

УДК 539.21

РАСЧЕТ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ В НАНОЗЕРНЕ, ОБУСЛОВЛЕННОГО НАНОДВОЙНИКОВАНИЕМ

Т.В. ДРОБЫШЕВСКАЯ, канд. физ.-мат. наук **О.М. ОСТРИКОВ**
(Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого)

Разработана методика расчета полей смещений и напряжений в нанозерне при наличии в нем нанодвойника. Изучено напряженное состояние в нанозерне, имеющем форму правильного многоугольника и содержащем нанодвойник. Определены точки концентрации напряжений в зерне наноматериала. Проанализирована зависимость напряжений от параметров двойника.

Ключевые слова: наноматериалы, нанозерно, зернограничные дислокации, двойникующие дислокации, нанодвойникование.

Введение. Наноматериалы – ультрамелкозернистые поликристаллические материалы [1]. Широкое использование наноструктурных металлов и сплавов в качестве конструкционных и функциональных материалов в настоящее время сдерживается из-за их особенных свойств. Так, наряду с высокой прочностью и твердостью наноструктурные металлы облают очень низкой пластичностью, что создает существенные препятствия для их применения в конструкциях деталей машин [2]. Повышение пластичности наноструктурных материалов может быть достигнуто за счет искусственного нанодвойникования. Благодаря чему наноматериалы (металлы) приобретают высокие показатели механических свойств, позволяющие существенно расширить их область применения [1]. При этом проанализировать приобретаемые в результате нанодвойникования структуры и свойства нанометаллов можно путем изучения напряженно-деформированного состояния зерна наноматериала (металла), содержащего нанодвойники.

Цель данной работы – изучение напряженно-деформированного состояния в зерне наноструктурного материала, обусловленного нанодвойникованием.

Рассмотрим представленное на рисунке 1 единичное зерно наноматериала. Данное наноразмерное зерно имеет вид *n*-угольника и содержит в своем объеме единичный нанодвойник. В рассматриваемом случае границы зерна смоделированы в виде стенки полных дислокаций, а границы двойника в виде цепочки частичных дислокаций. Зернограничные и двойникующие дислокации в рамках изучаемой задачи в пределах каждой отдельной границы параллельны оси *OZ* (рисунок 2).

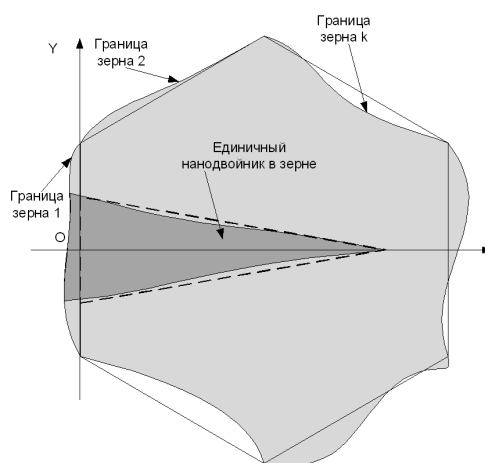


Рисунок 1. – Схематическое изображение единичного зерна наноматериала, содержащего единичный нанодвойник

В рамках проводимого исследования примем, что рассматриваемое нанозерно расположено на некотором расстоянии от поверхности материала. Кроме того, при расчете напряженно-деформированного состояния зерна не будем учитывать никакие напряжения кроме напряжений, обусловленных зернограничными и двойникующими дислокациями [3].

В соответствии с поставленной задачей и принятыми условиями, с учетом методик, описанных в [4, 5], смещения и напряжения, создаваемые двойниковыми и зерненными границами определяем путем суммирования

смещений и напряжений, создаваемых отдельными дислокациями $\left(u_i^{(m)} \right)_{tw}$, $\left(\sigma_{ij}^{(m)} \right)_{tw}$, $\left(u_l^{(k)} \right)_b$, $\left(\sigma_{lw}^{(k)} \right)_b$:

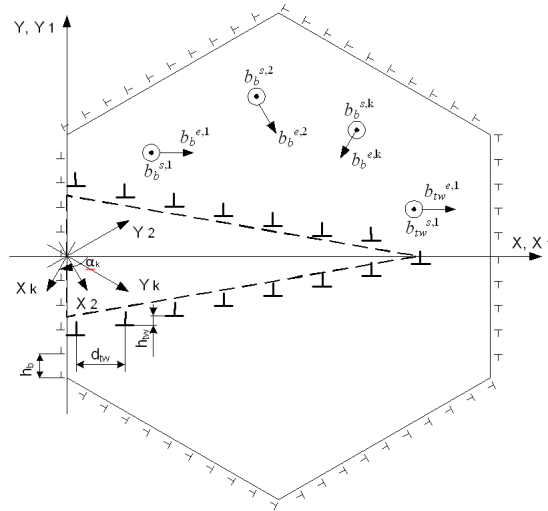


Рисунок 2. – Взаимное расположение зернограничных и двойнивающих дислокаций и их компонент вектора Бюргера

$$u_i = (u_i)_{tw}(x, y) + (u_i)_b(x, y), \quad (1)$$

$$(u_i)_{tw}(x, y) = \sum_{r=0}^{N_{tw}} (u_i^{(1)})_{tw}(x - rd_{tw}, y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}) + \sum_{r=0}^{N_{tw}} (u_i^{(2)})_{tw}(x - rd_{tw}, y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}), \quad (2)$$

$$(u_i)_b(x, y) = \sum_{k=1}^n \sum_l T_{il} \sum_{r=0}^{N_b-1} (u_l^{(k)})_b(x'_k, y'_k - rh_b); \quad (3)$$

$$\sigma_{ij} = (\sigma_{ij})_{tw}(x, y) + (\sigma_{ij})_b(x, y), \quad (4)$$

$$(\sigma_{ij})_{tw}(x, y) = \sum_{r=0}^{N_{tw}} (\sigma_{ij}^{(1)})_{tw}(x - rd_{tw}, y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}) + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} (\sigma_{ij}^{(2)})_{tw}(x - rd_{tw}, y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}), \quad (5)$$

$$(\sigma_{ij})_b(x, y) = \sum_{k=1}^n \sum_{l,w} T_{il} T_{jw} \sum_{r=0}^{N_b-1} (\sigma_{lw}^{(k)})_b(x'_k, y'_k - rh_b); \quad (6)$$

где i и j – индексы, принимающие значения x, y или z ; l и w – индексы, принимающие значения x'_k, y'_k или z'_k ; k – номер зерновой границы; m – номер двойниковой границы; $(u_i)_{tw}(x, y), (\sigma_{ij})_{tw}(x, y)$ – смещения и напряжения, создаваемые двойнивающими дислокациями; $(u_i)_b(x, y), (\sigma_{ij})_b(x, y)$ – смещения и напряжения, создаваемые зернограничными дислокациями; N_{tw}, N_b – количество двойнивающих и зернограничных дислокаций, расположенных на отдельной границе (двойника либо зерна); d_{tw}, h_{tw}, h_b – параметры, характеризующие взаимное расположение дислокаций (см. рисунок 2); системы координат XYZ и $X'_k Y'_k Z'$ (см. рисунок 2) – системы координат, используемые в расчетах; T_{il}, T_{jw} – элементы матрицы преобразования [6].

В данном случае рассматриваем поворот правосторонней системы координат XYZ вокруг оси Z по часовой стрелке на угол α_k (см. рисунок 2). При этом матрица преобразования принимает вид [6]

$$T = \begin{pmatrix} \cos(\alpha_k) & \sin(\alpha_k) & 0 \\ -\sin(\alpha_k) & \cos(\alpha_k) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

В соответствии с представленными на рисунке 2 системами координат и ориентировками векторов Бюргерса, а также с [3, 6], дальнейшие расчеты проводим следующим образом:

$$\begin{aligned}
 (u_x)_{tw}(x, y) &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{x - rd_{tw}} + \frac{(y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})(x - rd_{tw})}{2(1-\nu)\left((y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2\right)} \right] + \\
 &+ \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{x - rd_{tw}} + \frac{(y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})(x - rd_{tw})}{2(1-\nu)\left((y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2\right)} \right]; \\
 (u_y)_{tw}(x, y) &= - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln\left((y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2\right) + \right. \\
 &\left. + \frac{(x - rd_{tw})^2 - (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2}{4(1-\nu)\left((y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2\right)} \right] - \\
 &- \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln\left((y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2\right) + \frac{(x - rd_{tw})^2 - (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}{4(1-\nu)\left((y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 + (x - rd_{tw})^2\right)} \right]; \\
 (u_z)_{tw}(x, y) &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{b_{tw}^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{x - rd_{tw}} + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{b_{tw}^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{x - rd_{tw}}. \tag{8}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (u_x)_b(x, y) &= \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y'_k - rh_b}{x'_k} + \frac{(y'_k - rh_b)x'_k}{2(1-\nu)\left((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2\right)} \right] + \\
 &+ \sum_{k=1}^n \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln\left((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2\right) + \frac{x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2}{4(1-\nu)\left((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2\right)} \right]; \\
 (u_y)_b(x, y) &= \sum_{k=1}^n (-\sin(\alpha_k)) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y'_k - rh_b}{x'_k} + \frac{(y'_k - rh_b)x'_k}{2(1-\nu)\left((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2\right)} \right] + \\
 &+ \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^e}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln\left((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2\right) + \frac{x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2}{4(1-\nu)\left((y'_k - rh_b)^2 + x_k'^2\right)} \right]; \\
 (u_z)_b(x, y) &= \sum_{k=1}^n \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{b_b^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y'_k - rh_b}{x'_k}. \tag{9}
 \end{aligned}$$

$$(\sigma_{xx})_{tw} = - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}) \left[3(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]}{\left[(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]^2}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}) \left[3(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]}{\left[(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]^2}; \\
(\sigma_{yy})_{tw} &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}) \left[(x - rd_{tw})^2 - (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]}{\left[(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]^2} + \\
& + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}) \left[(x - rd_{tw})^2 - (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]}{\left[(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]^2}; \\
(\sigma_{zz})_{tw} &= - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2} - \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}; \\
(\sigma_{xy})_{tw} &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x - rd_{tw}) \left[(x - rd_{tw})^2 - (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]}{\left[(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2 \right]^2} + \\
& + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x - rd_{tw}) \left[(x - rd_{tw})^2 - (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]}{\left[(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2 \right]^2}; \\
(\sigma_{zx})_{tw} &= - \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2} - \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}; \\
(\sigma_{zy})_{tw} &= \sum_{r=0}^{N_{tw}} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{x - rd_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y + N_{tw}h_{tw} - rh_{tw})^2} + \sum_{r=0}^{N_{tw}-1} \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{x - rd_{tw}}{(x - rd_{tw})^2 + (y - N_{tw}h_{tw} + rh_{tw})^2}. \quad (10) \\
(\sigma_{xx})_b &= - \sum_{k=1}^n \cos^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[3x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \\
& + \sum_{k=1}^n \sin^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \sum_{k=1}^n \sin(2\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{x'_k \left[x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2}; \\
(\sigma_{yy})_b &= - \sum_{k=1}^n \sin^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[3x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \\
& + \sum_{k=1}^n \cos^2(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} - \sum_{k=1}^n \sin(2\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{x'_k \left[x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\sigma_{zz})_b &= -\sum_{k=1}^n \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e v}{\pi(1-v)} \frac{y'_k - rh_b}{x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2}; \\
 (\sigma_{xy})_b &= \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sin(\alpha_k) \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-v)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[3x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \\
 &+ \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-v)} \frac{(y'_k - rh_b) \left[x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2} + \sum_{k=1}^n \cos(2\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-v)} \frac{x'_k \left[x_k'^2 - (y'_k - rh_b)^2 \right]}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]^2}; \\
 (\sigma_{zx})_b &= -\sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{(y'_k - rh_b)}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]} + \sum_{k=1}^n \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{x'_k}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}; \\
 (\sigma_{zy})_b &= \sum_{k=1}^n \sin(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{(y'_k - rh_b)}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]} + \sum_{k=1}^n \cos(\alpha_k) \sum_{r=0}^{N_b-1} \frac{\mu b_b^e}{2\pi} \frac{x'_k}{\left[x_k'^2 + (y'_k - rh_b)^2 \right]}. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Здесь v – коэффициент Пуассона; μ – модуль сдвига; b_{tw}^e – модуль краевой составляющей вектора Бюргера двойнивающей дислокации; b_{tw}^s – модуль винтовой составляющей вектора Бюргера двойнивающей дислокации; b_b^e – модуль вектора Бюргера полной краевой дислокации; b_b^s – модуль вектора Бюргера полной винтовой дислокации.

Границы двойника и зерна принимаем прямолинейными, а дислокации на рассматриваемых границах равноудаленными друг от друга. Тогда координаты в системах $X'_k Y'_k Z$ и координаты границ зерен в данных системах координат определяем в соответствии с выражением (4):

$$x'_k = x \cdot \cos(\alpha_k) - y \cdot \sin(\alpha_k), \quad (12)$$

$$y'_k = x \cdot \sin(\alpha_k) + y \cdot \cos(\alpha_k). \quad (13)$$

Результаты расчетов и их обсуждение. В качестве базового варианта для исследования было принято шестиугольное наноразмерное зерно, содержащее в своем теле единичный нанодвойник, материал – железо (Fe). Для расчетов принимались следующие параметры: $b_b^e = b_b^s = 0,248$ нм; $b_{tw}^e = b_{tw}^s = 0,124$ нм [7]; $\mu = 81$ ГПа [6]; $v = 0,29$ [7]. Базовые параметры зерна и двойника: $N_{tw} = 35$, $h_{tw} = 2b_{tw}^e = 0,248$ нм; $d_{tw} = 1,736$ нм; $N_b = 32$, $h_b = 1,736$ нм.

Анализ напряженного состояния был проведен на базе анализа гидростатических σ_h (рисунок 3, а), нормальных σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , комбинированных касательных напряжений τ (рисунок 3, б), а также касательных напряжений σ_{xy} (рисунок 3, в), σ_{xz} и σ_{yz} . Дополнительные расчеты проводили в соответствии с [7]:

$$\sigma_h = \sum_i \sigma_{ii} / 3, \quad (14)$$

$$\tau = \sqrt{\sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2}. \quad (15)$$

В рассматриваемом случае гидростатические (σ_h) и сдвиговые (σ_{xy}, τ) локализованы на границах элементов системы двойник – зерно. Максимальные гидростатические σ_h и сдвиговые σ_{xy} напряжения наблюдаются у устья двойника, а максимальные комбинированные касательные напряжения τ – в вершинах зерна.

Концентрация гидростатических напряжений σ_h внутри зерна несколько выше нежели за его пределами. В анализируемом поле напряжений имеют место как сжимающие, так и растягивающие напряжения. Однако выявить четкую характеристику знакопеременности напряжений не представляется возможным (см. рисунок 3, а).

Локализация нормальных напряжений σ_{xx} внутри зерна значительно выше, нежели за его пределами. При этом выше оси OX преобладают сжимающие напряжения, а ниже – растягивающие. На участках максимальной концентрации (зеренные и двойниковые границы) напряжения σ_{xx} носят сжимающий характер. При этом максимальные значения σ_{xx} отмечены у устья двойника.

Нормальные напряжения σ_{yy} локализованы на зеренных и двойниковых границах и имеют относительно равномерное распределение внутри зерна и за его пределами. В пределах зерна имеют место как растягивающие (в I и III четвертях относительно осей, проходящих через вершину двойника), так и сжимающие напряжения (соответственно во II и IV четвертях). За пределами зерна преобладают отрицательные значения σ_{yy} . Напряжения на границах двойника и зерна носят сжимающий характер и имеют максимальные значения на границе зерна, к которой прилегает устье двойника.

Концентрация нормальных напряжений σ_{zz} внутри зерна и за его пределами отличается несущественно. При этом выше оси OX напряжения отрицательны, а ниже данной оси – положительны. На границах же зерна и двойника напряжения σ_{zz} , аналогично напряжениям σ_{xx}, σ_{yy} , являются сжимающими, а максимальные значения σ_{zz} соответствуют устью двойника. При этом максимальные напряжения σ_{zz} на порядок ниже максимальных значений σ_{xx}, σ_{yy} .

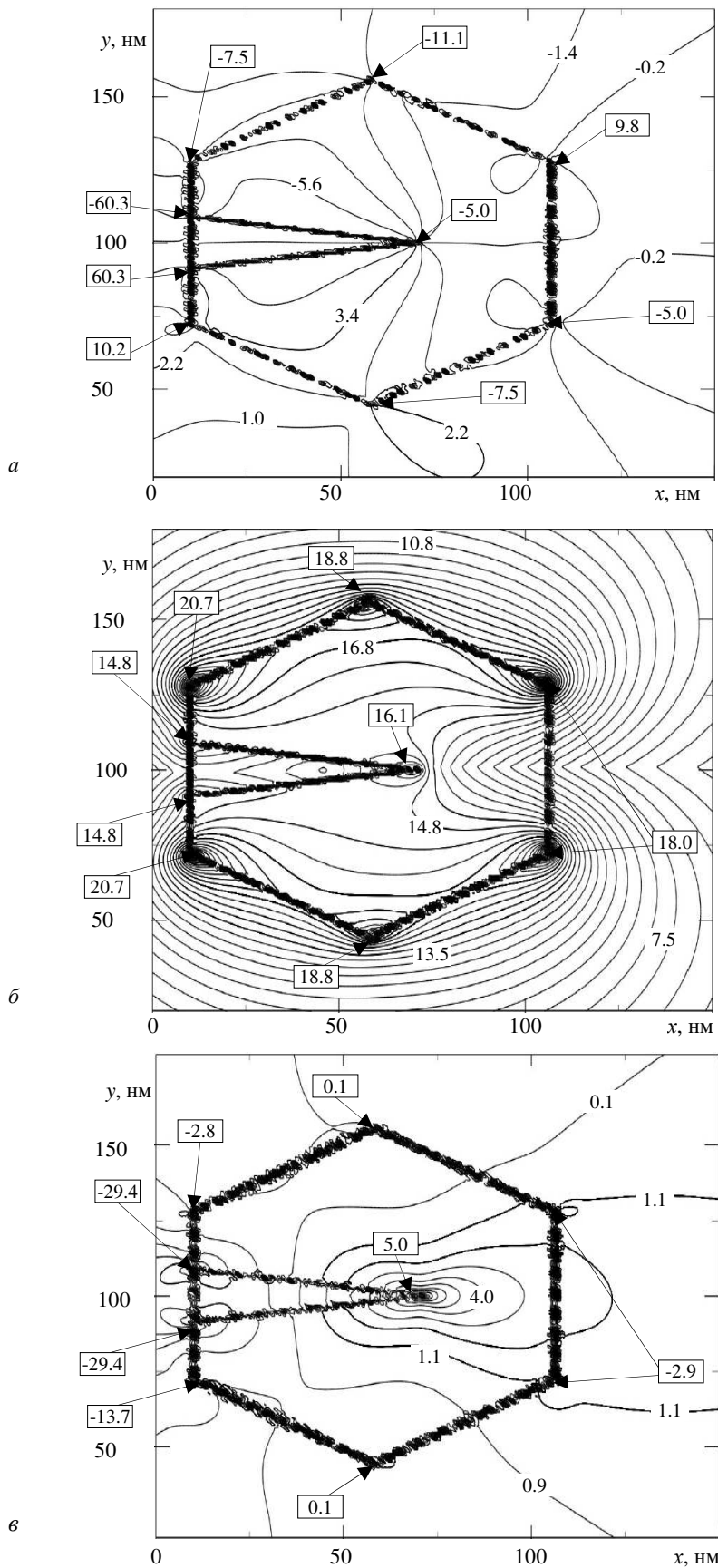
Комбинированные касательные напряжения τ можно охарактеризовать высокой концентрацией напряжений на зеренных и двойниковых границах, а также в узловых точках. Концентрация напряжений τ за пределами зерна выше концентрации внутри него. При этом максимальные численные значения τ имеют место в вершинах зерна (см. рисунок 3, б).

Распределение напряжений σ_{xz} характеризуется максимальными значениями, соответствующими устью двойника. Преобладающими являются сжимающие напряжения σ_{xz} , они расположены на границах двойника и зерна (места наибольшей локализации σ_{xz}), а также выше оси OX . Ниже оси OX имеют место растягивающие напряжения (кроме границ).

Как было отмечено выше сдвиговые напряжения σ_{yz} имеют максимальную концентрацию на границах двойника и зерна, при этом напряжения носят сжимающий характер. Концентрация данной компоненты тензора напряжений внутри зерна превышает концентрацию за его пределами. При удалении от границ зерна концентрация напряжений σ_{yz} существенно снижается, также снижаются и численные значения напряжений. Максимальные значения σ_{yz} отмечены на границе зерна, к которой прилегает устье двойника.

Сдвиговые напряжения σ_{xy} знакопеременны относительно оси, проходящей параллельно оси OY через середину двойника. Слева от данной оси напряжения σ_{xy} отрицательны, а справа – положительны. В местах локализации σ_{xy} (зеренные и двойниковые границы) преобладают сжимающие напряжения, максимальные их значения можно отметить на границе, к которой прилегает устье двойника (см. рисунок 3, в).

В рамках данного исследования также были проведены расчеты полей напряжений для пятиугольного и семиугольного зерен. Результаты свидетельствуют о том, что форма зерна не существенно влияет на характер распределения полей напряжений. В случае пятиугольного и семиугольного зерна аналогично варианту с шестиугольным зерном основные элементы рассматриваемой системы (зеренные и двойниковые границы), являются не только концентраторами напряжений, но соответственно и местом локализации напряжений.



a – $\sigma_{xx}(x,y)$; *б* – $\sigma_{yy}(x,y)$; *в* – $\sigma_{xy}(x,y)$
 Рисунок 3. – Распределение напряжений в шестиугольном зерне нанокристалла, обусловленных наличием единичного клиновидного нанодвойника

Кроме того, было рассчитано влияние параметров двойника на напряженное состояние в зерне наноматериала. В качестве варьируемых параметров приняты количество дислокаций на границах двойника (N_{tw}) и расстояние между двойническими дислокациями, измеренное вдоль оси OX (d_{tw}).

Так, при увеличении количества двойнических дислокаций ($N_{tw} = 2, 7, 15, 25, 35, 45$) увеличивается концентрация гидростатических напряжений σ_h в пределах зерна, а за его пределами концентрация не изменяется. В отношении гидростатического напряжения σ_h на основных элементах системы можно отметить, что количество двойнических дислокаций N_{tw} оказывает влияние на σ_h только на границе зерна, к которой прилегает устье двойника. При этом характер распределения напряжений на данной границе не изменяется. Имеет место лишь незначительное изменение численных значений σ_h при изменении N_{tw} . На остальных границах зерна количество двойнических дислокаций N_{tw} не оказывает влияние на гидростатическое давление. Следует также отметить отсутствие зависимости напряжений σ_h от количества двойнических дислокаций N_{tw} , измеренное вдоль оси OX .

Анализируя распределение гидростатических напряжений σ_h вдоль границ двойника, можно отметить следующее. Характер распределения анализируемых напряжений не зависит от N_{tw} , лишь размерные характеристики распределения обусловлены длиной двойника и соответственно N_{tw} .

В отношении комбинированных касательных напряжений τ и сдвиговых напряжений σ_{xy} можно отметить, что количество двойнических дислокаций N_{tw} не оказывает существенного влияния на характер распределения полей напряжений. При этом численные значения анализируемых компонент тензора напряжений (σ_{xy} и τ) имеют тенденцию к увеличению при увеличении N_{tw} .

По результатам исследования влияния расстояния между двойническими дислокациями, измеренного вдоль оси OX ($d_{tw} = 0,248; 0,744; 1,240; 1,736; 1,984; 2,232$ нм), можно отметить, что на анализируемые характеристики напряженного состояния (σ_h , τ , σ_{xy}) параметр d_{tw} не оказывает существенного влияния.

Таким образом, изучено напряженно-деформированное состояние в зерне наноструктурного материала, обусловленного нанодвойникованием. Разработана методика расчета полей смещений и напряжений в нанозерне, имеющем форму многоугольника и содержащем в своем теле единичный нанодвойник. Выявлены места концентрации напряжений в нанозерне. Проведен анализ зависимости распределения полей напряжений от параметров нанодвойника.

ЛИТЕРАТУРА

1. Овидько, И.А. Влияние миграции двойниковых границ на трещиностойкость нанодвойникованных металлов / И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман // Materials Physics and Mechanics. – 2014. – № 21. – С. 248–258.
2. Объемные наноструктурные металлы и сплавы с уникальными механическими свойствами для перспективных применений / Р.З. Валиев [и др.] // Вестник УГАТУ. – 2006. – № 3. – С. 23–34.
3. Дробышевская, Т.В. Задача о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным некогерентным двойником в пяти-, шести- и семиградном зерне поликристалла с гексагональной структурой / Т.В. Дробышевская, О.М. Остриков // Физ. мезомех. – 2015. – Т. 18. – № 2. – С. 79–88.
4. Остриков, О.М. Механика двойникования твердых тел : моногр. / О.М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П.О. Сухого, 2008. – 301 с.
5. Остриков, О.М. Поле упругих деформаций и смещений в системе «Клиновидный нанодвойник – цепочка полных дислокаций» / О.М. Остриков // Вестник ГГТУ им. П.О. Сухого. – 2011. – №4 (47).
6. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М. : Атомиздат, 1972. – 600 с.
7. Миркин, Л.И. Физические основы прочности и пластичности (Введение в теорию дислокаций) / Л.И. Миркин. – М. : Изд-во МГУ, 1968. – 538 с.

Поступила 13.10.2017

THE CALCULATION OF THE STRESS-STRAIN STATE IN NANOZINE DUE TO NEODOLIMAYA

T. DROBYSHEVSKAYA, O. OSTRIKOV

The developed method of calculation of fields of displacements and stresses in nanozine in the presence of nanovoise. The stress state in a nanosecond having the shape of a regular polygon and containing a nanodvoir is studied. The stress concentration points in the grain of nanomaterial are determined. The dependence of stresses on the parameters of the double is analyzed.

Keywords: *nanomaterials, nanozero, grain boundary dislocations, double dislocations, nanodvoynikovanie.*