

УДК 620.191

PACS number(s): 61.72 Lk, 62.20 Hg

ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНА РЕЛАКСАЦІЯ ВНУТРІШНІХ НАПРУЖЕНЬ У ПРОЦЕСІ ПОВЗУЧОСТІ ЛУЖНОГАЛОЇДНИХ МОНОКРИСТАЛІВ

Д. Мацокін, І. Пахомова

*Харківський національний університет ім. В.Н.Каразіна
майд. Свободи, 4, 61077 м. Харків, Україна*

З'ясовано основні механізми релаксації внутрішніх напружень у лужногалогідних монокристалах: прорив дислокаційної стінки дислокаціями, руйнування дислокаційної стінки, що містить асиметричну ділянку, переорієнтація ділянок монокристала та поява тріщин. Виконано комп'ютерне моделювання прориву дислокаційної стінки скупченням крайових дислокацій та руйнування дислокаційної межі. Пояснено немонотонний характер високотемпературної пластичної деформації.

Ключові слова: повзучість, динаміка дислокацій, зміцнення, сидяча дислокація.

Фізика високотемпературної пластичної деформації твердих кристалічних тіл продовжує бути об'єктом уваги багатьох вчених. Вплив дислокаційних ансамблів, їх розподіл в об'ємі кристала та еволюція субструктури кристала безпосередньо впливають на механічні властивості кристалів (межу плинності та міцності, коефіцієнти зміцнення та роззміцнення). Безпосередньо спостерігати за динамікою окремих дислокацій та їх скупчень за високих температур в масивних кристалах практично неможливо (це можна робити лише у тонких зразках за допомогою електронного мікроскопа). Завдяки новим комп'ютерним технологіям нині доцільно поєднувати експериментальні дані з математичним моделюванням фізичних процесів, що дає змогу до більш глибокого розуміння процесів, що відбуваються у дислокаційній підсистемі кристала.

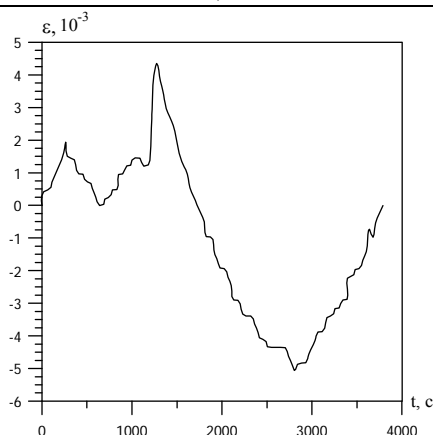


Рис. 1. Крива повзучості монокристала KCl після зменшення зовнішніх напружень від $\sigma_1 = 0,8$ МПа до $\sigma_2 = 0,2$ МПа, $T = 650$ °С

Експериментальна частина досліджень виконувалась на лужногалоїдних монокристалах NaCl і KCl, які деформувались в інтервалі температур $0,6-0,92 T_{пл}$ у режимі повзучості за схемою одновісного стискання. Зразки були виготовлені у вигляді прямокутних призм $3 \times 5 \times 10$ мм. Початкова густина дислокацій $\rho_0 \approx 10^5 \text{ см}^{-2}$. Вивчали початкову (нестационарну) стадію повзучості, коли зміни в дислокаційній підсистемі найсуттєвіші. Було одержано значення середніх зворотних внутрішніх напружень σ_i залежно від рівня зовнішніх напружень та температури, для чого було використано методику швидкої зміни прикладеного зовнішнього напруження від σ_1 до σ_2 (інтервал напружень $\sigma_1: 0,4-1,2$ МПа) [1]. Залежно від співвідношення значень σ_2 та σ_i було одержано різні за зовнішнім виглядом діаграми деформації $\varepsilon(t)$. Якщо $\sigma_2 > \sigma_i$, то простежено продовження “позитивної” деформації (у напрямку прикладеного напруження), але з меншою швидкістю, ніж при напруженні σ_1 . Якщо $\sigma_2 \approx \sigma_i$ експериментально спостерігався немонотонний стрибкоподібний характер деформації (рис. 1). На наш погляд, такий вигляд діаграм деформації можна пояснити нерівномірною релаксацією внутрішніх зворотних напружень у кристалах.

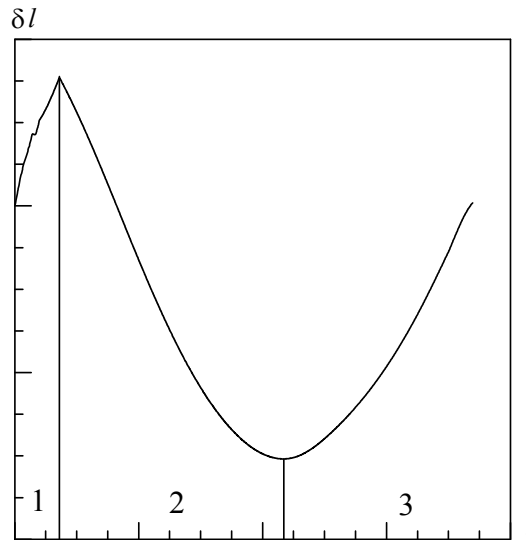


Рис. 2. Розрахована деформаційна крива при прориві дислокацій крізь дислокаційну межу

Один із можливих механізмів зменшення σ_i – прорив дислокаційної стінки рухомими дислокаціями. Щоб довести, що прорив дислокаційної стінки призводить до стрибкоподібного характеру пластичної деформації, було розроблено математичну модель цього процесу. Ми врахували не лише консервативний рух дислокацій, але й можливість їх дифузійного переповзання за високих температур. Параметри моделі були узяті для монокристалів NaCl.

Було змодельовано поведінку окремого скупчення випадково розташованих рухомих крайових дислокацій біля стінки крайових нерухомих дислокацій. Така модель може бути використана, коли радіус кривизни дислокаційних ліній значно перевищує середню відстань між дислокаціями. Тоді дислокації можна вважати в цілому прямолінійними, а повну дислокаційну сукупність при дослідженні його еволюції можна розбити на підсукупності ансамблі, кожний з яких є системою паралельних дислокаційних ліній. Відомо, що дислокації рухаються під дією ефективних напружень $\sigma_{eff} = \sigma - \sigma_i$, де σ – зовнішні напруження. Завдяки цьому рухові відбувається деформація кристала. На рис. 2 показано криву повзучості, отриману за допомогою комп'ютерного моделювання, а на рис. 3 – послідовні стадії еволюції дислокаційного скупчення. Вважаємо, що скид напруження до σ_2 здійснили у початковий момент, тоді як до цього часу в процесі повзучості (під дією σ_1) у кристалі виникли дислокаційні скупчення поблизу стопорів (наприклад, дислокаційних стінок). Криву (рис. 2) можна уявно поділити на три ділянки. На першій деформація відбувається у “позитивному” напрямі прикладеного зовнішнього напруження. Дислокації, які розташовані у голові скупчення прориваються крізь межу та рухаються далі під дією зовнішнього напруження, доки не зустрінуть іншу перешкоду, яку не можуть подолати (рис. 3, a-в). На другій ділянці починає активно рухатися решта дислокацій: “передні” в бік стопора (де й зупиняються), “задні” у протилежний бік (де немає перешкод), що й викликає “негативну” деформацію (рис. 3, г-д). На третій ділянці деякі

дислокації, що вийшли з поля напружень скупчення, рухаються у “позитивному” напрямі. Цей процес відбувається паралельно з появою нових дислокацій, що у підсумку знову дає “позитивну” деформацію (рис. 3, *д-е*).

Порівнюючи криві повзучості, які отримані експериментально і за допомогою моделі, бачимо, що вони якісно збігаються, якщо є прорив скупчення рухливих дислокацій через масив закріплених дислокаційних стінок. Отже, немонотонності пластичної течії можна пояснити проходом вже утворених дислокацій крізь закріплені малокутові границі, що призводить до стрибкоподібного зменшення внутрішніх напружень. Для того, щоб цей процес давав суттєвий внесок у повзучість (що можна спостерігати експериментально), таке подолання перешкод повинне або відбуватися локально великим числом дислокацій, або майже одночасно поодинокими дислокаціями у різних місцях об’єму зразка. Враховуючи, що одна дислокація у кристалі розмірами $3 \times 3 \times 3$ мм та з середнім розміром блоку ~ 100 мкм при русі всередині блоку дає деформацію зразка $\sim 10^{-13}$ м, для того щоб експериментально побачити цей ефект (чутливість передавача $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ м) при одночасному протіканні таких процесів в усіх блоках, у кожному з них у деформації мають брати участь $\sim 10^2$ дислокацій.

Другим важливим ефектом, який впливає на немонотонність пластичної деформації, є розсип дислокаційних границь, коли поодинокі дислокації, що вийшли з границь, рухаються крізь блок та вносять вклад у деформацію [2]. Під час розгляду розсипу границь особливу увагу звернено на руйнування асиметричної ділянки дислокаційної границі, тому що такі ділянки з’являються завжди у разі перетину границь, що формуються в процесі полігонізації. Було визначено стійкі, тобто найбільш енергетично вигідні, конфігурації асиметричних ділянок дислокаційних границь [3].

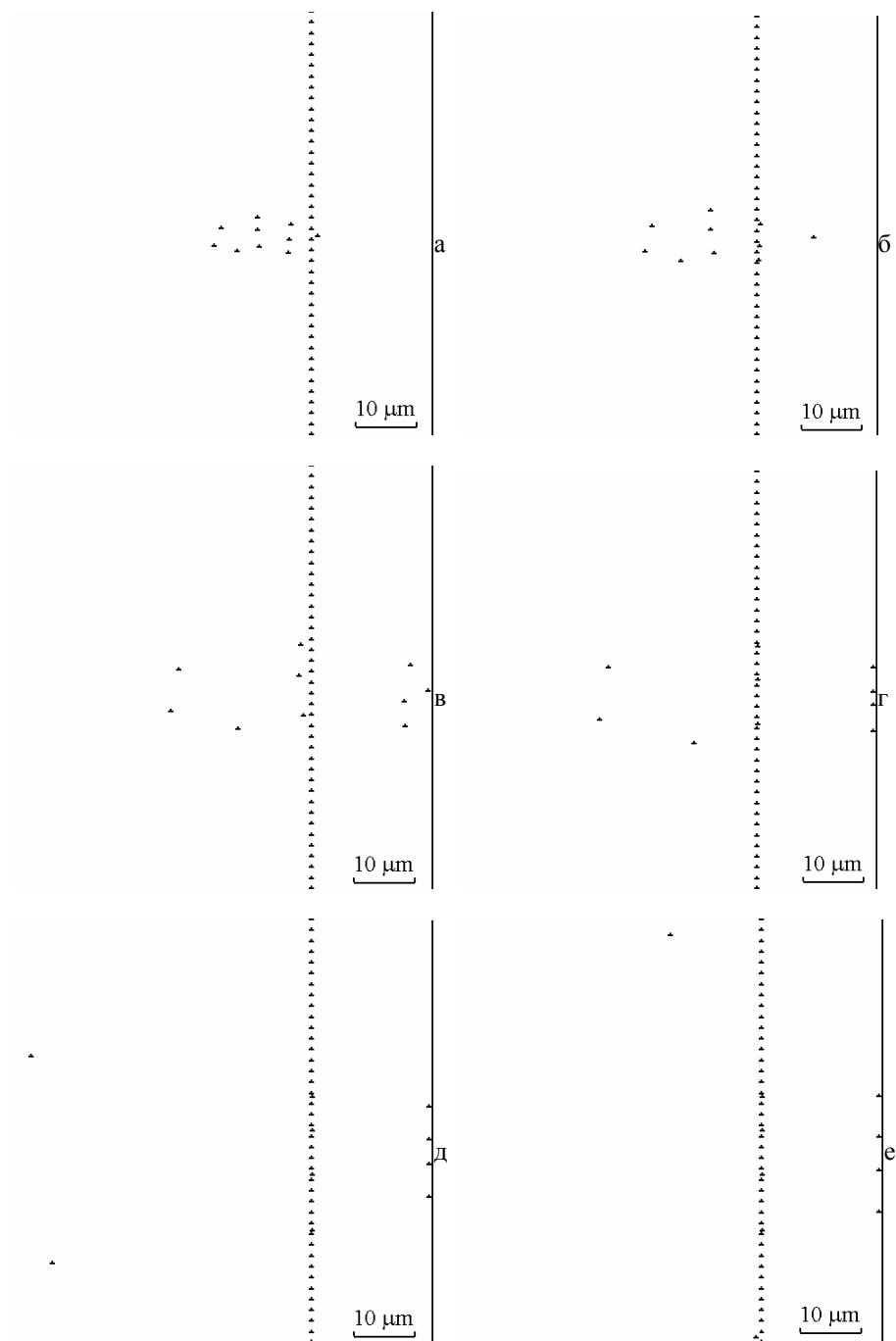


Рис. 3. Послідовні стадії еволюції дислокаційного скупчення біля нерухомої симетричної дислокаційної границі

Для розв'язання цієї задачі було побудовано енергетичний рельєф функції $U(x, y)$. Ця функція, нормована на одиницю довжини крайової дислокації, така, що сила, яка діє на одиницю довжини дислокації, $\vec{F} = -\text{grad}U$. Аналізуючи рельєф поверхні цієї функції, можна встановити мінімальні та максимальні значення енергетичних бар'єрів, які утворюються дислокаціями різних систем ковзання (з векторами Бюргерса $\vec{b}_1 = (b, 0, 0)$ та $\vec{b}_2 = (0, b, 0)$), що розташовані у дислокаційній стінці. Рух дислокації, розміщеної поблизу стінки, спрямований в бік зменшення $U(x, y)$. На рис. 4 побудовано рельєф функції $U(x, y)$ поблизу асиметричної ділянки, яка складається з чотирьох дислокацій з вектором Бюргерса \vec{b}_2 .

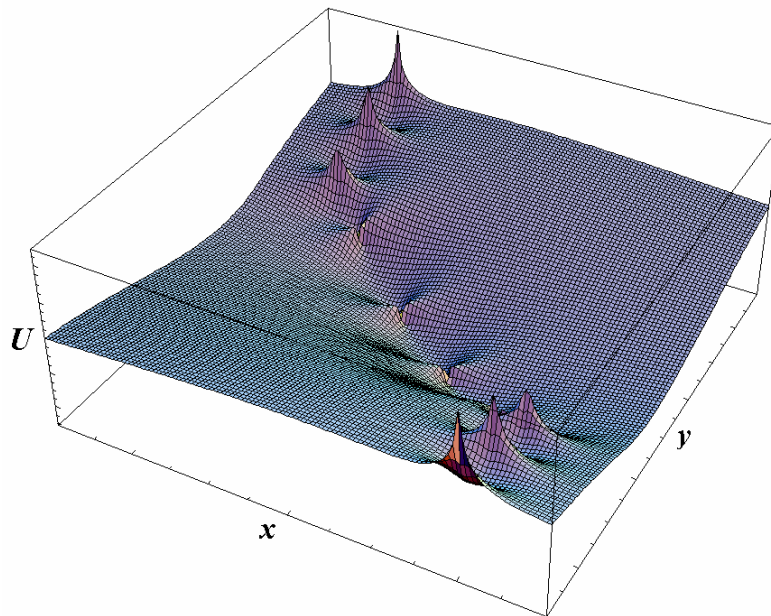


Рис. 4. Поверхня енергетичної функції асиметричної ділянки дислокаційної стінки

На рис. 5 наведено діаграму напрямів руху дислокації з вектором Бюргерса \vec{b}_1 біля асиметричної ділянки, яка складається з трьох дислокацій з \vec{b}_2 . Аналізуючи такі діаграми та відповідні енергетичні рельєфи, було встановлено, що є дві стійкі конфігурації асиметричної ділянки: чергування на рівній відстані дислокацій з \vec{b}_1 та \vec{b}_2 та попарне гранично близьке розташування таких дислокацій (з можливістю дислокаційної реакції і утворенням сидячої дислокації).

Визначивши можливі стійкі конфігурації асиметричних ділянок дислокаційних границь, було з'ясовано послідовність руйнування асиметричної дислокаційної стінки, тобто визначені ті дислокації, яким енергетично вигідно першими залишити таку границю.

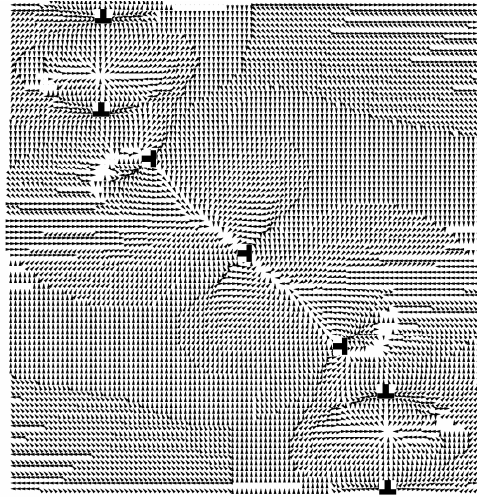


Рис. 5. Площинна діаграма можливих напрямків руху дислокації (стрілки) поблизу асиметричної ділянки дислокаційної границі

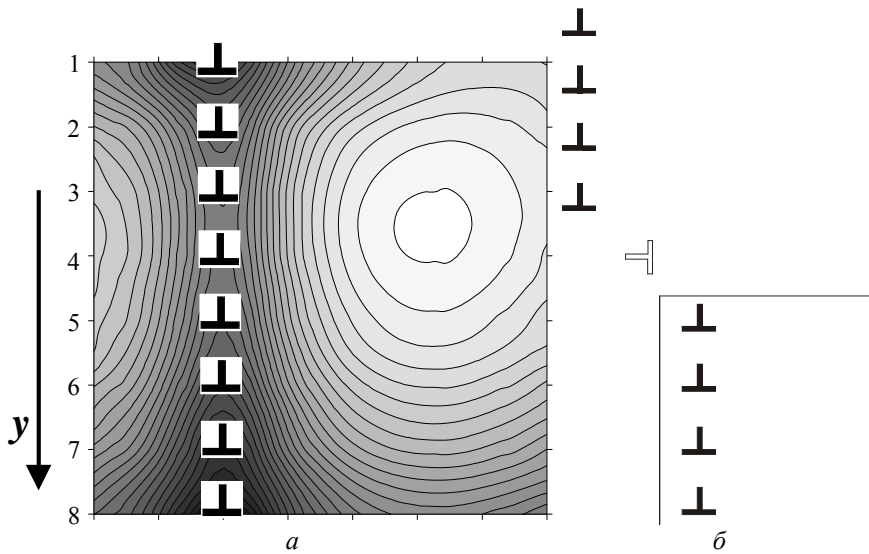


Рис. 6. Контури рівної енергії дислокаційної границі (а), схема границі (б)

Із рис. 6, а, де наведено контури рівних енергій для асиметричної ділянки, схему якої зображено на рис. 6, б (контури наведено лише для нижньої частини симетричної ділянки дислокаційної стінки), видно, що руйнування дислокаційної стінки відбуватиметься на відстані від центру асиметричної ділянки, де значення $U(x, y)$ найменше (темна частини рисунка). Видно, що асиметрична ділянка сама не є осередком руйнування дислокаційної стінки. Якщо ж дислокації не мають змоги переповзати (при низьких температурах) і можуть рухатись лише у своїх площинах ковзання, першою під дією зовнішнього напруження вийде зі стінки

дислокація, у якій найнижча різниця поміж максимумом $U_{\max}(x, y)$ в її площині ковзання у напрямку руху та значенням $U(x, y)$ у вихідній точці (рис. 7).

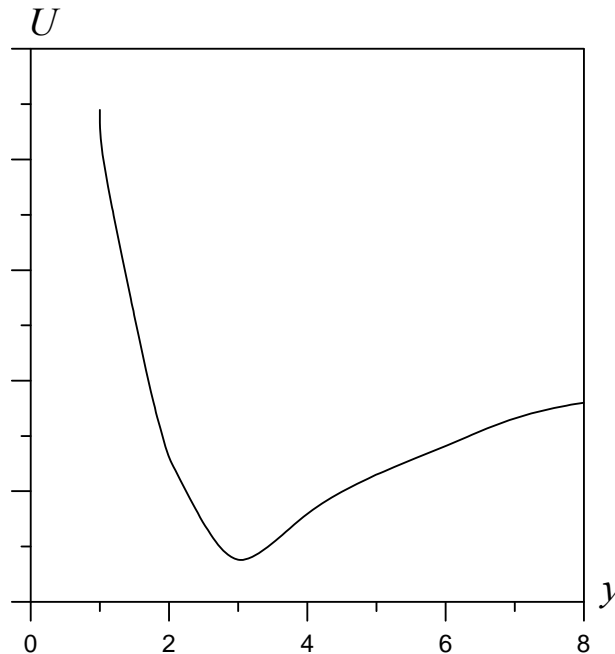


Рис. 7. Висота потенційного бар'єра який має подолати дислокація, що розташована у стінці (рис. 6)

Обчислено вплив кількості дислокацій з вектором Бюргерса \vec{b}_2 в асиметричній частині дислокаційної стінки на величину напруження, яке необхідне для необоротного руйнування дислокаційної стінки. Результати комп'ютерного моделювання з урахуванням переповерхання дислокацій свідчать, що за однакової відстані між симетричними ділянками дислокаційної границі значення критичного зсувного напруження $\sigma_{\text{кр}}$, необхідного для руйнування дислокаційної стінки з асиметричною ділянкою, зменшується зі збільшенням кількості дислокацій з вектором Бюргерса \vec{b}_2 на асиметричній ділянці. На рис. 8, а наведено залежність $\sigma_{\text{кр}}$ від кількості відкріплених від стопорів дислокацій на симетричній ділянці для стінок, що містять різну кількість дислокацій з \vec{b}_2 на асиметричній ділянці. На рис. 8, б показано схему відповідних ділянок. Отож, дислокації з \vec{b}_2 зменшують сили зв'язку, що діють усередині симетричних ділянок, утворених дислокаціями з векторами Бюргерса \vec{b}_1 .

Подальшим кроком було визначення співвідношення між $\sigma_{\text{кр}}^{\text{H}}$ за низьких температур (дислокації не можуть залишати свої площини ковзання) та $\sigma_{\text{кр}}^{\text{B}}$ за високих температур (дислокації можуть переповерхати). Результати комп'ютерного

моделювання засвідчують, що $\sigma_{кр}^H = (1,5 - 2)\sigma_{кр}^B$, тобто руйнування дислокаційних стінок з асиметричними ділянками відбувається легше за високих температур, ніж за низьких, як і руйнування симетричних дислокаційних стінок.

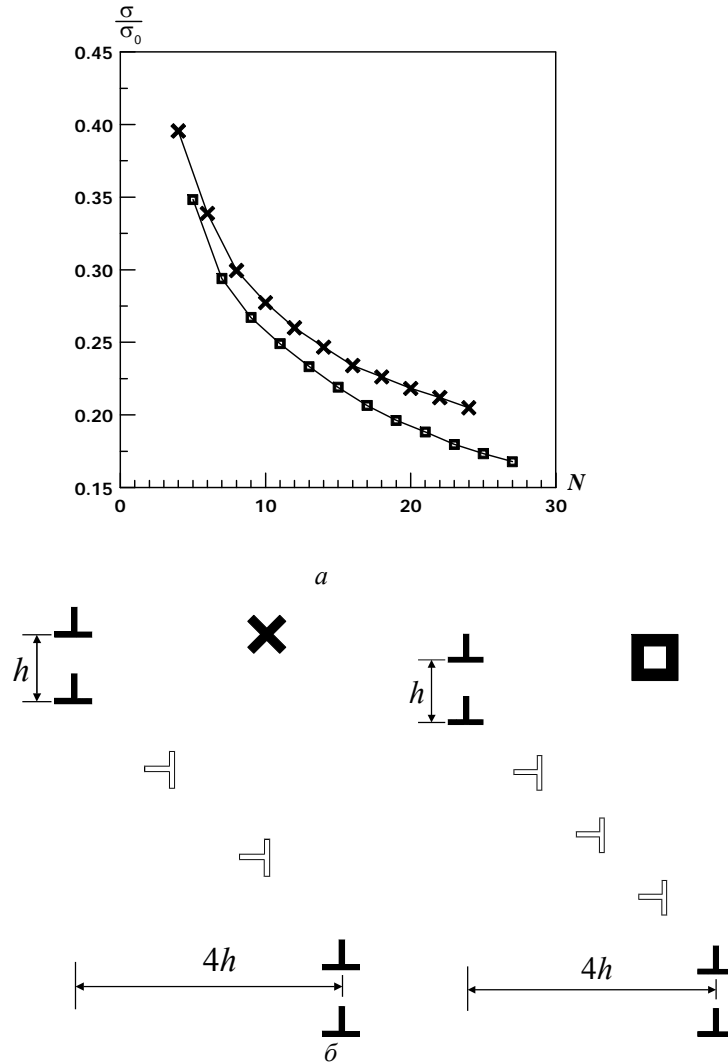


Рис. 8. Залежність критичного зсувного напруження руйнування дислокаційної стінки з асиметричною ділянкою від числа рухомих дислокацій. Нормована на величину напруження σ_0 , необхідного для руйнування симетричної границі

Третя можливість релаксації напружень – це локальна переорієнтація кристалічних площин. У процесі повзучості до зразків було прикладене зовнішнє напруження, яке сприяє утворенню нових дислокацій. Ці дислокації можуть рухатись, поки не потраплять на стопор (атоми домішок, нерухомі сидячі

дислокації, дислокаційні границі та ін.). Водночас, дислокації продовжують народжуватись, і в місцях стопорів виникають скупчення дислокацій. Це призводить до збільшення на цій ділянці внутрішніх напружень. Зокрема, вздовж однієї границі може утворитись кілька дислокаційних скупчень, які не можуть прорватись крізь границю, а спричинено локальну переорієнтацію. Це може бути в тому випадку, коли по обидва боки від границі відбувається скупчення дислокацій з антипаралельними векторами Бюргерса, тобто ситуація, подібна до формування смуг скиду [4]. Такі ділянки спостерігаються експериментально за допомогою оптичного мікроскопу за різницею в контрасті відбитих променів (рис. 9) та рентгенотопографічним методом Фудживара [5] із дроблення окремої дифракційної плями (рис. 10).

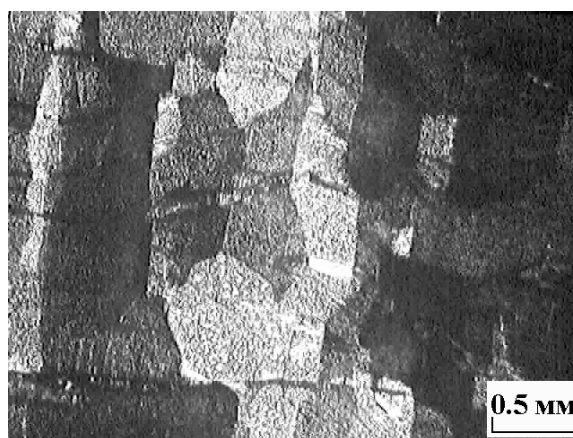


Рис. 9. Фотографія ділянок переорієнтації монокристулу NaCl, деформованого в процесі повзучості

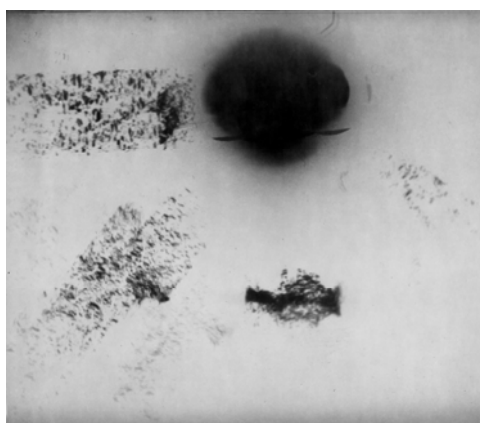


Рис. 10. Фудживарограма кристала NaCl після повзучості



Рис. 11. Тріщини в кристалах КСІ

Нарешті, четверта можливість релаксації внутрішніх напружень – утворення тріщин (рис. 11) в умовах, коли рух дислокацій у системах легкого ковзання неможливий, або може відбуватися у разі великих зовнішніх напружень [3].

1. *Ahlquist G.N., Nix W.D.* The measurement of internal stresses during creep of Al and Al-Mg alloys // *Acta Metallurgica*. 1971. Vol. 19. N 4. 373 p.
2. *Гегузин Я.Е., Мацюкін В.П., Каролинский А.М.* Исследование очагов россыпи дислокационных границ в щелочно-галлоидных кристаллах // *Укр. фіз. журн.* 1971. Т. 16. № 4. С. 539–546.
3. *Мацюкін Д.В., Пахомова И.Н., Мацюкін В.П.* Асимметричный участок дислокационной границы как очаг её разрушения // *Вісн. Харків. ун-ту. Сер. фіз.* 2003. № 600. С. 89–93.
4. *Фридель Ж.* Дислокации // М.: Мир. 1977. 644 с.
5. *Fujiwara T., Koizumi K., Hirose M.* Determination of crystal lattice planes by which the “white-black” planes might be produced // *Memoirs of the Defense Academy Japan*. 1965. Vol. 4. N 4. 361 p.

**HIGH-TEMPERATURE RELAXATION OF INTERNAL STRESSES DURING
CREEP IN ALKALI-HALIDE SINGLE CRYSTALS****D. Matsokin, I. Pakhomova***V. Karazin Kharkov National University
Svobody Sq., 4, 61077 Kharkov, Ukraine*

The main relaxation mechanisms of internal stresses in alkali-halide single crystals is found out. They are: break of movable dislocations through dislocation wall, destruction of asymmetric dislocation wall, reorientation of single crystal's part, crack appearance. The break of edge dislocation accumulation through dislocation wall is modeled by computer. Nonmonotonic nature of high-temperature plastic deformation is explained.

Key words: creep, dislocation dynamics, hardening.

Стаття надійшла до редколегії 17.05.2006

Прийнята до друку 09.06.2008