

PACS numbers: 61.72.Nh, 61.72.Lk, 62.20.de, 62.20.dj, 62.20.F-, 62.40.+i, 81.40.Jj

Про непружне двійникування, ауксетизм і структурні перетворення в Be

В. О. Корпан, А. В. Олійнич-Лисюк, М. Д. Раранський,
О. Ю. Тащук

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2,
58012 Чернівці, Україна*

В роботі шляхом моделювання на мезоскопічному рівні непружних клиновидних двійників у Be в ауксетичному та неауксетичному станах показано, що зміна величин і знаків коефіцієнтів Пуассона з ростом температури приводить до інверсії локалізованих полів напружень поблизу вершини та країв двійника й істотного (у кілька разів) зменшення величини напружень навколо нього, поблизу дислокацій та їх комплексів, що супроводжується спочатку розм'якшуванням пружних модулів з подальшим гальмуванням процесів пластичної деформації та зміцненням Be при переході у стан повного ауксетика вище 575 К.

Ключові слова: клиновидний двійник, коефіцієнти Пуассона, поле напружень, розм'якшування модулів, зміцнення ауксетичного Be.

By modelling of inelastic wedge-shaped crystal twins in Be of the auxetic and non-auxetic states on the mesoscopic level, it is shown that the change in the Poisson coefficients' magnitudes and signs with a temperature increasing leads to inversion of the localized stress fields near the tip and edges of the twin and to significant (by several times) decrease in the magnitude of stresses around it, near dislocations and their complexes. This effect is accompanied initially by softening of elastic modules and followed by inhibition of processes of plastic deformation and strengthen-

Corresponding author: A. V. Oliynich-Lysyuk
E-mail: a_oliynich@ukr.net

*Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
2 Kotsyubynsky Str., UA-58012 Chernivtsi, Ukraine*

Citation: V. O. Korpan, A. V. Oliynich-Lysyuk, M. D. Raransky, and O. Yu. Tashchuk, On Inelastic Twinning, Auxetism and Structural Transformations in Beryllium, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 12: 1625–1635 (2018) (in Ukrainian), DOI: 10.15407/mfint.40.12.1625.

ing of Be during the transition to a complete auxetic state above 575 K.

Key words: wedge-shaped twin, Poisson coefficients, stress field, softening of modulus, strengthening in auxetic Be.

В работе путём моделирования на мезоскопическом уровне неупругих клиновидных двойников в Be в ауксетическом и неауксетическом состояниях показано, что изменение величин и знаков коэффициентов Пуассона с ростом температуры приводит к инверсии локализованных полей напряжений вблизи вершины и краёв двойника и существенному (в несколько раз) уменьшению величины напряжений вокруг него, вблизи дислокаций и их комплексов, что сопровождается сначала размягчением упругих модулей с последующим торможением процессов пластической деформации и упрочнением Be при переходе в состояние полного ауксетика выше 575 К.

Ключевые слова: клиноподобный двойник, коэффициенты Пуассона, поле напряжений, размягчение модулей, упрочнение ауксетического Be.

(Отримано 17 червня 2017 р.)

1. ВСТУП

Відомо, що з ростом температури Be проходить ряд структурно-релаксаційних перетворень і набуває властивостей ауксетика (спочатку неаксіального, потім аксіального, змішаного неаксіально-аксіального і, нарешті, повного), які супроводжуються аномальними змінами пружних та непружних характеристик цього матеріалу, а також динаміки дефектів, через які реалізуються процеси деформації у цьому металі при різних температурах [1]. Як продовження цих досліджень, в даній роботі представлені результати мезоскопічного моделювання двійників, які активно утворюються в процесі деформації Be при середньотемпературному ($-50-450^{\circ}\text{C}$) термоциклюванні [2]. Термомеханічне циклювання в цій області температур супроводжується пружним та непружним двійникуванням з генерацією пружних (ламелеподібних) та непружних (клиновидних) двійників. Перші з них не приводять до істотного зміцнення зразка в процесі термоциклювання, а непружні двійники після утворення в полі прикладеного напруження продовжують функціонувати як ефективні концентратори напружень, які здатні провокувати утворення мікро- та макротріщин [2], що є небажаним для конструкцій, виготовлених з берилію.

2. «МЕЗОСКОПІЧНЕ» МОДЕЛЮВАННЯ НЕПРУЖНОГО КЛИНОВИДНОГО ДВІЙНИКА

В роботі [2] показано, що при циклічній деформації Be в районі кі-

мнатних температур виникають пружні та непружні двійники.

Перший тип двійників при прикладанні зворотнього за знаком механічного напруження зменшується (аж до повного зникнення) і утворюється знову при зміні знаку навантаження. При розвантаженні такого здвійникового кристалу спостерігають ефект втрати зміцнення кристалів і його відновлення в процесі подальшої пульсації напружень.

Властивості зазначених двійників у кристалах берилію при деформації його в умовах пульсації напруження добре описуються за допомогою реологічного підходу, який «адекватно відображає такі закономірності двійникування в металах, як наявність межі пластичності для руху меж поділу, ефект Баушингера при повторному навантаженні кристалу зусиллям протилежного знаку, зворотнє зміцнення двійникових меж при відпочинку здвійникового зразка» [2].

Ми спробували використати реологічний підхід до моделювання пружних двійників у ауксетичному Be і виявили, що криві залежності деформації ϵ від напруження σ при циклічних навантаженнях у цьому структурному стані мають ряд особливостей у порівнянні з неауксетичним матеріалом: відсутність залишкової деформації після циклу «навантаження–розвантаження», зворотній характер кривих $\epsilon(\sigma)$ («криві навантаження–розвантаження» на діаграмі міняються місцями) та наявність критичних значень σ , при яких починається процес двійникування [3].

Але в неоднорідних кристалах особливо в складних умовах деформування, які приводять до зміни параметрів здвійникового і нездвійникового металу в процесі деформації, тобто до зміцнення кристалу при термоциклюванні, реологічний підхід стає неприйнятним.

В таких умовах моделювання двійників краще проводити на мезоскопічному рівні з врахуванням зміни властивостей кристалу і дефектів, що знаходяться в кристалі, в різних кристалографічних напрямках.

При моделюванні непружного клиновидного двійника, ми, так само як автори [4], розглядали його як пару стінок лінійних двійникових дислокацій (рис. 1, *a*), розміщених у напрямку *OZ* у площині *XOY* під кутом $\theta/2$ відносно осі *OX*, де θ — кут розхилу двійника.

Розрахунок компонент тензора механічних напружень σ_{ij} проводили за співвідношенням:

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sum_n \sigma_{ij}^{OA}(x - nd, y + nh) + \sum_m \sigma_{ij}^{OB}(x - md, y - mh), \quad (1)$$

яке у випадку двійника, представленого на рис. 1, *a*, набуває вигляду:

$$\sigma_{xx}(x, y) = -\frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(y+nh) \left[3(x-nd)^2 + (y+nh)^2 \right]}{\left[(x-nd)^2 + (y+nh)^2 \right]^2} + \sum_{m=1}^M \frac{(y-mh) \left[3(x-md)^2 + (y-mh)^2 \right]}{\left[(x-md)^2 + (y-mh)^2 \right]^2} \right\}, \quad (2)$$

$$\sigma_{yy}(x, y) = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(y+nh) \left[(x-nd)^2 - (y+nh)^2 \right]}{\left[(x-nd)^2 + (y+nh)^2 \right]^2} + \sum_{m=1}^M \frac{(y-mh) \left[(x-md)^2 - (y-mh)^2 \right]}{\left[(x-md)^2 + (y-mh)^2 \right]^2} \right\}, \quad (3)$$

$$\sigma_{xy}(x, y) = \frac{\mu b_{\text{кр}}}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{(x-nd) \left[(x-nd)^2 - (y+nh)^2 \right]}{\left[(x-nd)^2 + (y+nh)^2 \right]^2} + \sum_{m=1}^M \frac{(x-md) \left[(x-md)^2 - (y-mh)^2 \right]}{\left[(x-md)^2 + (y-mh)^2 \right]^2} \right\}, \quad (4)$$

$$\sigma_{zz}(x, y) = -\frac{\mu b_{\text{кр}} \nu}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \quad (5)$$

$$\sigma_{xz}(x, y) = -\frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{y-mh}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \quad (6)$$

$$\sigma_{yz}(x, y) = \frac{\mu b_{\text{в}}}{2\pi} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{x-nd}{(x-nd)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{m=1}^M \frac{x-md}{(x-md)^2 + (y-mh)^2} \right\}, \quad (7)$$

де σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} — нормальні, а σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz} — сколювальні напруження, спричинені двійникувальними дислокаціями; N і M — число дислокацій на кожній із меж двійника.

3. ОСОБЛИВОСТІ РОЗПОДІЛУ МЕХАНІЧНИХ НАПРУГ НАВКОЛО КЛИНОВИДНОГО ДВІЙНИКА У Ве В АУКСЕТИЧНОМУ ТА НЕАУКСЕТИЧНОМУ СТАНАХ

На рисунках 1–5 представлено просторові розподіли компонентів тензора напружень навколо клиновидного двійника в різних кристалографічних напрямках у Ве в ауксетичному та неауксетичному станах.

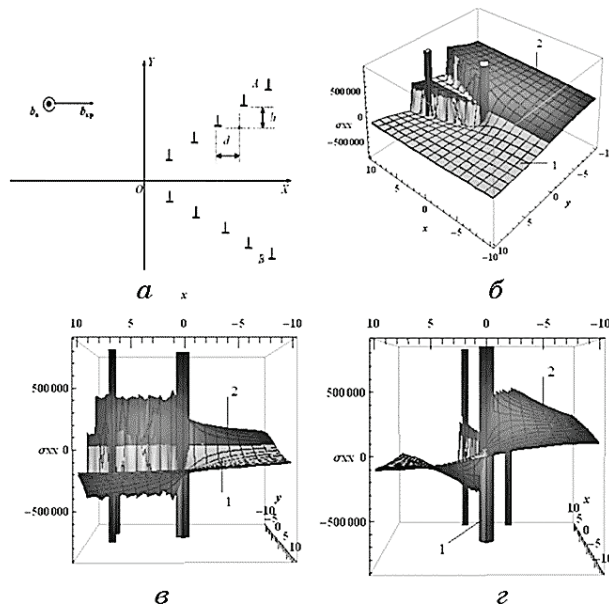


Рис. 1. Схема взаємного розміщення дислокацій для розрахунку полів напруження і деформацій клиновидного двійника [4] (а); розподіл компоненти тензора поля напруги σ_{xx} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Ве у напрямку [110] (б); переріз σ_{xx} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Ве площиною XOZ (в); те ж, площиною YOZ (г).

Fig. 1. The scheme of the mutual placement of dislocations for calculating the stress and strain fields of the wedge-shaped twin [4] (a); distribution of the component of the stress field tensor σ_{xx} for a wedge-shaped twin in the usual (1) and auxetic (2) Be in the direction [110] (б); the cross section σ_{xx} for the wedge-shaped twin in the usual (1) and auxetic (2) Be plane XOZ (в); the same, plane YOZ (г).

Як бачимо, σ_{xx} компонента тензора напружень навколо клиновидного двійника свідчить про сильну асиметрію поля напружень: максимальні додатні П-подібні напруження локалізовані при вершині двійника, як для звичайних, так і для ауксетичних матеріалів (рис. 1, б-г). При цьому, спостерігаються також дві додаткові П-подібні області напруження, симетрично розміщені відносно осі OX двійника, з додатніми (на лінії OA) і від'ємними (на лінії OB) вузько локалізованими напруженнями. При цьому розподіл полів напружень між дислокаційними стінками як для звичайного, так і для ауксетичного матеріалу має дзеркальний характер з тією різницею, що в ауксетичному стані напруження в рази менші, ніж у звичайному.

Розподіл σ_{yy} компоненти поля напружень відрізняється від роз-

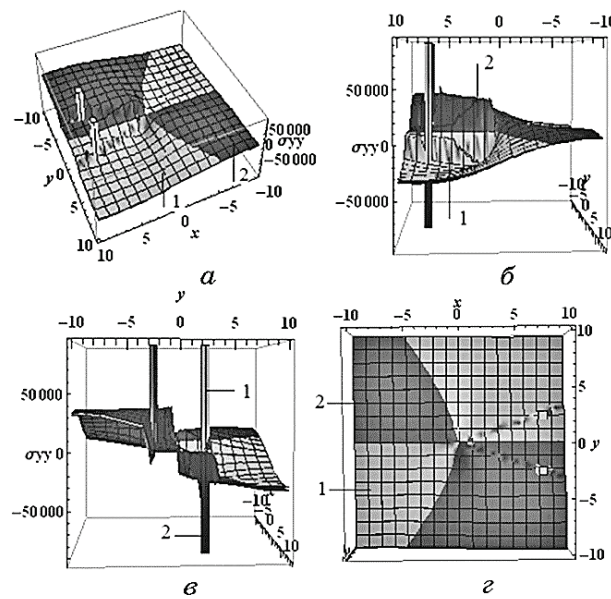


Рис. 2. Розподіл компоненти тензора поля напруження σ_{yy} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Be у напрямку $[110]$ (а); переріз σ_{yy} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Be площиною XOZ (б); площиною YOZ (в); та площиною XOY (г).

Fig. 2. Distribution of the component of the stress field tensor σ_{yy} for the wedge-shaped twin in the usual (1) and auxetic (2) Be in the direction $[110]$ (а); the cross section σ_{yy} for a wedge-shaped twin in the usual (1) and auxetic (2) Be plane XOZ (б); the YOZ plane (в); and the plane XOY (г).

поділу для σ_{xx} відсутністю локалізованих напружень біля вершини двійника і зміною знаку П-подібних напружень у дислокаційних стінках: додатні напруження спостерігаються тепер на лінії OB , а від'ємні — на лінії OA (рис. 2).

Розподіл компоненти σ_{xy} поля напружень біля вершини двійника набуває від'ємних значень, при цьому напруження у просторі змінюються плавно, на відміну від компонент σ_{xx} і σ_{yy} . Від'ємні значення напружень поблизу вершини двійника навколо двох наступних за вершинною дислокацій змінюються на дві δ -подібні додатні області, які потім поступово переходять в суцільне постійно наростаюче додатне поле між дислокаційними стінками. Відмітимо, що у від'ємній області максимальні напруження, які спостерігаються біля вершини двійника, зменшуються у напрямку до його країв, і закінчуються двома дублетами вузько локалізованих δ -подібних і П-подібних областей напруження (рис. 3) справа та зліва від осі двійника.

На відміну від попередніх розподілів компоненти тензора σ_{zz} для

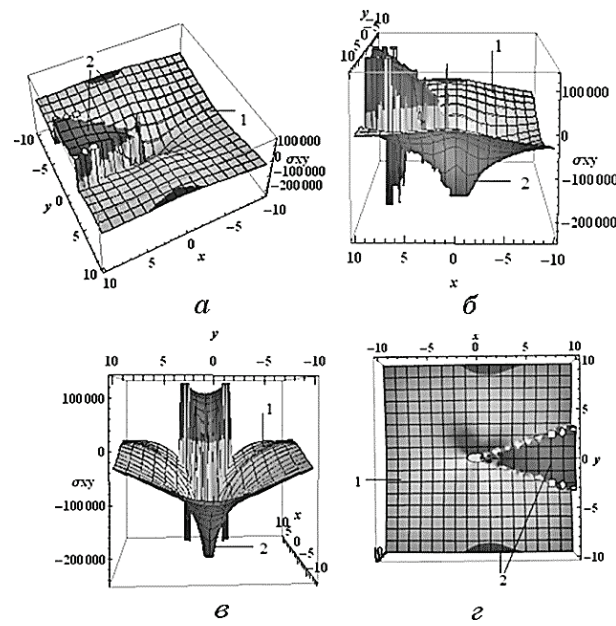


Рис. 3. Розподіл компоненти тензора поля напруження σ_{xy} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Be у напрямку [110] (а); переріз σ_{xy} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Be площиною XOZ (б), площиною YOZ (в) та площиною XOY (г).

Fig. 3. Distribution of the component of the stress field tensor σ_{xy} for the wedge-shaped twin in the normal (1) and auxetic (2) Be in the direction [110] (a); the cross section σ_{xy} for a wedge-shaped twin in the usual (1) and auxetic (2) Be by plane XOZ (б), by YOZ plane (в), and by plane XOY (г).

звичайних і ауксетичних матеріалів мають дзеркальний характер: додатне П-подібне поле напруги навколо головної дислокації при вершині для звичайного матеріалу в ауксетиках змінюється на від'ємне, а додатне П-поле напруги вздовж лінії OA для звичайних матеріалів змінюється на від'ємне для ауксетиків. Аналогічна інверсія поля напруги спостерігається для дислокаційної лінії OB : від'ємні напруги для звичайних матеріалів змінюються на додатні для ауксетиків (рис. 4).

Розподіл сколюючої компоненти поля напружень σ_{xz} для звичайних матеріалів набувають додатніх значень при вершині двійника, у вигляді П-подібної області. При цьому спостерігаються також дві додаткові П-подібні області напруження, симетрично розміщені відносно осі OX двійника (рис. 5) з додатніми (на лінії OA) і від'ємними (на лінії OB) вузько локалізованими напруженнями поблизу країв двійника.

Розподіл компоненти тензора σ_{yz} можна описати аналогічно до

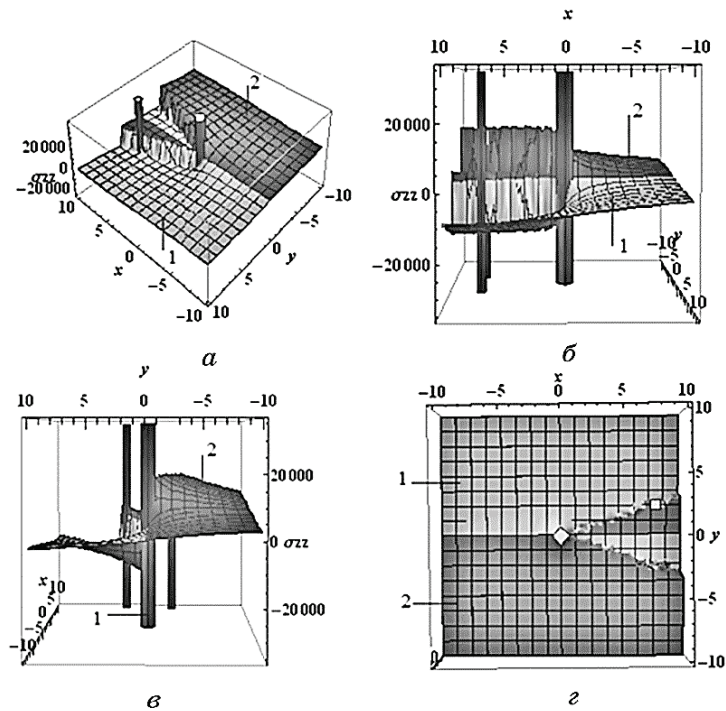


Рис. 4. Розподіл компоненти тензора поля напруження σ_{zz} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Be у напрямку [110] (а); переріз σ_{zz} для клиновидного двійника в звичайному (1) і ауксетичному (2) Be площинною XOZ (б), площинною YOZ (в) та площинною XOY (г).

Fig. 4. Distribution of the component of the stress field tensor σ_{zz} for the wedge-shaped twin in the usual (1) and auxetic (2) Be in the direction [110] (a); the cross section σ_{zz} for the wedge-shaped twin in the usual (1) and auxetic (2) Be by plane XOZ (b), by plane YOZ (c), and by plane XOY (d).

розподілу компоненти тензора σ_{xy} . Тільки на відміну від σ_{xy} компонента σ_{yz} має чотири δ -подібні області локалізованих напруг, які потім поступово переходять у суцільне постійно наростаюче додатне поле між дислокаційними стінками, і закінчуються двома симетричними відносно осі двійника Π -подібними максимумами у додатній області напруження. У від'ємній області максимальні напруження так само спостерігаються біля вершини двійника, які зменшуються у напрямку до його країв, і закінчуються двома дублетами вузько локалізованих δ -подібних і Π -подібних областей напруги. При цьому на лінії OA спостерігається додатковий δ -максимум, який відсутній на лінії OB .

Підсумовуючи зазначимо, розрахунок компонентів тензора σ_{ij} полів напруги навколо клиновидного двійника та його візуалізація

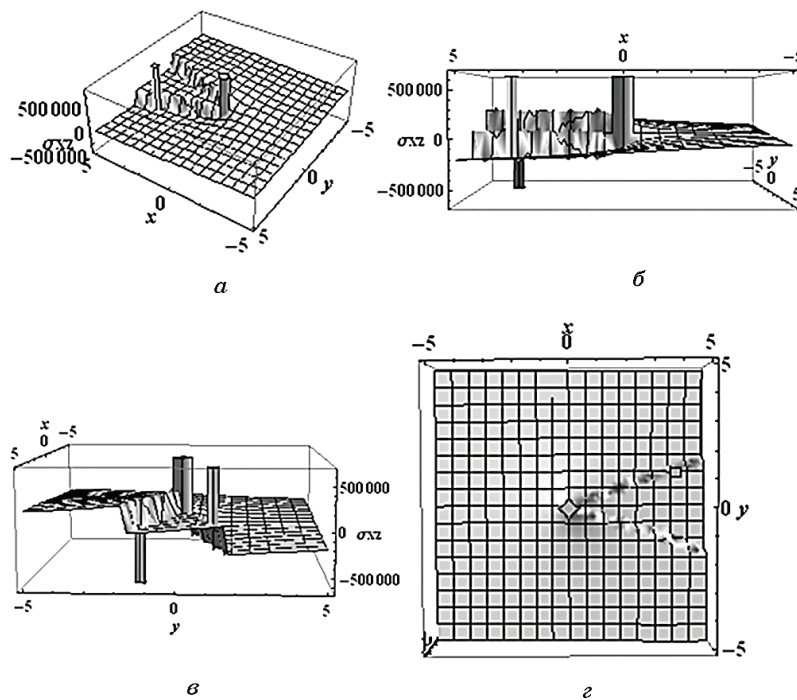


Рис. 5. Розподіл компоненти тензора поля напруження σ_{xz} для клиновидного двійника в звичайному Be в площині ZOY (*a*); переріз σ_{xz} для клиновидного двійника в Be площиною XOZ (*б*), YOZ (*в*) та площиною XOY (*г*).

Fig. 5. Distribution of the component of the stress field tensor σ_{xz} for a wedge-shaped twin in the usual Be in the plane ZOY (*a*); the cross section σ_{xz} for the wedge-shaped twin in the Be plane of the XOZ (*б*), the YOZ (*в*) and the plane of the XOY (*г*).

в тривимірному просторі уможливила виявити області локалізованих напруг поблизу головної дислокації двійника і поблизу його країв як для ауксетичного, так і для неауксетичного станів. При цьому рівень напружень в ауксетичному стані в деяких напрямках у кристалі в рази менший, ніж у звичайному. Зменшення локалізованих напруг веде до зменшення ймовірності крихкого руйнування. В той же час, їх зменшення означає і зменшення рухливості дефектів, зокрема дислокацій, тобто приведе до пониження пластичності, через пониження швидкості їх руху.

Отже, в районі температур, де Be набуває ауксетичних властивостей, слід очікувати зменшення ймовірності крихкого руйнування матеріалу з одночасним зменшенням його пластичності. Це твердження корелює з результатами експериментів по дослідженню пружних, непружних характеристик та швидкості руху дефектів у

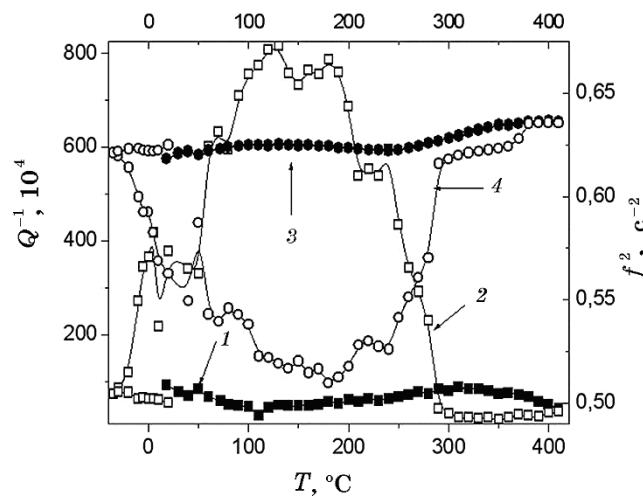


Рис. 6. Температурні залежності внутрішнього тертя (1, 2) і динамічного модуля зсуву (3, 4) високочистого (99,95%) берилію після термоцикування в інтервалі $-50-450^{\circ}\text{C}$.

Fig. 6. Temperature dependence of internal friction (1, 2) and dynamic shear modulus (3, 4) high-purity (99.95%) beryllium after thermal cycling in the range of $-50-450^{\circ}\text{C}$.

високо чистому (99,95%) Be при термоцикуванні в інтервалі $-50-450^{\circ}\text{C}$ (рис. 6) [5]. Як бачимо, початок «розм'якшення» динамічного модуля зсуву у високочистому (99,95%) Be досить непогано збігається з температурами виникнення аксіальної ауксетичності в цьому металі [1], а його перехід у стан повного ауксетика (вище 575 K) з температурою зростання динамічного модуля пружності, тобто із зміцненням Be у ауксетичному стані.

4. ВИСНОВКИ

Таким чином, в роботі розраховано та візуалізовано поля напружень навколо клиновидних двійників в Be в ауксетичному та неауксетичному станах та виявлено локалізовані поля напруг поблизу вершини та країв двійника, які у звичайному та в ауксетичному станах відрізняються величиною і знаком.

Проведена оцінка рівня полів напруг навколо дефектів Be, і виявлено їх зменшення в ауксетичному стані, яке може, з одного боку, сприяти пониженню його крихкості, розм'якшенню модулів пружності, а з іншого, приводити до обмеження рухливості лінійних дефектів, зокрема, при переході берилію у стан повного ауксетика при 575 K .

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. О. Ю. Ташчук, *Особливості деформації термодинамічно нестабільного Be на різних структурних рівнях* (Автореферат дис. ... канд. фіз.-мат. наук) (Чернівці: 2017)
2. В. И. Башмаков, Т. С. Чикова, *Пластификация и упрочнение металлических кристаллов при механическом двойниковании* (Минск: Технопринт: 2001).
3. V. O. Korpan, O. V. Lysyuk, A. V. Oliynich-Lysyuk, M. D. Raransky, and O. Yu. Tashchuk, *Abstr. Int. Summer School and Int. Conf. 'Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2017)' (August, 23–27, 2017, Chernivtsi)* (Kyiv: 2017), p. 759.
4. О. М. Остриков, *Механика двойникования твердых тел* (Гомель: ГГТУ им. П. О. Сухого: 2008).
5. О. Ю. Ташчук, М. К. Мишилюк, А. В. Олійнич-Лисюк, М. Д. Раранський, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 12: 1595 (2015).

REFERENCES

1. O. Yu. Tashchuk, *Osoblyvosti Deformatsiyi Termodynamichno Nestabil'noho Be na Riznykh Strukturnykh Rivnyakh* [Features of Deformation of Thermodynamically Unstable Be at Different Structural Levels] (Thesis of Dissert. for ... Dr. Phys.-Mat. Sci.) (Chernivtsi: 2017) (in Ukrainian).
2. V. I. Bashmakov and T. S. Chikova, *Plastifikatsiya i Uprochnenie Metallicheskiikh Kristallov pri Mekhanicheskom Dvoynikovanii* [Plasticization and Hardening of Metallic Crystals during Mechanical Twinning] (Minsk: Tekhnoprint: 2001) (in Russian).
3. V. O. Korpan, O. V. Lysyuk, A. V. Oliynich-Lysyuk, M. D. Raransky, and O. Yu. Tashchuk, *Abstr. Int. Summer School and Int. Conf. 'Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2017)' (August, 23–27, 2017, Chernivtsi)* (Kyiv: 2017), p. 759.
4. O. M. Ostrikov, *Mekhanika Dvoynikovaniya Tverdykh Tel* [Mechanics of Solids Twinning] (Gomel': GGTU im. P. O. Sukhogo: 2008) (in Russian).
5. O. Yu. Tashchuk, M. K. Myshlyuk, A. V. Oliynich-Lysyuk, M. D. Rarans'ky, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 12: 1595 (2015) (in Ukrainian).