

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГРАНИЦ ДВОЙНИКОВ С ПРЕПЯТСТВИЯМИ В МАГНИИ В ПРОЦЕССЕ МИГРАЦИИ

**А. Остаповец<sup>1\*</sup>, К. Кушнир<sup>1</sup>, К. Матис<sup>2</sup> и Ф. Шишка<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт Физики Материалов Чешской Академии Наук, Жижкова 513/22, 61600 Брно, Чешская Республика

<sup>2</sup>Отдел Физики Материалов, Физико-Математический Факультет, Карлов Университет, Ке Карлову 3, 12116 Прага 2, Чешская Республика  
\*ostapov@ipm.cz

**Ключевые слова:** магний, двойникование, моделирование, пора, включение

## ПРО ОСОБЛИВОСТІ РЕЛАКСАЦІЇ МЕХАНІЧНИХ НАПРУЖЕНЬ В ЧАСТКОВО АУКСЕТИЧНИХ МАТЕРІАЛАХ У ПРОЦЕСІ ЇХ ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ

**М. Д. Раранський, А. В. Олійнич-Лисюк, Р. Ю. Ташчук, О. Ю. Ташчук**

Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича, Чернівці, Коцюбинського, 2, Україна, [tashchuk.roman@chnu.edu.ua](mailto:tashchuk.roman@chnu.edu.ua)

**Анотація.** В роботі представлені результати дослідження особливостей поведінки дефектів у частково-ауксетичних кристалах у звичайному і ауксетичному станах, і показано, що в умовах енергетичної або орієнтаційної заборони на їх рух у кристалічній ґратці деякі з них такі як дислокаційні кінки, домішки в дислокаційних атмосферах з високою ймовірністю можуть переміщатись ґраткою шляхом когерентного проникнення через потенціальні бар'єри.

**Ключові слова:** часткові ауксетики, тунелювання дислокаційних кінків, квантова дифузія домішок в дислокаційній атмосфері.

Здатність ауксетиків аномально деформуватись, нетипово реагувати на прикладене зовнішнє механічне поле, знайшла за останні кілька десятиків років цілу низку практичних застосувань в різних галузях економіки, військової техніки, ракетобудування, медицини, побуту. Унікальні властивості цих матеріалів – відносно «недавнє» надбання людства. Початок їх інтенсивного використання і вивчення припадає на 90-і роки ХХ століття. За останні три десятиріччя вдалось накопити чимало теоретичного і експериментального матеріалу про властивості ауксетиків, особливості їх поведінки в різних силових полях [1-6]. Це стосується полімерних, композиційних, а також кристалічних ауксетиків, однак про особливість поведінки дефектів у таких речовинах відомо не так уже і багато [7 – 9].

В той же час широке використання ауксетичних матеріалів у сучасних новітніх технологіях вимагає досконального розуміння механізмів їх механічної деформації, особливо тих, що протікають в екстремальних умовах обмеженої релаксації механічних напружень та їх накопичення в матеріалах. Механізми деформації реальних ауксетиків на сьогодні далеко не вивчені, особливо за умов, коли на рух дефектів, через який реалізується їх пластична деформація, накладаються заборони (енергетичні або орієнтаційні) [8].

Дослідження, проведені у цьому напрямку, показали, що поведінка дефектів кристалічної будови в ауксетиках відрізняється від їх поведінки у звичайних кристалах [7,9]. Так, наприклад, в ауксетичному індії дислокаційні атмосфери на 10-15% розрідженіші, а поля напружень навколо крайових дислокацій у 4 рази слабші, ніж у звичайному Іп. Це дозволяє припускати, що в умовах значних механічних напружень і енергетичної або орієнтаційної неможливості їх руху в ґратці такі дефекти зможуть переміщатись когерентно, тобто шляхом тунелювання [10].

Так в [10] було показано, що в матеріалах, в яких рух дефектів обмежувався енергетично (наприклад, для дислокацій в Al при криогенних температурах – високими бар'єрами Пайерлса) можливий під бар'єрний рух (тунелювання) геометричних перегинів на дислокаціях, який дозволив автору пояснити аномальну пластичність алюмінію при криогенних температурах.

Для того, щоб підтвердити достовірність такого припущення необхідно оцінити ступінь «квантовості» ауксетичного кристала, розраховавши параметр де Бура для частинок, що рухаються:

$$L \sim \frac{\left(\frac{\hbar}{a}\right)}{\sqrt{mE}} \sim \left(\frac{a_0}{a}\right), \quad (1)$$

величина якого росте із зменшенням маси частинок  $m$ , що утворюють систему, та енергії їх взаємодії  $E$ . Ймовірність  $w$  під бар'єрного проникнення частинок масою  $m$  через потенціальний бар'єр росте зі збільшенням  $L$  за експоненціальним законом:

$$w \sim \exp\left(-\frac{1}{L}\right) \quad (2)$$

На сьогодні відомо не так уже і багато істинно квантових кристалів, в яких реалізується механізм підбар'єрної дифузії атомів. До них належать кристали гелію  ${}^4\text{He}$  ( $L \sim 0,4$ ), його ізоотопу  ${}^3\text{He}$  ( $L \sim 0,5$ ); молекулярного водню  $\text{H}_2$  ( $L \sim 0,3$ ); неону  $\text{Ne}$  ( $L \sim 0,1$ ).

Однак і в звичайних кристалах за певних критичних обставин: під дією напружень на межі міцності при обмеженні дифузійної активності атомів або при орієнтаційній забороні на їх рух (високі енергетичні бар'єри) точкові дефекти, а також перегини на дислокаціях (kinks) можуть рухатись як дефектони, шляхом тунелювання [10].

Метою цієї роботи було оцінити ступінь «квантовості» таких дефектних підсистем як дислокаційні кінки, атоми домішок в дислокаційних атмосферах в частково-ауксетичних матеріалах, для виявлення можливих механізмів релаксації механічних напружень в них.

Для досягнення поставленої мети:

А) визначили енергетичні характеристики основних типів дефектів у кристалах, які відповідають за релаксацію механічних напружень. Оцінили енергії бар'єрів Пайерлса (Peierls potential) для крайових дислокацій у частково-ауксетичних берилії, індії,  $\alpha$ -діоксиді кремнію, енергії зв'язку атомів домішок з дислокаціями

$$E_{\text{вз}} = \frac{1}{3} \Omega_0 \sigma_{zz}, \quad (3)$$

де  $\Omega_0 > 0$  для міжвузольних атомів – надлишковий об'єм, який створює атом домішки в кристалічній ґратці речовини розчинника,  $\sigma_{zz}$  – компонент тензора механічних напружень, що виникають поблизу крайової дислокації.

$$\sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} \quad (4)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} \quad (4)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \quad (6)$$

При значенні коефіцієнта Пуассона для Ве в районі 300К  $\nu = 0,03$ , поле напружень навколо крайової дислокації (чи її компонента) буде мало відрізнятись від напруження для гвинтової дислокації:

$$\sigma_{zz} = \nu \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \left( -\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} + \frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} \right) = \nu \frac{Gb}{\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} \quad (7)$$

Підставивши (6) в (7) оцінили енергію взаємодії атома карбону з крайовою дислокацією у Ве:  $E_{\text{вз}} = 1,4 \cdot 10^{-23}$  Дж.

Б) розраховали швидкості руху цих дефектів у звичайних та ауксетичних напрямках у частково-ауксетичних кристалах індію, берилію, діоксиду кремнію;

В) оцінили параметри де Бура  $L$  і ймовірність  $w$  під бар'єрного проникнення цих дефектів через потенціальні бар'єри.

Так, для атомів карбону в дислокаційній атмосфері в кристалах Ве.

$$L \sim \frac{\hbar}{a\sqrt{mE_{33}}} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}}{3.584 \cdot 10^{-9} \text{ м} \sqrt{12 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \cdot 1.4 \cdot 10^{-28}}} = 0,349. \quad (8)$$

Як бачимо, параметр де Бюра вказує на значну ймовірність вмикання квантової дифузії атомів карбону, які знаходяться поблизу дислокацій у кристалічних ґратах берилію. Отримані результати дозволяють пояснити механізм раніше отриманих осциляцій на часових залежностях поглинання пружної енергії  $Q^{-1}(t)$  і  $f^2(t) \sim G_{ef}$  (рис.1).

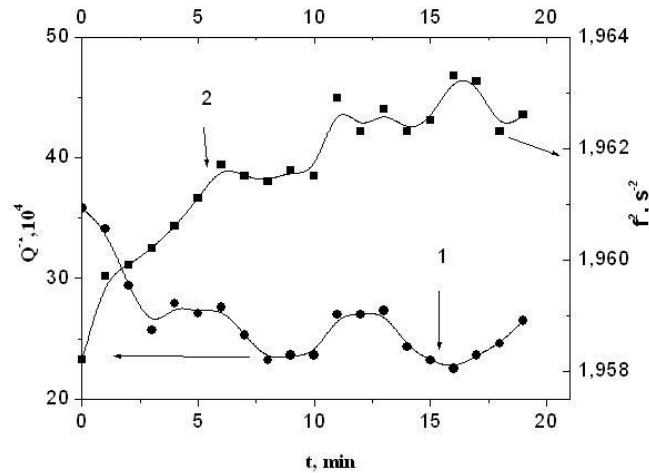


Рис. 1. Кінетичні залежності  $Q^{-1}(t)$  (1) і  $f^2(t) \sim G_{ef}$  (2) МТК Ве після термоциклювання в діапазоні 20-400°C і циклічної деформації при 260°C з амплітудою відносної деформації  $10^5$  (5хв)

Тунелювання атомів карбону в дислокаційній атмосфері приводить до ефекту розмиття атмосфери, яке утруднює рух дислокації виводячи її з процесу поглинання пружної енергії, але при цьому не закріплює її. Тому будь яке наступне збільшення механічних напружень знову приводить до прискорення дислокації та зростання рівня поглинання. Такий процес відбуватиметься допоки атоми карбону на локалізуються в ґратці Ве.

Таким чином, в роботі показано, що перегини на дислокаціях в In, Be,  $\alpha\text{-SiO}_2$  з високою ймовірністю можуть переміщатись когерентно, якщо інші механізми їх руху будуть енергетично або орієнтаційно заблоковані. Крім того, квантовими властивостями можуть володіти домішки з дислокаційних атмосфер, зокрема домішки карбону в полі напружень навколо дислокації в Ве.

### Література

1. М. Раранський, В. Балазюк, М. Гунько. Явище ауксетичності в твердих тілах. Чернівці: Друк Арт, 2016. – С.116 – 121.
2. X. Cheng, C. Liu, V.V. Silberschmidt, Auxetic Materials and Structures – Berlin: Springer, 2015, – 591.
3. Teik-Cheng Lim. Auxetic Materials and Structures/ Engineering Materials: Springer 2015.– 587 p.
4. Д.С.Лисовенко. Ауксетическая механика изотропных материалов, кристаллов и анизотропных композитов/Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Москва, 2019. – 392 с.
5. М. D. Rarans'ky, A. V. Olynych-Lysyuk, O. Yu. Tashchuk, and Ye. I. Kurek, Influence of the Type of Auxetic Effect on the Elastic and Inelastic Properties of Beryllium, Metallofiz. Noveishie Tekhnol., 38, No. 7: 923—934 (2016) (in Ukrainian), DOI: 10.15407/mfint.38.07.0923.
6. O. Yu. Tashchuk, M. K. Myshlyuk, A. V. Olynych-Lysyuk, and M. D. Rarans'ky, Evolution of Defect Subsystems During Microplastic Deformation of Auxetic Beryllium, Metallofiz. Noveishie Tekhnol. 2015.–37, No. 12. –С. 1595–1602. (in Ukrainian).

7. Про непружне двійникування, ауксетизм і структурні перетворення в Ве / В.О. Корпан, А.В. Олійнич-Лисюк, М.Д. Паранський, О.Ю. Ташук // *Металлофізика и новейшие технологии*. – 2018. – Т. 40, № 12. – С. 1625-1635.

8. M. D. Raransky, A. V. Oliynych-Lysyuk, R. Yu Tashchuk, O. Yu. Tashchuk, O. V. Lysyuk, “Peculiarities of Deformation in Crystals of In in a Wide Temperature Range”. *Metallophysics. The Latest Technologies*. 2018. – 40, 11.– С.1453–1463. (in Ukrainian).

9. Микола Паранський, Алла Олійнич-Лисюк, Роман Ташук, Олександр Лисюк. Особливості поведінки дефектів кристалічної будови в ауксетичних кристалах // *Журнал фізичних досліджень*. 2019.– Т.23, №2.– С.2998-13–2998-14.

10. М.М. Аракелян. Анализ и моделирование процесса движения дислокаций в монокристаллах алюминия // *Известия НАН Армении, Физика*. 2015.–Т.50, №1.– С.126-133.

## ON PECULIARITIES OF MECHANICAL STRESS RELAXATION IN PARTIALLY AUXETIC MATERIALS IN THE PROCESS OF THEIR PLASTIC DEFORMATION

M.D. Raransky, A. V. Oliynych-Lysyuk, R.Yu Tashchuk, O. Yu.Tashchuk

Yuri Fedkovich Chernivtsi National University, Chernivtsi, Kotsyubynskoho, 2, Ukraine,  
[tashchuk.roman@chnu.edu.ua](mailto:tashchuk.roman@chnu.edu.ua)

**Abstract.** *The paper presents the results of the study of the behavior of defects in partially auxetic crystals in normal and auxetic states, and shows that under conditions of energy or orientation prohibition on their movement in the crystal lattice, some of them such as dislocation kinks, impurities in dislocation atmospheres with high probability can move through the lattice by coherent penetration through potential barriers.*

**Keywords:** partial auxetics, tunneling of dislocation kinks, quantum diffusion of impurities in the dislocation atmosphere.

## ВПЛИВ ТЕРМОЦИКЛУВАННЯ НА СУБСТРУКТУРУ СПЛАВІВ Al-Cu ТА Al-Cu-Zn

А. І. Білюк<sup>1</sup>, В. В. Широков<sup>2</sup>, О. В. Мозговий<sup>1</sup>, М. В. Лисий<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Вінницький державний педагогічний університет імені Михайла Коцюбинського, Україна  
Вінниця, вул. Острозького, 32, [anbilyk57@gmail.com](mailto:anbilyk57@gmail.com)

<sup>2</sup>Українська Академія друкарства, Україна, Львів

<sup>3</sup>Вінницький національний технічний університет, Україна, Вінниця

**Анотація.** *В роботі представлені результати досліджень впливу термоциклування на механізм полігонізації в конструкційних матеріалах на основі алюмінію.*

**Ключові слова:** термоциклування, субструктура, дисперсійна фаза, дислокації, внутрішнє тертя.

Термоциклування (ТЦО) як і динамічне старіння ефективно впливає на розвиток субструктури і розпад твердого розчину.

Дослідження закономірностей зміни структури і властивостей старіючих сплавів Al-Cu і Al-Cu-Zn при високотемпературній ТЦО (ВТЦО) у рівноважному і напруженому станах (ПЗН) проводились на установці типу оберненого крутильного маятника при частоті 1 Гц. ВТЦО проводилося в інтервалі температур (495-520) К. Швидкість нагрівання і охолодження витримувалась на рівні (30-40) К/с. Величина напруження на зразок під час обробки становила  $0,2 \sigma_{0,2}$ . Мікротвердість вимірювали на приладі ПМТ-3. Хімічний склад сплавів: сплав 1 - Al-4%Cu; сплав 2 - Al-4%Cu -4%Zn.

Вплив домішок на процеси формування і стабілізації структури відбивається за характером поведінки непружних ефектів А, В, С [1, 2], що мають релаксаційну природу і