

Влияние распределения дислокаций в границах двойника на зарождение микротрещин в его вершине

© В.А. Федоров, В.А. Куранова, Ю.И. Тялин, С.Н. Плужников

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина,
392622 Тамбов, Россия

E-mail: feodorov@tsu.tmb.ru

(Поступила в Редакцию 4 сентября 2001 г.)

Исследовано влияние распределения дислокаций в границах заторможенного двойника на зарождение микротрещин в его вершине. Двойник моделировался двойным ступенчатым скоплением двойникующих дислокаций, расположенных в соседних плоскостях скольжения. Уравнения равновесия дислокаций решались численным методом. Рассматривались скопления с различным суммарным числом дислокаций, а также различным соотношением чисел дислокаций в верхней и нижней границах двойников. Анализировалось образование микротрещин в результате слияния головных дислокаций по силовому и термоактивированному механизмам. Рассчитаны равновесные конфигурации одиночной двойниковой границы и двойника. Установлено, что условие образования микротрещин в вершине двойника существенно зависит от соотношения числа дислокаций в его границах. В пределе оно совпадает с условием зарождения трещины в вершине изолированной двойниковой границы с таким же суммарным числом дислокаций. Показано, что термоактивированному зарождению микротрещины соответствуют меньшие значения критических напряжений.

В [1,2] было показано, что учет реальной структуры дислокационных скоплений может существенно изменить условия зарождения в них микротрещин. С этой точки зрения особый интерес представляют двойники и двойниковые границы, в которых каждая из двойникующих дислокаций движется в своей плоскости скольжения. Дефекты такого рода моделируются обычно ступенчатыми скоплениями дислокаций [3,4], причем в двойнике дислокации располагаются попарно и симметрично относительно плоскости двойникования, проходящей через вершину двойника. Понятно, что в общем случае границы двойника не обязательно должны содержать равное число дислокаций. В настоящей работе на примере кальцита рассмотрены условия зарождения микротрещин в вершине заторможенного двойника с различным соотношением числа двойникующих дислокаций в его границах.

Граница двойника моделирована одиночным ступенчатым скоплением двойникующих дислокаций, каждая из которых смещена относительно соседней на расстояние, равное межплоскостному h ($3.82 \cdot 10^{-10}$ м). Двойник представлен двойным ступенчатым скоплением двойникующих дислокаций. Головная дислокация считалась неподвижной в точке с координатами $x = y = 0$ и принадлежала одновременно верхней и нижней границам. Скопление дислокаций поджималось к головной внешним напряжением τ .

Рассмотрим границы двойника, содержащие разное число n_1 и n_2 дислокаций. Формально это означает, что каждую из границ следует анализировать отдельно и для каждой из них записывать свои уравнения равновесия дислокаций. Для верхней границы с числом дислокаций n_1 уравнения равновесия будут иметь сле-

дующий вид:

$$\sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^{n_1} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} + \sum_{j=2}^{n_2} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i + y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i + y_j)^2]^2} - \frac{\tau}{Db} = 0, \quad i = 2, 3, \dots, n, \quad (1)$$

где x_i и y_i — координаты i -й дислокации, $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$, G — модуль сдвига ($3.2 \cdot 10^{10}$ N/m²), ν — коэффициент Пуассона ($\nu = 0.3$), b — вектор Бюргера двойникующих дислокаций ($1.269 \cdot 10^{-10}$ м). Первое слагаемое описывает взаимодействие i -й дислокаций с дислокациями верхней границы, второе — с дислокациями нижней границы.

Аналогично записываются уравнения для дислокаций в нижней границе

$$\sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^{n_2} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} + \sum_{j=2}^{n_1} (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i + y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i + y_j)^2]^2} - \frac{\tau}{Db} = 0, \quad i = 2, 3, \dots, n. \quad (2)$$

Таким образом, мы получили систему нелинейных уравнений (1) и (2) с числом неизвестных $n_1 + n_2 - 1$. Численное решение систем уравнений (1) и (2) методом последовательных приближения [5] дает равновесные координаты x_i дислокаций, зависящие от упругих констант G и b , числа дислокаций n_1 и n_2 и величины внешнего напряжения τ . С точки зрения зарождения микротрещины интерес представляет расстояние d между

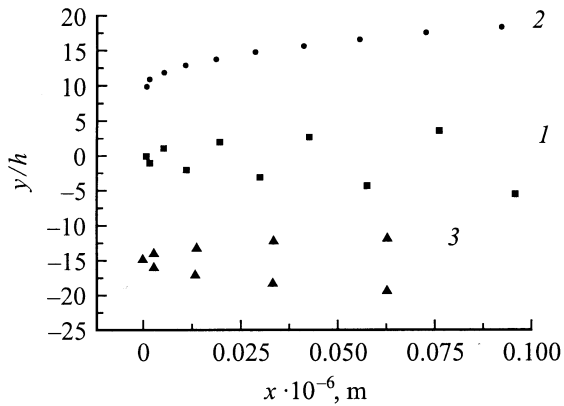


Рис. 1. Расположение дислокаций в вершине дефектов: АД (1), ГД (2), СД (3).

головными дислокациями, при слиянии которых и образуется зародыш трещины. Механизмы слияния головных дислокаций разделяются на силовые и активационные.

В плоском скоплении слияние головных дислокаций происходит при их сближении до расстояния $d = b$ [6]. В ступенчатом скоплении для слияния головных дислокаций достаточно сблизить их до критического расстояния $d_{c1} = 2.41h$. При этом сила отталкивания второй дислокации со стороны первой достигает максимума. Дальнейшее их сближение до слияния будет происходить без увеличения внешней нагрузки. Поэтому в качестве критических напряжений τ_{cr} зарождения трещин можно принять напряжения, необходимые для сближения головных дислокаций до расстояния d_{cr} . Будем называть этот критерий силовым.

При термоактивированном зарождении микротрещины предполагается не одновременное слияние головных дислокаций по всей длине, а первоначально лишь на коротком отрезке в результате выбрасывания второй дислокацией скопления парного перегиба за счет термических флуктуаций. При этом образуется зародыш микротрещины длиной l при слиянии этого перегиба и первой дислокации, который затем расширяется по всей ее длине. В [7] было показано, что энергетический барьер зарождения трещины полностью определяется первой стадией процесса — образованием парного перегиба. Выражение для энергии W образования парного перегиба приведено в [3].

Для определения критических значений внешних напряжений τ_{cr} рассчитывалась зависимость W от τ и находилось такое значение τ , при котором W совпадала с заданной величиной. В нашем случае эта энергия выбиралась равной 1 eV, что сопоставимо с минимальной высотой потенциального барьера образования парного перегиба и составляет величину порядка Gb^3 [8].

В расчетах анализировались: „симметричный“ двойник (СД) с равным числом дислокаций в границах, двойник с различным числом дислокаций в границах — „асимметричный“ двойник (АД) и одиночная граница двойника (ГД). Рассматривали скопления с различным

суммарным числом n дислокаций, а также различным соотношением чисел дислокаций n_1 и n_2 в верхней и нижней границах АД. Отмечается, что дислокации в границах СД выстраивались попарно (рис. 1), т.е. значения координат x_i для i -х дислокаций верхней и нижней границ двойника совпадали, а координаты y_i были равными по абсолютной величине, но противоположными по знаку. Этот результат понятен и является следствием взаимодействия дислокаций, движущихся в параллельных плоскостях скольжения. Если считать одну из дислокаций неподвижной, то равновесному состоянию другой дислокации будут отвечать два положения — $x = h$ и $x = 0$, в которых сила взаимодействия равна нулю, но устойчивым будет только одно из них — $x = 0$. При отклонении от него на движущуюся дислокацию будет действовать сила, возвращающая ее к положению равновесия.

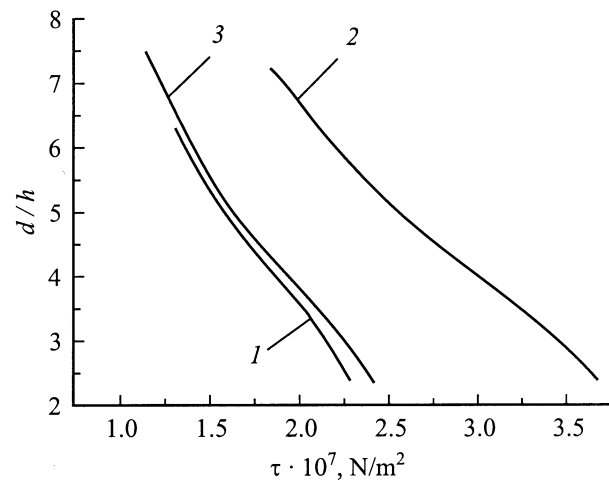


Рис. 2. Зависимость расстояния между головными дислокациями от приложенного напряжения для различных дислокационных скоплений: ГД, $n = 50$ (1); СД, $n_1 = n_2 = 25$ (2); АД, $n_1 = 20, n_2 = 30$ (3).

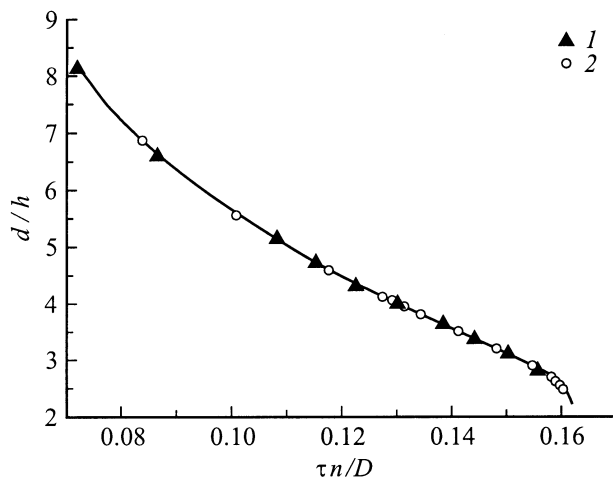


Рис. 3. Зависимость расстояния между головными дислокациями от приложенного напряжения для АД: $n_1 = 10, n_2 = 12$ (1); $n_1 = 20, n_2 = 30$ (2).

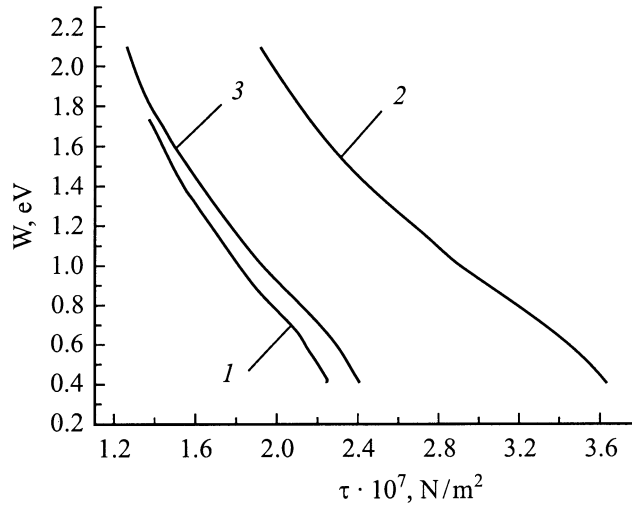


Рис. 4. Зависимость энергии парного перегиба W от внешнего напряжения: ГД, $n = 50$ (1); СД, $n_1 = n_2 = 25$ (2); АД, $n_1 = 20, n_2 = 30$ (3).

При нарушении равенства числа дислокаций в границах СД, т.е. при трансформации его в АД, расположение дислокаций существенно изменяется (рис. 1). Впрочем, и с этом случае встречается попарное выстраивание дислокаций в границах АД, но число таких пар не превышает единиц процентов. Обозначим через d расстояние между головной и второй дислокациями границы двойника. Для верхней и нижней границ АД d тем меньше, чем больше число дислокаций в границе, причем различие в величине d обеих границ АД может отличаться в несколько раз при небольшой разнице n_1 и n_2 . Например, для $n_1 = 10$ и $n_2 = 12$ отношение $d_1/d_2 \approx 4$. Помимо этого наименьшее из d_1 и d_2 оказывается гораздо меньше, чем величина d для СД. Это хорошо видно из рис. 1, на котором приведено расположение дислокаций непосредственно в вершинах скоплений. Если учесть, что именно величина d определяет напряжения зарождения трещин, следует ожидать изменения условий зарождения трещины в вершине АД.

В расположении дислокаций у вершины двойника обращает на себя внимание тот факт, что значения координат дислокаций в границах АД близки к значениям координат дислокаций в одиночной границе с суммарным числом дислокаций $n = n_1 + n_2$. Этот результат становится понятным, если вернуться к выражению для напряжений, действующих со стороны j -й дислокации на i -ю,

$$\tau_{ij} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x_i - x_j)[(x_i^2 - x_j^2) - (y_i^2 - y_j^2)]}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2}. \quad (3)$$

Для соседних дислокаций $y_i - y_j = h$, а $x_i - x_j$ сравним с h только для дислокаций, примыкающих к голове скопления (при слиянии $x_2 - x_1 = 2.41h$). Для остальных дислокаций с большими номерами $x_i - x_j \gg h$. Например, для $n > 10$ $(x_i - x_j)/h > 10$, т.е. в этом случае соседние дислокации и тем более дислокации с большей

разницей индексов взаимодействуют так, как будто они расположены в одной плоскости. Действительно, в (3) в этом случае можно с хорошей точностью пренебречь слагаемыми $(y_i - y_j)^2$, т.е. хвостовую часть ступенчатых скоплений можно заменить плоской конфигурацией дислокаций, а форма вершины дефекта и условия слияния головных дислокаций будут определяться особенностью взаимодействия небольшого числа головных дислокаций, для которых $\Delta y = |y_i - y_j|$ сравнимо с $\Delta x = |x_i - x_j|$.

На рис. 2 приведены результаты, показывающие зависимость d от внешнего напряжения τ для трех типов скоплений — ГД, СД и АД. Видно, что зависимости для ГД и АД расположены достаточно близко. Это является следствием отмеченного выше хорошего совпадения равновесных положений дислокаций в границах ГД и АД, т.е. ГД можно рассматривать как предельный случай АД, у которого $n_1 \gg n_2$ (или $n_2 \gg n_1$).

Сравнивая значения τ для АД и СД (с равным суммарным числом дислокаций в их границах), при $d = 2.41h$ получаем, что зарождение микротрещин по силовому механизму в АД будет иметь место при значительно меньших напряжениях (примерно в 1.7 раза).

Выяснялось, зависят ли полученные результаты от числа дислокаций в рассматриваемых скоплениях. Если перестроить зависимость $d = f(\tau)$ (или W от τ) в относительно единицах $d = f(\tau n/D)$, то полученные точки, соответствующие различным n для одного и того же скопления, с хорошей точностью ложатся на одну кривую. В качестве примера на рис. 3 приведен график такой зависимости для АД. Таким образом, результаты, приведенные на рис. 2, могут быть обобщены на случай других n простой перенормировкой критических напряжений.

Результаты расчета энергии активации зарождения трещины приведены на рис. 4. Сравнивая данные с результатами на рис. 2, отмечаем, что термоактивированному зарождению соответствуют меньшие значения критических напряжений, но это различие невелико ($\sim 25\%$). Сами значения энергии парного перегиба при выполнении силового критерия $d = 2.41h$ составляют ~ 0.5 eV.

Список литературы

- [1] В.Н. Рыбин, Ш.К. Ханнанов. ФГТ **11**, 4, 1048 (1969).
- [2] В.И. Владимиров, Ш.Х. Ханнанов. ФММ **31**, 4, 838 (1971).
- [3] В.А. Федоров, Ю.И. Тялин. Кристаллография **26**, 4, 775 (1981).
- [4] В.А. Федоров, В.М. Финкель, В.П. Плотников, Ю.И. Тялин, В.А. Куранова. Кристаллография **33**, 5, 1244 (1988).
- [5] Дж. Ортега, В. Рейнболдт. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. Мир, М. (1975).
- [6] A.N. Stroh. Adv. Phys. **6**, 24, 418 (1957).
- [7] В.И. Владимиров. Физическая природа разрушения металлов. Металлургия, М. (1984). 280 с.
- [8] А.Н. Орлов. Введение в теорию дефектов в кристаллах. Вышш. шк., М. (1983). 144 с.