

УДК 548.24

ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАЗВИТИЯ КЛИНОВИДНЫХ ДВОЙНИКОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ВИСМУТА, ПОДВЕРГНУТЫХ ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКОМУ ДВОЙНИКОВАНИЮ

О. М. Остриков

Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого,
246746 Гомель, Беларусь
E-mail: ostrikov@gstu.gomel.by

Изучены особенности развития клиновидных двойников в монокристаллах висмута с полисинтетическими двойниками. Установлено, что полисинтетические двойники способствуют увеличению числа и уменьшению длины клиновидных двойников, возникающих вблизи отпечатка индентора. Данные параметры зависят от плотности двойников в полисинтетическом двойнике. На основе дислокационной модели на мезоскопическом уровне рассчитаны поля напряжений вблизи клиновидного и полисинтетического двойников.

Ключевые слова: клиновидные двойники, монокристаллы, двойникование.

Как правило, при деформировании двойникующихся монокристаллов и поликристаллов в них возникают группы двойников. При этом армированные двойниками кристаллы проявляют физические свойства, отличающиеся от свойств до деформирования в условиях, благоприятных для двойникования [1].

В настоящее время вопрос о роли групп двойников в формировании физико-механических свойств материалов является спорным. Существует две точки зрения: 1) двойниковые границы, являясь концентраторами больших внутренних напряжений, способствуют зарождению микротрещин, что приводит к ускорению процесса разрушения; 2) двойникование является резервом пластичности материала, поскольку границы двойников являются преодолимым (при большой степени деформации) энергетическим барьером для движущихся полных дислокаций, длина пути которых увеличивается, что уменьшает вероятность зарождения микротрещин [1].

Таким образом, представляется актуальным и целесообразным изучение влияния групп двойников на характер развития пластической деформации двойникующихся материалов.

Целью данной работы является экспериментальное исследование процессов двойникования армированных полисинтетическими двойниками монокристаллов висмута при локальном дозированном деформировании их поверхности, а также расчет на основе мезоскопической дислокационной модели полей напряжений вблизи клиновидного и полисинтетического двойников.

Монокристаллы висмута выращивались методом Бриджмена (методом направленной кристаллизации) из сырья с содержанием висмута 99,999 %. Образцы получались путем раскола монокристаллов вдоль плоскости спайности (111). Определяемая методом избира-

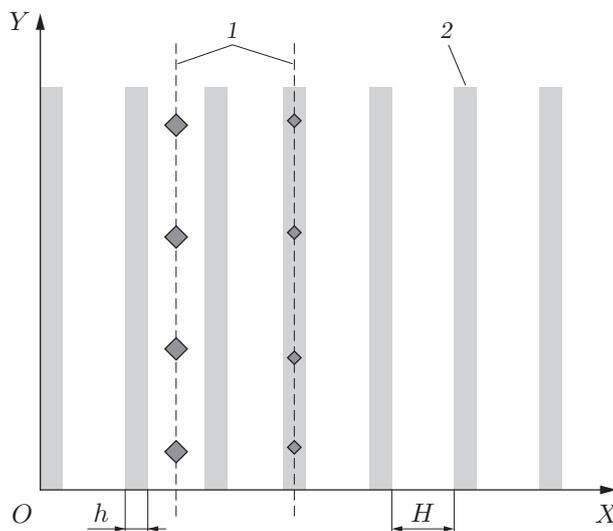


Рис. 1. Полисинтетический двойник и направления нанесения отпечатков индентора Виккерса:

1 — направления нанесения отпечатков индентора Виккерса; 2 — двойник

тельного травления исходная плотность базисных дислокаций (зарождающихся в плоскости спайности) составляла 10^9 м^{-2} , пирамидальных (движущихся по граням пирамиды, образованной плоскостями скольжения) — 10^7 м^{-2} .

Полисинтетическому двойникованию монокристаллы висмута подвергались в результате их сжатия (относительная деформация $\varepsilon = 8 \%$) в направлении большого значения фактора Шмида для двойникования. Особенности развития двойников в локально деформируемых приповерхностных областях монокристаллов висмута с полисинтетическими двойниками изучались с помощью прибора ПМТ-3 с алмазным индентором Виккерса. При этом прибор настраивался таким образом, чтобы имелась возможность нанесения отпечатка индентора в строго указанном месте на поверхности монокристалла. Отпечатки индентора наносились как в междвойниковом пространстве, так и на самих двойниках полисинтетического двойника (рис. 1).

Линейная плотность двойников ρ в полисинтетическом двойнике в направлении оси OX (рис. 1) определяется по формуле

$$\rho = N/L, \quad (1)$$

где N — число двойников, укладываемых на отрезке L , расположенном вдоль оси OX . Нетрудно показать, что $L = N(h + H)$, где h — ширина двойника; H — расстояние между двойниками (рис. 1). Тогда (1) записывается в виде

$$\rho = 1/(h + H).$$

В данной работе изучается влияние параметра ρ на закономерности развития клиновидных двойников вблизи отпечатка индентора Виккерса.

Для определения влияния базисного скольжения на двойникование монокристаллов висмута последние деформировались сжатием в направлении, параллельном плоскости (111), благоприятном для базисного скольжения (скольжения в плоскости спайности, т. е. в наиболее плотноупакованной плоскости, в которой вектор Бюргерса дислокаций имеет наименьшее значение).

Типичная деформационная картина, возникающая на поверхности (111) монокристалла висмута вблизи отпечатка пирамиды Виккерса, представлена на рис. 2. Особенно-

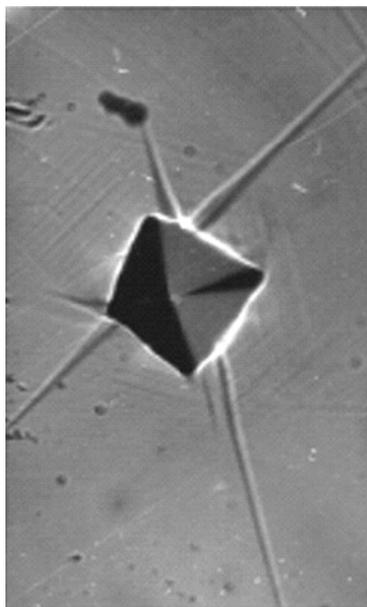


Рис. 2. Деформационная картина, возникающая вблизи отпечатка пирамиды Виккерса на поверхности (111) монокристаллов висмута

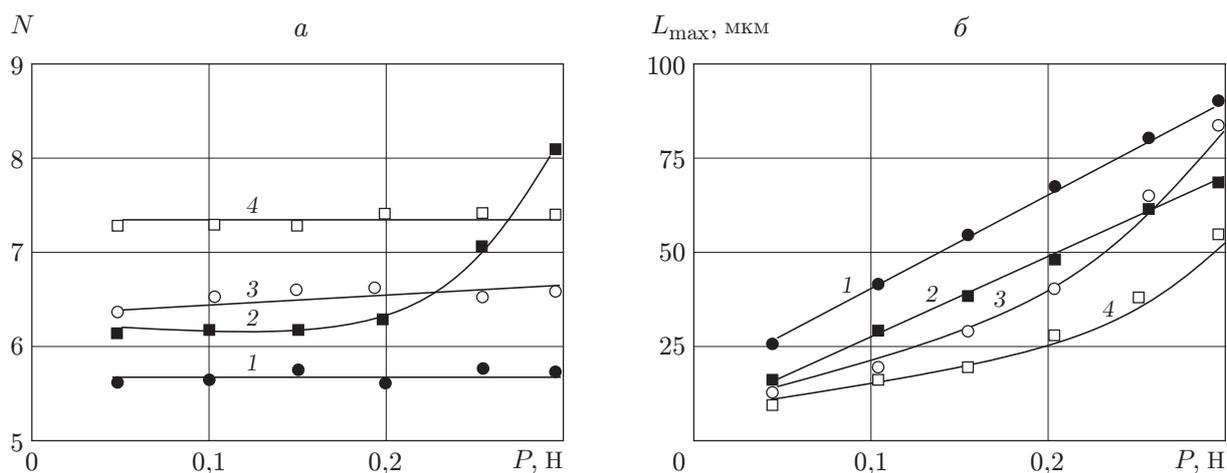


Рис. 3. Зависимости среднего числа двойников N , возникающих вблизи отпечатка индентора (а), и максимальной длины двойника L_{\max} (б) от нагрузки на индентор P :

1 — исходный образец; 2 — образец, деформированный сжатием ($\varepsilon = 8\%$) в условиях ориентационного запрета на двойникование; 3, 4 — образцы, подвергнутые полисинтетическому двойникованию ($\varepsilon = 8\%$) (3 — $\rho = 0,005 \text{ мкм}^{-1}$; 4 — $\rho = 0,02 \text{ мкм}^{-1}$)

стью этой картины является наличие вблизи отпечатка клиновидных двойников системы $\{110\}\langle 001\rangle$, которые, как правило, развиваются в местах пересечения полос сдвига пирамидального скольжения, где внутренние напряжения максимальны. При этом следы пирамидального скольжения вблизи отпечатка индентора образуют шестиугольник.

Эволюция ансамблей клиновидных двойников в зависимости от условий деформирования монокристаллов висмута достаточно полно описывается зависимостями, представленными на рис. 3 (отпечатки наносились между двойниками). Сжатие ($\varepsilon = 8\%$) монокристаллов висмута в условиях ориентационного запрета на двойникование (при малом значении фактора Шмида) приводит к увеличению числа клиновидных двойников вблизи отпечатка индентора и уменьшению их длины. С ростом нагрузки на индентор в исследуемом интервале нагрузок число двойников вблизи индентора увеличивается, в то время как

вблизи исходного образца, не подвергнутого предварительной обработке давлением, с увеличением нагрузки на индентор количество двойников остается практически неизменным. Это свидетельствует о том, что предварительное сжатие приводит к увеличению плотности базисных и пирамидальных дислокаций в образце. В результате увеличивается концентрация напряжений вблизи стопоров за счет увеличения вблизи них числа дислокаций. Скопления дислокаций являются одним из типов источников двойникующих дислокаций, так как в данных областях энергетически выгодно расщепление полных дислокаций на частичные двойникующие дислокации [2]. Это, в свою очередь, способствует увеличению работающих источников двойникующих дислокаций при деформировании монокристаллов висмута сосредоточенной нагрузкой. С увеличением нагрузки на индентор увеличивается деформация областей вблизи индентора, растет уровень напряжений, что активизирует те источники двойникующих дислокаций, активизация которых при более низком уровне напряжений была невозможна. Это проявляется в увеличении числа двойников при росте нагрузки на индентор (рис. 3, а).

Являясь дополнительными источниками двойникующих дислокаций, скопления базисных и пирамидальных дислокаций одновременно препятствуют развитию двойников с точки зрения формирования границы раздела двойник — материнский кристалл и трансляции двойникующих дислокаций вдоль границ двойников. Это приводит к уменьшению длины клиновидных двойников, возникающих вблизи отпечатка индентора в деформированном сжатием монокристалле висмута. Однако сами границы двойников являются концентраторами больших внутренних напряжений, и при их взаимодействии со скоплением базисных или пирамидальных дислокаций создаются благоприятные условия для ветвления двойников [3]. В деформированном монокристалле число ветвящихся двойников больше, чем в недеформированном.

Полисинтетические двойники оказывают влияние на закономерности развития клиновидных двойников вблизи отпечатка индентора (см. рис. 3), что приводит к увеличению их числа и уменьшению длины. Аналогичный результат получается при нанесении отпечатков вдоль единичной двойниковой прослойки полисинтетического двойника. Влияние полисинтетических двойников на деформационную картину вблизи отпечатка индентора обусловлено действием напряженного состояния в пространстве между двойниками, а также большой плотностью базисных и пирамидальных дислокаций. Это приводит к тому, что генерация двойникующих дислокаций при индентировании начинается при меньших внешних напряжениях, причем используются те источники двойникующих дислокаций, для работы которых в неармированном полисинтетическими двойниками монокристалле уровень напряжений индентора был недостаточным. Образование скоплений базисных и пирамидальных дислокаций приводит к увеличению общего числа источников двойникующих дислокаций в результате расщепления полных дислокаций на частичные двойникующие дислокации. Все это обуславливает увеличение числа клиновидных двойников, возникающих вблизи отпечатка индентора.

В то же время полисинтетические двойники препятствуют развитию (увеличению длины) клиновидных двойников, поэтому длина двойников в монокристаллах висмута, подвергнутых полисинтетическому двойникованию, меньше, чем в исходных образцах, а также в образцах, деформированных в условиях ориентационного запрета на двойникование (см. рис. 3, б). Наряду с этим ширина устья клиновидных двойников в монокристаллах висмута с полисинтетическими двойниками увеличивается в 1,5–2 раза по сравнению с шириной двойников в исходных образцах. Увеличение ширины устья двойников свидетельствует об интенсификации процессов генерации двойникующих дислокаций.

Из рис. 3 следует, что количественные характеристики клиновидных двойников зависят от параметра ρ . С увеличением плотности параллельных двойников уменьшается длина и растет число клиновидных двойников вблизи индентора.

Представляет интерес исследование механизмов зарождения трещин в локально деформируемых монокристаллах висмута с полисинтетическими двойниками. В хрупких материалах в местах скоплений дислокаций вблизи границ двойников велика вероятность возникновения трещин. В пластичных монокристаллах висмута такие скопления инициируют вторичное скольжение. При скоплении вторичных пирамидальных дислокаций различных кристаллографических направлений создаются условия для возникновения микротрещин под отпечатком индентора.

Большое количество информации об упругих свойствах двойников дает знание конфигурации полей напряжений, возникающих вокруг них. Согласно дислокационной теории упругих двойников их граница состоит либо из краевых, либо из винтовых дислокаций [1, 4], и поля напряжений, созданные таким скоплением дислокаций, определяются как суперпозиция напряжений, вызванных отдельными дислокациями. Однако в настоящее время информация о конфигурации полей напряжений вокруг клиновидных двойников отсутствует. Это обусловлено тем, что граница двойников состоит из большого числа дислокаций (плотность дислокаций на границе двойников составляет $10^4 \div 10^6 \text{ см}^{-2}$ [5]) и суммирование напряжений, вызванных отдельными дислокациями, является трудоемкой задачей.

В работах [6, 7] с помощью теории рядов Фурье предпринята попытка сведения сумм к функциям, анализ которых несколько упрощает рассматриваемую задачу. Однако, как отмечено в [6, 7], подобное сведение суммирования к функциональным зависимостям можно осуществить только для одной границы двойника и использование полученного в [6, 7] результата допустимо лишь в приближении достаточно большой ширины двойника, такой что влиянием второй границы можно пренебречь.

Компьютерное моделирование полей напряжений, проводимое в данной работе на основе дислокационной модели двойниковой границы, позволяет решить указанную выше проблему.

Как правило, клиновидные двойники возникают в монокристаллах в областях локализации внешних напряжений. Пусть двойник представляет собой клиновидное скопление двойникующих дислокаций с вектором Бюргерса \mathbf{b} . Так как двойникующие дислокации являются частичными [1], их вектор Бюргерса можно разложить на две составляющие: винтовую \mathbf{b}_v и краевую $\mathbf{b}_{кр}$. Кроме того, пусть краевая составляющая вектора Бюргерса направлена вдоль положительного направления оси OX (рис. 4), а винтовая — перпендикулярно плоскости рисунка (вдоль оси OZ). Среду, в которой находятся дислокации, будем

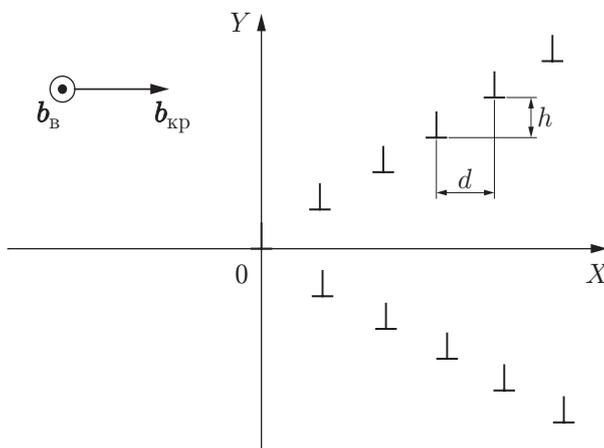


Рис. 4. Дислокационная модель клиновидного двойника

считать однородной и изотропной. Тогда на основе принципа суперпозиции компоненты тензора напряжений, возникающих вокруг рассматриваемого скопления дислокаций, можно определить из следующих соотношений:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -b_{кр}A \left(\sum_{n=0}^N \frac{(y + nh)[3(x - nd)^2 + (y + nh)^2]}{[(x - nd)^2 + (y + nh)^2]^2} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(y - mh)[3(x - md)^2 + (y - mh)^2]}{[(x - md)^2 + (y - mh)^2]^2} \right), \\ \sigma_{yy} &= b_{кр}A \left(\sum_{n=0}^N \frac{(y + nh)[(x - nd)^2 - (y + nh)^2]}{[(x - nd)^2 + (y + nh)^2]^2} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(y - mh)[(x - md)^2 - (y - mh)^2]}{[(x - md)^2 + (y - mh)^2]^2} \right), \quad (2) \\ \sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}), \\ \sigma_{xy} &= b_{кр}A \left(\sum_{n=0}^N \frac{(x - nd)[(x - nd)^2 - (y + nh)^2]}{[(x - nd)^2 + (y + nh)^2]^2} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^M \frac{(x - md)[(x - md)^2 - (y - mh)^2]}{[(x - md)^2 + (y - mh)^2]^2} \right), \\ \sigma_{xz} &= -b_{в}B \left(\sum_{n=0}^N \frac{y + nh}{(x - nd)^2 + (y + nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y - mh}{(x - md)^2 + (y - mh)^2} \right), \\ \sigma_{yz} &= b_{в}B \left(\sum_{n=0}^N \frac{x - nd}{(x - nd)^2 + (y + nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{x - md}{(x - md)^2 + (y - mh)^2} \right). \end{aligned}$$

Здесь σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} и σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz} — нормальные и скальвающие напряжения, вызванные двойникующими дислокациями, соответственно; $A = G/[2\pi(1 - \nu)]$; G — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона; $B = G/(2\pi)$; n , N — соответственно номер и число дислокаций на границе двойников, лежащей в первой четверти плоскости XOY (рис. 4); m , M — номер и число дислокаций на границе, находящейся в четвертой четверти плоскости XOY ; d , h — проекции на оси OX и OY соответственно отрезка, соединяющего две соседние дислокации границы двойников.

Некоторые результаты компьютерной обработки соотношений (2) приведены на рис. 5 в виде изолиний величин $\sigma_{xx}/(b_{кр}A(x, y))$ и $\sigma_{xy}/(b_{в}B(x, y))$.

Сравнительный анализ полученных графических данных показывает, что поведение нормальных (σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz}) и скальвающих (σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz}) напряжений вокруг клиновидного двойника различно: нормальные напряжения распределены вблизи границ двойника несимметрично, скальвающие — симметричны относительно оси OX . Исключение составляют напряжения σ_{zz} и σ_{xz} , изолинии которых идентичны. Однако в непосредственной близости границы двойников все напряжения максимальны.

Компьютерные расчеты показали, что увеличение числа двойникующих дислокаций на границах двойников не приводит к существенному изменению конфигурации полей напряжений. Однако при этом величина напряжений вблизи двойника изменяется пропорционально числу дислокаций в рассматриваемом скоплении, что, в частности, следует из (2).

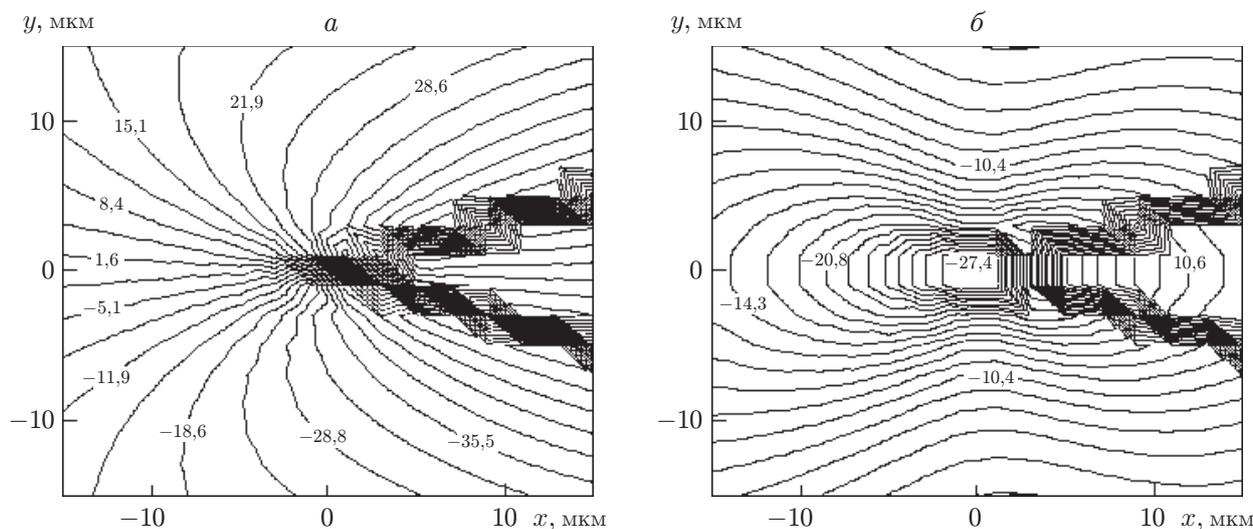


Рис. 5. Распределение напряжений вблизи клиновидного двойника ($-15 \text{ мкм} < x < 15 \text{ мкм}$, $-15 \text{ мкм} < y < 15 \text{ мкм}$; $N = 100$, $M = 99$, $d = 0,15 \text{ мкм}$, $h = 0,05 \text{ мкм}$):

a — $\sigma_{xx}/(b_{\text{кр}}A(x, y))$; b — $\sigma_{xy}/(b_{\text{кр}}A(x, y))$

Отметим еще один, очевидный, но ранее не обсуждавшийся факт: внутри двойника напряжения не являются однородными, а возрастают по мере удаления от устья двойника и приближения к его вершине. Этот факт невозможно установить с использованием модели тонкого двойника [4].

При увеличении масштаба построения полей напряжений в три раза и более видно, что конфигурация полей напряжений вокруг клиновидного двойника такая же, как и вблизи единичной дислокации. Подобная картина наблюдалась при изучении полей напряжений вблизи дислокационной стенки [4].

Нормальные напряжения σ_{xx} , σ_{yy} локализованы вблизи одной из границ двойников. Это свидетельствует о наличии избыточных внутренних напряжений вблизи одной из границ двойников, что должно оказывать влияние на динамику двойникующих дислокаций, образующих в результате деформации кристалла двойниковый клин. Нормальные напряжения способствуют переползанию дислокаций через препятствия в виде дефектов кристаллической решетки. Следовательно, граница двойников, вблизи которой нормальные напряжения выше, в процессе формирования менее чувствительна к дефектам кристаллической структуры.

Напряжения σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{zz} ответственны за миграцию точечных дефектов к границе двойников. Антисимметрия данных напряжений (см. рис. 5) приводит к тому, что вблизи одной из границ концентрация точечных дефектов выше, чем вблизи другой, где нормальные напряжения меньше. Например, избыточная концентрация примесей вблизи границы двойников способствует образованию их скоплений, состоящих из большего числа атомов, чем вблизи границы, где нормальные напряжения меньше.

Наличие неоднородного поля нормальных напряжений внутри двойника способствует массопереносу в сдвойникованном объеме и миграции атомов к границам двойников.

Скальвающие напряжения (см. рис. 5) отвечают за процессы междислокационного взаимодействия, а также за процессы генерации дислокаций. Результаты анализа конфигурации полей данных напряжений свидетельствуют о том, что взаимодействующие с клиновидным двойником дислокации стремятся занять место вблизи его границ и верши-

ны, где скалывающие напряжения имеют наибольшие значения. Скопление дислокаций вблизи границ двойников и вершины приводит к образованию в данных областях микротрещин, способствующих релаксации внутренних напряжений, созданных скоплением дислокаций, мигрировавших к клиновидному двойнику.

Увеличивающиеся по мере приближения к вершине двойника при движении от его устья скалывающие напряжения способствуют генерации двойникующих дислокаций на сформировавшихся границах раздела двойник — материнский кристалл. Очевидно, что в окрестности вершины клиновидного двойника двойникующих дислокаций генерируется больше, чем вблизи устья. Образовавшиеся вблизи устья двойникующие дислокации мигрируют к вершине двойника в область больших напряжений.

Неоднородность скалывающих напряжений внутри двойниковой прослойки способствует активизации в ней дислокационных процессов.

Вблизи полисинтетического двойника при ориентации его единичных двойников вдоль оси OY напряжения могут быть найдены на основе принципа суперпозиции из соотношений

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{\mu b_{кр}}{2D(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y - 2\pi X_n^{(1)} \operatorname{sh} 2\pi X_n^{(1)})}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2} - \right. \\ & \left. - \frac{\mu b_{кр}}{2D(1-\nu)} \sum_{n=0}^N \frac{\sin 2\pi Y (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y - 2\pi X_n^{(2)} \operatorname{sh} 2\pi X_n^{(2)})}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2} \right), \quad (3) \\ \sigma_{xx} = & -\frac{\pi \mu b_{кр}}{D(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{2\pi X_n^{(1)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(1)} - \cos 2\pi Y)^2} - \right. \\ & \left. - \sum_{n=0}^N \frac{2\pi X_n^{(2)} (\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} \cos 2\pi Y - 1)}{(\operatorname{ch} 2\pi X_n^{(2)} - \cos 2\pi Y)^2} \right), \end{aligned}$$

где $Y = y/D$; $X_n^{(1)} = (x - n(h + H) - h)/D$; $X_n^{(2)} = (x - n(h + H))/D$. В (3) учтено, что на противоположных границах изолированного двойника полисинтетического двойника находятся разноименные дислокации.

Таким образом, методом локального деформирования поверхности изучено развитие клиновидных двойников в монокристаллах висмута, подвергнутых полисинтетическому двойникованию. Установлено, что полисинтетическое двойникование приводит к увеличению числа работающих источников двойникующих дислокаций и уменьшению длины их пробега. В результате компьютерного моделирования, проведенного на основе дислокационной модели клиновидного двойника, появляется возможность построения полей напряжений вблизи границы двойников, что может быть использовано при анализе физических закономерностей двойникования кристаллов. Получены соотношения для расчета полей напряжений вблизи полисинтетического двойника.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Классен-Неклюдова М. В.** Механическое двойникование кристаллов. М.: АН СССР, 1960.
2. **Остриков О. М.** Влияние импульсов электрического тока на работу источников двойникующих дислокаций в монокристаллах висмута // Инж.-физ. журн. 1999. Т. 72, № 3. С. 592–594.
3. **Остриков О. М.** Ветвление клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой // Физика металлов и металловедение. 1999. Т. 87, № 1. С. 94–96.

4. **Косевич А. М., Бойко В. С.** Дислокационная теория упругого двойникования // Успехи физ. наук. 1971. Т. 104, № 2. С. 201–254.
5. **Башмаков В. И., Чикова Т. С.** Кинетика образования клиновидных двойников в кристаллах висмута // Физика металлов и металловедение. 1981. Т. 51, № 5. С. 1066–1072.
6. **Савенко В. С., Остриков О. М.** Поля напряжений вокруг двойникующих дислокаций в изотропной электропроводящей среде, находящейся во внешнем электрическом поле // Тез. докл. 4-й Междунар. конф. “Действие электромагнитных полей на пластичность и прочность материалов”, Воронеж, 9–13 сент. 1996 г. Воронеж: Воронеж. гос. техн. ун-т, 1996. С. 20.
7. **Савенко В. С., Остриков О. М.** Поля напряжений вокруг бесконечной дислокационной лестницы // Изв. АНБ. Сер. физ.-мат. наук. 1997. № 2. С. 129. Деп. в ВИНТИ 05.02.97, № 327-В97.

*Поступила в редакцию 13/VI 2006 г.,
в окончательном варианте — 9/VII 2007 г.*
