УДК 539.3

## ДИСЛОКАЦИОННАЯ СТРУКТУРА, ФОРМИРУЕМАЯ ПРИ ОСТАНОВКЕ И ЗАЛЕЧИВАНИИ ТРЕЩИН СКОЛА В ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ

## © Ю.И. Тялин, В.А. Тялина

Ключевые слова: разрушение; пластическая деформация; дислокация; трещина; залечивание. Приведены результаты математического моделирования пластического течения в вершине остановившейся трещины. Выделены две стадии процесса, соответствующие нагруженному и разгруженному образцам. Показано, что на второй стадии имеет место обратимое движение дислокаций в пластической зоне и частичное залечивание трещи-

Разрушение большинства кристаллических твердых тел сопровождается пластической деформацией, интенсивность и степень локализации которой зависят от темпа движения трещины. В случае быстрого скола следы пластического течения обнаруживаются лишь в тонких приповерхностных слоях плоскостей разрушения. При частичной или полной остановке трещины формируются легко наблюдаемые пластические зоны, структура которых определяется типом разрушающей трещины, геометрией образца, свойствами материала. Для ЩГК, в частности, пластическая зона имеет вид характерного «дислокационного креста». Относительная простота дислокационной структуры в этом случае является следствием низкой плотности активных источников дислокаций в объеме материала, в результате чего релаксация упругих напряжений осуществляется эмиссией дислокаций по небольшому числу благоприятных кристаллографических направлений.

С точки зрения залечивания трещин эмиссия дислокаций ее вершиной является неблагоприятным фактором. Испущенные дислокации создают некоторое пластическое вскрытие  $\delta$  и приводят к изгибу берегов трещины, что препятствует ее залечиванию после снятия нагрузки.

Причем дислокации различных систем скольжения будут оказывать неодинаковое влияние на возможность последующего залечивания остановившейся трещины. Дислокации с вектором Бюргерса  $[\bar{1}\,10]$  создают нормальное пластическое вскрытие и дополнительный изгиб поверхностей трещины. Скольжение в системе  $[10\,\bar{1}\,]$  приводит лишь к тангенциальному смещению ее берегов.

В первом случае спонтанное залечивание может стать невозможным, если число испущенных дислокаций будет достаточно велико. Если же результирующее (конечное) вскрытие  $\delta$  окажется достаточно малым ( $\delta \approx 10$  нм), то части кристалла, двигаясь по инерции навстречу другу, схлопываются. Так как процесс развивается достаточно быстро (время остановки трещины 10–20 мкс), то большая часть поверхности трещины остается ювенильной, что также способствует восста-

новлению ионных связей. Тогда создаваемое ими раскрытие трещины превысит характерное расстояние, на котором еще взаимодействуют ионы противоположных поверхностей скола. Для залечивания трещины потребуется некое внешнее воздействие, которое обеспечит сближение берегов трещины до восстановления сил взаимодействия между ними.

Во втором случае тангенциальный разворот частей кристалла может привести к несовпадению поверхностного (при большом числе испущенных дислокаций одного знака) и атомного рельефов.

При наличии поверхностных ступеней достаточное сближение берегов трещины в дальнейшем может быть обеспечено пластическим смятием ступеней под действием значительных усилий. Несовпадение атомных рельефов проявится в изменении сил взаимодействия противоположных поверхностей трещины, и хотя в меньшей мере, но будет осложнять процесс ее залечивания.

В силу указанных обстоятельств исследование пластической деформации в вершине трещины представляет интерес для понимания процесса формирования профиля остановившейся трещины и возможности ее спонтанного или последующего залечивания. В настоящей работе выполнено моделирование процесса пластического течения в вершине остановившейся трещины и сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными по изучению дислокационной структуры при остановке и залечивании трещин в щелочно-галоидных кристаллах.

1. Моделирование пластического течения в вершине трещины. При математическом моделировании пластического течения в вершине остановившейся трещины пластическая зона представлялась одиночной линией или полосой скольжения (рис. 1). Случай симметричной дислокационной структуры был проанализирован в [1]. Так же различались два этапа формирования дислокационной структуры в вершине трещины: образование линий скольжения в момент ее остановки, когда образец остается нагруженным, и эволюция их после снятия нагрузки.

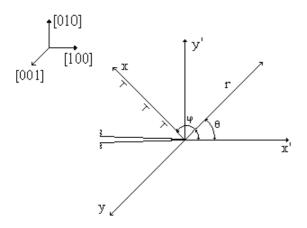


Рис. 1. Схема пластического течения у вершины трещины

При составлении уравнений равновесия дислокаций, испускаемых трещиной, учитывались взаимодействие дислокаций, напряжения, действующие на дислокацию со стороны трещины, напряжения изображения и сопротивление кристалла сдвигу  $\tau_S$ . Уравнения равновесия имели следующий вид

$$\sum_{j=1, i\neq j}^{n} \frac{A}{x_i - x_j} + \frac{K}{\sqrt{x_i}} - \frac{A}{2x_i} - \tau_s = 0, i = 1, 2, ..., n,$$
 (1)

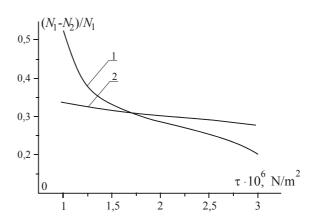
где  $A = Gb/2\pi(1-v)$ , G — модуль сдвига, b — вектор Бюргерса, v — коэффициент Пуассона, K — коэффициент интенсивности напряжений в вершине трещины, n — число дислокаций в скоплении.

Для призматического образца с краевой трещиной длины a, расклиниваемой перпендикулярно сколу усилием p, коэффициент интенсивности равен

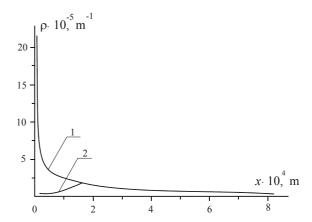
$$K = \frac{2\sqrt{3}\,pa}{\omega h\sqrt{h}}\,,$$

где  $\omega$  — ширина, а 2h — высота образца. Величина n определялась из условия, что эмиссия дислокаций прекратится, когда обратные напряжения лини скольжения станут больше напряжений, инициирующих пластическое течение. Система уравнений равновесия решалась численно.

Общее число дислокаций  $N_1$  линии скольжения на первой стадии зависит от нагружающего усилия в момент остановки трещины и напряжений трения и может изменяться в пределах от нескольких десятков до 200. При уменьшении сил сопротивления со стороны кристалла движению дислокаций и увеличении напряжений в вершине трещины лидирующие дислокации удаляются от нее на большие расстояния. Величина запирающих источник напряжений уменьшается, а их общее число при этом увеличивается. Длина линий скольжения I примерно также зависит от величин расклинивающей силы и напряжений трения. При используемых в расчетах значениях усилий (4–6 H) и напряжений трения ( $\sim$ 1,0·10 $^7$  дин/см $^2$ ) пробег головной дислокации меняется от десятков микрон до 2 мм.



**Рис. 2.** Зависимость  $(N_1-N_2)/N_1$  от напряжений трения: 1-симметричный случай; 2-асимметричный



**Рис. 3.** Плотность дислокаций в линии скольжения: 1 – нагруженный образец; 2 – после разгрузки

На второй стадии формирования дислокационной структуры в вершине трещины дислокациям предоставлялась возможность перемещаться из исходных положений под действием сил отталкивания и изображения. Неподвижными считались дислокации, для которых абсолютная величина действующих сил не превосходила сил трения. Часть дислокаций могла покинуть кристалл и выйти на поверхность трещины, если они в процессе движения приближались к ней на расстояние, где силы изображения превышают силы трения.

Показано, что на стадии разгрузки имеет место заметная доля обратимой пластической деформации. Число дислокаций в линии скольжения после разгрузки  $N_2$  может уменьшаться до 50 % от их количества  $N_1$  в нагруженном образце (рис. 2). Эффект сильнее выражен для симметричной пластической зоны. Результирующая плотность дислокаций максимальна на некотором удалении от вершины трещины (рис. 3). В непосредственной близости от вершины трещины имеется ограниченная зона, свободная от дислокаций. Характеристики пластического течения практически сохраняются (с точностью до  $\sim$ 10 %), если деформированная зона представлялась набором из нескольких линий скольжения.

2. Основные экспериментальные результаты и их сравнение с результатами математического моделирования. Эксперименты выполняли на призматических образцах монокристаллов LiF размером 4×8×40 мм. В кристалле лезвием создавалась зародышевая трещина, которая затем проталкивалась до нужной длины (25 мм) под действием импульсной нагрузки (постукивание легким металлическим стержнем). Как правило, трещина при этом претерпевала 2–3 скачка.

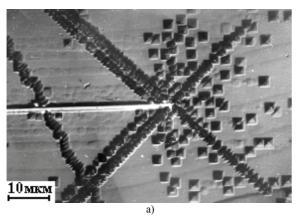
Дислокационную структуру в вершине трещины выявляли химическим травлением в растворе хлористого железа FeCl<sub>3</sub>.

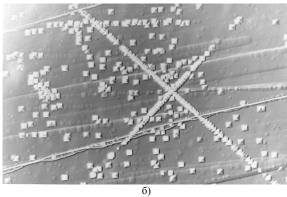
Пластическая зона в вершине трещины, как правило, представляет собой единичные или двойные линии скольжения. Реже в вершине наблюдаются широкие полосы из нескольких линий скольжения. Некоторые из типичных картин травления приведены на рис. 4а.

Число дислокаций в пластической зоне меняется в широких пределах — от единиц и десятков до сотен. Если число испущенных дислокаций невелико ( $\approx$  50), то может наблюдаться частичное залечивание трещин (см. рис. 46) уже в процессе ее остановки.

Плотность дислокаций в среднем увеличивается при приближении к вершине трещины. Но характер зависимости не всегда одинаков. В некоторых случаях наблюдается немонотонный характер изменения плотности дислокаций. Плотность дислокаций может уменьшаться (рис. 5) и оставаться постоянной в среднем при приближении к вершине.

Такой характер изменения плотности дислокаций соответствует принятой в расчетах схеме пластической





**Рис. 4.** Типичные дислокационные структуры в вершине остановившейся а) и частично залечившейся трещины б)

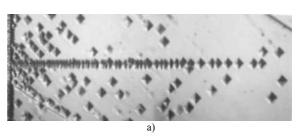
деформации в вершине трещины. Ее остаточное вскрытие  $\delta$  будет определяться числом дислокаций, оставшихся в кристалле

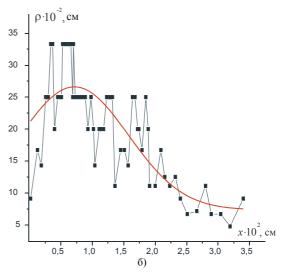
 $\delta = N_2 b \cos \pi/2$ .

Некоторое отличие экспериментальных кривых от расчетного распределения дислокаций в пластической зоне (рис. 3) может быть связано с увеличением сил трения при реверсивном движении дислокаций.

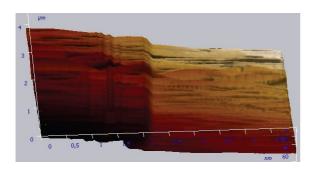
То есть при остановке трещины мы всегда имеем дело с частичным залечиванием трещин, т. к. до 50 % дислокаций выходят на ее поверхность при разгрузке образца. Если число испущенных дислокаций невелико, то трещина может самопроизвольно залечиваться. Как правило, трещина при этом закрывается на участке до места предыдущей остановки. При значительной пластической деформации в вершине раскрытие трещины будет определяться приведенным выше выражением.

Остановившаяся трещина далее может быть залечена приложением сжимающих усилий, перпендикулярных плоскости трещины. При этом дислокационные структуры в вершине исходной и залеченной трещин различаются незначительно. Это означает, что закрытие трещины под действием сжимающих усилий идет не за счет сваливания дислокаций из пластической зоны. Это могут быть дислокации другого механического знака. Причем они могут распространяться вдоль тех же полос скольжения или концентрироваться в окрестности вершины, где их трудно наблюдать методом химического травления. Последний вариант может быть связан с тем, что упругие напряжения при расклинивании и сжатии образца различны.





**Рис. 5.** Структура а) и плотность дислокаций б) в линии скольжения у вершины трещины



**Рис. 6.** 3D-представление ступеньки из нескольких моноступеней

Дополнительно к исследованию дислокационной структуры методом химического травления изучался геометрический рельеф поверхности скола в местах остановки трещины. Измерение высоты ступеньки на поверхности скола позволяет однозначно определить число дислокаций, испускаемых при этом вершиной трещины. Ниже приводятся результаты измерений, полученные с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Типичное 3D-представление АСМ-изображения ступени приведено на рис. 6. Видно, что ступенька может иметь тонкую структуру и состоять из нескольких моноступеней, соединенных площадками, парал-

лельными поверхности скола. Очевидно, что такую же структуру будут иметь полосы скольжения в вершине трещины.

Характерная высота моноступеньки составляет  $\approx 10$  нм. В кристаллах фтористого лития  $b=3,28\cdot 10^{-8}$  см. Поэтому такой высоте  $\delta$  соответствует  $\approx 50$  дислокаций в линии скольжения у вершины трещины. Таким образом, наиболее вероятный профиль остановившейся трещины может быть представлен полостью с суммарным раскрытием порядка десятков нанометров, ступенчато сужающейся к вершине трещины.

## ЛИТЕРАТУРА

Тялин Ю.И., Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Куранова В.А. Аналитическая оценка распределения дислокаций в вершине остановившейся трещины // Физика твердого тела. 2000. Т. 42. Вып. 7. С. 1253-1255

Tyalin Yu.I., Tyalina V.A. The structure of dislocations formed at a stop and curing cracks in alkali-halide crystals. Results of mathematical modeling of a plastic current in top of the stopped crack are resulted. Two stages of the process corresponding to loaded and unloaded samples are allocated. It is shown that at the second stage of reversible movement of dispositions in a plastic zone and partial curing of a crack takes place.

Key words: destruction; plastic deformation; a dislocation; a crack; healing.