

УДК 539.214

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АКТИВНЫХ ПЛОСКОСТЕЙ ВТОРИЧНОГО ДВОЙНИКОВАНИЯ И СКОЛЬЖЕНИЯ ПРИ ПЕРЕСЕЧЕНИИ ДВОЙНИКОВ В НЕКОТОРЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

© В.А. Тялина, Ю.И. Тялин

Ключевые слова: двойникование; скольжение; взаимодействие двойников; фактор Шмида. Рассмотрены метод и результаты кристаллографического анализа процессов микропластичности и разрушения при пересечении деформационных двойников в ОЦК и ГПУ металлах.

При решении задач физики прочности и пластичности зачастую необходимо знать касательные напряжения τ , действующие по определенным кристаллографическим плоскостям и направлениям. В случае одноосного напряженного состояния напряжения τ пропорциональны величине фактора Шмида m [1]:

$$\tau = \sigma \cos \varphi \cos \lambda = \sigma \cdot m, \quad (1)$$

где σ – напряжение, действующее вдоль оси нагружения; λ – угол между направлениями действия нагрузки и скольжения; φ – угол между направлениями действия нагрузки и нормалью к плоскости скольжения.

При известном направлении действия нагрузки и определенном положении кристаллографических плоскостей и направлениях, заданных индексами Миллера $\{hkl\}$ и $\langle uvw \rangle$ соответственно, задача сводится к отысканию углов φ и λ . Значения углов легко находятся при рассмотрении напряжений τ и σ , действующих в одной системе координат, связанной с какой-либо кристаллической структурой. Вместе с тем при переходе от одной системы координат, где действуют напряжения σ , к другой, в которой отыскиваются напряжения τ (подобное может иметь место в кристаллах при переходе через границы зерен, двойников), требуются дополнительные преобразования.

Известно [2–3], что пересечение деформационных двойников сопровождается развитием в сдвойникованном материале вторичного двойникования, скольжения и разрушения. Протекание процессов обусловлено действием на границу статического двойника развивающейся прослойки. Определение кристаллографических параметров протекающих процессов, как правило, затруднительно.

Целью настоящей работы являлось проведение кристаллографического анализа пересечения двойников в кристаллах с ОЦК и ГПУ решетками для последующего выявления дислокационных взаимодействий, приводящих к образованию раскалывающих дислокаций, способных выступать в качестве зародышей разрушения. Для основных вариантов пересечения двой-

ников в ОЦК и ГПУ решетках выполнено преобразование индексов плоскостей вторичного скольжения и двойникования к системе координат, связанной с матрицей, отыскание значений факторов Шмида в плоскостях скольжения и двойникования сдвойникованного материала при воздействии на него развивающегося двойника с учетом их взаимной ориентации и идентификация активных плоскостей вторичного двойникования и скольжения по величине факторов Шмида.

ОЦК решетка имеет 12 систем двойникования $\{112\} \langle 111 \rangle$. Пересечение деформационных двойников возможно по шести неэквивалентным вариантам (рис. 1), каждый из которых имеет определенный коэффициент повторяемости k .

При выполнении расчетов по определению значений факторов Шмида считали, что с материалом матрицы связана прямоугольная система координат XYZ (рис. 2), а с материалом двойника – система $X'Y'Z'$ (при этом решетка сдвойникованной части кристалла повернута относительно матрицы на угол $\theta = 71^\circ$ в плоскости $(1\bar{1}0)$ матрицы).

На материал остаточного двойника кристаллографической системы $\{hkl\}[uvw]$ действуют развивающиеся двойники других кристаллографических систем $\{h_j k_j l_j\} \langle u_j v_j w_j \rangle$, индексы которых заданы в координатах XYZ . Вторичное двойникование и скольжение развивается в сдвойникованном материале по плоскостям $\{h_j k_j l_j\}$ и направлениям $\langle u_j v_j w_j \rangle$, заданным в координатах $X'Y'Z'$. Зная значения факторов Шмида в этих плоскостях относительно нагрузки, вызванной развивающимся двойником, можно определить преимущество развития деформации скольжением и двойникованием по той или иной системе скольжения или двойникования материала статической двойниковой прослойки.

Выразим индексы кристаллографических систем двойникования и скольжения $\{h_j k_j l_j\} \langle u_j v_j w_j \rangle$ в сдвойникованном материале через индексы этих систем в матричном материале $\{h_j k_j l_j\} \langle u_j v_j w_j \rangle$ по формулам [4]:

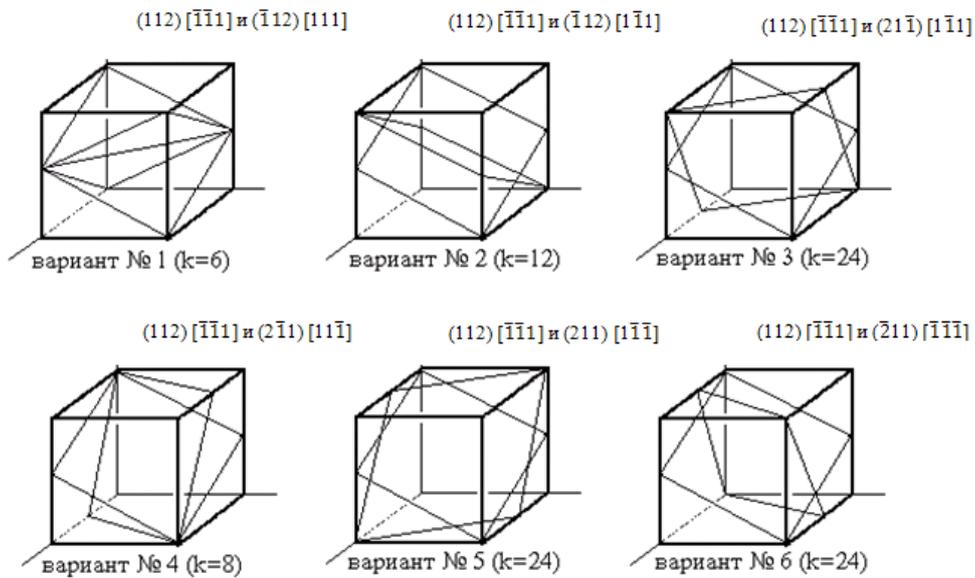


Рис. 1. Варианты пересечения двойников в ОЦК решетке: k – коэффициент повторяемости, показывающий, сколько раз подобное пересечение встречается среди всех возможных

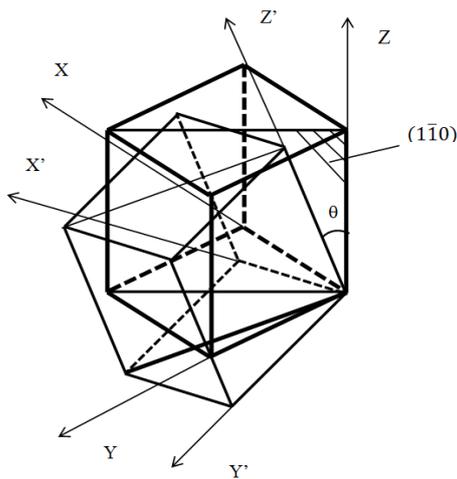


Рис. 2. Схема взаимного расположения систем координат матрицы и статической двойниковой прослойки для ОЦК решетки

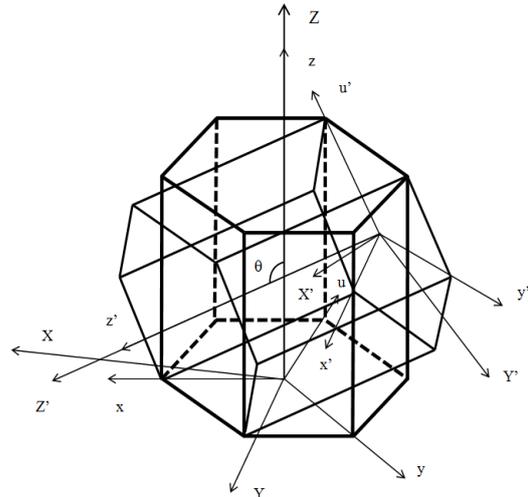


Рис. 4. Схема взаимного расположения систем координат матрицы и остаточного двойника для ГПУ решетки

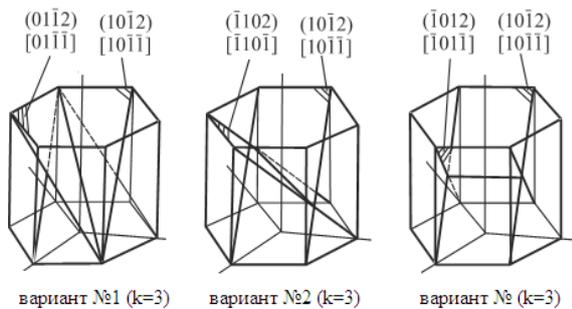


Рис. 3. Варианты пересечений двойников в гексагональной плотно упакованной решетке

$$\begin{aligned}
 u_j'' &= 1/2(1 + \cos\theta)u_j + 1/2(\cos\theta - 1)v_j + (1/\sqrt{2})\sin\theta w_j; \\
 v_j'' &= 1/2(\cos\theta - 1)u_j + 1/2(\cos\theta + 1)v_j + (1/\sqrt{2})\sin\theta w_j; \\
 w_j'' &= -(1/\sqrt{2})\sin\theta u_j - (1/\sqrt{2})\sin\theta v_j + \cos\theta w_j.
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Следует отметить, что при определении индексов направления нормали $[u_j'' v_j'' w_j'']$ к плоскостям скольжения или двойникования в системе координат $X'Y'Z'$ в выражениях (2) вместо индексов $u_j v_j w_j$ использовали индексы плоскости $h_j k_j l_j$, к которой находится направление нормали (численные значения индексов плоскости и нормали к ней совпадают в прямоугольной системе координат). Следовательно, зная индексы плоско-

сти $h_i k_i l_i$ в системе XYZ и найдя их в координатах $X'Y'Z'$ по выражениям (2), считаем их индексами нормали к этой плоскости $[u''_j v''_j w''_j]$.

Тогда в соответствие с принятыми обозначениями угол между направлением развивающегося двойника в матричном материале $\{h_i k_i l_i\} \langle u_i v_i w_i \rangle$ и произвольным направлением в сдвоенном материале (направлением двойникования, скольжения или нормали к данной плоскости) будет находиться по формуле [4]:

$$\cos \gamma = \frac{u_i u''_j + v_i v''_j + w_i w''_j}{(u_i^2 + v_i^2 + w_i^2)^{1/2} (u''_j^2 + v''_j^2 + w''_j^2)^{1/2}}, \quad (\gamma = \varphi, \lambda). \quad (3)$$

Значения факторов Шмида для плоскостей скольжения и двойникования материала статического двойника, рассчитанные с помощью выражения (3) и позволяющие оценить преимущественные системы скольжения и двойникования, приведены в [5, 6].

Гексагональная плотноупакованная решетка имеет шесть систем двойникования $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$, способных пересекаться по трем неэквивалентным вариантам (рис. 3), каждый из которых имеет коэффициент повторяемости $k = 3$.

Кристаллографические плоскости и направления двойникования и скольжения в материале матрицы определяются в координатах $xuiz$ с использованием четырехиндексной системы Миллера–Бравэ $(h^* k^* i^* l^*) [u^* v^* n^* w^*]$ с неодинаковой периодичностью вдоль осей x, y, u, z , характеризуемой отношением c/a , где a – период решетки вдоль осей x, y, u , а c – период решетки вдоль оси z . Пусть материал сдвоенной части связан с координатами x', y', u' и z' и повернут относительно матрицы на угол θ вокруг оси y (рис. 4). Системы координат имеют общее начало.

При проведении расчетов первоначально выполняли переход от четырехосной системы координат к трехосной прямоугольной системе XYZ (рис. 5) с соответствующим преобразованием индексов Миллера–Бравэ $(h^* k^* i^* l^*) [u^* v^* n^* w^*]$ в индексы Миллера $(hkl)[uvw]$. При этом учитывали, что оси X и Y повернуты относительно осей x, u и y на угол $= 15^\circ$.

В соответствии с вышеизложенным, получаем выражения для преобразования индексов направлений:

$$u = (u^* - v^*/2 - n/2) \cos 15^\circ - \sqrt{3}/2 (v^* - n^*) \sin 15^\circ; \\ u = (u^* - v^*/2 - n/2) \sin 15^\circ - \sqrt{3}/2 (v^* - n^*) \cos 15^\circ; \\ w = cw^*/a.$$

Выражения для преобразования индексов плоскостей имеют вид (для случаев, когда $h^* \neq 0, k^* \neq 0, i^* \neq 0, l^* \neq 0$):

$$h = h^* \cos \beta / \sin \alpha, \quad k = h^* \sin \beta / \sin \alpha, \quad l = l^* a/c,$$

$$\text{где } \alpha = \arccos \frac{2/h^* + 1/k^*}{2[1/h^{*2} + 1/k^{*2} + 1/(h^* k^*)]^{1/2}},$$

$$\beta = 7\pi/12 - \alpha.$$

Для частных случаев преобразования осуществляются с помощью следующих соотношений:

$$h^* = 0: h = (-2/\sqrt{3})k^* \sin 15^\circ, \quad k = (2/\sqrt{3})k^* \cos 15^\circ, \\ l = l^* a/c; \\ k^* = 0: h = (2/3)^{1/2} h^*, \quad k = (2/3)^{1/2} h^*, \quad l = l^* a/c; \\ h^* = k^* = i^* = 0: h = k = 0, \quad l = l^* a/c.$$

Предполагали, что после перехода от четырехиндексной системы к трехиндексной материал имеет кубическую решетку, и, исходя из этого, осуществляли все последующие преобразования и вычисления для материалов с ГПУ решеткой.

Следовательно, определенные таким образом значения фактора Шмида в системе координат $X'Y'Z'$ аналогичны и для системы $x'y'u'z'$.

В силу неодинаковой периодичности решетки вдоль осей координат в гексагональных материалах расчеты проводили только для кадмия с параметрами решетки $c/a = 1,866$ и $\theta = 94,8$. Для других ГПУ металлов проведение расчетов аналогично.

Возможные плоскости вторичного двойникования и скольжения для всех вариантов пересечения двойников в кадмии и соответствующие им значения факторов Шмида приведены в табл. 1. В первом столбце представлены плоскости двойникования типа $\{01\bar{1}2\}$ и плоскости скольжения по базису, пирамидам первого и второго родов типа $\{0001\}, \{1\bar{1}01\}, \{1\bar{2}12\}$ статической двойниковой прослойки (в квадратных скобках указаны направления скольжения и двойникования). Скольжение по пирамиде первого рода рассматривается в связи с тем, что оно возможно в кадмии при пониженной температуре (77–190 К). Отрицательные значения фактора Шмида означают, что направления действия эффективных касательных напряжений в этой плоскости противоположны направлению возможного скольжения или реальному направлению сдвига при двойниковании. В вариантах со знаками «±» приведенные значения факторов Шмида берутся с верхним знаком для указанных направлений, а для противоположных направлений – с нижним.

По значению фактора Шмида были идентифицированы активные плоскости вторичного двойникования и скольжения в статической прослойке. Степень активности той или иной плоскости определялась величиной фактора Шмида в ней (табл. 1). Наиболее активными плоскостями скольжения и вторичного двойникования

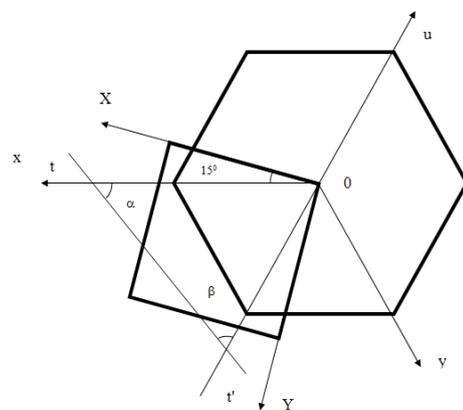


Рис. 5. Схема, иллюстрирующая переход от четырехиндексной системы ГПУ решетки к трехиндексной системе ОЦК решетки: u' – след произвольной плоскости, пересекающей плоскость $Z = 0$

являются те, для которых ориентационный фактор принимает максимальные значения. Так, например, в первом варианте пересечения вторичное двойникование в статической прослойке будет наблюдаться по плоскостям $(01\bar{1}2)$, $(\bar{1}012)$, $(0\bar{1}12)$, и $(10\bar{1}2)$. Однако развитие двойника по $(0\bar{1}12)$ является предпочтительным, т. к. величина фактора Шмида для этой плоскости имеет наибольшее значение, равное 0,318 (табл. 1).

Из приведенного выше следует, что при увеличении напряжения, вызывающего развитие динамического двойника, в статической прослойке будет развиваться вторичное двойникование. Причем вначале по плоскостям с максимальными значениями фактора Шмида, а затем с меньшими по мере достижения в них напряжений, необходимых для зарождения двойникования. Так, например, в первом варианте сначала должен появиться двойник $(0\bar{1}12)$, затем $-(0\bar{1}12)$, и только после этого может возникнуть двойник $(\bar{1}012)$, а затем $-(10\bar{1}2)$.

Следует отметить, что рассмотрение процессов пересечения двойников определяет лишь возможные условия распространения вторичных двойниковых прослоек в той или иной плоскости. Для окончательного вывода необходимо исследовать условия зарождения двойникообразующих дислокаций во вторичных плоскостях двойникования.

В табл. 2 представлено количество активных плоскостей вторичного двойникования и скольжения. Из нее следует, что в первых двух вариантах пересечения двойников это число примерно одинаково. Однако в третьем варианте нет ни одной плоскости вторичного двойникования со значением фактора Шмида, превышающим 0,2. Большее число плоскостей скольжения по базису имеет значение фактора Шмида $> 0,4$, появляются плоскости скольжения по пирамиде 2-го рода с максимальными значениями фактора Шмида ($> 0,7$). Основная часть плоскостей скольжения по пирамиде 1-го рода имеет значения фактора Шмида большие, чем в первых двух вариантах пересечения двойников.

Таблица 1

Значения факторов Шмида в плоскостях скольжения и двойникования: $\{h_j^*k_j^*i_j^*l_j^*\} < u_j^*v_j^*n_j^*w_j^* >$
в остаточном двойнике $(10\bar{1}2)[10\bar{1}\bar{1}]$ в *Cd*

Системы скольжения и двойникования	Развивающиеся двойники $\{hkil\} < uvnw >$		
	$(01\bar{1}2)[01\bar{1}\bar{1}]$	$(\bar{1}102)[110\bar{1}]$	$(\bar{1}012)[\bar{1}01\bar{1}]$
$(01\bar{1}2)[01\bar{1}\bar{1}]$	0,259	0,376	-0,087
$(\bar{1}102)[\bar{1}10\bar{1}]$	-0,072	-0,026	-0,128
$(\bar{1}012)[\bar{1}01\bar{1}]$	0,192	0,234	0,084
$(0\bar{1}12)[0\bar{1}1\bar{1}]$	0,318	0,335	-0,128
$(1\bar{1}02)[1\bar{1}0\bar{1}]$	-0,062	-0,032	-0,087
$(10\bar{1}2)[10\bar{1}\bar{1}]$	0,144	0,269	0,166
$(0001)[2\bar{1}\bar{1}0]$	$\pm 0,126$	$\pm 0,100$	$\pm 0,418$
$(0001)[1120]$	$\pm 0,361$	$\pm 0,261$	$\pm 0,418$
$(0001)[\bar{1}2\bar{1}0]$	$\pm 0,324$	$\pm 0,160$	0
$(1\bar{2}12)[\bar{1}2\bar{1}3]$	$\pm 0,207$	$\pm 0,020$	$\pm 0,154$
$(\bar{1}2\bar{1}2)[1\bar{2}13]$	$\pm 0,055$	$\pm 0,201$	$\pm 0,154$
$(2\bar{1}\bar{1}2)[\bar{2}113]$	$\pm 0,095$	$\pm 0,081$	$\pm 0,274$
$(\bar{2}112)[2\bar{1}\bar{1}3]$	$\pm 0,046$	$\pm 0,031$	$\pm 0,195$
$(11\bar{2}2)[11\bar{2}3]$	$\pm 0,764$	$\pm 0,145$	$\pm 0,069$
$(\bar{1}\bar{1}22)[\bar{1}\bar{1}23]$	$\pm 0,042$	$\pm 0,688$	$\pm 0,768$
$(1\bar{1}01)[\bar{1}2\bar{1}3]$	0,016	-0,007	-0,056
$(01\bar{1}1)[1\bar{2}13]$	0,074	-0,358	-0,056
$(10\bar{1}1)[\bar{2}113]$	0,164	-0,239	-0,399
$(\bar{1}101)[2\bar{1}\bar{1}3]$	0,154	0	0,134
$(0\bar{1}11)[11\bar{2}3]$	-0,477	-0,188	0,134
$(10\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}23]$	-0,056	-0,398	-0,399
$(0\bar{1}11)[1\bar{2}1\bar{3}]$	0,385	0,029	-0,332
$(\bar{1}101)[\bar{1}2\bar{1}\bar{3}]$	-0,024	0	-0,332
$(1\bar{1}01)[2\bar{1}\bar{1}\bar{3}]$	-0,005	-0,099	0,089
$(\bar{1}011)[\bar{2}11\bar{3}]$	0,237	-0,056	-0,213
$(\bar{1}011)[\bar{1}\bar{1}2\bar{3}]$	0,368	0,164	-0,213
$(01\bar{1}1)[11\bar{2}\bar{3}]$	0,066	0,477	0,089

Таблица 2

Число активных плоскостей скольжения и вторичного двойникования в сдвойникованном материале

Значение факторов Шмида m в плоскостях скольжения и вторичного двойникования в статическом двойнике		Атакующие (развивающиеся) двойники		
		Варианты пересечений		
		1	2	3
		$(01\bar{1}2)[01\bar{1}\bar{1}]$	$(\bar{1}102)[110\bar{1}]$	$(\bar{1}012)[\bar{1}01\bar{1}]$
Число плоскостей двойникования	$m < 0,10$	2	2	3
	$m > 0,10$	2	0	3
	$m > 0,20$	1	2	0
	$m > 0,30$	1	2	0
Число плоскостей скольжения по базису	$m < 0,10$	0	2	2
	$m > 0,10$	2	2	0
	$m > 0,20$	2	2	0
	$m > 0,30$	2	0	0
	$m > 0,40$	0	0	4
Число плоскостей скольжения по пирамиде 2-го рода	$m < 0,10$	8	6	2
	$m > 0,10$	0	2	6
	$m > 0,20$	2	2	2
	$m > 0,30$	0	0	0
	$m > 0,60$	0	2	0
Число плоскостей скольжения по пирамиде 1-го рода	$m < 0,10$	6	6	4
	$m > 0,10$	2	2	2
	$m > 0,20$	1	1	2
	$m > 0,30$	2	2	4
	$m > 0,40$	1	1	0

Таким образом, в третьем варианте пересечения двойников при низкой температуре развитие вторичного двойникования в материале статического двойника будет затруднено, а развитие скольжения по всем возможным плоскостям – более активно, чем в первых двух вариантах. Особенно предпочтительно развитие базисного скольжения в остаточном двойнике. В первых двух вариантах пересечения возможность протекания пластической деформации скольжением и двойникованием практически равноценна.

Используя результаты расчетов, можно провести дислокационный анализ процессов микропластичности с целью определения механизмов зарождения трещин в зонах взаимодействия пересекающихся двойниковых прослоек.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
2. Федоров В.А., Финкель В.М., Плотников В.П. О механизме образования каналов Розе в цинке // Физика металлов и металловедение. 1979. Т. 47. Вып. 5. С. 1044-1052.

3. Федоров В.А., Куранова В.А., Плотников В.П. Особенности пересечения двойников в кадмии // Физика металлов и металловедение. 1986. Т. 62. Вып. 1. С. 161-165.
4. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике. М.: Наука, 1981. 720 с.
5. Федоров В.А., Плужников С.Н., Куранова В.А. Анализ микропластичности и разрушения при пересечении двойников в ОЦК – решетке // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2000. Т. 5. Вып. 2–3. С. 387-389.
6. Федоров В.А., Тялин Ю.И., Тялина В.А. Дислокационные механизмы разрушения двойникующихся материалов. М.: Изд-во Машиностроение-1, 2004. 335 с.

Поступила в редакцию 23 января 2012 г.

Tyalina V.A., Tyalin Yu.I. DETERMINATION OF ACTIVE FLATS OF SECONDARY TWINNING AND SLIDING AT CROSSING OF TWINS IN SOME CRYSTAL STRUCTURES

The method and results of crystallographic analysis of processes of microplasticity and devastation at crossing of deformed twins in MCC and GPU metals are considered.

Key words: twinning; sliding; interaction of twins; Schmidt factor.