

**ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТОВ ДИСКЛИНАЦИОННОГО ТИПА В ЗОНАХ
ЛОКАЛИЗАЦИИ УПРУГИХ ДИСТОРСИЙ**

И.И. Суханов

Научный руководитель: профессор, д. ф.-м. н. А.Н. Тюменцев
Национальный исследовательский Томский Государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

**FIELDS OF STRESSES AND ENERGY OF DEFECTS OF DISCLINATIONAL TYPE IN ZONES
OF LOCALIZATION OF ELASTIC DISTORTIONS**

I.I. Suhanov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.N. Tyumentsev
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenina ave., 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

***Abstract.** Dipole and quadrupole configurations of wedge partial disclinations are considered. It's shown that the size of local internal stresses and their gradients can reach $P \approx E/50$ and $\partial P/\partial x \approx 0.02 \text{ nm}^{-1}$ respectively. The calculating experiment demonstrates that high values of local internal stresses and their gradients in the field of elastic distortions can be described by multipole configurations of partial disclinations like dipole/quadrupole. Mechanism of deformation localization in the region of elastic distortions is proposed.*

Введение. Одним из интенсивно развивающихся направлений физики прочности и пластичности является создание и исследование наноструктурных металлических материалов. К настоящему времени накоплены экспериментальные результаты, которые демонстрируют, что основным фактором, отвечающим за формирование в таких материалах уникальных физических и механических свойств, являются особенности их неравновесной структуры [1].

К сожалению, практически отсутствуют работы по теоретическому описанию и моделированию таких неравновесных состояний, которые оказывают непосредственное влияние, как на эволюцию микроструктуры, так и на уровень физико-механических свойств наноструктурных металлических материалов в различных условиях внешних воздействий.

В настоящей работе проведено моделирование дипольной и квадрупольной дисклинационных конфигураций в области упругих дисторсий и последующий теоретический анализ полей локальных внутренних напряжений и энергий этих конфигураций.

Материалы и методы исследования. Вычислительный эксперимент проводился в программной среде Maple 17. Моделирование полей напряжений проведено с использованием явного вида компонент тензора напряжений [2]. Для удобства расчета рассматривались только клиновые компоненты дисклинаций. Визуализация полей напряжений и пространственного распределения упругой энергии произведена с помощью графических средств пакета Maple 17. Анализ энергии проведен с использованием численного интегрирования по методу Монте Карло с точностью $\varepsilon = 0,005$.

Результаты. Для анализа процессов зарождения указанных выше нанополос и связанных с ними нанодиполей частичных дисклинаций значительный интерес представляют результаты работы [1], в которой установлено, что локализация деформации с формированием нанополос переориентации размерами менее 10 нанометров развивается уже в области упругой деформации. Они зарождаются на границах нанозерен динамической рекристаллизации никеля и представляют собой нанополосы с непрерывным характером разориентировок и упругой кривизной кристаллической решетки сотни град/мкм. На фронте их распространения, помимо нанодиполей частичных дисклинаций, обнаружены более сложные дисклинационные конфигурации – мультиполи или ансамбли взаимосвязанных квадруполей.

Теоретическая оценка величины давления $P = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ в зоне нанодиполя клиновых дисклинаций с экспериментально наблюдаемыми значениями $l \approx 6$ нм и $\varphi \approx 1^\circ$ показала, что максимальных значений ($P \approx \pm E/50$) эта величина достигает в плоскости залегания нанодиполя (рис. 1 а). Важной особенностью поля напряжений нанодиполя является также то, что максимальное значение тангенциальной компоненты тензора напряжений, под действием которой осуществляется сдвиг, находится перед фронтом его распространения. По-видимому, этим объясняется формирование в этой области квадруполя частичных дисклинаций, превращающего движущийся диполь в мультипольную конфигурацию.

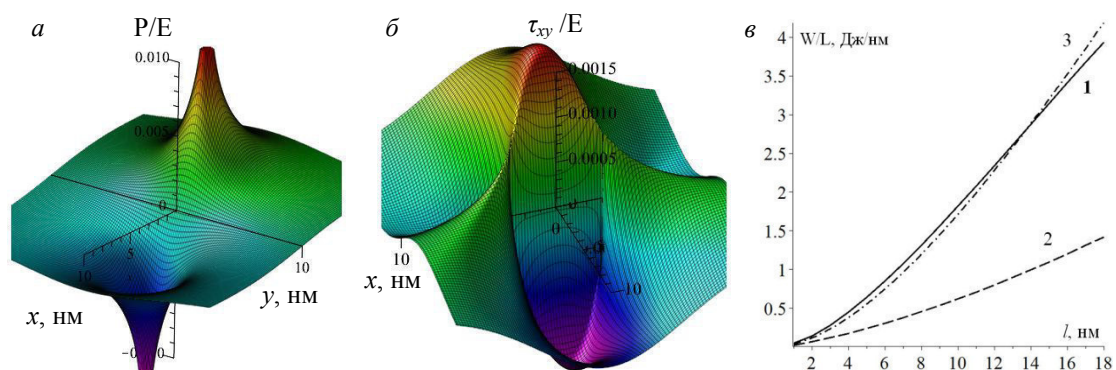


Рис. 1. Пространственное распределение давления (а) и компоненты τ_{xy} тензора напряжений (б) нанодиполя частичных клиновых дисклинаций; удельная упругая энергия нанодипольной (кривая 1), мультипольной (кривая 2) дисклинационных конфигураций и краевой дислокации с вектором Бюргерса $b \approx l \omega$ (кривая 3) (в)

Расчеты полей напряжений и энергий мультипольных конфигураций показали, что результатом суперпозиции и более интенсивных эффектов экранировки полей напряжений в ансамбле нанодиполей является увеличение градиентов и уменьшение величины локальных напряжений в окрестности мультиполя. Следствием такого уменьшения является кратное (примерно в 3 раза) снижение энергии дисклинационной конфигурации (рис. 1 в, кривая 2). Такое снижение, совместно с максимумом сдвиговой компоненты напряжений перед движущимся нанодиполем делает его эффективным концентратором напряжений, стимулирующим локализованный характер развития упругой деформации.

Как видно, нанодиполи частичных дисклинаций являются неустойчивыми конфигурациями. При этом структура области заторможенного упругого сдвига с поворотом как дефекта упруго деформированной среды может быть представлена не только нанодиполем частичных дисклинаций, но и ансамблем взаимосвязанных квадрупольей. Механизм продвижения такого дефекта при формировании нанополосы локализации деформации в этой области можно представить как многократную последовательность следующих структурных трансформаций:

- образование в зоне перед фронтом распространения нанополосы квадрупольей частичных дисклинаций со значительным снижением энергии дефекта;
- объединение этого квадрупольей с нанодиполем, движущимся под действием приложенных напряжений.

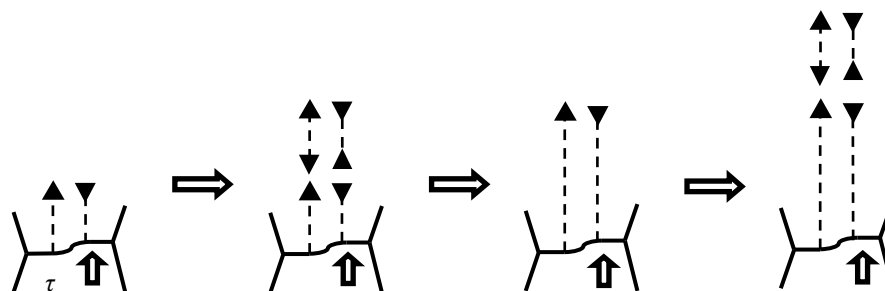


Рис. 2. Схема движения нанодиполя частичных дисклинаций

Заключение. Характерной особенностью зон локализации упругих дисторсий являются высокие значения диагональных компонент тензора напряжений с максимальными значениями в плоскостях залегания нанодиполей $P \approx E/50$.

Обнаружено значительное (кратное) уменьшение энергий мультипольных конфигураций по сравнению с нанодипольными в широком интервале их геометрических размеров. Такое снижение, совместно с максимумом сдвиговой компоненты напряжений перед движущимся нанодиполем делает его эффективным концентратором напряжений, стимулирующим локализованный характер развития упругой деформации.

Предложен механизм локализации деформации в области упругих дисторсий, представляющий собой квазипериодическую последовательность формирования и релаксации дисклинационных ансамблей различного типа с периодическим изменением энергии дефекта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-19-01374).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тюменцев А.Н. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикрорекристаллических и нанокристаллических металлических материалах / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 9. – С. 26–36.
2. Владимиров В. И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов //– Л.: наука, 1986. – 223 с.