

Краткие сообщения

05

Компьютерное моделирование образования фрагментов в полосах сдвига

© Ю.В. Свирина, В.Н. Перевезенцев

Нижегородский филиал Института машиноведения им. А.А. Благонравова РАН,
603024 Нижний Новгород, Россия
e-mail svirina@phys.unn.ru

(Поступило в Редакцию 20 июля 2012 г.)

Методом компьютерного моделирования проведен анализ условий возникновения фрагментов со среднеугловыми границами в полосах сдвига. Показано, что основным условием преобразования слабоориентированных дислокационных структур в фрагментированную структуру является подавление активной пластической деформации внутри субзерна упругими полями дисклинаций, возникающих в стыках субзерна в результате рассогласования пластических разворотов по отдельным его границам. При выполнении этих условий при продолжающейся деформации в окружающей матрице это субзерно ведет себя подобно недеформируемому включению и испытывает кристаллографический разворот. При этом разориентировка субзерна непрерывно увеличивается, преобразуя исходные малоугловые дислокационные границы в среднеугловые и в пределе, в большеугловые границы.

Введение

Известно, что в процессе пластической деформации металлов и сплавов наблюдается явление фрагментации — разбиение исходных зерен поликристалла на более мелкие по размерам взаимно разориентированные области (субзерна), разделенные среднеугловыми (с углами разориентировки 5–6 градусов) границами. Это явление носит фундаментальный характер и наблюдается в материалах с различным типом кристаллической решетки при различных схемах и режимах пластической деформации [1,2].

В проведенных ранее теоретических исследованиях было показано, что описание процесса формирования разориентированных областей кристаллов может быть проведено в рамках кинетического подхода, основанного на представлениях о самосогласованной динамике дислокационных ансамблей вблизи мезодефектов (дисклинаций, дисклинационных диполей и планарных скоплений дислокаций ориентационного несоответствия), появляющихся в результате неоднородной в объеме зерен и по ансамблю зерен поликристалла пластической деформации [3–5].

Однако в этих работах рассматривалась лишь начальная стадия процесса фрагментации, а именно образование в упругом поле дисклинаций оборванных малоугловых дислокационных границ с разориентировкой, не превышающей мощности дисклинаций (менее градуса).

Для создания адекватной теории фрагментации ключевое значение имеет построение физической модели, описывающей процесс трансформации малоугловых границ в средне- и большеугловые границы зерен в процессе пластической деформации.

Целью настоящей работы является анализ условий возникновения фрагментов со среднеугловыми границами в рамках кинетического подхода в частном случае, когда начальная стадия фрагментации осуществляется путем возникновения полос сдвига и разбиения их на фрагменты, разделенные среднеугловыми границами, что экспериментально наблюдалось в ряде ГЦК- и ОЦК-металлов и сплавов [6].

Описание модели

Пусть пластическая деформация в процессе нагружения локализуется в полосах сдвига. Рассмотрим полосу сдвига I (рис. 1) в монокристалле, в которой движение дислокаций в поле внешних напряжений осуществляется по единственной системе скольжения. Взаимодействие разноименных дислокаций приводит к формированию

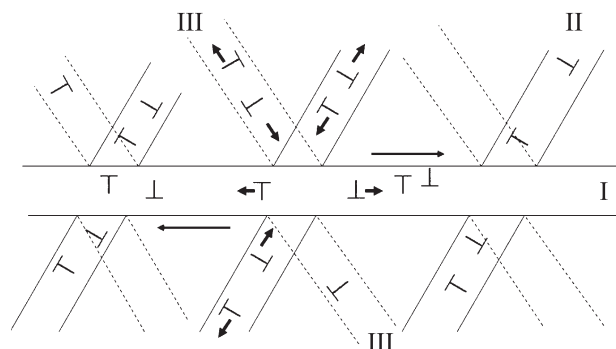


Рис. 1. Схематическое представление систем полос сдвига в модельном монокристалле — I, II — активные системы, III — аккомодационная.

и накоплению малоподвижных дислокационных диполей внутри полосы и, как следствие, к упрочнению и необходимости увеличения внешнего напряжения для продолжения деформации. При превышении внешним напряжением некоторого порогового значения активируются вторичные полосы сдвига II (рис. 1). Дислокации вторичной системы скольжения, достигая границ первичной полосы, вступают в реакцию с движущимися внутри нее дислокациями, что приводит к образованию сидячих дислокаций (в ГЦК-материалах — барьеров Ломера–Коттрелла). Таким образом, в окрестности края полосы на некотором участке длины l будет происходить накопление барьерных дислокаций. Поскольку плотность дислокаций, осуществляющих пластическую деформацию в первичной полосе сдвига к моменту активации вторичной системы скольжения достаточно велика, то эти реакции происходят преимущественно вблизи границ полосы [5]. Накопление дислокаций на границе полосы приводит к росту внутренних полей напряжений, препятствующих развитию деформации во вторичных полосах сдвига. Релаксация этих полей возможна за счет включения аккомодационной системы скольжения III (рис. 1). Для простоты предположим, что вторичная и аккомодационная системы скольжения ориентированы под углами 60° и 120° по отношению к первичной полосе сдвига соответственно. При такой геометрии полос сдвига поля напряжений, обусловленные тангенциальными (по отношению к первичной полосе) компонентами вектора Бюргера дислокаций, накапливающихся на границе полосы, эффективно релаксируют, а поле напряжений от нормальных компонент b_n может быть эквивалентно представлено как поле от оборванных стенок дислокаций (длиной l) или как поле от дисклинационных диполей с плечом l мощности $\omega_i \approx \frac{b_n}{h_i}$, где h_i — расстояние между дислокациями. Конечно, в действительности на границе полосы формируется структура, которую можно представить в виде не идеальной стенки, а размазанной в слое Δ и неоднородной по плотности дислокаций „стенки“. Тем не менее компьютерное моделирование показывает, что при величинах отношения $\Delta/l < 0.1$ и случайном распределении плотности дислокаций внутри „стенки“ поля сдвиговых напряжений от нее оказываются весьма близки к полю идеальной дислокационной стенки и соответственно на некоторых расстояниях от стенки практически совпадает с полем дислокационного диполя (рис. 2).

Это дает основание дислокационную структуру, формирующуюся на границах полосы скольжения в процессе пластической деформации с участием всех трех систем скольжения (двух активных и одной аккомодационной), представить в первом приближении как систему двусосных диполей клиновидных дисклинаций.

В работах [1–4] было показано, что упругое поле дисклинаций возмущает ламинарный поток дислокаций, что приводит к формированию динамических оборванных малоугловых субграниц, ориентированных перпендикулярно плоскости скольжения дислокаций. Таким

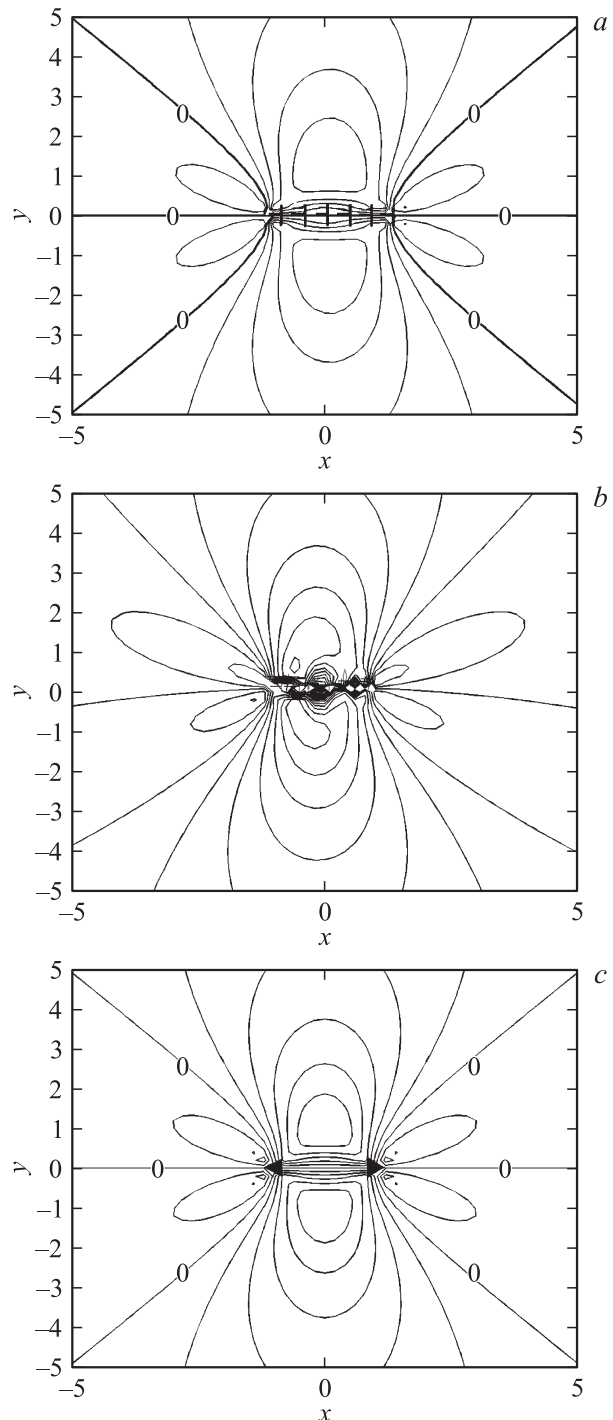


Рис. 2. Контуры постоянных полей сдвиговых напряжений в случае *a* — оборванной стенки эквидистантно расположенных дискретных дислокаций с плотностью вектора Бюргера 0.01, *b* — хаотического распределения того же числа дислокаций в слое $\Delta = 0.2 \mu\text{m}$, *c* — двусосного диполя клиновидных дисклинаций с мощностью 0.01 rad.

образом, появление дисклинационных диполей на границах первичной полосы сдвига приведет к образованию внутри нее стенок дислокаций (оборванных дислокационных границ), ориентированных перпендикулярно к

первичной плоскости скольжения. В процессе сдвиговой деформации по первичной системе скольжения дисклинационные диполи, расположенные на противоположных границах полосы, смещаются друг относительно друга в противоположных направлениях. При этом одновременно с ними смещаются и оборванные стенки дислокаций. При этом неизбежно возникновение ситуаций, когда стенки, расположенные вдоль границ полосы и внутри полосы, замыкаются в субзерно, сформированное из системы замкнутых малоугловых границ с разориентировками, не превышающими мощность дисклинаций.

Как будет показано ниже, возможно создание таких условий, когда активная деформация внутри некоторых субзерен подавляется, а продолжающаяся пластическая деформация в окружающем его материале приводит к его кристаллографическому развороту и трансформации малоугловых границ в среднеугловые границы зерен.

Исследование процессов формирования субзерна и изменение его разориентировки в процессе пластической деформации проведем методом компьютерного моделирования.

Результаты моделирования

Рассмотрим эволюцию ансамбля дислокаций в первичной, вторичной и аккомодационной полосах скольжения, расположенных под углами $\alpha = 0^\circ$ и $\beta = 60^\circ$, $\gamma = -60^\circ$ к оси Ox соответственно, под действием суммарных полей внутренних (от ансамбля дефектов) и внешних напряжений в рамках компьютерной модели, развитой в работах [3–5]. Согласно данной модели, внутри каждой полосы происходят самосогласованные процессы генерации и движения дислокаций. Генерация дислокаций осуществляется случайно распределенными источниками типа Франка–Рида при превышении напряжения порогового значения σ_c , аннигиляция дислокаций противоположного знака и реакции между дислокациями первичной и вторичной систем скольжения происходят при сближении дислокаций на некоторое критическое расстояние. Движение дислокаций рассматривается в квазивязком приближении. Сток дислокаций осуществляется на свободных поверхностях кристалла. Расчеты проводились для модельного кристалла размера $10 \times 10 \mu\text{m}$ и толщинах первичных и вторичных полос скольжения $1\text{--}5 \mu\text{m}$ при значении величин внешнего напряжения $\sigma = 3 \cdot 10^{-3} G$ (G — модуль Юнга), $\sigma_c \sim 2.5 \cdot 10^{-3} G$, вектора Бюргерса $b = 0.25 \cdot 10^{-9} \text{m}$, подвижности дислокаций $\sim 10^{-4} \text{Pa}^{-1} \text{s}^{-1}$.

Рассмотрим результаты компьютерного моделирования динамики дислокационного ансамбля. На рис. 3 представлена дислокационная структура в момент времени $t = 300 \text{s}$ после включения вторичной системы скольжения (при величине деформации $\varepsilon \sim 16\%$ во вторичной полосе). Видно, что в процессе пластической деформации возникает система замкнутых дислокационных границ, формирующих субзерно в первичной полосе сдвига. Разориентировка субзерна растет и при значении

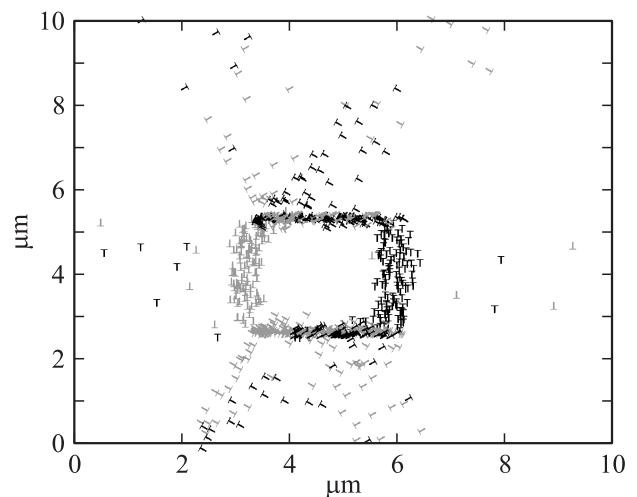


Рис. 3. Дислокационная структура, сформированная за время $t = 500 \text{s}$ при действии двух активных и одной аккомодационной систем скольжения.

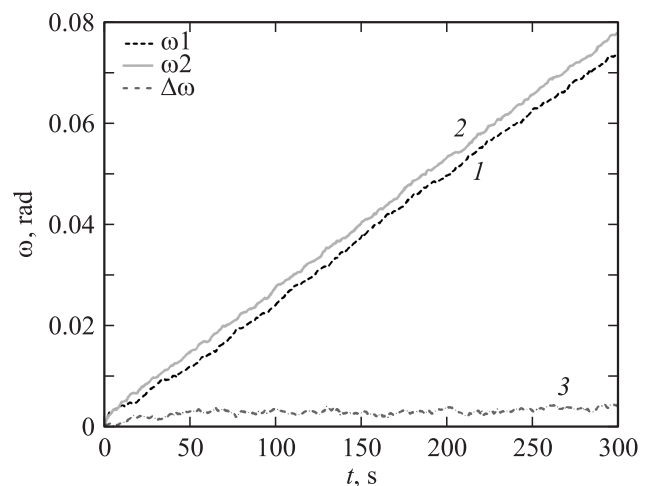


Рис. 4. Изменение разориентировок вертикальных ω_2 (2) и горизонтальных ω_1 (1) границ субзерна и величины рассогласования пластических разворотов $\Delta\omega$ (3) в его стыках.

$t = 300 \text{s}$ достигает 5° (рис. 4). Важно подчеркнуть, что разориентировка вертикальных ω_1 и горизонтальных ω_2 границ субзерна не одинакова. Таким образом, в стыках субзерна имеется рассогласование $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ пластических разворотов по границам зерен, в результате чего в них возникают разнозаряженные клиновые дисклинации мощности $\Delta\omega$, в совокупности формирующие дисклинационный квадруполь. При этом средняя мощность дисклинаций квадруполя в процессе деформации возрастает и выходит на насыщение, достигая некоторой постоянной величины порядка 0.005rad (рис. 4).

Расчеты при больших значениях деформации качественно не изменяют общую картину, т.е. разориентировка субзерна непрерывно нарастает при постоянной мощности $\Delta\omega$. Однако следует отметить, что при

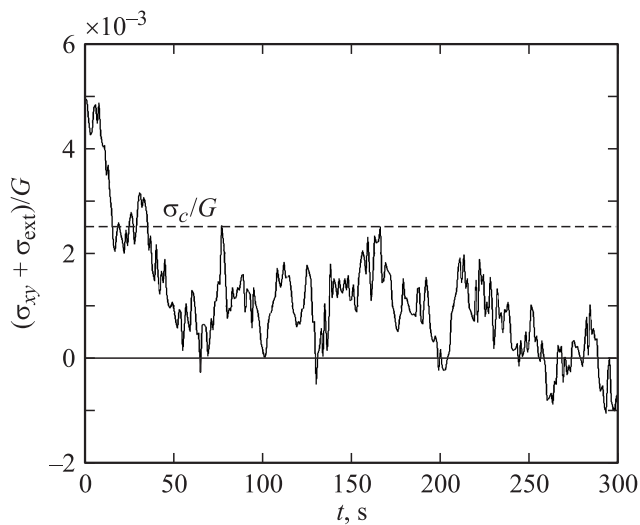


Рис. 5. Зависимость усредненного по длине квадруполя суммарного поля внешних и внутренних сдвиговых напряжений σ_{xy} от времени деформации. σ_c — пороговое напряжение срабатывания дислокационного источника.

приближении ее к верхней границе брэндоновского интервала углов [7] для малоугловых границ (8° – 9°) модель становится неприменимой, так как при больших значениях разориентировок необходимо учитывать пластический поворот плоскостей скольжения внутри субзерна, вызванный слиянием ядер дислокаций в его границах.

Обсуждение

Рассмотрим причины, приводящие к возможности трансформации малоугловых границ в среднеугловые. Образование замкнутой системы малоугловых границ и квадруполя дисклинаций мощности $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ приводит к тому, что внутри субзерна возникает поле внутренних сдвиговых напряжений, действующее внутри квадруполя противоположно внешнему напряжению. На рис. 5 представлена зависимость усредненного по длине квадруполя суммарного поля внешних и внутренних сдвиговых напряжений σ_{xy} от времени деформации. Флуктуации поля обусловлены динамическим характером дислокационной структуры. С увеличением мощности дисклинаций при некотором $\Delta\omega$ суммарное поле сдвиговых напряжений уменьшается и становится меньше порогового значения $\sigma_c \sim 2.5 \cdot 10^{-3}G$. Вследствие этого подавляется направленное вдоль внешнего поля движение дислокаций внутри субзерна, однако движение дислокаций и деформация в окружающем его материале продолжают, и попадающие извне на границы субзерна потоки дислокаций увеличивают его разориентировку. Иначе говоря, в процессе деформации устанавливается некоторая постоянная мощность квадруполя $\Delta\omega$, обеспечивающая самосогласованный разворот по границам субзерна в процессе пластической

деформации. Таким образом, разориентировка субзерна может непрерывно увеличиваться, преобразуя исходные малоугловые дислокационные границы в среднеугловые и в пределе в большеугловые границы.

Рассмотренный выше частный случай, на наш взгляд, позволяет сформулировать некоторые общие выводы относительно условий преобразования слаборазориентированных дислокационных структур в фрагментированную структуру, в которой основную долю границ составляют границы со среднеугловыми разориентировками. Для этого должна возникнуть такая ситуация, когда активная пластическая деформация внутри отдельных субзерен подавляется. При продолжающейся деформации в окружающей матрице это субзерно будет вести себя подобно недеформируемому включению и испытывать кристаллографический разворот, который на дислокационном языке можно представить как результат формирования самосогласованных дислокационных стенок по периметру субзерна под воздействием потока дислокаций из окружающего объема. В свою очередь подавление деформации внутри отдельных зерен может осуществляться вследствие возникновения квадруполя или мультиполя дисклинаций в его стыках в результате рассогласования пластических разворотов по отдельным его границам.

Список литературы

- [1] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [2] Рыбин В.В. // Вопросы материаловедения. 2002, 1 (29), С. 11–33.
- [3] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. // ФТТ. 2009, Т. 51. Вып. 12. С. 2309–2314.
- [4] Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. // Mater. Sci. Eng. A. 2009. Vol. 503. P. 137–140.
- [5] Dmitrieva O., Svirina J.V., Demir E., Raabe D. // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18. P. 085 011.
- [6] Dorothe'e Dorner, Yoshitaka Adachi, Kaneaki Tsuzaki // Script. Mater. 2007. Vol. 57. P. 775–778.
- [7] Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. М.: Металлургия, 1980. 156 с.