

М.Є. БОСІН,^{1,2} Є.П. ГОМОЗОВ,^{1,2} Т.В. ОТРОШКО,^{1,2} А.О. ПРОКОПЕНКО^{1,2}

¹ Харківська гуманітарно-педагогічна академія
(Пров. Руставелі, 7, Харків, 61001)

² Національний технічний університет (Харківський політехнічний інститут)
(Вул. Куртичова, 2, Харків, 61002)

КРИСТАЛОГЕОМЕТРИЧНИЙ АНАЛІЗ ДИСЛОКАЦІЙНИХ РЕАКЦІЙ ТА ПЕРЕТВОРЕНЬ ДИСЛОКАЦІЙ “ЛІСУ” НА ДВІЙНИКОВИХ МЕЖАХ У ГПУ-КРИСТАЛАХ

УДК 539

Розглянуто реакції взаємодії базисних, пірамідальних і призматичних дислокацій з двійниковими дислокаціями у ГПУ-кристалах. Результати аналізу таких взаємодій є необхідними для оцінки феноменологічних параметрів математичної моделі розвитку одиничних двійникових прошарків. Щільність кожного виду ковзних дислокацій (дислокацій “лісу”) в околі двійникових меж визначає характер дислокаційних реакцій на двійникових межах і, по суті, розвиток двійників. У роботі розглянуто всі можливі взаємодії між двійниковими дислокаціями і дислокаціями “лісу” в ГПУ-кристалах. Результати представлені у вигляді, який є зручним для подальшого аналізу розвитку двійникових прошарків у різних режимах навантаження.

Ключові слова: двійник, двійникова межа, дислокаційна структура, базисна дислокація, пірамідальна дислокація, призматична дислокація, дислокація “лісу”.

1. Вступ

У роботі [1] запропоновано математичну модель розвитку двійникових прошарків у металевих кристалах для різних режимів навантаження, за різних умов.

Робота [1] вийшла значно пізніше, ніж роботи І. Лівшиця [2], А. Котрелла [3], А. Косевича [4], О. Острікова [5], які донедавна вважалися класичною теорією двійникування. Вже після виходу цих класичних робіт з'явилося досить багато ціка-

вих експериментів з вивчення властивостей одиничних двійників у металевих кристалах, поведінки двійникових меж у різних режимах навантаження зразків. Виявлено кілька дуже цікавих явищ на двійниках з навантаженням. Зокрема, виявлено ефект Баушингера зі знакозмінними навантаженнями, ефект втрати й подальшого відновлення зміцнення межами двійників і подальшого відновлення з пульсуючими навантаженнями, деякі особливості поведінки двійників з повзучістю, а також з ударними навантаженнями тощо. Всі ці ефекти і явища в різних аспектах докладно описано в наших роботах [6–15].

У [1] була запропонована математична модель, з якої слідують перелічені явища, але для з'ясування фізичного сенсу параметрів цієї моделі необхідне розуміння не тільки взаємодії двійниковальних дислокацій одна з одною, але і взаємодії цих дислокацій з іншими перешкодами. Основ-

Цитування: Босін М.Є., Гомозов Є.П., Отрошко Т.В., Прокопенко А.О. Кристалогеометричний аналіз дислокаційних реакцій та перетворень дислокацій “лісу” на двійникових межах у ГПУ-кристалах. *Укр. фіз. журн.* **71**, № 8, 701 (2026).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2026. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

ISSN 2071-0194. *Укр. фіз. журн.* 2026. Т. 71, № 8

ними об'єктами, що перебувають на шляху руху двійникувальних дислокацій є дислокації лісу. Отже, основною задачею зараз є аналіз дислокаційних реакцій між двійникувальними дислокаціями й дислокаціями лісу. Задача досить об'ємна, тому в цій роботі ми будемо розв'язувати її лише для ГПУ-кристалів.

2. Види ковзання в ГПУ-кристалах

Найлегшим ковзанням для всіх металів з ГПУ ґратками є ковзання в системі $\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Цей вид ковзання називається базисним ковзанням. Більш важке ковзання відбувається в системі $\{\bar{1}\bar{1}22\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$. Цей вид ковзання називається пірамідальним ковзанням. Воно характеризується більшою межею текучості, ніж базисне ковзання, і реалізується, в основному, якщо останнє утруднено. Ковзання в системі $\{\bar{1}\bar{1}00\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ у більшості ГПУ металів спостерігається лише за високих температур. Цей вид ковзання називається призматичним.

Для передбачення результатів взаємодії двійникування з ковзанням, слід по-перше, шляхом урахування геометричних факторів і меж текучості для різних систем ковзання виявити активні системи, по-друге, провести аналіз реакцій між двійникувальними дислокаціями й відповідними ковзними дислокаціями.

3. Проникнення дислокацій “лісу” у двійники. Дислокаційні реакції

Всі випадки проникнення повних дислокацій з матриці у двійник можна розділити на три групи:

1. Вектор Бюргерса повної дислокації $b \parallel \eta_1$ (η_1 – напрям двійникового зсуву). В цьому випадку повні дислокації переходять у двійник як такі гвинтові дислокації, що поперечно ковзають без дислокаційних реакцій на межах.

2. $b \parallel \eta_2$ (η_2 – пов'язаний напрям зсуву); повна дислокація розпадається на межі на дві двійникувальні дислокації та одну повну в ґратках двійника. Такі реакції повинні сприяти збільшенню товщини двійникового прошарку.

3. Вектор Бюргерса повної дислокації b не є паралельним ні до напрямку двійникового зсуву η_1 , ні до пов'язаного напрямку зсуву η_2 ; тоді повна дислокація розпадається на одну часткову й пов-

ну у двійнику. Така взаємодія повинна гальмувати розвиток двійника.

Аналіз усіх можливих дислокаційних взаємодій у гексагональних кристалах з урахуванням дислокаційних реакцій і порогів, що утворюються, дає змогу зробити деякі загальні висновки.

1. На дислокаціях, відповідальних за базисне ковзання, на перетині будь-яких інших дислокацій, що існують у гексагональних кристалах, завжди утворюються ковзні пороги, які не є серйозними перешкодами для їхнього руху. Отже, при базисному ковзанні відсутнє зміцнення внаслідок утворення порогів на перетині дислокацій. Можливо, такими обставинами деякою мірою пояснюється легкість базисного ковзання. Звідси також випливає, що пластична деформація вздовж площини (0001), як правило, не повинна супроводжуватися утворенням вакансій.

2. У гексагональних щільно упакованих кристалах є сприятливі умови для утворення закріплених вузлів дислокаційних ліній, що може сприяти розмноженню дислокацій за механізмом Франка-Ріда. З іншого боку, спротив руху дислокацій у площинах призми, пірамід I та II роду значно перевищує спротив руху в площинах базису, що ускладнює поперечне ковзання. Все це повинно спричиняти сильну локалізацію смуг ковзання в ГПУ-кристалах, що і спостерігається експериментально.

3. При ковзанні в площинах піраміди II роду легко можуть утворюватися дислокаційні конфігурації, що можуть бути джерелами Франка-Ріда. Можливо, це є одною з причин того, що джерела Франка-Ріда в більшості випадків спостерігаються в кристалах з гексагональною структурою.

4. У гексагональних кристалах завдяки перетину дислокацій у площинах піраміди можливо утворення сидячих дислокацій. Останні повинні істотно впливати на розвиток дислокаційної структури при деформації в умовах, що унеможливають базисне ковзання. Таким чином, максимальне зміцнення в ГПУ-кристалах має відбуватися при пірамідальному ковзанні.

Водночас слід зазначити, що ковзання повних дислокацій носить випадковий характер і залежить від того, чи зустріне дислокація у діючій площині ковзання іншу дислокацію у власній чи іншій площині ковзання. При двійникуванні всі дислокації в материнському кристалі в області руху меж двійника взаємодіють з частковими двій-

никувальними дислокаціями і, в залежності від характеру цієї взаємодії (притягання чи відштовхування) повні дислокації, переходять до двійника, чи відштовхуються його межею. Відштовхувальна взаємодія двійникувальних дислокацій і повних дислокацій спричиняє віддалення повних дислокацій від меж двійника, і область поблизу межі набуває орієнтації материнського кристала з підструктурою, що створена взаємодіями між повними дислокаціями.

Характер дислокаційних реакцій на межі двійників залежить не тільки від об'єкта, а й значною мірою від орієнтації кристалу відносно прикладеної напруги, яка визначає тип дислокацій “лісу”, що проявляється в процесі двійникування. За напруг, більших, ніж межа плинності, ковзання в кристалах має неоднорідний характер – у місцях локальних концентраторів напруг. Некогерентні межі двійників є концентраторами напруг, тому в їхньому околі ковзання відбувається більш інтенсивно, ніж в інших частинах кристалу. Водночас можливий перехід дислокацій з матриці у двійник, що супроводжується генеруванням двійникувальних дислокацій. Розглянемо можливий перехід дислокацій “лісу” з материнського кристалу у двійник. Наочне зображення переходу базисної і пірамідальної дислокацій “лісу” наведено на рис. 1, де світло-сірим кольором позначено ґратки материнського кристалу, а темно-сірим – ґратки двійника.

Із схеми на рис. 1 видно, що перехід двох базисних дислокацій супроводжується утворенням двох двійникувальних дислокацій та однієї пірамідальної дислокації в ґратках двійника. Аналітично це перетворення представимо у вигляді:

$$(B) \quad \frac{2}{3} [1210]_{4,00}^{(0001)} \rightarrow \frac{1}{3} [2\bar{1}\bar{1}3]_{4,46}^{*(2\bar{1}12)*} + \left[\frac{\left(\frac{c}{a}\right)^2 - 3}{\left(\frac{c}{a}\right)^2 + 3} \right] [01\bar{1}\bar{1}]_{0,03}^{(01\bar{1}2)}.$$

Зірочками відмічені індекси площини та напрямів у ґратках двійника, а індекси справа вгорі біля векторів Бюргерса показують площині залягання дислокацій. Цифри справа внизу біля векторів Бюргерса показують величини енергій дислокацій у відносних одиницях (відношення величини квадрату вектору Бюргерса дислокації до квадрату параметру ґраток). Бачимо, що реакція (Б)

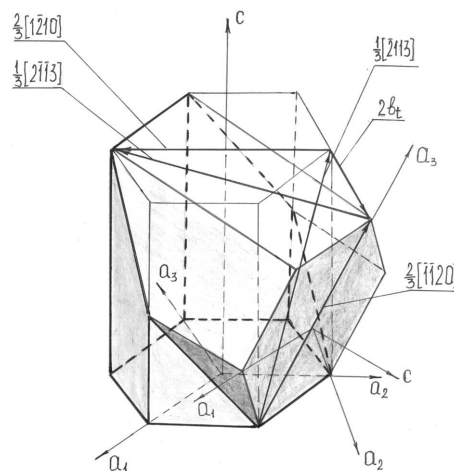


Рис. 1

енергетично не вигідна і відбувається тільки під дією зовнішніх зсувів напруг. Це, по суті, пояснює збільшення меж плинності для початку руху ґраток двійників при збільшенні щільності базисних дислокацій “лісу”. Таким чином, перехід базисних дислокацій з матриці у двійник супроводжується генеруванням двійникувальних дислокацій. Це, у свою чергу, збільшує швидкість руху меж двійників під постійною зовнішньою напругою зсуву. Реальність такого механізму підтверджується тим, що в тілі двійника експериментально спостерігаються продукти протікання реакції (Б) у вигляді пірамідальних дислокацій, яких не було в зразку до його двійникування.

На рис. 1 показано також перехід пірамідальної дислокації “лісу” з матриці у двійник. В аналітичному вигляді цей перехід описується таким співвідношенням:

$$(П) \quad \frac{1}{3} [2113]_{4,46}^{(2\bar{1}\bar{1}2)} + \left[\frac{\left(\frac{c}{a}\right)^2 - 3}{\left(\frac{c}{a}\right)^2 + 3} \right] [01\bar{1}\bar{1}]_{0,03}^{(01\bar{1}1)} \rightarrow \frac{2}{3} [\bar{1}\bar{1}20]_{4,0}^{*0001*}.$$

З реакції (П) видно, що перехід однієї пірамідальної дислокації з матриці у двійник супроводжується виходом двох двійникувальних дислокацій і включенням у двійник двох базисних дислокацій, тому збільшення у вихідному зразку щільності пірамідальних дислокацій “лісу” зумовлює зменшення швидкості руху меж двійників і суттє-

вого збільшення межі плинності, пов'язаної з початком руху межі, порівняно зі збільшенням базисних дислокацій “лісу”. На відміну від реакції (Б), реакція (П) енергетично вигідна. Слід додати, що пірамідальні дислокації “лісу” з векторами Бюргерса на відміну від розглянутих у реакції (П), при переході з матриці у двійник не описується утворенням дислокацій з відомими векторами Бюргерса. Тому збільшення щільності дислокацій у системі $\{1122\}\langle 1123 \rangle$ викликає збільшення межі плинності, що супроводжується початком руху меж двійників, із включенням у двійник дислокацій зі складними векторами Бюргерса. Можна вважати, що наведений вище кристалогеометричний аналіз переходу дислокацій “лісу” з матриці у двійник є необхідною передумовою для розробки подальшого аналітичного опису реакцій перетворення повних дислокацій при їх включенні у двійник. Цей метод слід рекомендувати для дислокаційних зернографічних перетворень і реакцій у кристалах з іншими типами кристалічної ґратки при їх двійникуванні.

Окремо слід зупинитися на взаємодії та дислокаційних реакціях призматичних дислокацій з дефектами пакування. При формуванні призматичних дислокацій у площині (0001) окрім зсуву на величину $\frac{1}{3}\langle 10\bar{1}0 \rangle$ необхідно зробити зближення сусідніх щільно упакованих на величину $\frac{C}{2}$. Тоді вектор Бюргерсу призматичних дислокацій з дефектами пакування стає рівним:

$$\frac{1}{3} [10\bar{1}0] + \frac{1}{2} [0001] = \frac{1}{6} [20\bar{2}3].$$

При вилученні одного щільно запакованого шару можливе формування дефектів пакування двох типів. Внаслідок цього можливі чотири варіанти взаємодії призматичних дислокацій.

1) Вектори Бюргерса призматичних кілець однакові. У цьому випадку ділянки петель, що зустрічаються, намагаються анігілювати так, що в результаті повинна утворюватися одна велика петля.

2) Компоненти векторів Бюргерса в площині базису складають кут 120° , наприклад, $\frac{1}{3} [\bar{1}100]$ і $\frac{1}{3} [10\bar{1}0]$. Типи дефектів пакунків обох петель однакові. Змикання дислокаційних кілець супроводжуватиметься формуванням на межі дислокацій з компонентою в площині базису. Дислокація з базисною компонентою $\frac{1}{3} [\bar{2}110]$, у свою чергу, може

розщепитися згідно з реакцією

$$\frac{1}{3} [\bar{2}101] \rightarrow \frac{1}{3} [\bar{1}100] + \frac{1}{3} [\bar{1}010].$$

Між частковими дислокаціями з компонентами $\frac{1}{3} [\bar{2}110]$ та $\frac{1}{3} [\bar{1}010]$ формується дефект пакування.

3) Компоненти векторів Бюргерса у площині базису утворюють кут 60° , наприклад, $\frac{1}{3} [\bar{1}100]$ і $\frac{1}{3} [01\bar{1}0]$. У цьому випадку типи дефектів пакунків обох петель різні. Між дотиковими петлями відбудуватиметься реакція

$$\frac{1}{3} [\bar{1}100] - \frac{1}{3} [01\bar{1}0] = \frac{1}{3} [\bar{1}010].$$

4) Базисні компоненти векторів Бюргерса антипаралельні, наприклад, $\frac{1}{3} [\bar{1}100]$ і $\frac{1}{3} [1\bar{1}00]$. У цьому випадку типи дефектів пакунків різні. Відповідна реакція між петлями, що дотикаються, буде

$$\frac{1}{3} [\bar{1}100] - \frac{1}{3} [1\bar{1}00] = -\frac{2}{3} [\bar{1}100].$$

Реакція енергетично невигідна. Тому дислокація з базисною компонентою $\frac{2}{3} [\bar{1}100]$ буде намагатися розщепитися на три дислокації

$$\frac{2}{3} [\bar{1}100] \rightarrow \frac{1}{3} [01\bar{1}0] + \frac{1}{3} [\bar{1}100] + \frac{1}{3} [\bar{1}010].$$

Отже, розглянуто поведінку усіх трьох видів дислокацій “лісу” в ГПУ-кристалах, які, в основному і визначають рухливість двійникових меж, а також усі наведені в [1] ефекти (ефект Баушингера на двійникових межах, ефект втрати і подальшого відновлення зміцнення двійникових меж при пульсації напруг тощо).

4. Висновок

У роботі [1] запропоновано математичну модель, яка дає змогу описати поведінку двійникових меж в ГПУ-кристалах з різними режимами навантаження: у режимі активного навантаження, у режимі повзучості, зі знакозмінними навантаженнями та у випадку пульсації навантажень. Всі ці режими були експериментально реалізовані на різних ГПУ-металах і не тільки. Результати представлено в роботах [6–15]. Там же було виявлено та виміряно всі явища, описані в роботі [1]. Математична модель дає змогу шляхом порівняння розв'язків відповідного математичного рівняння з експериментальними даними знайти параметри моделі. Проте сама лише відповідність експериментальним даним

ще не забезпечує фізичного обґрунтування моделі, оскільки причини виникнення і ефект Баушингера зі знакозмінними навантаженнями, ефект втрати зміцнення двійниковими межами при повторних навантаженнях та решта ефектів у різних режимах навантаження залишаються нез'ясованими. А причина полягає у взаємодії між двійниковувальними дислокаціями і дислокаціями "лісу" з їхніми численними продуктами взаємодії і розпаду.

Ця робота є кроком до розуміння причин такої різноманітної поведінки двійникових меж при зміні режимів навантаження, оскільки на шляху руху двійниковувальних дислокацій розташовані дислокації "лісу", взаємодія з якими значною мірою визначає шукані причини. Наступними кроками у цьому напрямі є: по-перше, дослідження дислокаційних реакцій між двійниковувальними дислокаціями і дислокаціями "лісу" в кристалах з іншими типами кристалічних ґраток; по-друге, якісне і кількісне зіставлення результатів дислокаційних взаємодій з параметрами математичної моделі, запропонованої в [1], з метою надання їй фізичного обґрунтування.

1. М.Є. Босін, Т.Г. Дригач, В.М. Русскін. Математичне узагальнення результатів експериментів зі спостереження розвитку одиничних двійникових прошарків у металевих матеріалах. *УФЖ* **66** (9), 810 (2021).
2. I.M. Lifshits. On the macroscopic description of the crystal twinning phenomenon. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **18**, 1134 (1948) (in Russian).
3. A.H. Cottrell, B.A. Bilby. A mechanism for the growth of deformation twins in crystals. *Phil. Mag.* **42**, 573 (1951).
4. А.М. Косевич, Л.А. Пастур О дислокационной модели двойникования. *Физика твёрдого тела* **3**, 1291 (1961).
5. О.М. Остриков. Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника. *Вестн ГГТУ им. П.О. Сухого* № 2, 10 (2006).
6. M.E. Bosin, V.M. Russkin. Influence of alloying on the mobility of twin boundaries in beryllium single crystals. In: *Proceedings of the 6th International Conference "Development of Science in the 21st Century"* (Kharkiv, 2015), Vol. 1, p. 6 (in Russian).
7. M.E. Bosin, N.V. Omel'chenko. Motion of twin boundaries in zinc single crystals under shock loading. In: *Proceedings of the International Conference "Actual Problems of Strength"* (Kharkiv, 2014), p. 123 (in Russian).

8. M.E. Bosin, F.F. Lavrentev, V.N. Nikiforenko. Dislocation structure stability of the zinc crystals. *Funct. Mater.* **10**, 661 (2003).
9. M.E. Bosin, F.F. Lavrentev, V.N. Nikiforenko. Al-Be-Mg alloy strength and plasticity within 300 to 4.2 K temperature range. *Funct. Mater.* **10**, 253 (2003).
10. M.E. Bosin, F.F. Lavrentev, V.N. Nikiforenko. Changes in resistivity and structural state of Zn single crystals under low-temperature cycling. *Funct. Mater.* **7**, 90 (2000).
11. M.E. Bosin, V.N. Nikiforenko, V.G. Kolpakov, N.V. Kolpakova. Twin boundaries motion in zinc single crystals under shock loading. *Funct. Mater.* **6**, 61 (1999).
12. M.E. Bosin, F.F. Lavrentev, V.N. Nikiforenko. Nonlinearity and localization of the plastic deformation in zinc single crystals with forest dislocation. *Mater. Sci. Eng.* **5**, 191 (1998).
13. M.E. Bosin. Specific features of twin boundaries motion in beryllium single crystals at the twinning and untwining. *Funct. Mater.* **4**, 557 (1997).
14. M.E. Bosin, F.F. Lavrentev, V.N. Nikiforenko. On the motion of a grown intergranular boundary with twin orientation in Be crystals of pure zinc. *Phys. Status Solidi A* **157**, 213 (1996).
15. F.F. Lavrentev, M.E. Bosin. The peculiar effect of forest dislocations on single twin layer development in zinc and beryllium single crystals. *Mater. Sci. Eng.* **33**, 243 (1978).

Одержано 06.12.25

M.E. Bosin, E.P. Gomozev,
T.V. Otroshko, A.O. Prokopenko

CRYSTALLOGEOMETRIC ANALYSIS OF DISLOCATION REACTIONS AND TRANSFORMATIONS OF "FOREST" DISLOCATIONS AT TWIN BOUNDARIES IN hcp CRYSTALS

Interaction reactions of basal, pyramidal, and prismatic dislocations with twinning dislocations in hcp crystals have been considered. The corresponding information is necessary for evaluating the phenomenological parameters of the mathematical model for the development of single twin layers. The density of gliding dislocations ("forest" dislocations) of each type in the vicinity of twin boundaries determines the nature of dislocation reactions at twin boundaries and, in essence, the development of twins. All possible interactions between twinning and forest dislocations in hcp crystals have been analyzed. The results are presented in a form that is convenient for further analysis of the development of twin layers under various loading conditions.

Keywords: twin, twin boundary, dislocation structure, basal dislocation, pyramidal dislocation, prismatic dislocation, "forest" dislocation.