

УДК 539.21

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ГРАНИЦ ДВОЙНИКА НА ЗАРОЖДЕНИЕ ТРЕЩИН В ЕГО ВЕРШИНЕ

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

Kuranova V.A., Pluzhnikov S.N., Tyalin Y.I., Fedorov V.A. The influence of a double's boundary structure on crack initiation in its peak. The article discusses the conditions in which micro-cracks are initiated in the peaks and on the boundaries of doubles. It is shown that the consideration of a double's real dislocation structure has great influence on the activation parameters of destruction initiation.

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 двойниующих дислокаций движется в своей плоскости скольжения. Дефекты такого рода моделируются обычно ступенчатыми скоплениями дислокаций [3], причем в двойнике дислокации располагаются попарно и симметрично относительно плоскости двойниования, проходящей через вершину двойника. Понятно, что в общем случае границы двойника не обязательно должны содержать одинаковое число дислокаций. В настоящей работе на примере кальцита рассмотрен именно такой случай асимметричного двойника с различным числом дислокаций в его границах. Формально это означает, что каждую из границ следует рассматривать отдельно и для каждой из них записывать свои уравнения равновесного распределения дислокаций.

Пусть границы содержат разное количество n_1 и n_2 дислокаций. Головная дислокация «заперта» в точке с координатами $x = y = 0$ и принадлежит одновременно верхней и нижней границам. Скопление дислокаций поджимается к головной внешними напряжениями τ . Для верхней границы с числом дислокаций n_1 уравнения равновесия будут иметь следующий вид

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

где x_i и y_i – координаты i -й дислокации; $D = G/2\pi(1-\nu)$; G – модуль сдвига ($3,2 \cdot 10^{10}$ Н/м²); ν – коэффициент Пуассона ($\nu = 0,3$); b – вектор Бюргера двойниующих дислокаций ($1,269 \cdot 10^{-10}$ м); h – межплоскостное расстояние ($3,82 \cdot 10^{-10}$ м).

Здесь первое слагаемое описывает взаимодействие

i -й дислокации с дислокациями верхней границы, второе – с дислокациями нижней границы.

Аналогично записываются уравнения для дислокаций в нижней границе:

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

Таким образом, мы получаем систему нелинейных уравнений (1) и (2) с общим числом неизвестных $n_1 + n_2 - 1$.

Системы уравнений (1) и (2) решали численно методом последовательных приближений [4]. 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 Лаггера $L^1_{n-1}(2\pi x/A)$, где $A = Db$. Причем нет необходимости находить точные значения корней полинома L^1_{n-1} , а можно воспользоваться их асимптотикой. 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 $\max |x_i^{k+i} - x_i^k| \leq \epsilon$, ($i = 2, 3, \dots, n$); ϵ – заданная точность. Величина ϵ выбиралась такой, чтобы в состоянии равновесия максимальное напряжение, действующее на дислокации скопления, не превышало $10^{-5}\tau$.

Решение уравнений (1) и (2) дает равновесные ко-

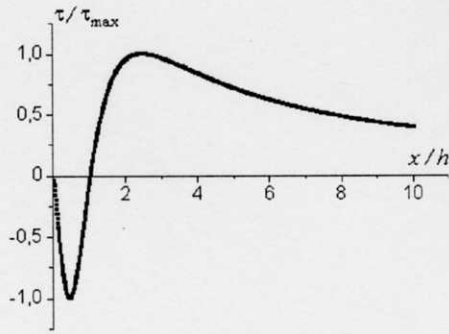


Рис. 1. Взаимодействие дислокаций, движущихся в соседних плоскостях скольжения

ординаты x , 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 головными дислокациями, при слиянии которых и образуется зародыш трещины. В плоском скоплении слияние головных дислокаций происходит при их сближении до расстояния $d = b$ [5].

В ступенчатом скоплении для слияния головных дислокаций достаточно сблизить их до расстояния $d = 2,41h$. При этом сила отталкивания второй дислокации со стороны первой достигает максимума (рис. 1). Дальнейшее их сближение до слияния будет происходить без увеличения внешней нагрузки. Поэтому в качестве критических напряжений $\tau_{кр}$ зарождения трещин можно принять напряжения, необходимые для сближения головных дислокаций до критического расстояния $d = 2,41h$. Будем называть этот критерий силовым.

При термоактивированном зарождении 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 длине дислокации. В [6] было показано, что энергетический барьер зарождения трещины полностью определяется первой стадией процесса – образованием парного перегиба. Выражение для энергии W образования парного перегиба приведено в [7].

Для определения критических значений внешних напряжений $\tau_{кр}$ 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 эВ, что сопоставимо с минимальной высотой потенциального барьера образования парного перегиба и составляет величину порядка Gb^3 [8].

В расчетах анализировались: двойник с равным числом дислокаций в границах – «симметричный» двойник (СД); двойник с различным числом дислокаций в границах – «асимметричный» двойник (АД); и одиночная граница двойника (ГД). Рассматривались дефекты с различным суммарным числом дислокаций, а также различным соотношением чисел дислокаций n_1 и n_2 в верхней и нижней границах АД.

В АД при $n_1 = n_2$ дислокации располагаются симметрично, как и в СД с $n = n_1 = n_2$. Этот результат по-

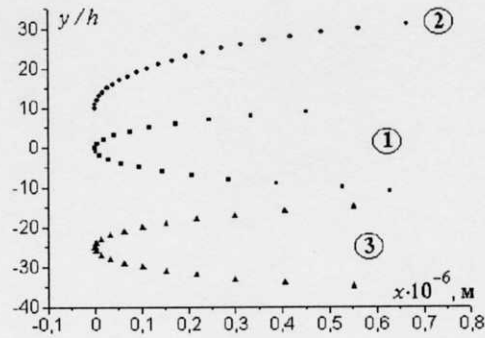


Рис. 2. Равновесные конфигурации дефектов: 1) АД; 2) ГД; 3) СД

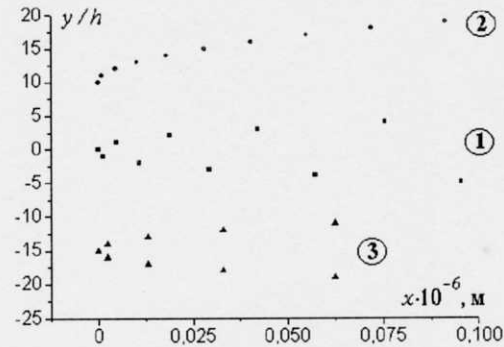


Рис. 3. Расположение дислокаций в вершине дефектов: 1) АД; 2) ГД; 3) СД

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 их 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.

При нарушении равенства числа дислокаций в границах симметричного двойника, т. е. при трансформации его в АД, расположение дислокаций существенно изменяется (рис. 2, 3). Впрочем, и в этом случае встречается попарное выстраивание дислокаций в границах АД, но число таких пар не превышает единиц процентов. В области, примыкающей к вершине АД, в сторону запертой дислокации сильнее смещается вторая дислокация границы с большим числом дислокаций. Причем различие в величине d обеих границ 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 на рис. 3, где приведено расположение дислокаций непосредственно в вершинах дефектов. 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 координаты дислокаций в границах АД имеют близкие значения с координатами дислокаций в одиночной границе с суммарным числом дислокаций $n = n_1 + n_2$ (рис. 3). Этот результат становится понятным, если вернуться к вы-

ражению для напряжений, действующих со стороны j -й дислокации на i -ю

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

Для соседних дислокаций $y_i - y_j = h$, а $x_i - x_j$ сравнимо 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 $n > 10$ $\Delta x/h > 10$, 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 дефектов можно заменить плоским скоплением, а форма вершины дефекта и условия слияния дислокаций будут определяться особенностью взаимодействия небольшого числа головных дислокаций, для которых

$$\Delta y = |y_i - y_j| \text{ сравнимо с } \Delta x = |x_i - x_j|.$$

На рис. 4 приведены результаты, показывающие зависимость d от внешнего напряжения τ для трех типов дефектов – 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 дефектах. Если перестроить зависимость d от τ (или W от τ) в относительных единицах $\tau n/D$, то полученные точки, соответствующие различным n для одного и того же дефекта, с хорошей точностью ложатся на одну кривую. В качестве примера на рис. 5 приведен график такой зависимости для АД. Таким образом, результаты, приведенные на рис. 4, могут быть обобщены на случай других n простой перенормировкой критических напряжений.

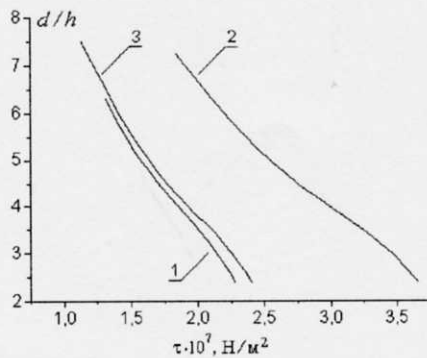


Рис. 4. Зависимость расстояния между головными дислокациями от приложенного напряжения: 1) ГД; 2) СД; 3) АД

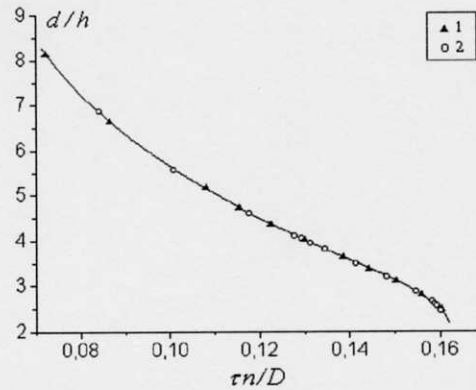


Рис. 5. Зависимость расстояния между головными дислокациями от приложенного напряжения для АД: 1) $n_1 = 10$, $n_2 = 12$; 2) $n_1 = 20$, $n_2 = 30$

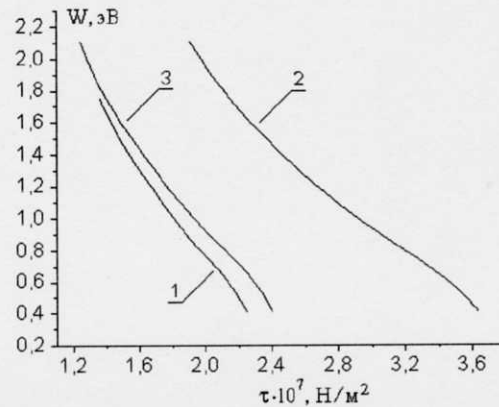


Рис. 6. Зависимость энергии перегиба W от внешнего напряжения τ : 1) ГД; 2) СД; 3) АД

Результаты расчета энергии активации зарождения трещины приведены на рис. 6. Сравнивая данные с результатами на рис. 4, отмечаем, что термоактивированному зарождению соответствуют меньшие значения критических напряжений, но это различие не велико (~25 %). Сами значения энергии парного перегиба при выполнении силового критерия $d = 2,41h$ равны ~0,5 эВ.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Рыбин В.Н., Ханнанов Ш.К. Учет реальной структуры скопления дислокаций в задаче о термоактивированном зарождении трещины // ФТТ. 1969. Т. 11. Вып. 4. С. 1048-1051.
2. Владимиров В.И., Ханнанов Ш.К. Образование трещин в заторможенной полосе скольжения // ФММ. 1971. № 31. С. 838-842.
3. Федоров В.А., Тялин Ю.И. О зарождении трещин на границах двойников в кальците // Кристаллография. 1981. Т. 26. Вып. 4. С. 775-781.
4. Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975.
5. Stroh A.N. A theory of fracture of metals // Advances phys. 1957. V. 6. № 24. P. 418-428.
6. Владимиров В.И. Физическая природа разрушения металлов. М.: Металлургия, 1984. 280 с.
7. Куранова В.А., Плужников С.Н., Тялин Ю.И., Федоров В.А. Зарождение микротрещин при двойниковании в ОЦК и ГЦК металлах // Вестн. ТГУ. Сер. Естеств. и технич. науки. Тамбов, 2001. Т. 6. Вып. 3. С. 346-350.
8. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М.: Высш. шк., 1983. 144 с.

Поступила в редакцию 24 августа 2001 г.