

На правах рукописи

Манухина Дарья Владимировна

ДИСЛОКАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ОСТАНОВКЕ
И ЗАЛЕЧИВАНИИ ТРЕЩИН В КРИСТАЛЛАХ

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Москва – 2010

Работа выполнена в государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Гамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина»

Научный консультант – заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук,
профессор Федоров Виктор Александрович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Логинов Борис Михайлович

доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Кадомцев Андрей Георгиевич

Ведущая организация: ГОУ ВПО «Костромской государственный
технологический университет»

Защита состоится «26» мая 2010г. В 16 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.141.17 при Московском государственном техническом университете имени Н.Э. Баумана по адресу:
248600, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, КФ МГТУ имени Н.Э. Баумана

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке
КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана
(г. Калуга, ул. Баженова, д. 2)

Автореферат разослан «__» _____ 2010г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.т.н., доцент

Лоскутов С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В настоящее время появляются и интенсивно развиваются новые области техники и науки, базирующиеся на широком использовании своеобразных, а порой уникальных свойств монокристаллов.

Широкое использование получили кристаллы, в которых проявляются различные эффекты: пьезоэффект, пьезооптический эффект, пироэффект, магнито - и электрострикция. Показано, что в щелочногалоидных кристаллах наблюдается явление магнитопластичности – увеличение подвижности дислокаций при воздействии относительно слабого магнитного поля. Подобное возможно и при воздействии электрических полей. Последнее обусловлено наличием электрического заряда на дислокациях. Присутствие электрического заряда на дислокациях и других дефектах приводит к росту энергии разрушения и формированию в объеме кристалла электрических полей, напряженность которых может достигать пробойных значений и вызывать разрушение кристалла в областях скопления дислокаций, прежде чем механические напряжения достигнут разрушающих значений. В этом плане исследование эффектов в щелочногалоидных кристаллах, обусловленных скоплениями заряженных дислокаций является актуальным. Кроме того, электрическая активность структурных дефектов может быть использована для оценки кинетики их развития.

В ряде кристаллов, используемых в оптике, имеет место механическое двойникование. Механические двойники являются концентраторами напряжений, что представляет определенную опасность с точки зрения зарождения микротрещин. В тоже время двойникование является одним из видов деформации, в объяснении которой существует ряд неопределенностей и, следовательно, еще не выработаны четкие критерии и не определены условия возникновения трещин.

Эти и другие проблемы, связанные с использованием монокристаллов в науке и технике, делают в целом актуальными изыскания, направленные на изучение свойств ионных кристаллов, содержащих электрически активные дефекты или дефекты – концентраторы высоких механических напряжений.

Целью настоящей работы является исследование структуры пластической зоны, образующейся в вершине трещины при ее остановке и разгрузке образца в кристаллах с заряженными дислокациями, а также установление механизма зарождения трещины в кристаллах кальцита при встречном развитии упругих двойников.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1) Предложить математическую модель пластического течения при асимметричном развитии деформации в вершине трещины нормального отрыва.

2) Выполнить исследование рельефа поверхности скола щелочно-галоидных кристаллов (ЩГК) методом атомно-силовой микроскопии (AFM)

для установления тонкой структуры линий скольжения в местах остановки трещины.

3) Установить роль заряда дислокаций на процессы формирования пластической зоны и разрушения образца.

4) Проанализировать дислокационные модели свободно растущего упругого двойника под действием постоянной нагрузки, а также заторможенного двойника и в рамках предложенных моделей рассмотреть взаимодействие встречных упругих двойников.

5) Предложить механизм вскрытия микротрещины между вершинами взаимодействующих встречных упругих двойников.

Научная новизна полученных результатов состоит в том, что:

1. Показано, что формирующуюся пластическую зону в вершине остановившейся трещины в ЦГК можно моделировать одиночной линией скольжения, которая адекватно описывает процесс развития и эволюции пластической зоны, представленной набором дислокаций. Модель позволяет определить количественные и качественные характеристики такого течения в зависимости от величины внешнего нагружающего усилия в момент остановки трещины и от величины напряжений трения кристаллической решетки.

2. Экспериментально методами АФМ-микроскопии получены данные о геометрическом рельефе поверхности скола кристаллов LiF: определены величины углов наклона и высот ступенек, образующихся на поверхности скола кристалла в моменты кратковременных остановок трещины при прохождении ее сквозь образец.

3. Впервые выдвинуто предположение, что зона сдвига, образующаяся при пластической деформации, представляет собой не локализованную полосу сдвига, а диффузную полосу скольжения толщиной до сотен нанометров, что подтверждено экспериментально.

4. Оценены электрические поля, характеризующие электрически активную пластическую зону в вершине трещины, полученную асимметричным сколом. Установлено, что при определенных условиях величина напряженности образованного скопления заряженных дислокаций может достигать значений, сравнимых с пробойным значением напряженности для атмосферного воздуха. Аналитически установлены зависимости напряженности электрического поля и дипольного момента скопления заряженных дислокаций от внешней нагрузки и напряжений внутреннего трения кристалла.

5. В кристаллах кальцита предложен механизм зарождения упругих каналов Розе (УКР), основанный на взаимодействии встречных упругих двойников, рост которых обусловлен соотношением сил взаимодействия дислокаций двойников и сопротивления кристалла сдвигу. Проведена аналитическая оценка такого взаимодействия.

Научная ценность и практическая значимость работы. Полученные в работе результаты могут быть использованы при разработке теории прочности и пластичности материалов. Рассмотренные модели пластической зоны в вершине остановившейся трещины взаимодействующих упругих двойников и найденные критерии зарождения микротрещин позволяют прогнозировать процесс разрушения материалов в зависимости от режимов нагружения. Кроме того контроль электрической активности кристаллов с заряженными дислокациями позволит получать информацию о состоянии кристалла по величине электрического диполя.

Результаты работы могут быть использованы в организациях и лабораториях, занимающихся разработкой теорий прочности и пластичности материалов: в Воронежском государственном университете, Белгородском государственном университете, Институте кристаллографии им. А.В Шубникова РАН, Сибирском государственном индустриальном университете, Институте физики прочности и материаловедения СО РАН, Тамбовском государственном университете им. Г.Р. Державина, МГУ им. М.В. Ломоносова.

На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Модель асимметричной пластической зоны, формирующейся в вершине остановившейся трещины. Количественные характеристики пластической зоны в нагруженном и разгруженном состояниях кристалла.

2. Результаты исследования зоны сдвига, образующейся при пластической деформации на поверхности образца при движении трещины сквозь образец в местах ее остановки. Показано, что зона сдвига представляется диффузным набором полос скольжения толщиной от десятка до сотен нанометров.

3. Аналитически установленные значения напряженности и дипольного момента электрического поля, формируемого электрически активной пластической зоной, а также влияние заряда на дислокациях на процесс пластического течения ЦГК.

4. Результаты моделирования взаимодействия упругих двойников в кристалле кальцита и влияние на это взаимодействие различных внутренних факторов.

5. Механизм зарождения микротрещины (упругого канала Розе) между вершинами взаимодействующих двойников, основанный на модели зарождения трещины, предложенной Фудзито.

Апробация работы. Результаты исследований докладывались на «XV Петербургских чтениях по проблемам прочности, посвященных 100-летию со дня рождения. ак. С.Н. Журкова» (Санкт-Петербург, 2005), на XLIV Международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Вологда, 2005), на «XVI Петербургских чтениях по проблемам прочности, посв. 75-летию со дня рождения В.А. Лихачева» (Санкт-Петербург, 2006), на Четвертой Международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов», посв. памяти ак. Г.В. Курдюмова (Черноголовка, 2006), на III Международной конференции по физ. кристаллов

«Кристаллофизика 21-го века» (Черноголовка, 2006), на «XVII Петербургских чтениях по проблемам прочности, посв. 90-летию со дня рожд. проф. А.Н. Орлова» (Санкт-Петербург, 2007), на IV Международной школе-конференции «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (Тамбов, 2007), на IX Российско-Китайский симпозиуме «Новые материалы и технологии» (Астрахань, 2007), на Второй Международной конференции «Деформация и разрушение материалов» (Москва, 2007) и на научных конференциях преподавателей и сотрудников ТамбГУ (2004 -2008 г.г.).

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в 4 статьях из перечня ВАК и 10 тезисах докладов на международных и всероссийских конференциях.

Достоверность результатов. Выводы диссертации основаны на проведении комплексных исследований, включающих сопоставление данных, полученных при моделировании, с экспериментальными данными; они не противоречат известным положениям физики конденсированного состояния и согласуются с экспериментальными результатами других исследователей.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, списка цитированной литературы, содержащего 266 наименования. Полный объем составляет 152 страницы машинописного текста, в том числе 67 иллюстраций и одна таблица.

Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертационной работе. В работах, написанных в соавторстве, автору принадлежат проведение экспериментов, выполнение математических расчетов, обработка полученных результатов, а также участие в обсуждении результатов и написании статей.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, определены цель и задачи проводимых исследований, сформулированы научная новизна и практическая значимость работы, перечислены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена литературному обзору основных экспериментальных данных и теоретических представлений о микромеханизмах пластической деформации кристаллов, а также моделированию, как способу изучения микропластичности и механизмов разрушения. Представлены данные о различных способах залечивания трещин и методы исследования приповерхностных слоев материалов.

Во второй главе представлены результаты исследования особенностей остаточной пластической деформации при остановке микротрещин в кристаллах LiF. При частичной или полной остановке трещины формируются легко наблюдаемые пластические зоны, структура которых определяется типом разрушающей трещины, геометрией образца, свойствами

материала. Для ЦГК кристаллов, в частности, пластическая зона имеет вид характерного «дислокационного креста» [188].

В первой части главы рассматривается математическая модель

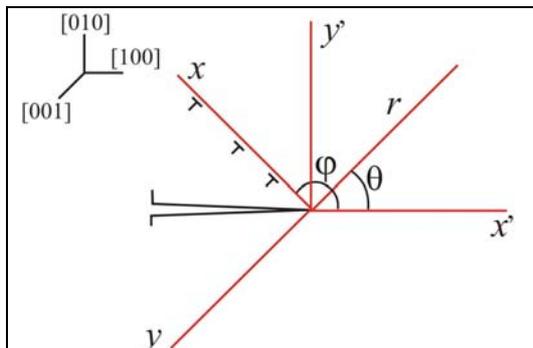


Рис. 1. Схема пластического течения у вершин трещин

пластического течения в вершине остановившейся трещины для асимметричного случая. Пластическая зона представлялась одиночной линией скольжения в полуплоскости, обращенной в сторону, противоположную движению трещины. Предполагалось, что трещина расположена в плоскости (010) и движется до полной остановки в направлении [100] (рис. 1.) Исследовалось два этапа формирования дислокационной структуры

в вершине трещины. Первый – это образование линии скольжения в момент остановки трещины, когда образец остается нагруженным, и второй – ее эволюция после снятия нагрузки и частичного залечивания вершины трещины. Для данной схемы пластического течения уравнения равновесного положения дислокаций на первой стадии будут иметь вид:

$$\tau_T(x_i) + \sum_{j=1, i \neq j}^m \tau_D(x_i, x_j) - \tau_s - \tau_{im} = 0, \quad (1)$$

где $i = 1, 2, \dots, m$, $\tau_T(x_i)$ – напряжения, создаваемые в плоскости скольжения трещиной, $\tau_D(x_i, x_j)$ – напряжения, действующие на i -ю дислокацию со стороны j -той, τ_s – напряжения трения решетки, τ_{im} – напряжения изображения.

На второй стадии формирования дислокационной структуры дислокациям предоставлялась возможность перемещаться из исходного состояния под действием сил взаимного отталкивания и изображения. В этом случае в уравнении (1) следует исключить $\tau_T(x_i)$. В процессе релаксации скопления часть дислокаций может покинуть кристалл и выйти на поверхность трещины, т.е. происходит изменение не только пространственного положения отдельных дислокаций, но и их числа. Системы уравнений (1) решались методом последовательной верхней релаксации (ПВР) – Ньютона.

Результаты численных расчетов позволили выявить зависимость плотности дислокаций в линии скольжения. На первой стадии формирования линии скольжения плотность дислокаций (кривая 1 рис. 2) наиболее велика в хвостовой части линии скольжения, примыкающей к трещине. В области головных дислокаций ее величина уменьшается более чем на порядок. На второй стадии расположение дислокаций в голове скопления (дислокации с номерами $j \leq 37$) сохранилось прежним (кривая 2 рис. 2). В области же, примыкающей к трещине, число дислокаций уменьшилось, одновременно

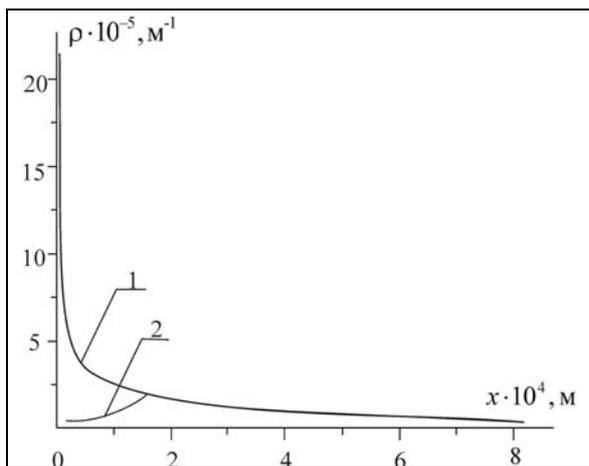


Рис. 2. Плотность дислокаций в линии скольжения:
1 – нагруженный образец;
2 – после разгрузки

изменились расстояния между ними.

Зависимость ρ от x уже не является монотонной, а имеет сложный вид с экстремумом на значительном расстоянии от вершины трещины. Кроме того были получены зависимости общего числа дислокаций N в линии скольжения и длины линии скольжения l . В общем случае N и l зависят от нагружающего усилия (p) в момент остановки трещины и от напряжений трения. Они увеличиваются при уменьшении сил сопротивления со стороны кристалла движению дислокаций, так как

лидирующие дислокации удаляются от трещины на большие расстояния, уменьшая тем самым величину запирающих источник напряжений. При неизменном τ_s число дислокаций и длина линии скольжения растут с увеличением нагружающего усилия p , т. е. в кристаллах с большей поверхностной энергией γ следует ожидать и более интенсивного пластического течения за счет увеличения напряжений в вершине трещины.

Общая ситуация в эксперименте соответствует выходу на поверхность трещины ~35% дислокаций в результате разгрузки образца т.е. наряду с односторонним течением имеет место заметная доля обратимой пластической деформации. В результате снятия нагрузки берега трещины частично смыкаются, остаточное же вскрытие пропорционально числу остающихся в кристалле дислокаций. Если при остановке трещины пластичность в ее вершине незначительна, то после выхода части дислокаций на поверхность трещины, ее берега могут сблизиться на расстояния, достаточные для восстановления ионных связей. Экспериментальные результаты хорошо согласуются с расчетом.

Во второй части рассмотрено изменение характеристик пластического течения в вершине трещины для случая, когда пластическая зона представлена симметричными линиями скольжения относительно плоскости трещины. В этом случае в уравнения равновесия дислокаций (1) следует добавить слагаемое, отвечающее за взаимодействие j -ой дислокации из одной линии с дислокациями другой линии. Анализ результатов математического расчета показал, что основные черты и характеристики пластического течения сохраняются. Отличие наблюдается лишь в числовых значениях: в частности, одинаковым значениям p и τ_s при симметричном скольжении соответствуют меньшие значения чисел дислокаций в линиях скольжения и длин самих линий. Т.е. при равных условиях пластическая зона при

симметричном течении получается менее протяженной, и эмиссия дислокаций прекращается при несколько меньшем их числе, чем при скольжении по одиночной линии.

Эффект влияния второй линии скольжения обусловлен взаимным притяжением дислокаций обеих линий и повышением их плотности в области, прилегающей к вершине. Из-за этого появляется различие в поведении скоплений на второй релаксационной стадии формирования пластической зоны. Если для асимметричного скольжения доля обратимой пластичности не сильно зависит от напряжений трения и составляет 30-35% от общего числа испущенных дислокаций, то для симметричной зоны соответствующая зависимость приобретает более сложный характер. А именно, в области малых напряжений трения сильно возрастает число дислокаций, выходящих на поверхность трещины при разгрузке образца. В указанной области оно может превышать половину от их общего количества.

В третьей части исследовался геометрический рельеф поверхности скола тещины. Эксперименты проводились на призматических образцах монокристаллов LiF размером 4×8×60 мм. Лезвием создавалась зародышевая трещина, которая затем скачкообразно продвигалась по образцу под действием импульсной нагрузки. При таком движении трещина, как правило, претерпевает несколько (2–5) скачков, образуя на поверхности скола ступеньки, число и высота которых растут по мере приближения к краю образца. Наименее искаженной с точки зрения наличия ступеней скола является область в центре образца, где фронт трещины можно считать практически прямолинейным. Поверхность скола кристаллов исследовалась с помощью оптического микроскопа МИМ–7 и сканирующего зондового микроскопа Solver LS.

Дислокационную структуру в вершине трещины выявляли методом химического травления в водном растворе хлористого железа (FeCl_3). Результаты сканирования образцов показали, что образованные на поверхности ступеньки могут быть как одиночными, так и состоять из нескольких моноступеней, соединенных площадками, параллельными поверхности скола.

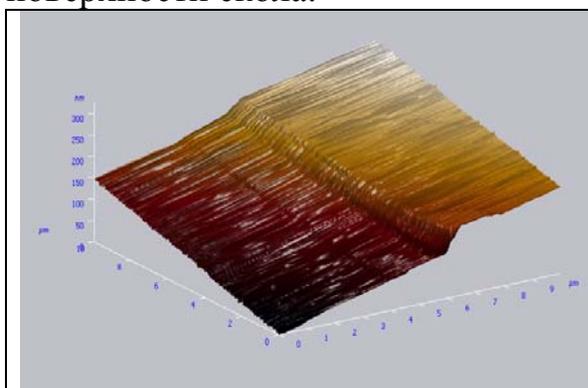


Рис. 3. 3D-представление каскада ступеней

На 3D-представлении поверхности скола в местах остановок трещины наблюдаются как моноступеньки, биступеньки, так и каскады моноступенек (рис. 3).

Сопоставление оптического изображения с 3D-представлением фронта трещины позволяет сделать вывод о том, что между ступеньками, образованными на берегах трещины, и дислокационными линиями существует

неразрывная связь, т.е. дислокационные линии указывают на местоположение поверхностных ступенек скола.

Количественная оценка величины углов наклона ступенек к поверхности трещины показала, что величины углов меняются $0,1^\circ$ до 12° . Для ЩГК плоскость скольжения дислокаций наклонена под углом 45° к плоскости скола, угол же наклона поверхностных ступенек существенно меньше этой величины. Таким образом зона сдвига, соответствующая одной отдельной ступени, не может быть представлена геометрической тонкой линией скольжения, имеющей конечную ширину. Например, при числе дислокаций, равном 50, и угле наклона ступеньки, равном 2° , ширина линии скольжения составляет ≈ 230 нанометров. Таким образом дислокационные линии, наблюдаемые на картинах химического травления, фактически представляют тонкие диффузные полосы скольжения. Высота ступенек колеблется от единиц до нескольких десятков нанометров (от $0,1$ до 60 нм), которая зависит от геометрии скольжения и числа испущенных дислокаций. Измерение высоты ступеньки на поверхности скола позволяет однозначно определить число дислокаций, испускаемых при остановке трещины. Аналитическая оценка количества дислокаций находится в согласии с результатами эксперимента. Таким образом, высота каждого из уступов на берегах трещины определяется числом дислокаций в связанной с ним линии скольжения. Ширина ступеньки зависит от того, является ли она моноступенькой, биступенькой или каскадом моноступеней. Наиболее характерная ширина моноступеньки – $150-600$ нм. Высота $\approx 10-40$ нм, что соответствует $\approx 50-170$ дислокациям в линии скольжения в вершине трещины. Профиль остановившейся трещины может быть представлен полостью с суммарным раскрытием порядка десятка нанометров, ступенчато сужающейся к вершине трещины.

Третья глава посвящена электрическим эффектам при пластической деформации в вершине трещины в кристаллах с заряженными дислокациями.

В первой части приводятся литературные данные об электрических эффектах, связанных с движением дислокаций, в ЩГК и полупроводниках. Это фотопластический эффект, электропластический эффект, деформационная люминесценция окрашенных ЩГК, дислокационные токи и эффект Степанова в ЩГК и в соединениях A^2B^6 . Отметим что, для полного понимания процессов пластической деформации необходимо учитывать не только упругие, но и электростатические поля. Это могут быть стационарные поля неподвижных скоплений заряженных дислокаций и низкочастотные переменные электрические поля, связанные с движением и перестройкой дислокационных скоплений. Впервые на некоторые особенности проявления подобных эффектов было обращено внимание в работе [241].

Во второй части главы приводится исследование статических электрических полей, создаваемых скоплениями заряженных дислокаций в кристаллах LiF. В кристаллах с заряженными дислокациями пластическая

деформация будет сопровождаться поляризацией образца и созданием в объеме кристалла электрического поля.

Рассматривались электрические поля, создаваемые пластической зоной в вершине трещины. Дислокация считалась равномерно заряженной с линейной плотностью заряда λ , выражаемой через число f элементарных зарядов e , приходящихся на параметр решетки: $\lambda = ef/b$. Для определения напряженности поля, создаваемого заряженными дислокациями, рассмотрим комплексную функцию: $E(z) = E_x(z) + iE_y(z)$ [33], действительные и мнимые части которой представляют собой компоненты напряженности электрического поля в декартовой системе координат с центром на линии дислокации, а $z = x + iy$ – точка комплексной плоскости. Поле заряженной краевой дислокации будет определяться выражением $\bar{E}(z) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \frac{1}{z}$, где ε – диэлектрическая постоянная.

Для нахождения электрического поля дислокационного скопления необходимо просуммировать приведенные выражения по числу дислокаций в скоплении: $\bar{E}(z) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \sum_{i=1}^n \frac{1}{z - x_i}$, где x_i – координаты дислокаций скопления, n – число дислокаций в нем. Расчеты проводились для одиночной линии скольжения, испущенной трещиной при ее движении через образец.

Рассчитывалась напряженность поля E скопления. Как видно из рис. 4, ее значения могут быть достаточно велики. На расстоянии порядка микрона от границы скопления напряженность поля может достигать значений порядка $2 \cdot 10^5$ В/м. При приближении к границе скопления напряженность поля будет изменяться обратно пропорционально расстоянию от крайней дислокации.

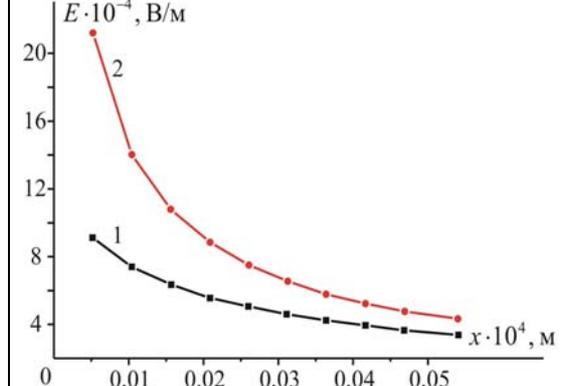


Рис. 4. Изменение электрического поля в плоскости скольжения дислокаций (нагруженный образец): 1 – на продолжении скопления; 2 – в хвостовой части скопления

Поэтому на меньших расстояниях ее величина может сравниться с пробойным значением напряженности для атмосферного воздуха. После разгрузки образца значения напряженности поля несколько уменьшаются за счет выхода части дислокаций на поверхность трещины. Была получена зависимость величины E от нагружающего усилия p (рис. 5), которое в свою очередь зависит от размеров образца и величины поверхностной энергии кристалла.

Изменение p в 2-2,5 раза приводит к увеличению напряженности электрического поля более чем на порядок.

В третьей части приводятся данные по определению электрического

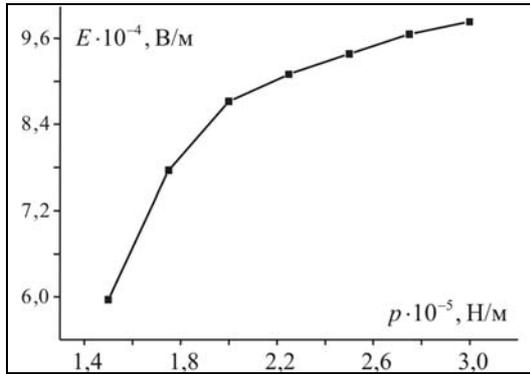


Рис. 5. Зависимость напряженности от нагружающего усилия

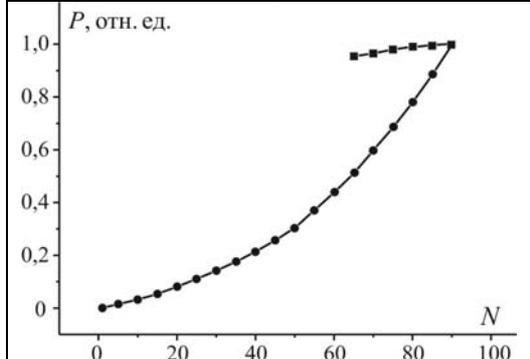


Рис.6. Зависимость величины дипольного момента линии скольжения от числа дислокаций

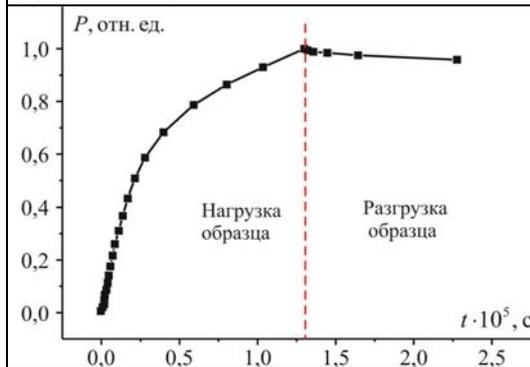


Рис. 7. Зависимость дипольного момента P от времени t

дипольного момента P скопления дислокаций в линии скольжения:

$$P(t) = \lambda \sum_{i=1}^n x_i(t).$$

Представляла также интерес производная от дипольного момента, определяющая

$$I(t) = \lambda \sum_{i=1}^n \frac{dx_i}{dt} = \lambda \sum_{i=1}^n v_i.$$

Формулы для $P(t)$ и $I(t)$ позволяют

последовательно находить статические конфигурации дислокаций в линии скольжения. Зависимость P от числа дислокаций в линии скольжения приведена на рис.6.

Величина P растет на первой стадии процесса пластической деформации до некоторого максимального значения, на второй стадии – уменьшается на величину ΔP в результате выхода части дислокаций на поверхность трещины. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными. Анализ зависимости дипольного момента от нагружающего усилия и от силы трения решетки в момент остановки трещины показал, что значение дипольного момента при увеличении нагрузки возрастает и убывает при увеличении трения решетки по экспоненциальным законам. Четвертая часть посвящена изучению кинетики пластической деформации в вершине трещины. Уравнения движения дислокаций в этом случае имеют вид:

$$\frac{dx_i}{dt} = \begin{cases} \frac{b}{B} \sigma(x_i), & \sigma(x_i) \geq \tau_s, \\ 0, & \sigma(x_i) < \tau_s, \end{cases}$$

где $\sigma(x_i)$ – напряжения, действующие на дислокацию, B – константа торможения. Уравнения решались численными методами Рунге-Кутты.

Изменение дипольного момента во времени (рис.7) позволило определить время, соответствующее стадиям нагрузки и разгрузки образца, каждая из которых занимает приблизительно по 10 мкс. Общее время формирования линии скольжения составляет примерно 20-30 мкс, которое меняется в зависимости от характеристик кристалла.

В четвертой главе исследовано зарождение микротрещин при взаимодействии встречных упругих двойников в кристаллах кальцита.

В первой части главы приводится методика эксперимента. Исследовалось образование каналов Розе (КР) при множественном двойниковании кристаллов кальцита. Для проведения эксперимента использовалась методика, предложенная в [40]. Стационарные КР пронизывают весь кристалл, наблюдаются на любом сколе, параллельном поверхности образца, на которую они выходят (рис.8).

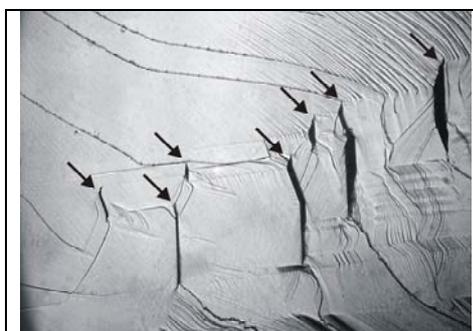


Рис. 8. Выходы каналов КР1 сложной формы на плоскость спайности

Ширина канала может уменьшаться, если к образцу приложить нагрузку, вызывающую раздвойникование кристалла. Отдельные каналы могут при этом закрываться. На следе залеченных каналов травлением выявляются строчки дислокационных ямок.

Во второй части исследовано распределение числа образующихся КР в зависимости от их длины. Установлено, что большая часть КР имеет размеры порядка 10-30 мкм, а их максимальная длина ограничена значением порядка 100 мкм. Это характерное расстояние, начиная с которого параллельные прослойки перестают взаимодействовать. Результаты хорошо согласуются с [40].

Третья часть посвящена исследованию дислокационных моделей двойников. В работе [260] показано, что для двойниковых границ характерно ступенчатое смещение соседних двойникоующих дислокаций на межплоскостное расстояние h . При этом возможны несколько дислокационных моделей двойниковых дефектов: одиночная двойниковая граница, двойник с симметричным относительно плоскости двойникования расположением дислокаций и асимметричный двойник, составленный из границ с различным числом дислокаций. Граница реального двойника состоит из двойникоующих дислокаций, движущихся в соседних атомных плоскостях [30].

Рассматривалась модель двойниковой границы, содержащей n подвижных дислокаций, параллельных оси Z . Дислокации движутся вдоль оси OX от источника, находящегося в начале координат $x=0$, под действием упругих напряжений $\tau(x)$. Каждая дислокация перемещается в своей плоскости скольжения. Расстояние между плоскостями скольжения соседних дислокаций равно межплоскостному расстоянию h . При составлении

уравнений равновесного положения дислокаций в границах учитываются внешние напряжения, напряжения взаимодействия дислокаций и сопротивление кристалла сдвигу. Расчеты показали, что для двойниковой границы условие слияний головных дислокаций будет $d=2.41h$, где d – расстояние между головными дислокациями.

Из литературных данных известно, что двойник с различным числом дислокаций $n1$ и $n2$ в границах с хорошей точностью может быть заменен одиночной плоской границей с суммарным числом дислокаций $n=n1+n2$.

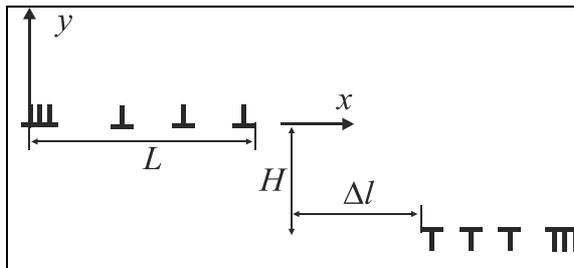


Рис. 9. Дислокационная модель взаимодействия встречных двойников

Дислокационная модель таких взаимодействующих встречных двойников приведена на рис. 9. Двойник представлен плоским скоплением дислокаций, параллельных оси OZ и способных перемещаться в плоскости скольжения XOZ . Напряжения, создаваемые внешней нагрузкой, моделируемой супердислокацией с вектором Бюргерса, равным mb (m –

целое число порядка 10^5), являются сосредоточенными и убывают с расстоянием как x^{-1} . Для модели на рис. 9 уравнения равновесия имеют следующий вид [30]:

$$\frac{mA}{x_i} + \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{A}{x_i - x_j} + \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{Ag_j(g_i^2 - H^2)}{(g_i^2 + H^2)^2} - \tau = 0, \quad g_i = \Delta l + 2L - x_i - x_j; \quad \tau = \begin{cases} \tau_s, & i \neq n, \\ \tau_l, & i = n, \end{cases}$$

где $i = 1, 2, \dots, n$, τ_l – напряжение, действующее на лидирующую дислокацию с номером $i=n$. Данные уравнения решались численным методом.

В четвертой части приводятся результаты математического моделирования. Исследовались характеристики заторможенной линии скольжения. Схема Стро, рассматривающая такую линию скольжения, является исторически первой и наиболее часто используемой для различных оценок.

Были получены зависимости расстояния d между головными дислокациями плоского скопления от величины m (значение m определяет уровень нагружающего усилия p). Показано, что с ростом m расстояние между головными дислокациями уменьшается. Критическая нагрузка или критическое значение m определяется из равенства $d=b$ (условие зарождения микротрещины в вершине заторможенного скопления по силовому механизму). Так же критическая величина m будет связана с длиной скопления и числом дислокаций n в нем: m примерно обратно пропорционально n при неизменной длине двойника. Сравнивая полученные данные с данными для двойниковой границы, можно отметить, что зарождение микротрещины в двойниковой границе будет иметь место при существенно меньшей нагрузке, чем в плоском скоплении (головные дислокации необходимо сблизить до расстояния $2,41h$).

Результаты расчета равновесных координат дислокаций одиночного свободного двойника показали, что вершина свободного двойника является вытянутой в направлении его движения и имеет форму заостренного клюва (рис.10). Причем форма двойника не изменяется с увеличением напряжений трения τ_s . С ростом τ_s двойник только сокращает свою длину. Если же увеличить силу торможения, действующую на головную дислокацию, то заметно изменится распределение дислокаций в вершине свободного двойника: она притупляется и по форме начинает напоминать вершину заторможенного двойника, что приводит к резкому увеличению плотности дислокаций в его вершине. Также длина двойника L будет зависеть и от величины нагружающего усилия p : с ростом p длина двойника увеличивается практически линейно, что подтверждается экспериментально [49].

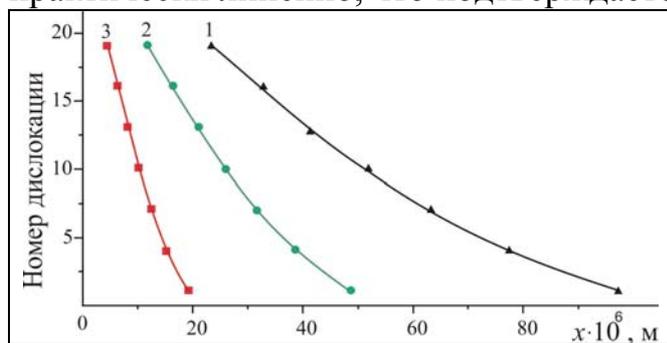


Рис. 10. Форма двойниковой границы: 1 – $\tau_s = 10^6$ Па; 2 – $\tau_s = 2 \cdot 10^6$ Па; 3 – $\tau_s = 5 \cdot 10^6$ Па

С изменением напряжения трения меняется плотность дислокаций в границе двойника. Но даже самые большие значения ρ ($\sim 10^5$) для свободного двойника заметно меньше, чем плотность ρ ($\sim 10^7$) в вершине заторможенного двойника, при которой могут образовываться микротрещины по силовому механизму. Таким образом, если растущий двойник

не встретил препятствий, то зарождение трещины в его вершине по механизму слияния дислокаций является событием маловероятным.

Анализ взаимодействия дислокаций двойников, находящихся в параллельных плоскостях (рис. 9), показал, что начальной стадией взаимодействия двойников является их притяжение.

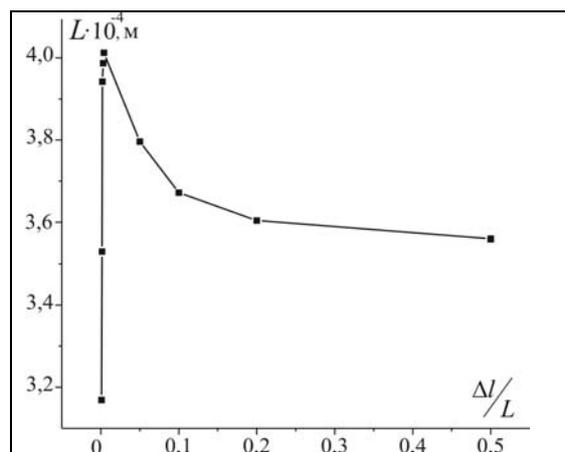


Рис. 11. Зависимость длины двойника от расстояния между их вершинами

Двойники притягиваются практически до полного сближения их вершин. Затем наблюдается отталкивание головных дислокаций и уменьшение длины двойников (рис.11).

Данные результаты подтвердились расчетом сдвиговых напряжений, создаваемых одиночным двойником в плоскостях скольжения, параллельных плоскости двойника.

Чтобы получить полное торможение двойников, необходимо сблизить их вершины на одно межплоскостное расстояние. Максимуму отталкивания будет соответствовать расстояние между двойниками $\sim 0,5 x/h$. И в этом случае микротрещина в вершине

двойников может возникать в результате слияния головных дислокаций. Но вероятность такого взаимодействия очень мала. В эксперименте же наблюдается образование микротрещин на расстояниях H до 70 мкм [42]. Наиболее вероятным представляется вскрытие микротрещины по механизму Фудзито (рис.12).



Рис. 12. Механизм образования трещины между вершинами двойников

Тонкий слой материала толщиной H попадает в область высоких растягивающих напряжений под экстраплоскостями двойниующих дислокаций.

Суммарное напряжение в этой области будет равно удвоенному напряжению, создаваемому каждым из двойников. В областях I и II суммарные напряжения будут незначительными, так как здесь область растяжения одного двойника накладывается на область сжатия другого двойника.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ОБЩИЕ ВЫВОДЫ

1. Методом компьютерного моделирования исследовано пластическое течение в вершине остановившейся трещины на примере кристаллов LiF. Выделены две стадии формирования пластической зоны: первая – образование линии скольжения в момент остановки трещины, когда образец остается нагруженным, и вторая – её эволюция после снятия нагрузки и частичного залечивания вершины трещины. Установлено, что на второй стадии часть дислокаций (~ 30-40%) выходит на плоскость трещины благодаря действию сил взаимного отталкивания и изображения, обеспечивая тем самым частичное залечивание вершины трещины.

2. АФМ-микроскопией рельефа поверхности скола кристаллов LiF показано, что ступеньки на поверхности скола могут быть одиночными или состоять из нескольких моноступеней высотой от 0,1 до 60 нм. Высота каждого из уступов на берегах трещины в местах ее остановки определяется числом дислокаций в связанной с ним линии скольжения. Линии скольжения, различаемые в оптический микроскоп, фактически представляют собой тонкие диффузные полосы скольжения, имеющие конечную ширину, значение которой может достигать сотен нанометров, а профиль вершины трещины может быть представлен полостью с суммарным раскрытием порядка десятка нанометров, ступенчато сужающегося к вершине трещины.

3. Рассчитаны основные характеристики электрического поля, образованного в результате формирования пластической зоны в вершине трещины в кристалле LiF. Показано, что значения напряженности электрического поля от скопления заряженных дислокаций могут достигать величин сравнимых с пробойным значением напряженности для атмосферного воздуха. Величина напряженности убывает при разгрузке

образца (при выходе части дислокаций на поверхность трещины) и увеличивается при увеличении внешней нагрузки за счет увеличения локальной плотности дислокаций в линии скольжения.

4. Определены электрический дипольный момент скопления, а также производная от дипольного момента по времени, которая определяет дислокационный ток. Расчет данных электрических характеристик пластической зоны позволил описать кинетику ее образования: время формирования дислокационной структуры в вершине трещины при ее остановке и дальнейшей эволюции занимает ~ 30 мкс.

5. Предложены дислокационные модели двойников, представленные набором дислокаций. Получены равновесная форма и размеры упругого двойника, растущего под действием сосредоточенной нагрузки, моделируемой супердислокацией с вектором Бюргерса, равным mb , установлено распределение упругих напряжений, создаваемых двойником, а также влияние сил трения на форму двойника и плотность распределения дислокаций в нем.

6. Рассмотрено взаимодействие встречных упругих двойников и предложен механизм вскрытия микротрещины между вершинами двойников, базирующийся на механизме Фудзито. Результаты математического моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными. Показано, что при определенном соотношении числа дислокаций в двойниках, силы трения, расстояния между головными дислокациями рассматриваемая модель адекватно отражает особенности зарождения микротрещин на границах и при взаимодействии упругих двойников.

Основные положения диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Пластическая деформация в вершине остановившейся трещины / Д.В. Золотова [и др.] // Тезисы доклада XV Петербургских чтений по проблемам прочности, посв. 100-летию со дня рожд. ак. С.Н. Журкова. – СПб., 2005. – С. 39.

2. Дислокационные процессы при остановке и заживлении трещин / Д.В. Золотова [и др.] // Актуальные проблемы прочности: Тез. докл. XLIV Межд. конф. Вологда, 2005. С. 16.

3. Дислокационная структура, формируемая при остановке и заживлении трещин в щелочно-галогидных кристаллах / Д.В. Золотова [и др.] // Кристаллофизика 21-го века: Тез. докл. III Межд. конф. по физ. кристаллов. Черноголовка, 2006. С. 207-208.

4. Пластичность в вершине остановившейся трещины и геометрический рельеф поверхности скола / Д.В. Золотова [и др.] // Вестник ТамбГУ. 2007. Т.12, вып. 1. С. 70-72.

5. Структура полос скольжения, формируемых в вершине трещины при ее остановке / Д.В. Золотова [и др.] // Микромеханизмы пластичности,

разрушения и сопутствующих явлений: Матер. IV Межд. школы-конф. Тамбов, 2007. С.69-72.

6. Пластическая деформация в вершине трещины и связанные с нею электрические эффекты в кристаллах с заряженными дислокациями / Д.В. Золотова [и др.] // Деформация и разрушение материалов: Матер. Второй межд. конф. Москва, 2007.С. 110-111.

7*. Структура полос скольжения, формируемых в вершине трещины при ее остановке / Д.В. Золотова [и др.] // Деформация и разрушение материалов. 2008. № 3. С. 223-227.

8*. Электрические поля в пластически деформированных кристаллах с заряженными дислокациями / Д.В. Золотова [и др.] // Вестник СамГТУ. 2007. № 1(14). С. 96-99.

9. Нестационарные электрические эффекты при пластической деформации кристаллов с заряженными дислокациями / Д.В. Золотова [и др.] // Проблемы прочности, посв. 90-летию со дня рожд. проф. А.Н. Орлова: Матер. XVII Петербургских чтений. СПб., 2007. Ч. 1. С. 271-273.

10*. Тялин Ю.И., Тялина В.А., Золотова Д.В. Электрические эффекты при пластической деформации в вершине трещины в кристаллах с заряженными дислокациями // Перспективные материалы. 2007. Т.2. С.580-582.

11. Зарождение микротрещин при механическом двойниковании кристаллов кальцита / Д.В. Золотова [и др.] // Проблемы прочности, посв. 75-летию со дня рождения В.А. Лихачева: Тез. докл. XVI Петербургских чтений. СПб., 2006. С.185.

12. Тялин Ю.И., Тялина В.А., Золотова Д.В. Дислокационные модели двойников и зарождение трещин при механическом двойниковании // Фазовые превращения и прочность кристаллов, посв. памяти ак. Г.В. Курдюмова: Тез. докл. IV Межд. конф. Черноголовка, 2006. С.153.

13. Тялин Ю.И., Тялина В.А., Золотова Д.В. Зарождение микротрещин при механическом двойниковании // Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений: Матер. IV Межд. школы-конф. Тамбов, 2007. С.318-331.

14*. Тялин Ю.И., Тялина В.А., Золотова Д.В. Зарождение микротрещин при упругом двойниковании // Перспективные материалы. 2007.Т.2. С.576-579.

Манухина Дарья Владимировна

Дислокационные процессы при остановке и залечивании трещин в
кристаллах

Автореферат на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 21 апреля 2010г. Формат бумаги 60x84 1/16.
Бумага типографская №2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 035.

Отпечатано «Наша Полиграфия»,
г.Калуга, Грабцевское шоссе, 126.
Лиц. ПЛД № 42-29 от 23.12.99