

УДК 539.3

## ДИСЛОКАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ ДВОЙНИКОВЫХ ДЕФЕКТОВ И ЗАРОЖДЕНИЕ ТРЕЩИН В ВЕРШИНЕ ЗАТОРМОЖЕННОГО ДВОЙНИКА

© Ю.И. Тялин, В.А. Тялина

*Ключевые слова:* двойник; граница двойника; дислокация; трещина.

Рассмотрены модели двойников в виде одиночной границы и двух границ с симметричным и несимметричным расположением двойнивающих дислокаций. Показано, что в области допустимых внешних напряжений двойник может быть представлен одиночной границей с числом дислокаций, равным числу дислокаций в двойнике. Получено условие силового зарождения микротрещины в вершине заторможенного двойника в виде, аналогичном условию Стро для плоского скопления дислокаций.

При описании двойников возможно использование нескольких дислокационных моделей [1]. Самой простой из них является одиночная двойниковая граница, когда все дислокации лежат по одну сторону от плоскости движения головной дислокации (рис. 1).

В этом случае уравнения равновесия дислокаций заторможенного двойника имеют вид:

$$A \sum_{j=1, j \neq i}^n (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} - \tau = 0, \quad (1)$$

$i=2, 3, \dots, n,$

где  $A = Gb/2\pi(1-\nu)$ ,  $G$  – модуль сдвига,  $b$  – вектор Бюргера двойнивающих дислокаций,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $x_i$  и  $y_i$  – координаты дислокаций,  $n$  – число дислокаций в границе двойника,  $\tau$  – внешнее напряжение, поджимающее двойнивающие дислокации к запертой (в точке  $x = y = 0$ ). При этом смещение соседних дислокаций по оси  $y$  равно межплоскостному расстоянию  $h$ .

Если двойник содержит две границы, то уравнения (1) модифицируются следующим образом. При симметричном (относительно плоскости  $ZOX$ ) расположении дислокаций в (1) следует добавить слагаемые для дислокаций второй границы. А именно:

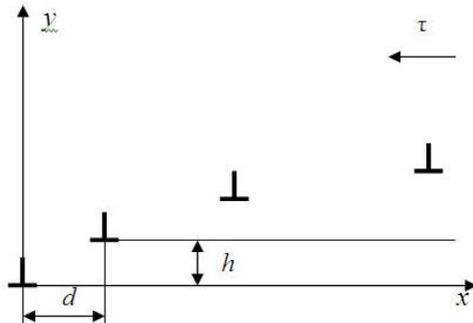


Рис. 1. Схема двойниковой границы

$$A \sum_{j=1, j \neq i}^n (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} +$$

$$+ A \sum_{j=2, j \neq i}^n (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i + y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i + y_j)^2]^2} - \tau = 0,$$

$i=2, 3, \dots, n.$

Число уравнений при этом меняться не будет. Если же положения дислокаций в двойниковых границах не совпадают, то систему (1) необходимо дополнить аналогичными уравнениями равновесия для дислокаций второй границы. Число уравнений в этом случае будет равно числу подвижных дислокаций в обеих границах. Система уравнений равновесия дислокаций в этом случае примет следующий вид:

$$A \sum_{j=1, j \neq i}^{n_1} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} +$$

$$+ A \sum_{j=2, j \neq i}^{n_2} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i + y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i + y_j)^2]^2} - \tau = 0,$$

$i=2, 3, \dots, n_1,$

$$A \sum_{j=1, j \neq i}^{n_2} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} +$$

$$+ A \sum_{j=2, j \neq i}^{n_1} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i + y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i + y_j)^2]^2} - \tau = 0,$$

$i=2, 3, \dots, n_2,$

где  $n_1$  и  $n_2$  – количества дислокаций в границах двойника.

Последняя модель обладает наибольшей общностью, поскольку реальные двойники, как правило, содержат две некогерентные границы с различным числом дислокаций в них.

Уравнения равновесия дислокаций решали численно методом последовательных приближений [2]. В последнем  $(k + 1)$ -е приближение для координат дислокаций  $x^{k+1}$  находили в результате последовательного решения  $i$ -го уравнения системы для  $i = 2, 3, \dots, n$  при фиксированных значениях остальных неизвестных. В качестве начального приближения  $x^0$  использовали координаты дислокаций плоского скопления, поджимаемого приложенным напряжением к неподвижной дислокации в точке  $x = y = 0$ . Известно, что в этом случае положение дислокаций определяется нулями полинома Лагерра  $L_{n-1}^1(2\pi x/A)$  [3]. Причем нет необходимости находить точные значения корней полинома  $L_{n-1}^1$ , а можно воспользоваться их асимптотикой [4]. В нашем случае использовалось следующее приближенное выражение для координат дислокаций:  $x_i \approx 2i^2 A / n\tau$ .

Процесс итерационного уточнения корней прекращался при выполнении условия

$$\max |x_i^{k+i} - x_i^k| \leq \mu, \quad (i = 2, 3, \dots, n),$$

где  $\mu$  – заданная точность вычислений координат дислокаций. Величина  $\mu$  выбиралась такой, чтобы в состоянии равновесия максимальные напряжения, действующие на дислокации в скоплении, не превышали  $10^{-5} \tau$ .

Из выражений для взаимодействия дислокаций (см. рис. 1)) следует, что структура двойниковой границы будет проявляться тогда, когда расстояния между дислокациями вдоль оси  $x$  будут сравнимы с  $h$ . Для этого величина внешнего напряжения  $\tau$  должна быть достаточно велика. Сверху она ограничена значением  $\tau_{кр}$ , при котором возможно слияние головных дислокаций и образование микротрещины в вершине двойника.

Для определения максимального  $\tau$  в расчетах использовали силовой критерий зарождения разрушения в вершине заторможенного дислокационного скопления [1]. В этом случае задается расстояние  $d$  между головными дислокациями, при слиянии которых и образуется зародыш трещины. В плоском скоплении слияние головных дислокаций происходит при их сбли-

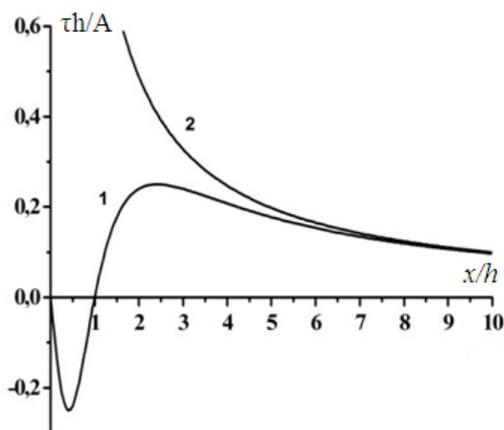


Рис. 2. Взаимодействие дислокаций, движущихся в параллельных плоскостях скольжения (1) и одной плоскости скольжения (2)

жении до расстояния  $d = b$  (условие Стро) [5]. В ступенчатой границе для слияния головных дислокаций достаточно сблизить их до расстояния  $d_{кр} = 2,41h$  [1]. При этом сила отталкивания второй дислокации со стороны первой достигает максимума (рис. 2, кривая 1). Дальнейшее их сближение до слияния будет происходить без увеличения внешней нагрузки.

Таким образом,  $d_{кр}$  – это минимально возможное расстояние между дислокациями вдоль плоскости двойникования, при котором еще возможно существование равновесных двойников. Оно ограничивает максимальную плотность дислокаций в двойниковой границе значением  $\rho \approx 1/d_{кр}$ .

Из этого же рисунка видно (кривая 2), что при движении в одной плоскости скольжения дислокация отталкивается сильнее. Причем различие проявляется при расстояниях между дислокациями, меньших  $(8-10)h$ . Таким образом, и отличия в положениях дислокаций в плоском и ступенчатом скоплениях следует ожидать при сближении дислокаций до расстояний  $\approx 10h$ .

В вычислениях использовались следующие значения упругих констант:  $G = 32$  ГПа;  $b = 1,27 \cdot 10^{-10}$  м;  $h = 3,82 \cdot 10^{-10}$  м;  $\nu = 0,3$ . Величины  $n$  менялись от нескольких десятков до ста. Расчеты показали, что координаты дислокаций в двойнике с асимметричным расположением дислокаций в границах ( $n_1 \neq n_2$ ) хорошо совпадают с координатами дислокаций в одиночной границе с числом подвижных дислокаций, равным  $n = n_1 + n_2 - 1$ . Незначительные различия в расположении дислокаций (см. рис. 3) имеют место для головной части двойника при внешних напряжениях  $\tau$ , величины которых близки к значению критического напряжения  $\tau_{кр}$ . Аналогичный результат имеет место и для двойника с симметричным расположением дислокаций (в границе в этом случае нужно удвоить вектор Бюргерса подвижных дислокаций).

Таким образом, с формальной точки зрения любой двойниковый дефект без потери общности и точности вычислений может быть представлен одиночной границей с соответствующим числом подвижных двойниующих дислокаций. Именно такая модель и использовалась в дальнейших расчетах.

Для определения  $\tau_{кр}$  рассчитывались зависимости  $d$  от  $\tau$  и определялась конечная устойчивая конфигурация

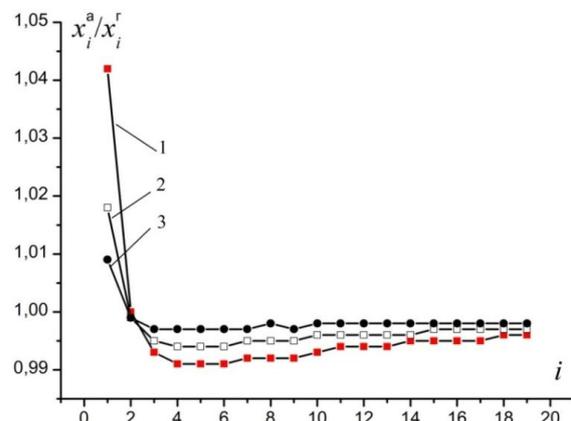


Рис. 3. Различия координат головных дислокаций в двойниковой границе и асимметричном двойнике: 1 –  $\tau = \tau_{кр} = 50$  МПа; 2 –  $\tau = 40$  МПа; 3 –  $\tau = 30$  МПа

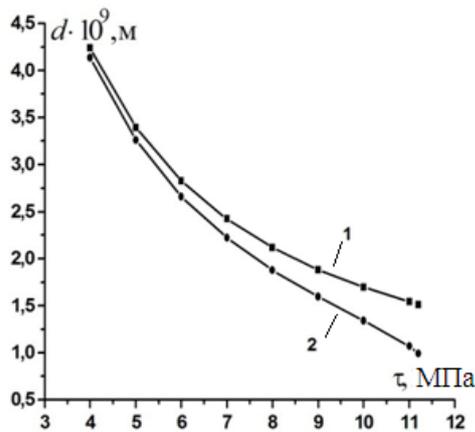


Рис. 4. Зависимость расстояния между головными дислокациями от приложенного напряжения: 1 – плоское скопление; 2 – двойниковая граница

двойниковой границы (рис. 4). На рис. 4 для сравнения приведена аналогичная зависимость и для плоского скопления. Видно, что в области предельных (для двойника) значений  $\tau$  расстояние между головными дислокациями в плоском скоплении примерно в полтора раза больше, чем в двойниковой границе.

При этом различия в значениях координат дислокаций имеют место для небольшой группы дислокаций (до 10 % от общего их числа) в окрестности вершины двойника. Положения дислокаций в средней и хвостовой частях обоих скоплений совпадают с хорошей точностью. При значительном уменьшении  $\tau$  до значений  $\tau/\tau_{\max} < 0,1$  практически исчезает различие в положениях головных дислокаций в ступенчатом и плоском скоплениях. Таким образом, в области умеренных значений  $\tau$  двойниковую границу можно без потери точности описывать как плоское скопление, а реальную структуру границы следует учитывать лишь при анализе условий зарождения микротрещин.

Расстояние  $d$  между головными дислокациями зависит не только от величины приложенного напряжения  $\tau$ , но и от числа дислокаций  $n$  в двойнике. Но если в качестве единицы напряжений взять величину  $D/n$  ( $D = A/b$ ), то зависимости, соответствующие различным значениям  $n$ , хорошо ложатся на одну кривую (рис. 5).

Отсюда можно получить критическое напряжение зарождения микротрещины в вершине двойника. Из рис. 5 видно, что при значении  $d/h$ , приближающемся к 2,41, критическое напряжение может быть определено из соотношения

$$\tau n/D = 0,155. \quad (4)$$

Полученное соотношение аналогично выражению Стро для условия зарождения микротрещины в вершине плоского скопления дислокаций [5]

$$\tau \tau = 1,84D \quad (5)$$

и отличается от него только числовым коэффициентом.

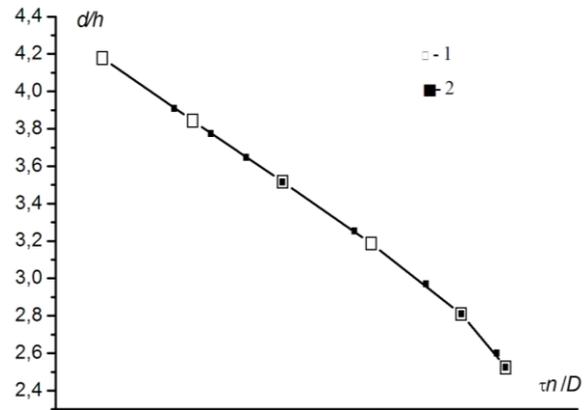


Рис. 5. Зависимость расстояния между головными дислокациями границы от приложенного напряжения: 1 –  $n = 50$ ; 2 –  $n = 100$

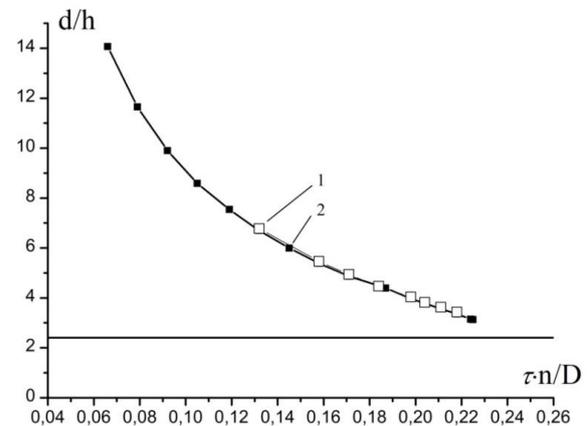


Рис. 6. Зависимость  $d$  от  $\tau$  для симметричного двойника: 1 –  $n = 49$ ; 2 –  $n = 25$ .

Сравнение (4) и (5) показывает, что силовое зарождение микротрещины в вершине заторможенного двойника будет иметь место при меньших внешних напряжениях или меньшем числе дислокаций в двойнике, чем в плоском скоплении. Этот результат является следствием различного взаимодействия дислокаций в плоском и ступенчатом скоплениях (рис. 2). При прочих равных условиях значения критических напряжений для обоих скоплений различаются более чем на порядок.

Для симметричного двойника критерий зарождения разрушения может быть также записан в виде

$$\tau \tau = \alpha D, \quad (6)$$

где  $\alpha \approx 0,23$  (см. рис. 6).

Отметим, что на рис. 5 и рис. 6 зависимости  $d$  от  $\tau$  только приближаются к значению  $d/h = 2,41$ , но не достигают его. Это связано с тем, что максимум сил отталкивания соседних дислокаций является пологим, что и не позволяет рассчитать устойчивую конфигурацию, соответствующую требуемому соотношению  $d$  и  $h$ .

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров В.А., Тялин Ю.И., Тялина В.А. Дислокационные механизмы разрушения двойнящихся материалов. М.: Машиностроение-1, 2004. 336 с.
2. Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975. 558 с.
3. Eshelby I.D., Frank F. S., Nabarro F.R.N. The Equilibrium of Linear Arrays of Dislocations // Phil Mag. 1951. V. 42. № 327. P. 351-364.
4. Сеге Г. Ортогональные многочлены. М.: ГИФМЛ, 1962. 500 с.
5. Troh A.N. A theory of fracture of metals // Advanced Phys. 1957. V. 6. № 24. P. 418-428.

Поступила в редакцию 3 июня 2011 г.

Tyalin Yu.I., Tyalina V.A. DISLOCATION MODELS OF TWINNING DEFECTS AND CONCEPTION OF CRACKS IN TOP OF SLOWER TWIN

Models of twins in alone border or two borders with symmetric and asymmetric position of twin dislocations are observed. It is shown that in a region of acceptable exterior tensions twin can be presented by alone border with a number of dislocations, which are equal to a number of dislocations in twin. Condition of power conception of microcrack in a top of slower twin, which is alike as a condition of Straw for flat accumulation of dislocations is reached.

*Key words:* twin; border of twin; dislocation; crack.