УДК 548.24

РАСЧЕТ ПОЛЕЙ СМЕЩЕНИЙ И ДЕФОРМАЦИЙ У КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА НА ОСНОВАНИИ МЕЗОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ МОДЕЛИ

Докт. физ.-мат. наук, проф. ВАСИЛЕВИЧ Ю. В., канд. физ.-мат. наук, доц. ОСТРИКОВ О. М.

Белорусский национальный технический университет

Развитие теории заклинившихся двойников оправдано тем, что на практике часто приходится иметь дело с двойникующимися материалами, предварительно обработанными давлением. В таких твердых телах уже сформирована система двойников, которые выступают в качестве статических концентраторов напряжений, оказывающих существенное влияние на физические свойства материала [1–3]. Целенаправленно изменять свойства двойникующихся материалов удобно при использовании теоретических расчетов, основанных на представлениях о дислокационной природе процесса двойникования [4].

На мезоскопическом уровне расстояние между двойникующими дислокациями нельзя считать пренебрежимо малым. Поэтому в математической модели двойников на этом уровне должен присутствовать параметр, определяющий данное расстояние. Напряжения, смещения и деформации в модели двойника рассматриваемого уровня находятся в результате суммирования напряжений, смещений и деформаций, сформированных каждой из двойникующих дислокаций двойниковых границ [5].

На мезоскопическом уровне возможно не только рассмотрение микродвойников, но и изучение отдельных двойников длиной до десятых долей микрометра. Такие двойники характеризуют начальную стадию развития двойникования и в некоторых случаях могут рассматриваться как зародыши двойников.

Целью данной работы стал расчет на основании мезоскопической дислокационной модели смещений и деформаций у клиновидного двойника.

Постановка задачи. Представим клиновидный двойник формы, близкой к виду равнобедренного треугольника, состоящим из имеющего вид клина скопления двойникующих дислокаций с вектором Бюргерса $\mathbf{b}$ (рис. 1). Так как двойникующие дислокации являются частичными [6–8], их вектор Бюргерса можно разложить на две составляющие: винтовую $\mathbf{b}_в$ и краевую $\mathbf{b}_{кр}$. Пусть краевая составляющая вектора Бюргерса направлена вдоль оси *OX* (рис. 1) вдоль положительного ее направления, а винтовая – перпендикулярно плоскости рис. 1 (вдоль оси *OZ*). Среду, в которой находятся дислокации, будем считать однородной и изотропной.

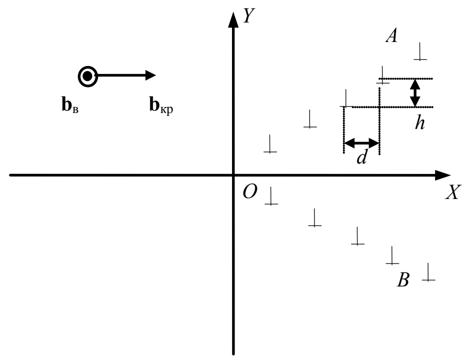


Рис. 1. Схема взаимного расположения дислокаций, их компонент вектора Бюргерса и декартовой системы координат для расчета полей напряжений и деформаций у клиновидного двойника

Проведем расчет на основании принципа суперпозиции смещений и компонент тензора деформаций, создаваемых такой совокупностью дислокаций. Для этого воспользуемся известными соотношениями для смещений у единичных краевых и винтовых дислокаций [6, 9]:

$$u_x^d(x,y)=\frac{b_{кр}}{2\pi}\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right)+\frac{xy}{2(1-\nu)(x^2+y^2)}\right];$$

$$u_y^d(x,y)=-\frac{b_{кр}}{2\pi}\times$$

$$\times\left[\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)}\ln(x^2+y^2)+\frac{x^2-y^2}{4(1-\nu)(x^2+y^2)}\right]; \qquad (1)$$

$$u_z^d(x,y)=\frac{b_{в}}{2\pi}\operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right).$$

Тогда на основании принципа суперпозиции [4–6, 9] смещения, возникающие вокруг рассматриваемого скопления дислокаций, в общем виде могут быть представлены как:

$$u_i(x,y)=\sum_n u_i^{OA}(x-nd,\,y+nh)+$$

$$+\sum_m u_i^{OB}(x-md,\,y-mh), \qquad (2)$$

или

$$u_x(x,y)=\frac{b_{кр}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\operatorname{arctg}\left(\frac{y+nh}{x-nd}\right)+\right.\right.$$

$$\left.+\frac{(x-nd)(y+nh)}{2(1-\nu)[(x-nd)^2+(y+nh)^2]}\right)+$$

$$+\sum_{m=1}^{M}\left(\operatorname{arctg}\left(\frac{y-mh}{x-md}\right)+\right.$$

$$\left.\left.+\frac{(x-md)(y-mh)}{2(1-\nu)[(x-md)^2+(y-mh)^2]}\right)\right];$$

$$u_y(x,y)=-\frac{b_{кр}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)}\ln((x-nd)^2+\right.\right.$$

$$\left.+(y+nh)^2)+\frac{(x-nd)^2-(y+nh)^2}{4(1-\nu)((x-nd)^2+(y+nh)^2)}\right)+ \qquad (3)$$

$$+\sum_{m=1}^{M}\left(\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)}\ln((x-md)^2+(y-mh)^2)+\right.$$

$$\left.\left.+\frac{(x-md)^2-(y-mh)^2}{4(1-\nu)((x-md)^2+(y-mh)^2)}\right)\right];$$

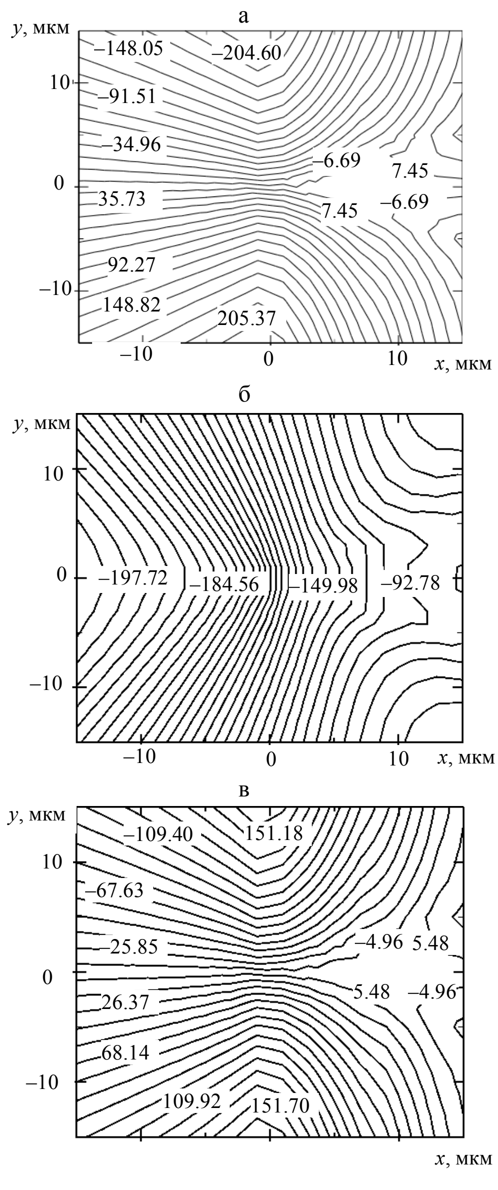
$$u_z(x,y)=\frac{b_{в}}{2\pi}\times$$

$$\times\left[\sum_{n=0}^{N}\operatorname{arctg}\left(\frac{y+nh}{x-nd}\right)+\sum_{m=1}^{M}\operatorname{arctg}\left(\frac{y-mh}{x-md}\right)\right].$$

Результаты расчетов смещений представлены на рис. 2. Принимались следующие параметры расчетов: $-15 < x < 15$; $-15 < y < 15$ (мкм); $N = 100$; $M = 99$; $d = 0{,}15$ мкм; $h = 0{,}05$ мкм; $\nu = 0{,}33$. Без ущерба общности полученных результатов для исключения необходимости учета численных значений величин $b_{кр}/2\pi$ и $b_{в}/2\pi$ рассчитывались безразмерные распределения

$$\chi_i(x,y)=\frac{u_i(x,y)}{B_i}, \qquad (4)$$

имеющие аналогичный вид, что и распределения $u_i(x,y)$.



−10 0 10

Рис. 2. Распределения: а – $\chi_x(x, y)$; б – $\chi_y(x, y)$; в – $\chi_z(x, y)$ (аналогичный вид имеют распределения смещений $u_x(x, y)$, $u_y(x, y)$, $u_z(x, y)$)

В (4) принималось: $B_x = b_{\text{кр}}/2\pi$; $B_z = b_{\text{в}}/2\pi$.

Конфигурация распределения смещений u_x и u_z имеет идентичный вид. Отличие заключается в величине значений изолиний в одних и тех же областях конденсированной среды относительно клиновидного двойника. Следует отметить, что данные смещения знакопеременны относительно оси OX (рис. 2а, в), а также оси, параллельной оси OY и проходящей у устья двойника.

Смещения u_y отрицательны и имеют высокое численное значение также в удалении от вершины двойника.

Расчет деформаций и обсуждение результатов расчета. Из соотношений (3) могут быть определены и компоненты тензора деформаций u_{ij}. Для этого необходимо найти частные производные [1, 6, 9]

$$u_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right). \tag{5}$$

Тогда получим:

$$u_{xx}(x,y) = \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y+nh}{(x-nd)^2+(y+nh)^2} - \frac{(x-nd)^2(y+nh)}{(1-\nu)[(x-nd)^2+(y+nh)^2]^2}\right) + \left(\sum_{m=1}^{M}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y-mh}{(x-md)^2+(y-mh)^2} - \frac{(x-md)^2(y-mh)}{(1-\nu)[(x-md)^2+(y-mh)^2]^2}\right)\right)\right];$$

$$u_{yy}(x,y) = -\frac{b_{\text{кр}}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y+nh}{(x-nd)^2+(y+nh)^2} - \frac{(y+nh)[(x-nd)^2-(y+nh)^2]}{2(1-\nu)[(x-nd)^2+(y+nh)^2]^2}\right) + \left(\sum_{m=1}^{M}\left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{y-mh}{(x-md)^2+(y-mh)^2} - \frac{(y-mh)[(x-md)^2-(y-mh)^2]}{2(1-\nu)[(x-md)^2+(y-mh)^2]^2}\right)\right)\right]; \tag{6}$$

$$u_{zz}(x,y) = 0;$$

$$u_{xy}(x,y) = \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\left(\frac{1}{4(1-\nu)}\frac{x-nd}{(x-nd)^2+(y+nh)^2} + \frac{(x-nd)[(x-nd)^2-3(y+nh)^2]}{4(1-\nu)[(x-nd)^2+(y+nh)^2]^2}\right) + \left(\sum_{m=1}^{M}\left(\frac{1}{4(1-\nu)}\frac{x-md}{(x-md)^2+(y-mh)^2} + \frac{(x-md)[(x-md)^2-3(y-mh)^2]}{4(1-\nu)[(x-md)^2+(y-mh)^2]^2}\right)\right)\right];$$

$$u_{xz}(x,y) = -\frac{b_{\text{в}}}{4\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\frac{y+nh}{(x-nd)^2+(y+nh)^2} + \sum_{m=1}^{M}\frac{y-mh}{(x-md)^2+(y-mh)^2}\right];$$

$$u_{yz}(x,y) = \frac{b_{\text{в}}}{4\pi}\left[\sum_{n=0}^{N}\frac{x-nd}{(x-nd)^2+(y+nh)^2} + \sum_{m=1}^{M}\frac{x-md}{(x-md)^2+(y-mh)^2}\right].$$

Результаты расчетов представлены на рис. 3 в виде конфигурации распределения величин

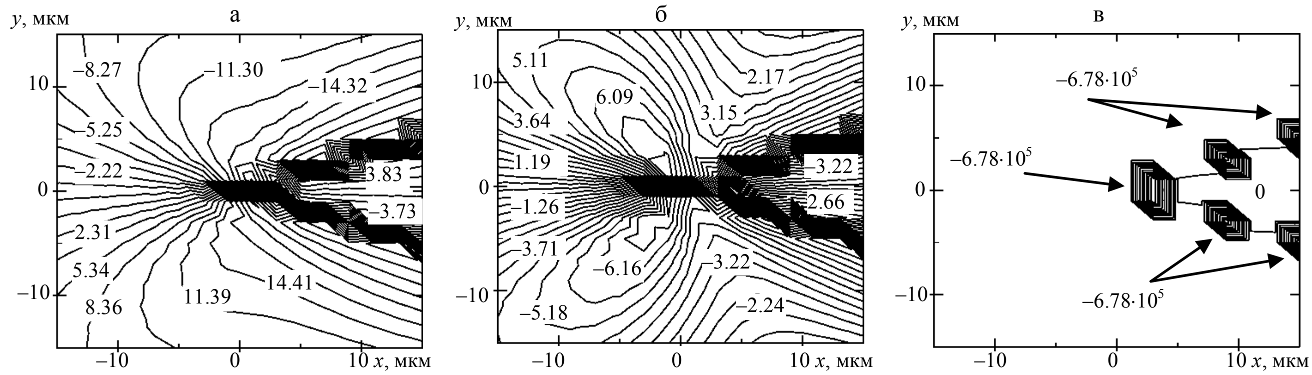
$$\chi_{ij}(x,y) = \frac{u_{ij}(x,y)}{B_{ij}}, \tag{7}$$

где

$$B_{xx} = B_{xy} = B_{yy} = \frac{b_{\text{кр}}}{2\pi}; \quad B_{xz} = B_{yz} = \frac{b_{\text{в}}}{2\pi}.$$

В отличие от смещений u_i (рис. 2), у распределений тензора деформаций четко прослеживается локализация деформаций у границ двойника (рис. 3). Нормальные деформации $u_{xx}(x,y)$ и $u_{yy}(x,y)$ знакопеременны относительно оси OX, а также относительно двойниковых границ, т. е. у каждой границы клиновидного двойника нормальные деформации снаружи и внутри двойника имеют разный знак. Вдоль оси OX данные деформации близки к нулю.

Деформации $u_{xy}(x, y)$, как и $u_{yz}(x, y)$, вдоль двойниковой границы локализуются в трех областях (рис. 3в, д): у вершины, у устья и средней части клиновидного двойника. Знак данных деформаций одинаков, и они равны нулю внутри двойника на оси *OX*.



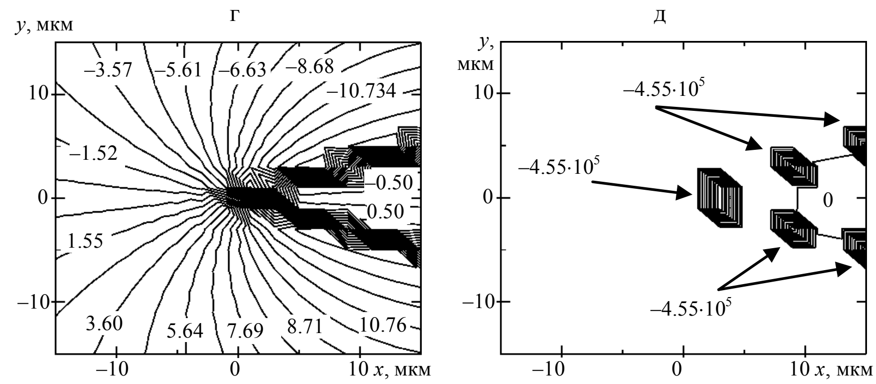


Рис. 3. Распределения: а – $\chi_{xx}(x, y)$; б – $\chi_{yy}(x, y)$; в – $\chi_{xy}(x, y)$; г – $\chi_{xz}(x, y)$; д – $\chi_{yz}(x, y)$; (аналогичный вид имеют распределения деформации $u_{xx}(x, y)$, $u_{yy}(x, y)$, $u_{xy}(x, y)$, $u_{xz}(x, y)$ и $u_{yz}(x, y)$)

Конфигурация полей деформаций $u_{xz}(x, y)$ схожа с конфигурацией деформаций $u_{xx}(x, y)$. Отличие заключается в численных значениях этих деформаций в одинаковых областях конденсированной среды по отношению к клиновидному двойнику.

ВЫВОД

Таким образом, на основании мезоскопической дислокационной модели рассчитаны смещения и деформации у клиновидного двойника. У распределений тензора деформаций четко прослеживается локализация деформаций у границ двойника

ЛИТЕРАТУРА

1. **Полухин, П. И.** Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – М.: Металлургия, 1982. – 584 с.

2. **Остриков, О. М.** О возможности формирования фазовых дифракционных решеток на основе явления двойникования монокристаллов / О. М. Остриков // Письма в журнал технической физики. – 2000. – Т. 26, № 21. – С. 49–52.

3. **Остриков, О. М.** Влияние облучения ионами бора, азота, углерода и циркония на процесс генерации двойникующих дислокаций в монокристаллах висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2001. – № 8. – С. 45–46.

4. **Остриков, О. М.** Распределение легирующего компонента в полисинтетических двойниках и теоретический прогноз формирования слоистых материалов с использованием явления полисинтетического двойникования / О. М. Остриков // Материалы. Технологии. Инструменты. – 2006. – Т. 11, № 3. – С. 54–56.

5. **Остриков, О. М.** Напряженное состояние у клиновидного двойника при дисбалансе плотностей двойникующих дислокаций / О. М. Остриков // Прикладная механика и техническая физика. – 2002. – Т. 43, № 4. – С. 180–182.

6. **Хирт, Дж.** Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.

7. **Классен-Неклюдова, М. В.** Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – М.: АН СССР, 1960. – 262 с.

8. **Пинчук, А. И.** Влияние электромагнитного поля на пластическую деформацию двойникованием кристаллов висмута: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / А. И. Пинчук. – Минск, 1998. – 18 с.