

ЗАРОЖДЕНИЕ МИКРОТРЕЩИНЫ В ВЕРШИНЕ ЗАТОРМОЖЕННОГО ДВОЙНИКА

В.А. Тялина

ФГБОУ ВПО «Тамбовский государственный технический университет», г. Тамбов

Рецензент д-р хим. наук, профессор В.М. Поликарпов

Ключевые слова и фразы: граница двойника; двойник; двойникующая дислокация; микротрещина.

Аннотация: Получены критерии зарождения микротрещины в вершине заторможенного двойника для силового и термоактивированного подходов. Показано, что учет ступенчатого расположения дислокаций в границах двойника приводит к уменьшению критических напряжений образования зародышевых трещин примерно на порядок.

Учет геометрической структуры скопления и термической активации образования зародышевой трещины [1] позволяет получить близкие к реальным соотношения между величиной критических напряжений и числом дислокаций в скоплениях.

В связи с этим представляется интересным учесть данные факторы при анализе условий трещинообразования на двойниковых дефектах. Двойникование сводится к последовательному сдвигу атомных плоскостей [2]. Поэтому любой незавершенный сдвиг при таком деформировании кристалла может быть представлен ступенчатым скоплением частичных двойникующих дислокаций [3]. Каждая из них является скользящей дислокацией Шокли, создающей дефект упаковки в виде двойниковой прослойки толщиной в одно межплоскостное расстояние. Толщина двойниковой прослойки у выхода на поверхность кристалла равна произведению полного числа двойникующих дислокаций, образующих двойник, на межплоскостное расстояние h . Размер ступеньки, образующийся на поверхности кристалла при двойниковании таким же образом связан с числом дислокаций и величиной их вектора Бюргерса b .

Ниже рассматриваются дислокационные модели двойниковых дефектов и условия зарождения микротрещин в вершине заторможенного двойника.

Тялина Валентина Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Управление качеством и сертификация», e-mail: vtyalina@mail.ru, ТамбГТУ, г. Тамбов.

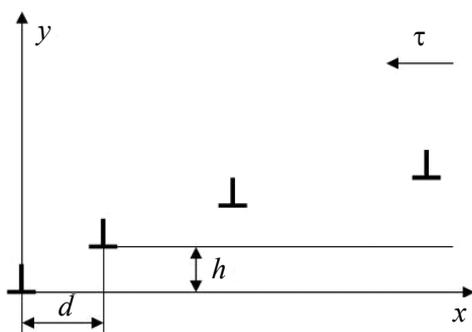


Рис. 1. Схема двойниковой границы

При дислокационном описании двойников возможно использование нескольких дислокационных моделей [3]. Самой простой из них является одиночная двойниковая граница (ГД), когда все дислокации лежат по одну сторону от плоскости движения головной дислокации (рис. 1).

В этом случае уравнения равновесия дислокаций заторможенного двойника имеют вид

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

где $A = Gb/2\pi(1-\nu)$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона; x_i и y_i – координаты дислокаций; n – число дислокаций в границе двойника; τ – внешнее напряжение, поджимающее двойникующие 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 в зависимости от расположения дислокаций в границах – симметричного относительно плоскости ZOX (симметричный двойник (СД)) или несимметричного (асимметричный двойник (АД)).

Уравнения равновесия дислокаций решали численно методом последовательных приближений [4]. Каждое последующее $(k+1)$ -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]. В нашем случае использовалось следующее приближенное выражение для координат дислокаций $x_i \approx 2i^2 A/n\tau$ [5].

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

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.

Из выражений для взаимодействия дислокаций (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 τ должна быть достаточно велика. Сверху она ограничена значением $\tau_{кр}$, при котором возможно слияние головных дислокаций и образование микротрещины в вершине двойника. Само же абсолютное значение критического напряжения будет зависеть от выбранного критерия зарождения микротрещины в вершине двойника.

Для определения максимального τ в расчетах использовали силовой и термоактивированный критерии [1] слияния головных дислокаций в вершине заторможенного скопления.

В первом случае задается расстояние d между головными дислокациями, при слиянии которых и образуется зародыш трещины. В плоском скоплении слияние головных дислокаций происходит при их сближении до расстояния $d = b$ (условие Стрo) [1]. В ступенчатой границе для слияния головных дислокаций достаточно сблизить их до расстояния $d_{кр} = 2,41h$ [3]. 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 $\rho \approx 1/d_{кр}$.

В дислокационной теории тонких двойников [6] плотность дислокаций определяет толщину или профиль двойника. При этом угол раствора в вершине двойника может меняться от нуля для свободно растущего двойника до 90° у двойника, заторможенного каким-либо препятствием. В дискретной модели диапазон возможных углов будет несколько меньшим. Для равновесного двойника максимальный угол раствора будет ограничен значением $\text{arctg}(h/d_{кр}) \approx 22,5^\circ$.

Данные на рисунке 2 (кривая 1) показывают также, что симметричное расположение дислокаций в границах двойника является устойчивым, поскольку сила взаимодействия дислокаций в этом случае будет нулевой. Но для такого попарного выстраивания дислокаций они должны сначала преодолеть значительные силы отталкивания, определяемые максимумом на кривой 1.

Из этого же рисунка видно (кривая 2), что при движении в одной плоскости скольжения дислокация отталкивается сильнее. При этом различие проявляется при рас-

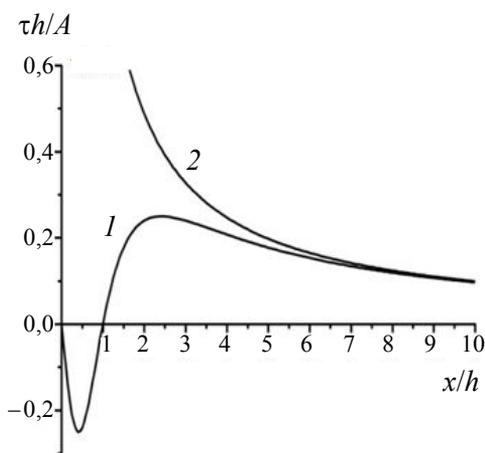


Рис. 2. Взаимодействие дислокаций, движущихся в параллельных плоскостях скольжения (1) и одной плоскости скольжения (2)

стояниях 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 $\approx 10h$.

Расчеты показали, что распределение дислокаций по длине двойника зависит от используемой дислокационной модели. Общее представление о характере распределения дислокаций дают данные на рис. 3.

Координаты дислокаций в ГД и СД, мкм:

ГД: 0 1,71 6,28 13,5 23,5 36,1 51,5 69,5 90,3...317,4 350,7
 СД: 0 2,96 16,1 40,0 74,8 120,5 ...324,4

Каждая пара дислокаций СД располагается между дислокациями одиночной границы. При этом общая длина двойника (см. выше) в обоих случаях остается примерно одинаковой. Различие будет тем меньше, чем больше дислокаций будет содержать двойник. Расстояние же между головными дислокациями в ГД и СД будут различаться гораздо сильнее. Поскольку именно оно определяет условие слияния дислокаций в вершине двойника, то при одинаковом числе скользящих дислокаций в обоих двойниковых дефектах следует ожидать существенного отличия напряжений зарождения трещины в вершине заторможенного двойника.

Координаты дислокаций в двойнике с асимметричным расположением дислокаций в границах хорошо совпадают с координатами дислокаций в одиночной границе с числом подвижных дислокаций, равным $n = n_1 + n_2 - 1$, где n_1 и n_2 – количества дислокаций в границах АД ($n_1 \neq n_2$). Незначительные различия в расположении дислокаций имеют место для головной части двойника при внешних напряжениях τ , 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 представ-

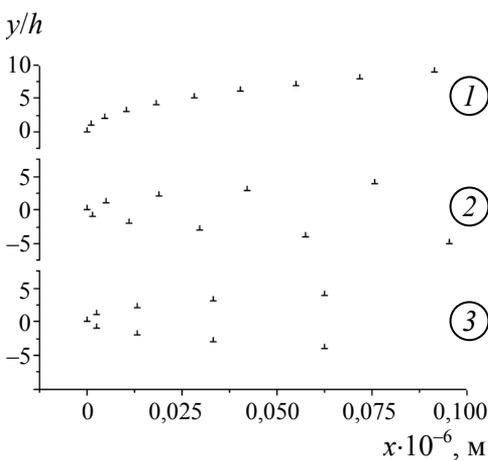


Рис. 3. Расположение дислокаций в вершине одиночной ГД (1), АД (2) и СД (3)

лен одиночной границей с соответствующим числом подвижных двойникоующих дислокаций. Именно такая модель может рассматриваться в качестве базовой при описании двойниковых дефектов.

Для определения $\tau_{кр}$ рассчитывались зависимости d от τ и находилась конечная устойчивая конфигурация двойниковой границы, для которой и фиксировалось значение критического напряжения зарождения микротрещины в вершине двойникового дефекта.

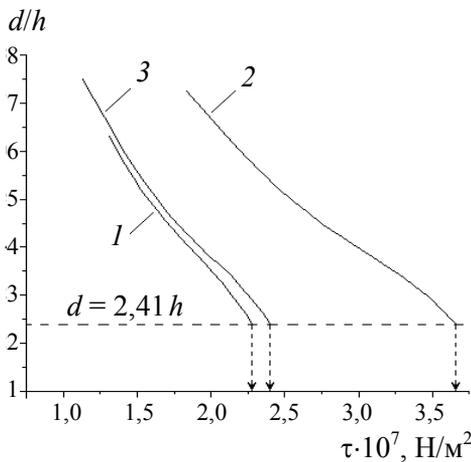


Рис. 4. Зависимость расстояния между головными дислокациями от приложенного напряжения:
1 – ГД; 2 – СД; 3 – АД

Сравнивая значения τ для АД и СД (с равными суммарными количествами 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 1,5 раза).

Расстояние d между головными дислокациями зависит не только от величины приложенного напряжения τ , 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 рисунка 5 видно, что при значении d/h , приближающемся к 2,41, критическое напряжение может быть определено из соотношения

$$n\tau = 0,155D. \quad (2)$$

Полученное соотношение аналогично выражению Стро для условия зарождения микротрещины в вершине плоского скопления дислокаций [3]

$$n\tau = 1,84D \quad (3)$$

и отличается от него только числовым коэффициентом. Сравнение (2) и (3) 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

На рисунке 4 приведены результаты, показывающие зависимость d от внешнего напряжения τ для трех типов дислокационных 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, то есть ГД можно рассматривать как предельный случай АД, у которого $n_1 \gg n_2$ (или $n_2 \gg n_1$). Отклонение критических напряжений для ГД и АД составляет примерно 10 % и уменьшается с увеличением числа дислокаций в двойнике.

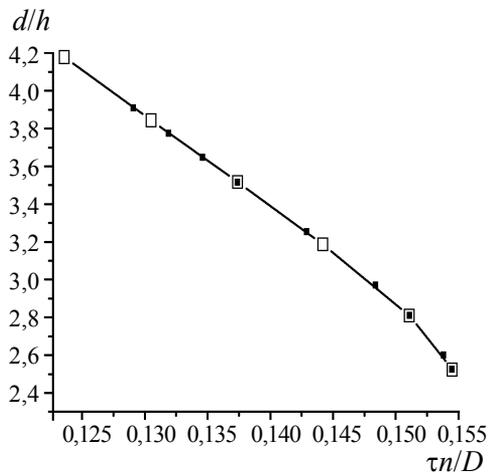


Рис. 5. Зависимость расстояния между головными дислокациями границы от приложенного напряжения:
□ – $n = 50$; ■ – $n = 100$

результат является следствием различного взаимодействия дислокаций в плоском и ступенчатом скоплениях (см. рис. 2). При прочих равных условиях значения критических напряжений для обоих скоплений различаются более чем на порядок. С этой точки зрения учет геометрии двойника является важным и оправданным при рассмотрении зарождения трещины в его вершине.

Для симметричного двойника критерий зарождения разрушения может быть также записан в виде $n\tau = \alpha D$, где $\alpha \approx 0,23$.

Отметим, что на рисунке 5 зависимости d от τ 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 .

При термоактивированном зарождении по аналогии с движением дислокаций в рельефе Пайерлса предполагается, что слияние головных дислокаций происходит в результате выброса второй дислокацией скопления парного перегиба шириной l и глубиной $a = d - b$ и последующего удлинения дислокационного отрезка с двойным вектором Бюргерса.

Энергия активации зарождения трещины W при $d < (5-7)b$ полностью определяются энергией образования парного перегиба, поскольку вскрытие зародыша трещины в ядре слившейся дислокации и его подрастание требуют преодоления меньших энергетических барьеров. В частности, для $d = 5b$ и ширине перегиба $l = 2b$ величина энергии активации составляет $\sim 2Db^3$. Преодоление такого барьера (~ 2 эВ) возможно за счет тепловых флуктуаций с учетом работы внешних сил.

Энергия образования парного перегиба на дислокации, ближайшей к дислокации-стопору, может быть представлена как сумма трех слагаемых

$$W = W_1 + \Delta W - A^*, \quad (4)$$

где W_1 – энергия образования парного перегиба на одиночной дислокации; ΔW – изменение энергии взаимодействия краевого сегмента перегиба с дислокациями границы (кроме второй); A^* – работа внешнего напряжения.

Выражение для энергии образования парного перегиба на одиночной дислокации может быть записано в следующем виде [3]

$$W_1 = \frac{Gb^2a}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \left[\sqrt{l^2 + a^2} - l - a + l \ln \frac{2l}{\sqrt{l^2 + a^2} + l} \right] - (1-\nu) \left[l - \sqrt{l^2 + a^2} + a \ln \frac{(\sqrt{l^2 + a^2} + a)\epsilon\rho}{al} \right] \right\}, \quad (5)$$

где $\rho = b/8$, а для ΔW имеем

$$\Delta W = lAb \sum_{j=1, j \neq 2}^n \left(\ln \frac{R_H^2}{R_K^2} + \frac{y^2}{R_H^2} - \frac{y^2}{R_K^2} \right), \quad (6)$$

где

$$y = (j-2)h; R_H^2 = (d-x_j)^2 + y^2; R_K^2 = (d-x_j-a)^2 + y^2.$$

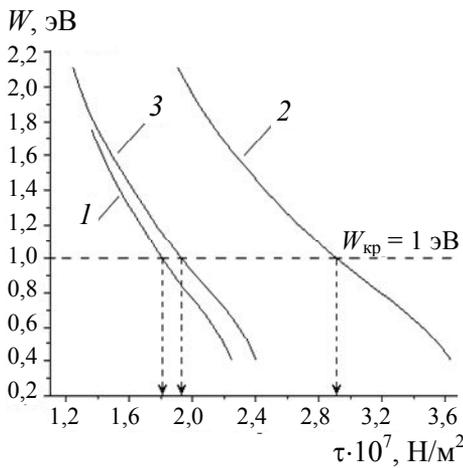


Рис. 6. Зависимость энергии W от внешнего напряжения τ :
 1 – ГД; 2 – СД;
 3 – АД

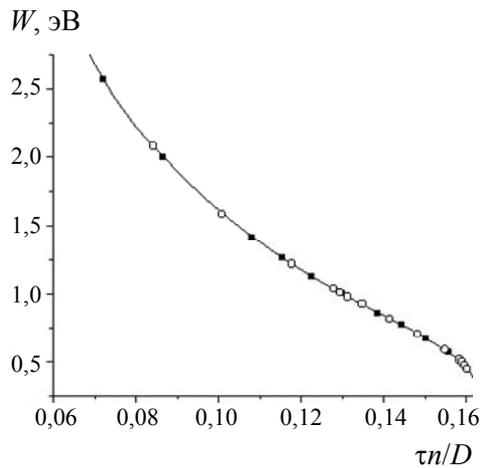


Рис. 7. Зависимость энергии образования парного перегиба от приложенного напряжения для ГД:
 ■ – $n = 22$; ○ – $n = 50$

Входящая в (4) работа внешнего напряжения равна

$$A^* = abl\tau. \quad (7)$$

После подстановки (5) – (7) в (4) получаем функциональную зависимость, позволяющую исследовать изменение энергии активации зарождения трещины от параметров скопления – числа дислокаций n и величины приложенного внешнего напряжения τ .

Конкретные расчеты выполнялись для двойников, содержащих от 10 до 100 дислокаций. Ширина перегиба l выбиралась равной двум векторам трансляции. Критические значения внешних напряжений $\tau_{кр}$ определяли по пересечению зависимостей кривых $W(\tau)$ с прямой $W_{кр} = \text{const}$ ($\approx 1 \dots 2$ эВ). Величины критических напряжений зависят от выбранной модели двойника. Результаты расчета энергии активации зарождения трещины W для всех типов двойниковых дефектов приведены на рис. 6.

При термоактивированном подходе так же, как и при силовом, можно получить в координатах W и $n\tau/D$ универсальную графическую зависимость, связывающую интересующие нас величины W , n и τ (рис. 7).

Однако в данном подходе не существует однозначного выбора критической энергии зарождения микротрещины $W_{кр}$, которая бы позволила также однозначно определить величину критических напряжений. Приведенная зависимость позволяет только определить нижний предел необходимой энергии активации. Он составляет $\approx 0,5$ эВ. Для данного значения энергии критические напряжения зарождения по обоим механизмам совпадают. При больших значениях $W_{кр}$ напряжения зарождения разрушения по термоактивированному механизму будут меньше. При увеличении величины энергии активации до 2 эВ значение $\tau_{кр}$ уменьшится примерно вдвое.

Список литературы

1. Владимиров, В.И. Физическая природа разрушения металлов / В.И. Владимиров. – М. : Металлургия, 1984. – 280 с.
2. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М. : Атомиздат, 1972. – 599 с.
3. Федоров, В.А. Дислокационные механизмы разрушения двойнящихся материалов / В.А. Федоров, Ю.И. Тялин, В.А. Тялина. – М. : Машиностроение-1, 2004. – 336 с.
4. Ортега, Дж. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными : пер. с англ. / Дж. Ортега, В. Рейнболдт. – М. : Мир, 1975. – 558 с.
5. Сеге Г. Ортогональные многочлены / Г. Сеге. – М. : Гос. изд-во физ.-мат. литературы, 1962. – 500 с.
6. Косевич, А.М. Дислокации в теории упругости / А.М. Косевич. – Киев : Наукова думка, 1978. – 220 с.

Microcracks Nucleation at the Top of a Stopped Twin

V.A. Tyalina

Tambov State Technical University, Tambov

Key words and phrases: microcrack; twin; twin boundaries; twinning dislocation.

Abstract: Microcrack nucleation criteria at the top of a stopped twin for the power and thermally activated approaches have been determined. It is shown that jogged positions of twinning dislocations at the boundaries decrease the critical stresses of microcrack nucleation by approximately an order.

© В.А. Тялина, 2013