

стической деформации. – М.: Металлургия, 1982. – 584 с. 3. Остриков О.М. Напряженное состояние у клиновидного двойника при дисбалансе плотностей двойникоующих дислокаций // Прикладная механика и техническая физика. – 2002. Т. 43, №4. – С. 180 - 182. 4. Пинчук А.И. Влияние электромагнитного поля на пластическую деформацию двойникованием кристаллов висмута // Автореф. дис... канд. физ.-мат. наук. - Минск, 1998. - 18 с. 5. Остриков О.М. Двойникование ионно-имплантированных монокристаллов висмута // Автореф. дис. ... к. ф. - м. н. - Минск, 1999. 17 с. 6. Остриков О.М., Дуб С.Н. Влияние скорости нагружения на механизм пластической деформации в висмуте // Журнал технической физики. - 2001. Т. 71, №5. – С. 44 - 46. 7. Остриков О.М. Физические закономерности двойникования при воздействии внешних ортогональных друг другу электрических и магнитных полей, прикладываемых к монокристаллам висмута, облученных ионами бора // Журнал технической физики. - 2000. Т. 70, № 12. – С. 39 - 42. 8. Остриков О.М. Магнитопластический эффект при двойниковании монокристаллов висмута // Прикладная механика и техническая физика. - 2001. Т. 42, № 3. – С. 159 - 161. 9. Савенко В.С. Влияние импульсов тока на двойникование металлических кристаллов // Автореф. дис. ... к. ф. - м. н. - Минск, 1982. 16 с. 10. Косевич А.М., Бойко В.С. Дислокационная теория упругого двойникования кристаллов // Успехи физических наук. - 1971. - Т. 104, № 2. - С. 101 - 255. 11. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.

УДК 548.24

Остриков О.М., Василевич Ю.В.

АНАЛИЗ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ У ВЕРШИНЫ КЛИНОВИДНОГО МЕХАНИЧЕСКОГО ДВОЙНИКА

Белорусский национальный технический университет
Минск, Беларусь

Изучено напряженное состояние у вершины клиновидного механического двойника. Установлено, что компоненты напряжения знакопеременны не только в зависимости от баланса двойникоующих дислокаций на двойниковых границах, но и от соотношения между проекциями на оси декартовой системы координат отрезка, соединяющего две соседние дислокации.

Механические клиновидные двойники, как правило, возникают у концентраторов напряжений в условиях ориентационного запрета на скольжение или при его затруднении в связи с температурными условиями деформирования. В настоящее время накоплено большое количество экспериментального материала, который позволяет полагать хорошую изученность явления двойникования кристаллов [1 - 2]. Однако теоретические аспекты двойникования еще требуют своего развития. Так, например, существующая в настоящая время дислокационная модель тонкого двойника обладает рядом существенных ограничений, не позволяющими анализировать напряженное состояние внутри двойника [1]. Поэтому развитие теоретических модельных представлений о двойниковании кристаллов представляется целесообразным и актуальным.

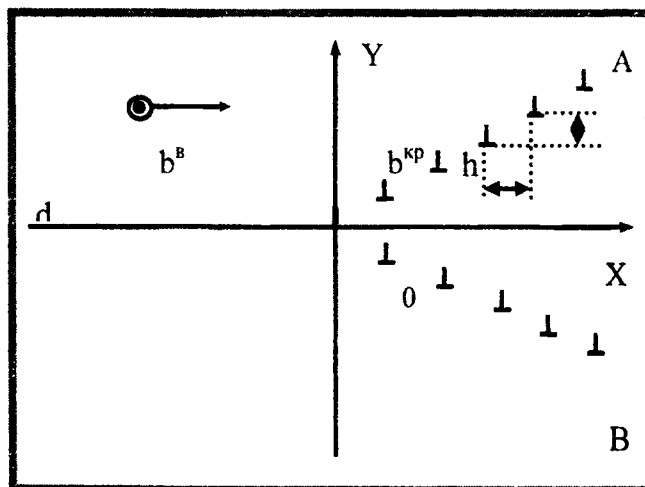


Рисунок 1

Цель данной работы - исследовать напряженное состояние у вершины клиновидного двойника. При этом масштабный уровень, на котором осуществляется исследование напряженного состояния, должен учитывать расстояния между двойникующимися дислокациями.

Двойникующиеся дислокации являются частичными дислокациями [1]. Поэтому их вектор Бюргера можно разложить на винтовую b_v и краевую b_{kp} составляющие. Будем моделировать клиновидный двойник скоплением дислокаций видом, представленным на рис. 1. Пусть винтовая и краевая составляющие вектора Бюргера ориентированы так, как это показано на рис. 1. Среду, в которой находятся дислокации, будем считать однородной и изотропной.

Тогда напряжения, у представленной на рис. 1 группы дислокаций будут, определяться по формулам

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

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ - нормальные, а σ_{xy}, σ_{yz} - скалывающие напряжения, вызванные двойникующимися дислокациями; N и M - номер и число дислокаций на каждой из границ двойника; μ - модуль сдвига; ν коэффициент Пуассона; d и h - проекции на оси OX и OY, соответственно, отрезка, соединяющего две соседние дислокации (рис. 1).

В плане анализа напряжений и деформаций у клиновидного двойника представляет интерес их рассмотрение в особых точках двойника. В качестве одной из таких особых точек можно выделить вершину двойника. Удалим из вершины двойника двойникующуюся дислокацию и рассмотрим напряженное состояние, создаваемое в этой точке дислокациями двой-

никовых границ. Такое удаление дислокации приведет к тому, что суммирование по n в (1) будет вестись не от нуля, а от единицы. Чтобы определить напряжения и деформации в вершине двойника, необходимо в (1) принять $x = y = 0$. Тогда получим [1,2]

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}(0,0) &= -\frac{\mu b_{kp}}{2\pi(1-\nu)} \frac{h(3d^2 + h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\ \sigma_{yy}(0,0) &= \frac{\mu b_{kp}}{2\pi(1-\nu)} \frac{h(d^2 - h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\ \sigma_{xy}(0,0) &= -\frac{\mu b_{kp}}{2\pi(1-\nu)} \frac{d(d^2 - h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\ \sigma_{zz}(0,0) &= -\frac{\mu b_{kp}\nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{h}{d^2 + h^2} \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\ \sigma_{xz}(0,0) &= -\frac{\mu b_n}{2\pi} \frac{h}{d^2 + h^2} \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right), \\ \sigma_{yz}(0,0) &= -\frac{\mu b_n}{2\pi} \frac{d}{d^2 + h^2} \left(\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m} \right),\end{aligned}\quad (2)$$

В случае, когда $N=M$, из (2) имеем

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= 0, \quad \sigma_{yy} = 0, \quad \sigma_{zz} = 0, \quad \sigma_{xz} = 0, \\ \sigma_{xy} &= -\frac{\mu b_{kp}}{\pi(1-\nu)} \frac{d(d^2 - h^2)}{(d^2 + h^2)^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n}, \\ \sigma_{yz} &= -\frac{\mu b_n}{\pi} \frac{d}{d^2 + h^2} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n},\end{aligned}\quad (3)$$

Из-за симметричного расположения дислокаций на двойниковых границах при $N=M$ и постоянстве параметров d и h , компоненты тензора напряжений σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} и σ_{xz} равны нулю. Это связано с тем, что напряжения дислокаций на двух двойниковых границах скомпенсированы. В то же время, из-за расположения на двойниковых границах дислокаций одного знака напряжения σ_{xy} , σ_{yz} удваиваются. Рассмотрим эти деформации и напряжения более подробно.

Для численной обработки результатов удобно использовать величину

$$\eta_{ij}(d, h) = \frac{\sigma_{ij}(d, h)}{\sigma_{ij}^{(0)}}, \quad (4)$$

где

$$\sigma_{ij}^{(0)} = A_{ij}/L, \quad (5)$$

$$A_{xx} = A_{yy} = A_{xy} = \frac{\mu b_{kp}}{2\pi(1-\nu)}, \quad A_{zz} = \frac{\mu\nu b_{kp}}{2\pi(1-\nu)}, \quad A_{zx} = A_{zy} = \frac{\mu b_n}{2\pi}, \quad L \text{ длина}$$

двойника. Это позволяет не привязываться к численным значениям величины A_j . При этом не ущемляется общность полученных результатов, так как конфигурация полей напряжений σ_j идентична конфигурации τ_j .

На рисунке 2 представлена зависимость η_{xy} от числа двойникующих дислокаций на двойниковых границах N при $d = 0,15$ мкм.

$$\eta_{xy}(N).$$

С ростом N исследуемые напряжения и деформации монотонно растут по модулю. При больших значениях N скорость роста величины напряжений и деформаций уменьшается. Это связано с тем, что растет длина двойника, а вместе с ней увеличивается расстояние от вершины двойника до прибавляемых к его устью дислокаций, которые начинают вносить свой вклад в напряженное и деформационное состояние в вершине двойника.

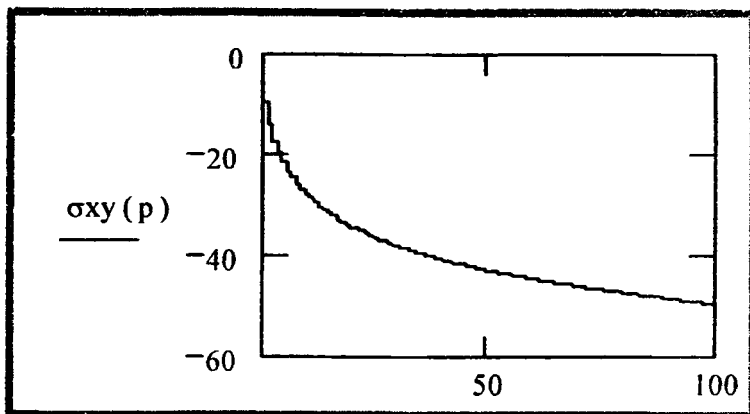


Рисунок 2

При $N \neq M$ напряжения σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xz} будут зависеть от параметра:

$$\Delta = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \sum_{m=1}^M \frac{1}{m}. \quad (6)$$

При $N < M$ имеем $\Delta < 0$. Это значит, что если на границе OB (рис. 1) дислокаций больше, чем на границе OA , то напряжения σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xz} будут менять знак своей величины на противоположный.

Для анализа зависимости напряжений и деформаций у вершины клиновидного двойника от параметров d и h , рассмотрим соотношения

$$\frac{\eta_{ij}(d, h)}{\Delta}, \frac{\eta_{ij}(d, h)}{\Sigma}, \quad (7)$$

где

$$\Sigma = \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{m}. \quad)$$

Зависимости (7) представлены на рисунке 3.

Напряжения σ_{xx} у вершины двойника увеличиваются по модулю с уменьшением расстояния между дислокациями (рис. 3). Скорость роста напряжений при этом увеличивается при меньших расстояниях между дислокациями. Максимальные значения напряжения достигают при $d \approx 1$ и $h \approx 1$.

Совершенно иначе у вершины двойника ведут себя напряжения σ_{yy} в зависимости от параметров d и h . Следует отметить, что данные напряжения меняют свой знак не только от дисбаланса плотности двойникующих дислокаций на противоположных двойниковых границах, но и от соотношения между параметрами d и h . Причем, при $d < 2$ мкм напряжения σ_{yy} отрицательны, а при $d > 2$ – положительны.

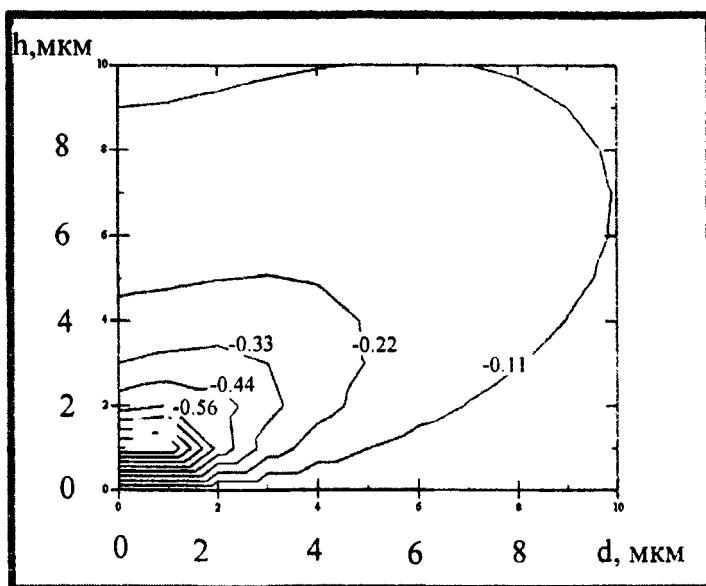


Рисунок 3

Скалывающие напряжения σ_{xy} так же, как и напряжения σ_{yy} , знакопе-

Скальвающие напряжения σ_{xy} так же, как и напряжения σ_{yy} , знакопеременны по отношению к параметрам d и h . Однако, в этом случае при $d < 2$ мкм напряжения σ_{xy} положительны, а при $d > 2$ – отрицательны.

Напряжения σ_{zz} и σ_{xz} в зависимости от параметров d и h имеют схожий вид. Отличие наблюдается в численных значениях изолиний в одинаковых областях зависимостей от d и h . При малых значениях этих параметров напряжения больше по величине, чем при больших значениях d и h . Знак напряжения σ_{xz} и σ_{xz} в рассматриваемом интервале значений d и h не меняют.

Конфигурация напряжений такая же, как и у напряжений σ_{zz} и σ_{xz} , но в отличие от них контуры изолиний напряжений σ_{yz} замыкаются на оси d , в то время как у напряжений σ_{xz} и σ_{xz} - на оси h .

Таким образом, на основании дислокационной мезоскопической модели исследовано напряженное состояние у вершины клиновидного двойника. Показано, что напряжения существенно зависят от баланса плотностей двойникоующих дислокаций на противоположных двойниковых границах. Знак напряжения у вершины двойника меняют не только с изменением баланса плотностей дислокаций на границах, но и при определенном соотношении между параметрами d и h .

ЛИТЕРАТУРА

1. Классен-Неклюдова М.В. Механическое двойникование кристаллов. - М.: АН СССР, 1960. - 262 с. 2. Остриков О.М. Использование полипараксилиленовых тонких пленок при исследовании пластической деформации монокристаллов висмута // Прикладная механика и техническая физика. - 2006. - Т. 47, № 4. - С. 162 - 166.

УДК 539.1

Колешко В.М., Дейнак Д.А.

НАНОУГЛЕРОД: СТРУКТУРА, СВОЙСТВА

*Белорусский национальный технический университет
Минск, Беларусь*

Нанотехнология – наука об изготовлении и свойствах элементов техники на атомном и молекулярном уровне. Важнейшим элементом этой науки является углерод, а именно его аллотропные формы – нанотрубки и фуллерены. Углеродные нанотрубки являются уникальным материалом, позволяющим проверять теории квантовых явлений, и обладающим уникальными и неповторимыми свойствами. Именно эти свойства привлекают внимание ученых всего мира, с целью создания приборов и машин на наноуровне.

Углерод – имеет несколько аллотропных форм, некоторые из них известны с древних времен (алмаз, графит), а некоторые открыты только 10-20 лет назад (графины, фуллерены, нанотрубки) (рис. 1) [1-10]. Аллотропия, от греч. *allos* - иной, *tropos* - поворот, свойство, существование одного и того же элемента в виде различных по свойствам и строению структур.

Основным состоянием атома углерода является состояние с максимальным числом неспаренных электронов. Образованию химической связи между атомами углерода предшествует переход в возбужденное состояние с максимальным числом неспаренных электронов по схеме $2s^2 2p^2 \rightarrow 2s^1 2p^1 2p^1 2p^1$. Атомы углерода, соединяясь, образуют ковалентные связи, в результате чего возможна sp -, sp^2 -, sp^3 -гибридизация.