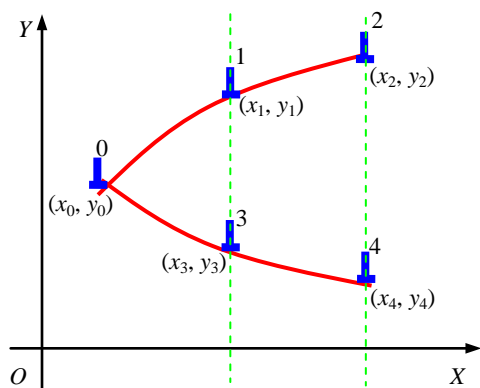


Рис. 2. Схематическое изображение клиновидного нанодвойника с упорядоченным расположением двойнивающих дислокаций на двойниковых границах парами в плоскостях, следы которых в плоскости XOY обозначены пунктирными линиями

Fig. 2. Schematic diagram of wedge-type nanodoublet with ordered arrangement of twinning dislocations at twin boundaries in pairs and planes and their traces are indicated in XOY plane by dotted line

После этого система (9) примет вид:

$$\begin{cases} a_{01} + a_{02} + a_{01} + a_{02} = 0; \\ a_{01} - a_{12} - a_{13} - a_{14} = 0; \\ a_{02} + a_{12} - a_{14} - a_{24} = 0; \\ a_{01} + a_{13} + a_{14} - a_{12} = 0; \\ a_{02} + a_{14} + a_{24} + a_{12} = 0. \end{cases} \quad (12)$$

С учетом (8) дальнейшие преобразования (12) приведут к системе:

$$\begin{cases} a_{01} + a_{02} = 0; \\ a_{01} - a_{12} = 0; \\ a_{02} + a_{12} = 0, \end{cases} \quad (13)$$

в которой три неизвестных и столько же уравнений, причем учитывая (10):

$$\begin{aligned} a_{01} &= \frac{\mu b_{кр}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_0 - x_1) \left((x_0 - x_1)^2 - a^2 \right)}{\left((x_0 - x_1)^2 + a^2 \right)^2}; \\ a_{02} &= \frac{\mu b_{кр}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_0 - x_2) \left((x_0 - x_2)^2 - 4a^2 \right)}{\left((x_0 - x_2)^2 + 4a^2 \right)^2}; \\ a_{12} &= \frac{\mu b_{кр}^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_1 - x_2) \left((x_1 - x_2)^2 - a^2 \right)}{\left((x_1 - x_2)^2 + a^2 \right)^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Заметим, что в (14)

$$x_0 - x_2 = (x_0 - x_1) + (x_1 - x_2). \quad (15)$$

Введем обозначения:

$$d_{01} = x_0 - x_1; \quad d_{02} = x_0 - x_2; \quad d_{12} = x_1 - x_2. \quad (16)$$

Тогда (15) примет вид

$$d_{02} = d_{01} + d_{12}. \quad (17)$$

Подставляя (14) в (13) и используя обозначения (16), получим:

$$\begin{cases} \frac{d_{01} (d_{01}^2 - a^2)}{(d_{01}^2 + a^2)^2} + \frac{d_{02} (d_{02}^2 - 4a^2)}{(d_{02}^2 + 4a^2)^2} = 0; \\ \frac{d_{01} (d_{01}^2 - a^2)}{(d_{01}^2 + a^2)^2} - \frac{d_{12} (d_{12}^2 - a^2)}{(d_{12}^2 + a^2)^2} = 0; \\ \frac{d_{02} (d_{02}^2 - 4a^2)}{(d_{02}^2 + 4a^2)^2} + \frac{d_{12} (d_{12}^2 - a^2)}{(d_{12}^2 + a^2)^2} = 0. \end{cases} \quad (18)$$

Отсюда очевидно следует:

$$d_{01}^2 + a^2 \neq 0; \quad d_{02}^2 + 4a^2 \neq 0; \quad d_{12}^2 + a^2 \neq 0. \quad (19)$$

Система (18) преобразуется к виду:

$$\begin{cases} d_{01}(d_{01}^2 - a^2)(d_{02}^2 + 4a^2)^2 + \\ + d_{02}(d_{02}^2 - 4a^2)(d_{01}^2 + a^2)^2 = 0; \\ d_{01}(d_{01}^2 - a^2)(d_{12}^2 + a^2)^2 - \\ - d_{12}(d_{12}^2 - a^2)(d_{01}^2 + a^2)^2 = 0; \\ d_{02}(d_{02}^2 - 4a^2)(d_{12}^2 + a^2)^2 + \\ + d_{12}(d_{12}^2 - a^2)(d_{02}^2 + 4a^2)^2 = 0. \end{cases} \quad (20)$$

Из второго уравнения системы (20) следует

$$\frac{d_{01}(d_{01}^2 - a^2)}{(d_{01}^2 + a^2)^2} = \frac{d_{12}(d_{12}^2 - a^2)}{(d_{12}^2 + a^2)^2}. \quad (21)$$

Отсюда $d_{01} = d_{12}$. Тогда

$$d_{02} = 2d_{01} = 2d_{12}. \quad (22)$$

Используя (22), первое уравнение в (20) можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} & d_{01}(d_{01}^2 - a^2)(d_{02}^2 + 4a^2)^2 + \\ & + d_{02}(d_{02}^2 - 4a^2)(d_{01}^2 + a^2)^2 = \\ & = d_{01}(d_{01}^2 - a^2)(4d_{01}^2 + 4a^2)^2 + \\ & + 2d_{01}(4d_{01}^2 - 4a^2)(d_{01}^2 + a^2)^2 = \\ & = 24d_{01}(d_{01}^2 - a^2)(d_{01}^2 + a^2)^2 = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Отсюда получаем два имеющих физический смысл решения:

$$d_{01} = 0; \quad d_{01} = a. \quad (24)$$

С использованием условия (22) третье уравнение в (20) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} & d_{02}(d_{02}^2 - 4a^2)(d_{12}^2 + a^2)^2 + \\ & + d_{12}(d_{12}^2 - a^2)(d_{02}^2 + 4a^2)^2 = \\ & = 2d_{12}(4d_{12}^2 - 4a^2)(d_{12}^2 + a^2)^2 + \\ & + d_{12}(d_{12}^2 - a^2)(4d_{12}^2 + 4a^2)^2 = \\ & = 8d_{12}(d_{12}^2 - a^2)(d_{12}^2 + a^2)^2 = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Отсюда: $d_{12} = 0; \quad d_{12} = a.$ (26)

Далее, подставляя (26) в (22), получим:

$$d_{02} = 0; \quad d_{02} = 2a. \quad (27)$$

Поскольку пары двойникующих дислокаций на противоположных границах нанодвойника

по условию задачи находятся в одной плоскости (рис. 2), то:

$$d_{03} = d_{01}; \quad d_{04} = d_{02}; \quad d_{34} = d_{12} \quad (28)$$

и $d_{03} = 0; \quad d_{03} = a; \quad d_{04} = 0; \quad d_{04} = 2a;$

$$d_{34} = 0; \quad d_{34} = a. \quad (29)$$

Очевидно, что

$$d_{14} = d_{23} = d_{12}. \quad (30)$$

И в равновесии:

$$d_{14} = 0; \quad d_{23} = 0; \quad d_{14} = a; \quad d_{23} = a. \quad (31)$$

Полученные результаты указывают на то, что в идеальном кристалле после снятия нагрузки возможны два варианта равновесной формы краевого клиновидного нанодвойника. В первом случае в плоскости двойникования расстояние между двойникующими дислокациями стремится к нулю. При этом в плоскости, перпендикулярной плоскости двойникования, расстояние между соседними двойникующими дислокациями равно межплоскостному расстоянию. В этом случае равновесия двойникующие дислокации выстраиваются в стенку и существование нанодвойника проблематично из-за аннигиляции двойникующих дислокаций границ двойника с имеющими противоположный знак дислокациями устья нанодвойника и связанного с этим процессом исчезновения нанодвойника.

Во втором случае для равновесия нанодвойника требуется, чтобы расстояние между соседними двойникующими дислокациями на его границах в плоскости двойникования равнялось межплоскостному расстоянию. Известно [16], что такое равновесие групп дислокаций является неустойчивым. Для обеспечения устойчивости в этом случае необходимо достаточное для фиксации дислокаций высокое значение сил неупругой природы, оказывающих сопротивление движению двойникующих дислокаций. Обеспечить равновесие такого нанодвойника могут и поля внутренних напряжений от источников, находящихся, например, у устья нанодвойника.

ВЫВОД

На основании анализа баланса сил, действующих на каждую двойникующую дислокацию со стороны других дислокаций краевого клиновидного нанодвойника, выполнен расчет равновесных параметров такого нанодвойника и показана возможность его существования в идеальном кристалле при отсутствии внешних сил. Результаты имеют важное практическое значение, поскольку могут быть использованы в механике разрушения для повышения точности расчета областей зарождения разрушения

в двойниующихся материалах у таких концентраторов напряжений, как нанодвойники.

ЛИТЕРАТУРА

1. Остриков, О. М. Нанодвойникование монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Черная металлургия. Изв. высш. учеб. заведений. 2002. № 3. С. 51–52.
2. Deformation Twins in Nanocrystalline Al / X. Z. Liao [et al.] // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 83, No 24. P. 5062–5064. DOI: 10.1063/1.1633975.
3. Waitz, T. Size-Dependent Martensitic Transformation Path Causing Atomic-Scale Twinning of Nanocrystalline NiTi Shape Memory Alloys / T. Waitz, D. Spisak, J. Hafner // Europhys. Lett. 2005. Vol. 71, No 1. P. 98–103. DOI: 10.1209/epl/i2005-10061-y.
4. Twinning Defects in Spherical GeSi Alloy Nanocrystals / Y. M. Yang [et al.] // J. Cryst. Growth. 2006. Vol. 219, No 2. P. 358–362. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2006.03.020.
5. Wu, Xiao-Lei. Deformation Twinning Mechanisms in Nanocrystalline Ni / Xiao-Lei Wu, En Ma // Appl. Phys. Lett. 2006. Vol. 88, No 6, 061905. DOI: /10.1063/1.2172404.
6. Twinning in Nanocrystalline Ni by Severe Plastic Deformation / X. Y. Feng [et al.] // J. Phys. D. 2006. Vol. 39, No 4. P. 746–749. DOI: 10.1088/0022-3727/39/4/022.
7. Гуткин, М. Ю. Механизм образования деформационных двойников в нанокристаллических материалах / М. Ю. Гуткин, И. А. Овидько, Н. В. Скиба // Физика твердого тела. 2007. Т. 49, № 5. С. 830–838. DOI: 10.1134/s1063783407050125.
8. Рушиц, С. В. Нанодвойникование мартенситных кристаллов и теория адаптивных фаз / С. В. Рушиц, В. Л. Ильичев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Сер. Металлургия. 2008. Вып. 11, № 24 (124). С. 44–46.
9. Овидько, И. А. Влияние миграции двойниковых границ на трещиностойкость нанодвойникованных металлов / И. А. Овидько, А. Г. Шейнерман // Физика и механика материалов. 2014. Т. 21, № 3. С. 248–258.
10. Овидько, И. А. Образование деформационных нанодвойников на границах зерен с дисклинациями в наноматериалах / И. А. Овидько, Н. В. Скиба // Физика и механика материалов. 2014. Т. 21, № 3. С. 288–298.
11. Остриков, О. М. Механика двойникования твердых тел / О. М. Остриков. Гомель: Гомельский гос. техн. ун-т имени П. О. Сухого, 2008. 301 с.
12. Остриков, О. М. Дислокационная модель нанодвойника / О. М. Остриков // Механика твердого тела. Изв. РАН. 2008. Т. 43, № 5. С. 124–129. DOI: 10.3103/s0025654408050142.
13. Финкель, В. М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В. М. Финкель, В. А. Федоров, А. П. Королев. Ростов на/Д.: Изд-во Рост. ун-та, 1990. 172 с.
14. Ovid'ko, I. A. Deformation Twinning Through Nanoscale Ideal Shears in Nano- and Polycrystalline Materials at Ultra High Stresses / I. A. Ovid'ko, A. G. Sheinerman // Rev. Adv. Mater. Sci. 2011. Vol. 27, No 2. P. 189–194.
15. Гуткин, М. Ю. Пластическое течение и разрушение аморфных межкристаллитных прослоек в керамических нанокompозитах / М. Ю. Гуткин, И. А. Овидько // Физика твердого тела. 2010. Т. 52, № 4. С. 668–677. DOI: 10.1134/s1063783410040086.
16. Миркин, Л. И. Физические основы пластической деформации / Л. И. Миркин. М.: МГУ, 1968. 538 с.

Поступила 26.01.2017
 Подписана в печать 30.03.2017
 Опубликована онлайн 28.07.2017

REFERENCES

1. Ostrikov O. M. (2002) Nanotwin Formation of Bismuth Monocrystal. *Izvestiya Visshikh Uchebnykh Zavedenii. Chernaya Metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*, (3), 51–52 (in Russian).
2. Liao X. Z., Zhou F., Lavernia E. J., He D. W., Zhu Y. T. (2003) Deformation Twins in Nanocrystalline Al. *Applied Physics Letters*, 83 (24), 5062–5064. DOI: 10.1063/1.1633975.
3. Waitz T., Spisak D., Hafner J. (2005) Size-Dependent Martensitic Transformation Path Causing Atomic-Scale Twinning of Nanocrystalline NiTi Shape Memory Alloys. *Europhysics Letters (EPL)*, 71 (1), 98–103. DOI: 10.1209/epl/i2005-10061-y.
4. Yang Y. M., Wu X. L., Yang L. W., Kong F. (2006) Twinning Defects in Spherical GeSi Alloy Nanocrystals. *Journal of Crystal Growth*, 219 (2), 358–362. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2006.03.020.
5. Xiao-Lei Wu, En Ma (2006) Deformation Twinning Mechanisms in Nanocrystalline Ni. *Applied Physics Letters*, 88 (6), 061905. DOI: /10.1063/1.2172404.
6. Feng X. Y., Cheng Z. Y., Wu X., Wang T. C., Hong Y. S. (2006) Twinning in Nanocrystalline Ni by Severe Plastic Deformation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39 (4), 746–749. DOI: 10.1088/0022-3727/39/4/022.
7. Gutkin M. Yu., Ovid'ko I. A., Skiba N. V. (2007) Mechanism of Deformation-Twin Formation in Nanocrystalline Metals. *Physics of the Solid State*, 49 (5), 874–882. DOI: 10.1134/s1063783407050125.
8. Rushits S. V., Ilyichiov V. L. (2008) Nanotwin Formation of Martensitic Crystals and Theory of Adaptive Phases. *Vestnik Yuzhno-Ural'skogo Gosudarstvennogo Universiteta. Seriya: Metallurgiya = Bulletin of the South Ural State University. Series: Metallurgical Engineering*, 11 (24), 44–46 (in Russian).
9. Ovid'ko I. A., Sheinerman A. G. (2014) Effect of Twin Boundary Migration on Fracture Toughness of Nanotwinned Metals. *Materials Physics and Mechanics*, 21 (3), 248–258 (in Russian).
10. Ovid'ko I. A., Skiba N. V. (2014) Nucleation of Deformation Nanotwins at Grain Boundaries Containing Disclinations in Nanomaterials. *Materials Physics and Mechanics*, 21 (3), 288–298 (in Russian).
11. Ostrikov O. M. (2008) *Mechanics of Nanotwin Formation in Solid Bodies*. Gomel, Sukhoi State Technical University of Gomel. 301 (in Russian).
12. Ostrikov O. M. (2008) Dislocation Model of a Nanotwin. *Mechanics of Solids*, 43 (5), 793–797. DOI: 10.3103/s0025654408050142.
13. Finkel V. M., Fedorov V. A., Korolev A. P. (1990) *Demolition of Crystals During Mechanical Twin Formation*. Rostov-on-Don, Publishing House of Rostov University. 172 (in Russian).
14. Ovid'ko I. A., Sheinerman A. G. (2011) Deformation Twinning Through Nanoscale Ideal Shears in Nano- and Polycrystalline Materials at Ultra High Stresses. *Reviews on Advanced Materials Science*, 27 (2), 189–194.
15. Gutkin M. Yu., Ovid'ko I. A. (2010) Plastic Flow and Fracture of Amorphous Intercrystalline Layers in Ceramic Nanocomposites. *Physics of the Solid State*, 52 (4), 718–727. DOI: 10.1134/s1063783410040086.
16. Mirkin L. I. (1968) *Physical Fundamentals of Plactical Deformation*. Moscow, Moscow State University. 538 (in Russian).

Received: 26.01.2017
 Accepted: 30.03.2017
 Published online: 28.07.2017