

05

## Модель аккомодационного зарождения оборванной субграницы с границы зерна

© Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев

Нижегородский филиал Института машиноведения  
им. А.А. Благодравова РАН, Нижний Новгород  
E-mail: sarafanov@sinn.ru, pevn@uic.nnov.ru

Поступило в Редакцию 24 октября 2006 г.

В рамках компьютерной модели исследован аккомодационный механизм формирования оборванных субграниц. Показано, что увеличение мощности дисклинации  $\Omega$ , расположенной на границе зерна, приводит к срабатыванию источников дислокаций в теле зерна и формированию оборванной субграницы. При этом пропорционально мощности дисклинации возрастает разориентировка субграницы  $\theta_{st}$ , примерно равная в текущий момент времени, с одной стороны, половине мощности дисклинации ( $\theta_{st} \simeq \Omega/2$ ), с другой — деформации зерна  $\varepsilon$ .

PACS: 62.20.Fc

Исследования закономерностей эволюции структуры поликристаллов при больших пластических деформациях позволили установить [1,2], что при достижении некоторых критических степеней деформации в исходных зернах возникают разориентированные области кристаллической решетки (фрагменты). Важным результатом этих работ явилось установление того факта, что разориентировка  $\theta$  границ фрагментов нарастает с величиной деформации согласно эмпирическому соотношению.

$$\theta = \alpha(\varepsilon - \varepsilon_0), \quad (1)$$

где  $\varepsilon_0 \simeq 0.2$  — критическая деформация, при которой начинаются процессы фрагментации дислокационной структуры в поликристаллах,  $\alpha \sim 1$ .

Детальные электронно-микроскопические исследования позволили выделить ряд важных элементов фрагментированной структуры (оборванные субграницы, границы фрагментов с изменяющейся разориентировкой), свидетельствующих о том, что процесс фрагментации обусловлен зарождением и движением частичных дисклинаций [3].

С помощью теории дисклинаций [4] и физики наведенных мезодефектов [1,2] удалось теоретически обосновать соотношение (1) и выработать качественные представления о механизмах зарождения и роста оборванных субграниц. Согласно [2], при некоторой степени деформации мощность наведенной в стыке зерен дисклинации достигает критической величины  $\varepsilon_0$ , при которой порождаемые ею сдвиговые напряжения становятся достаточными для активации в окрестности стыка аккомодационного перемещения решеточных дислокаций. После чего начавшаяся аккомодационная подстройка приводит к возникновению вблизи стыковой дисклинации оборванной дислокационной границы. В последнее время эти представления были привлечены для анализа энергетических условий измельчения зеренной структуры и формирования субмикроструктурной структуры [5–9]. В частности, в работах [8,9] было показано, что дислокационное скольжение в окрестности дисклинации приводит к эффективному снижению энергии системы и создает движущие силы для процесса фрагментации.

В настоящей работе проведено компьютерное моделирование эволюции дислокационного ансамбля в процессе аккомодационного решеточного скольжения и кинетики формирования оборванной субграницы вблизи расположенной в границе зерна частичной клиновой дисклинации. В похожей поставке исследовалась динамика дефектов в [10], но в этой работе не учитывалась кинетика дислокационных реакций.

Изучение динамики дислокационного ансамбля в окрестности дисклинации проводилось внутри двумерной прямоугольной области бесконечной упругоизотропной среды. Линии дефектов выбирались перпендикулярными плоскости этой области, а ее размеры составляли  $(D \times D)$ , где  $D = 2 \mu\text{m}$ . Дисклинация располагалась на границе области в точке  $x_d = D/2$ ,  $y_d = 0$ . В дальнейшем исследуемую область будем называть зерном.

Каждая дислокация характеризуется вектором Бюргерса  $\mathbf{b}^{(s)}$ , параллельным оси  $Ox$ , координатами  $(x^{(s)}, y^{(s)})$  и скоростями  $(v_x^{(s)}, v_y^{(s)})$ , где  $s = 1, \dots, N$ ,  $N$  — число дислокаций.

Предполагается, что вклад инерционных слагаемых в уравнение движения дислокации мал по сравнению со слагаемыми, обусловленными динамическим трением. При этом уравнение движения для  $k$ -компоненты скорости дислокации  $s$  в приближении квазивязкого

скольжения записывалось в виде

$$v_k^{(s)} = \frac{dx_k^{(s)}}{dt} = M_{ki} e_{ijm} l_j b_n^{(s)} (\sigma_{mn}^{ext} + \sigma_{mn}^{int}), \quad (2)$$

где  $\sigma_{mn}^{ext}$  — тензор напряжений, обусловленный внешним по отношению к рассматриваемой системе дефектов полем;  $\sigma_{mn}^{int}$  — тензор внутренних напряжений, определяемый как суммарное упругое поле, действующее на рассматриваемую дислокацию со стороны других дефектов;  $M_{ki}$  — тензор подвижности, имеющий отличные от нуля диагональные компоненты, которые определяют подвижность дислокации в плоскостях скольжения и переползания;  $e_{ijm}$  — единичный антисимметричный тензор,  $l_j$  — единичный вектор, касательный к линии дислокации.

Ниже рассматривается случай, когда процесс деформации контролируется скольжением дислокаций. Размножение дислокаций в объеме зерна характеризовалось некоторой скоростью  $\dot{N}$  зарождения в плоскости скольжения пар дислокаций противоположного знака, находящихся друг от друга на расстоянии  $x_c = D_0 b / \sigma_c$  (здесь  $\sigma_c$  — пороговое напряжение срабатывания источника типа Франка–Рида [11], ниже которого дислокации генерируемой пары аннигилируют,  $D_0 = G / 2\pi(1 - \nu)$ ,  $\nu$  — коэффициент Пуассона). Координаты дислокационной пары генерировались в исследуемой области случайным образом по закону равномерного распределения. Процесс аннигиляции дислокаций характеризовался радиусом их захвата  $x_a \simeq D_0 b / 4\sigma_e$  [11], а сток учитывался как исчезновение дислокаций при достижении ими границы зерна. Относительно стока заметим, что с физической точки зрения дислокации, попадая в границу зерна, должны вызывать некоторое упрочнение, связанное с наведенным барьерным напряжением  $\sigma_g$ . При активной деформации это вызывает повышение нагрузки  $\sigma$ . В данной работе рассматривается квазистационарный случай, когда напряжение течения  $\sigma_e = \sigma - \sigma_g$  является постоянной величиной.

В предлагаемой модели предусмотрен самосогласованный порог генерации, зависящий от распределения упругого поля в теле зерна. Параметры кинетики дислокаций выбирались таким образом, чтобы при заданной внешней нагрузке и в отсутствие дисклинации размножения дислокаций не происходило ( $\sigma_e < \sigma_c$ ). Физически это соответствует ситуации, когда зерно в ходе предшествующей деформации упрочнено настолько, что внешнее напряжение не способно вызвать размножение дислокаций и соответственно деформация в зерне отсутствует.

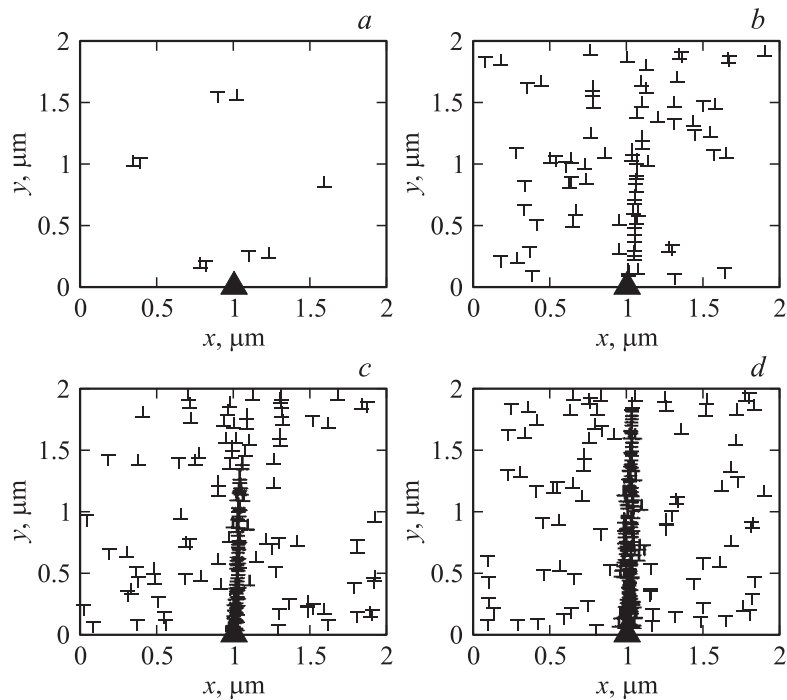
В этой ситуации монотонное увеличение мощности дисклинации  $\Omega$ , расположенной на границе зерна, должно привести к срабатыванию источников дислокаций в теле зерна и развитию процесса пластической деформации. Именно такая ситуация моделируется в настоящей работе.

Рассмотрим эволюцию дислокационного ансамбля в поле клиновой дисклинации при следующих параметрах:  $\sigma_c = 7.5 \cdot 10^{-4} G$ ,  $\sigma_e = \frac{1}{3} \sigma_c = 2.5 \cdot 10^{-4} G$ ,  $x_c = D_0 b / \sigma_c = 0.1 \mu\text{m}$ ,  $x_a = 0.075 \mu\text{m}$ ,  $\dot{N} = \dot{N}_+ = \dot{N}_- = 0.1 \text{ s}^{-1}$ ,  $N(0) = 2$  (начальное число дислокаций),  $\nu = 1/3$ . Сначала в течение  $t_p = 500 \text{ s}$  мощность дисклинации  $\Omega(t)$  линейно нарастает со временем со скоростью  $\dot{\Omega} = 8 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  от нуля до значения  $\Omega_0 = 0.04$ . Далее в течение  $t = 300 \text{ s}$  выбран режим, когда  $\Omega$  остается постоянной ( $\Omega = \Omega_0$ ), что физически может, например, соответствовать ситуации упрочнения в соседних зернах тех систем скольжения, с которыми связано увеличение мощности рассматриваемой дисклинации при продолжающейся деформации всего поликристалла.

Эволюция дислокационного ансамбля в исследуемой области в различные моменты времени показана на рис. 1. Изменение характеристик деформируемого зерна с течением времени показано на рис. 2.

По мере увеличения мощности дисклинации в начальный период времени ( $0 < t < t_y \simeq 50 \text{ s}$ ) деформация в зерне отсутствует (рис. 1, *a*). Все генерируемые дислокации („дислокационные петли“) аннигилируют в теле зерна (поле дисклинации еще мало, чтобы преодолеть потенциальный барьер взаимного притяжения дислокаций), хотя плотность дислокаций возрастает вследствие уменьшения скорости аннигиляции дислокаций.

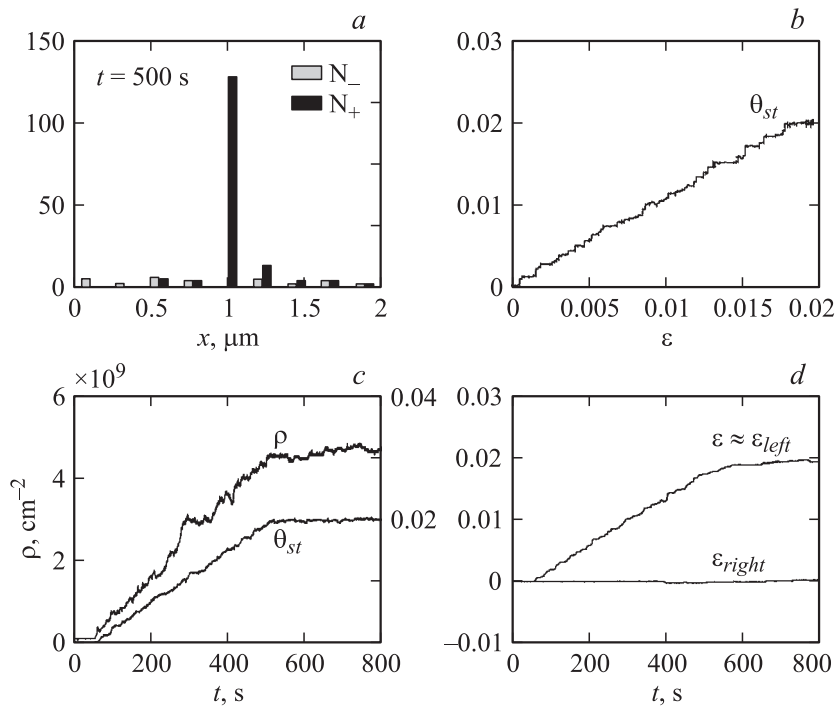
При  $t > t_y$  и соответственно при  $\Omega > \Omega_s = 0.004$  часть дислокаций начинает достигать границы зерна. Сток дислокаций на границе зерна обеспечивает прирост деформации  $\varepsilon(t) = \varepsilon_{left} + \varepsilon_{right} = b(N_{left} + N_{right})/D$ , где  $N_{left} = N_- - N_+$ ,  $N_{right} = N_+ - N_-$ ,  $N_+$  и  $N_-$  — число положительных и отрицательных дислокаций, пересекающих соответствующую границу зерна за время  $t$  (рис. 2, *d*). Асимметрия деформации (рис. 1, *b*; 2, *d*) связана с упругим полем дисклинации. При выбранном направлении внешнего поля упругое поле дисклинации в левой части зерна способствует генерации и перемещению дислокаций, а в правой — затрудняет эти процессы. При выбранной величине напряжения течения ( $\sigma_e = \frac{1}{3} \sigma_c$ ) правая половина зерна практически не деформируется (имеют место лишь локальные флуктуации величины деформации), поэтому  $\varepsilon \simeq \varepsilon_{left}$ .



**Рис. 1.** Эволюция ансамбля дислокаций во внешнем поле ( $\sigma_e = 2.5 \cdot 10^{-4} G$ ) и в поле дисклинации мощности  $\Omega$  в различные моменты времени: *a* —  $t = 1$  s,  $\Omega = 8 \cdot 10^{-5}$ ; *b* —  $t = 100$  s,  $\Omega = 8 \cdot 10^{-3}$ ; *c* —  $t = 500$  s,  $\Omega = 0.04$ ; *d* —  $t = 800$  s,  $\Omega = 0.04$ .

Одновременно (при  $t \geq t_y$ ) начинается и рост субграницы (рис. 1, *b*; 2, *c*), которая характеризуется разориентировкой  $\theta_{st} = b(N_+ - N_-)/D$ . Здесь  $N_+$  и  $N_-$  принадлежат некоторой области;  $|x - x_d| < \Delta x_{st}/2$ ,  $0 < y < D$ , где  $\Delta x_{st}$  — ширина сгущения, определяемая как стандартное отклонение от среднего (для измеряемой здесь выборки  $\Delta x_{st} \sim D/5$ ).

В интервале времени  $t_y < t < t_p \simeq 500$  s средняя плотность  $\rho(t)$  дислокаций в зерне нарастает пропорционально увеличению мощности дисклинации  $\Omega(t)$  согласно уравнению  $\rho(t) \simeq K(\Omega(t) - \Omega(t_y))$ , где  $K \simeq 1.25 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Также линейно нарастают разориентировка



**Рис. 2.** Распределение дислокаций, характеристики субграницы и величины мгновенных деформаций: *a* — гистограмма распределения числа дислокаций разного знака ( $N_+$  и  $N_-$ ) по  $x$  при  $t = 500$  s; *b* — изменение разориентировки субграницы  $\theta_{st}$  от деформации  $\epsilon = \epsilon_{left} + \epsilon_{right}$  в зерне; *c* — изменение средней плотности дислокаций  $\rho$  и разориентировки субграницы  $\theta_{st}$  от времени; *d* — деформация левой ( $\epsilon_{left}$ ), правой ( $\epsilon_{right}$ ) границы зерна и полная деформация  $\epsilon = \epsilon_{left} + \epsilon_{right}$  в зависимости от времени.

субграницы  $\theta_{st}$  и деформация  $\epsilon$

$$\theta_{st}(t) \simeq \alpha \epsilon(t) \simeq \frac{1}{2}(\Omega(t) - \Omega(t_y)), \quad (3)$$

где коэффициент пропорциональности  $\alpha \simeq 1$  (см. рис. 2, *b*). Характерный вид формирующейся при этом в зерне дислокационной структуры представлен на рис. 1, *c*.

При  $t > t_p = 500$  s, после того как прекращается увеличение мощности дисклинации, прекращается (без учета флуктуационных явлений) и рост разориентировки субграницы, плотности дислокаций и деформации в зерне (рис. 2, *c, d*).

Сформированная на заключительном этапе оборванная субграница (рис. 1, *d*) компенсирует упругое поле дисклинации, а деформация обеспечивает разворот левой половины зерна пропорционально мощности дисклинации  $\Omega = \Omega_0$ .

В постановке данной работы движущей силой процесса деформации зерна явилось монотонное увеличение мощности дисклинации  $\Omega(t)$ . Здесь в явном виде проявился феномен ротационной моды пластичности. Возникающая при этом субграница имеет разориентировку, примерно равную величине деформации зерна (см. рис. 2, *b*), и соответствует эмпирическому соотношению (1). Подчеркнем, что сформированная субграница является стационарным образованием (хотя и имеет черты квазиравновесной конфигурации), возникающим в условиях диссипативной динамики дислокационного ансамбля деформируемого зерна. Именно это обстоятельство делает ее устойчивой и воспроизводимой при заданных условиях деформирования.

Естественно задаться вопросом, что изменится при формировании субграницы, если напряжение внешнего поля положить равным нулю ( $\sigma_e = 0$ ). Исследование, подробные результаты которого здесь не приводятся, показывает, что формирование субграницы происходит похожим образом, что и при  $\sigma_e \neq 0$ . Однако полная деформация в зерне при этом равна нулю. Отрицательные дислокации симметричным образом стекают на противоположные границы зерна, обеспечивая чистый поворот, а положительные — формируют субграницу мощности  $\theta_{st} \simeq \Omega/2$ .

Важной особенностью образующейся субграницы является установленный в результате моделирования факт, что ее средняя разориентировка составляет примерно половину от мощности дисклинации ( $\theta_{st} \simeq \Omega/2$ ). Этот факт требует некоторых пояснений, поэтому обратимся к теории дисклинаций [4]. Формирование субграницы будем рассматривать как формирование дислокационной стенки, имеющей разориентировку  $\theta_{st}$  и длину  $l$ . Тогда исходную дисклинацию мощности  $\Omega$  и стенку можно в совокупности рассматривать как две частичные дисклинации мощности  $\Omega_1 = (1 - \gamma)\Omega$  и  $\Omega_2 = \gamma\Omega = \theta_{st}$  соответственно. Вторую дисклинацию, порождающую стенку и смещенную относительно первой на расстояние  $l$ , можно рассматривать как

отщепившуюся от материнской. Коэффициент  $\gamma$  нетрудно определить из условия минимума такой конфигурации:

$$\gamma = \frac{1}{2} + \frac{1 - l^2/2R^2}{4 \ln(R/l) + l^2/R^2}, \quad (4)$$

где  $R$  — расстояние до свободной поверхности. Согласно (4), при  $l/R \rightarrow 0$  коэффициент  $\gamma$  стремится к значению  $\gamma = 0.5$ . При типичном значении  $l/R = 10^{-4}$  его значение составляет  $\gamma = 0.5271$ . Таким образом, с позиций теории дисклинаций отщепление дисклинации примерно половинной мощности от материнской является наиболее энергетически выгодным процессом.

Заметим, что отщепившаяся дисклинация, выходя на границу зерна, способна при достижении определенной мощности, в свою очередь, „запустить“ аналогичные процессы и породить оборванную субграницу в соседнем зерне. Такое прорастание субграниц на несколько межзеренных расстояний действительно наблюдалось экспериментально [12].

## Список литературы

- [1] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. С. 224.
- [2] Рыбин В.В. // Вопросы материаловедения. 2002. № 4 (32). С. 11–33.
- [3] Веразов А.Н., Лихачев В.А., Рыбин В.В. // ФММ. 1976. Т. 42. С. 146–154.
- [4] Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинация в кристаллах. Л.: Наука, 1986. С. 224.
- [5] Орлова Т.С., Романов А.Е., Назаров А.А., Еникеев Н.А., Александров И.В., Валиев Р.З. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 23. С. 46–54.
- [6] Орлова Т.С., Назаров А.А., Еникеев Н.А., Александров И.В., Валиев Р.З., Романов А.Е. // ФТТ. 2005. Т. 47. В. 5. С. 820–826.
- [7] Nazarov A.A., Enikeev N.A., Orlova T.S., Romanov A.E., Alexandrov I.V., Beyerlein I.J., Valiev R.Z. // Acta Materialia. 2006. V. 54. N 4. P. 985–995.
- [8] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 21. С. 73–78.
- [9] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. В. 18. С. 35–43.
- [10] Микаэлян К.Н., Seefeldt M., Гуткин М.Ю., Klimanek P.E., Романов А.Е. // ФТТ. 2003. Т. 45. В. 11. С. 2002–2007.
- [11] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. С. 599.
- [12] Salishev G.A., Zhrebtsov S.V., Mironov S.Yu. // Vopr. Materialoved. 2003. N 1. P. 175–184.