

**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](mailto: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](mailto:suhanii@mail.ru)

***Abstract.** The theoretical study of elastically deformed state and analysis of deformation mechanisms in nanocrystals in the zones of localization of elastic distortions and related disclination type defects - dipole, quadrupole and multipole of partial disclinations are conducted.*

**Введение.** Представления о ротационных модах деформации, частичных дисклинациях, их диполях и мультиполях как носителях пластической деформации и переориентации кристаллической решетки в металлических сплавах развиваются с середины 70-х годов прошлого века [1]. При анализе микромеханизмов этих мод деформации, как правило, используются кооперативные дислокационные модели образования и эволюции дефектов дисклинационного типа [2]. В работах [3, 4] показана возможность формирования нанодиполей частичных дисклинаций в зонах локализации упругих дисторсий. Образование этих дефектов не связано с коллективными дислокационными явлениями. В настоящей работе проведено теоретическое исследование упруго – напряженного состояния и энергий дефектов дисклинационного типа в указанных выше зонах.

**Материалы и методы исследования.** Вычислительный эксперимент и визуализация полей напряжений и пространственного распределения упругой энергии проведены в программной среде Maple 15. Моделирование полей напряжений проведено с использованием явного вида компонент тензора напряжений [5]. Анализ зависимости энергии дисклинационных конфигураций (диполь / квадруполь) проведен с использованием численного интегрирования по методу Гаусса в адаптивной 30-точечной вариации, при оценках значений интегрирования применялось правило Кронрода по 61 точке.

**Результаты.** В процессе электронно – микроскопического исследования особенностей пластической деформации в субмикроструктурном никеле обнаружено явление локализации деформации в области упругих дисторсий с образованием полос переориентации с высокой (сотни град/мкм) упругой кривизной кристаллической решетки и нанодиполи частичных дисклинаций на фронте распространения этих полос [3, 4].

Теоретический анализ полей напряжений в окрестности нанодиполя клиновидных дисклинаций с экспериментально обнаруженными значениями  $l \approx 6$  нм (плечо нанодиполя) и  $\varphi \approx 1^\circ$  (угол переориентации) показал, что величины диагональных компонент тензора напряжений и градиентов этих напряжений достигают очень высоких значений при величинах  $P = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3 \approx \pm E/50$  и  $\partial P/\partial x \sim (10-20) E \text{ мкм}^{-1}$  ( $E$  – модуль Юнга). Важной особенностью поля напряжений нанодиполя является также то, что максимальные значения сдвиговых компонент тензора напряжений  $\tau_{xy}$ , под действием которых осуществляются сдвиги, локализованы перед фронтом движущегося диполя. На наш взгляд, это обстоятельство является значительным силовым фактором образования квадрупольных конфигураций на фронте распространения нанополос переориентации (рис. 1 в). Это приводит к более сложным мультипольным конфигурациям – ансамблям взаимодействующих между собой квадруполей.

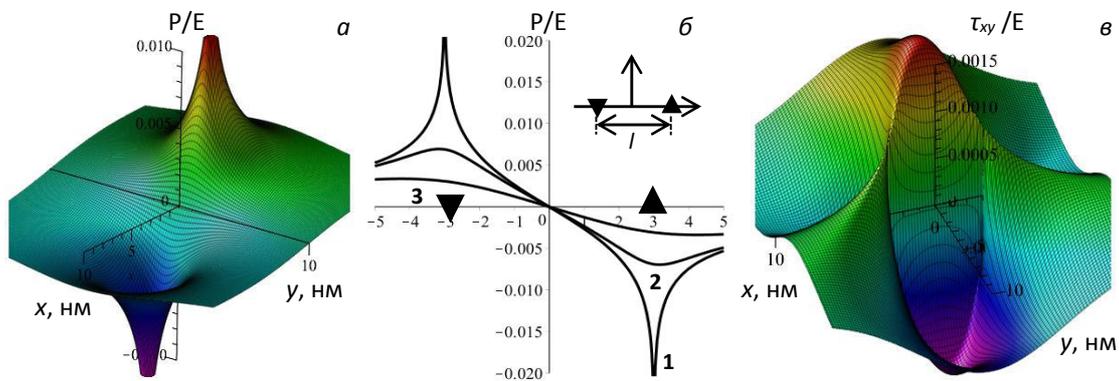


Рис. 1. а – пространственное распределение давления  $P = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$  нанодиполя частичных клиновидных дисклинаций с размером плеча  $l = 6$  нм и значением вектора Франка  $\omega \approx 1^\circ$ ; б – значения  $P$  на разных расстояниях ( $y$ ) от плоскости залегания диполя ( $y = 0$  – кривая 1,  $y = 1$  нм – кривая 2,  $y = 3$  нм – кривая 3); в – компоненты  $\tau_{xy}$  тензора напряжений.

Исходя из экспериментальных данных, для анализа полей напряжений в качестве исследуемой системы был выбран мультиполь с расстоянием между квадруполем и диполем  $m_1 = 6$  нм и длиной квадруполя  $m_2 = 12$  нм. Показано, что мультипольная конфигурация является сложной экранированной системой с преимущественной локализацией полей напряжений в области залегания дисклинаций с максимальными значениями  $P \approx E/50$ , близкими к таковым для нанодиполя.

Проведен сравнительный анализ распределения удельной упругой энергии дисклинационных конфигураций, формирующихся в процессе продвижения нанодиполя частичных дисклинаций (рис. 2). Из этих расчетов следует, что имеются значительные различия в энергиях как квадрупольных, так и мультипольных конфигураций по сравнению с нанодиполем частичных дисклинаций в широком интервале размеров (длин) квадруполей. При этом энергия мультипольных конфигураций оказывается в несколько раз меньше энергии нанодиполя (рис. 2 в).

Исходя из проведенного анализа особенностей упруго – напряженного состояния и энергий рассмотренных дисклинационных конфигураций, предложен механизм формирования нанополос локализованной упругой дисторсии.

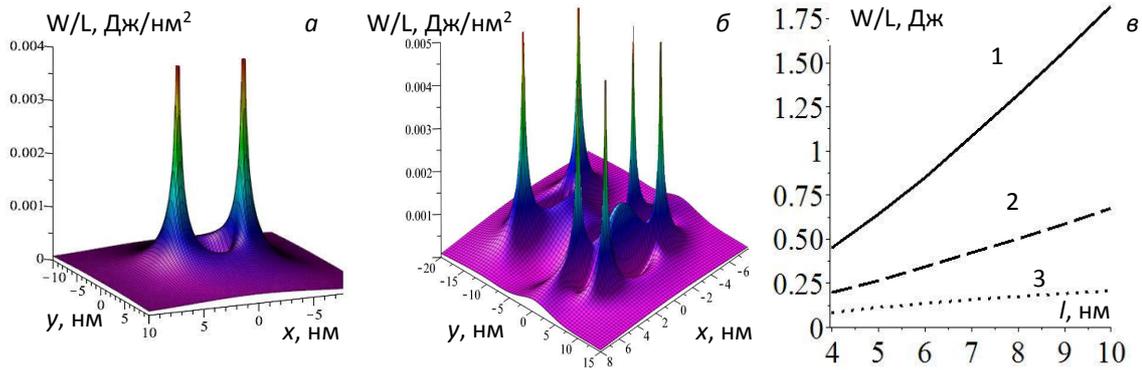


Рис. 2. Пространственное распределение удельной упругой энергии нанодиполя частичных дисклинаций с параметрами  $l = 6$  нм,  $\omega \approx 1^\circ$  (а) и мультиполя частичных дисклинаций с параметрами  $l = t_1 = 6$  нм,  $t_2 = 12$  нм  $\omega \approx 1^\circ$  (б); погонная энергия нанодиполя – кривая 1, квадруполь с фиксированным плечом  $t = 6$  нм – кривая 2 и мультиполя с фиксированными плечами  $t_1 = 6$  нм,  $t_2 = 12$  нм – кривая 3 (в).

**Заключение.** Показано, что характерной особенностью указанных выше дисклинационных конфигураций являются высокие значения диагональных компонент тензора напряжений и их градиентов  $P \approx E/50$  и  $\partial P/\partial x \approx 0,02 E \text{ нм}^{-1}$ . Специфической особенностью пространственного распределения сдвиговой компоненты тензора напряжений  $\tau_{xy}$  является локализация ее максимальных значений перед фронтом движения нанодиполя. Обнаружено значительное (кратное) уменьшение энергий квадрупольных и мультипольных конфигураций по сравнению с нанодипольными в широком интервале их геометрических размеров.

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

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вергазов А. Н. Характерные элементы дислокационной структуры в деформированном поликристаллическом молибдене / А. Н. Вергазов, В. А. Лихачев, В. В. Рыбин // Физика металлов и металловедение. – 1976. – Т. 42, № 1. – С. 146-154.
2. Владимиров В. И. Физическая природа разрушения металлов / В. И. Владимиров // – М.: Металлургия, 1984. – 280 с.
3. Тюменцев А.Н. Нанодиполи частичных дисклинаций как носители квазивязкой моды деформации и формирования нанокристаллических структур при интенсивной пластической деформации металлов и сплавов / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, № 3. – С. 55–68.
4. Тюменцев А.Н. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикроструктурных и нанокристаллических металлических материалах / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 9. – С. 26–36.
5. Владимиров В. И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов //– Л.: наука, 1986. – 223 с.