01;05

Анализ влияния свободной поверхности и размера пластической зоны на эффект экранирования упругого поля дисклинации

© *Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев*

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

Поступило в Редакцию 1 марта 2006 г.

Проведено численное исследование самосогласованного распределения избыточной дислокационной плотности в поле дисклинации для конечной области. Произведен расчет функции напряжений Эйри, тензора напряжений и упругой энергии экранированной дисклинации в зависимости от взаимного расположения дисклинации и пластической зоны, размера и геометрии пластической зоны, различных граничных условий. Показано, что упругая энергия системы во всех исследованных случаях существенно уменьшается в том случае, когда дисклинация располагается в пластически деформируемой области кристалла.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Bb

Как показано в работах [1–4], в процессе пластического течения в границах и стыках зерен образуются дефекты ротационного типа — дисклинации, играющие важнейшую роль в дальнейшей эволюции структуры деформируемых поликристаллов. Своими дальнодействующими полями напряжений они возмущают ламинарный поток решеточных дислокаций, вызывая расслоение их однородного распределения и порождая в прилегающих объемах зерен оборванные дислокационные субграницы и более сложные дислокационные образования (мезодефекты ротационного типа) [3].

Важно подчеркнуть, что как зарождение, так и движение оборванных субграниц (частичных дисклинаций) в глубь зерна происходит в результате коллективного движения дислокаций. Поэтому при расчете упругих полей и энергии дисклинационных конфигураций необходимо учитывать вклад окружающих дислокаций, перераспределение которых в упругом поле дисклинаций способно, как было показано в [5], существенно понизить общую упругую энергию системы. Проведенный в [5] анализ экранировки упругого поля клиновой дисклинации системой дислокаций в случае бесконечно протяженного пластически деформируемого кристалла, показал, что упругая энергия такой системы в области размера R определяется выражением

$$W = \frac{\sqrt{\pi}}{4} D\omega^2 r_d^2 \sqrt{\frac{R}{r_d}}, \qquad (1)$$

где r_d — радиус экранирования упругого поля [5,6], $D = G/2\pi(1-\nu)$, ω — мощность дисклинации, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.

То обстоятельство, что характерный масштаб r_d спадания упругого поля достаточно мал [6], позволил авторам [5] сделать вывод о том, что эффект экранированного упругого поля дисклинации имеет место и в случае конечного кристалла.

Настоящая работа посвящена обоснованию этого вывода применительно к общему случаю, когда как кристалл, так и пластическая область имеют конечные размеры.

Исходную краевую задачу удобно сформулировать для функции напряжений Эйри $\psi(\mathbf{r})$, которая, как показано в [5], будучи определенной во всем пространстве, удовлетворяет бигармоническому уравнению

$$\Delta^2\psi(\mathbf{r}) = -4r_d^{-2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(\mathbf{r}) + 4\pi D\omega\delta(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

в котором первое слагаемое в правой части является распределенным в пространстве дислокационным источником упругого поля, самосогласованно связанным с функцией $\psi(\mathbf{r})$, а второе — дисклинационным источником. При этом дислокации, формирующие пластическую зону, характеризуются плотностью $\rho_a(\mathbf{r}, t)$, вектором Бюргерса b_a в направлении скольжения дислокаций $0x(\mathbf{b}_a \parallel \mathbf{e}_x)$ и обладают нулевым суммарным вектором Бюргерса $\sum_a b_a\rho_a = 0$ $(a = \pm, b_a = \pm b)$.

При нахождении решений данной задачи как краевой задачи теории упругости уравнение (2) целесообразно записать в виде системы

$$\Delta^2\psi(\mathbf{r}) = -4\pi Db\,\frac{\partial I(\mathbf{r})}{\partial y} + 4\pi D\omega\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0), \tag{3a}$$

$$I(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\dfrac{1}{\pi Dbr_d^2}\dfrac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial y}, & \mathbf{r}\in\Omega_i\subset\Omega_\psi, \\ 0, & \mathbf{r}\in\Omega_i, \end{cases} \tag{3b}$$

где Ω_ψ — область определения $\psi(\mathbf{r})$, ограниченная некоторой поверхностью S, $\Omega_i\subset\Omega_\psi$ — область задания пластической зоны с распределенным дислокационным зарядом $I(\mathbf{r}) = \rho_+(\mathbf{r}) — \rho_-(\mathbf{r})$, $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ — радиус-вектор, задающий расположение клиновой дисклинации внутри области Ω_ψ. Упругие поля $\sigma_{ij}(r)$ определяются через функцию $\psi(r)$ стандартным образом: $\sigma_{xx} = \psi''_{yy}$, $\sigma_{yy} = \psi''_{xx}$, $\sigma_{xy} = -\psi''_{xy}$ [7].

Систему (3) следует дополнить краевыми условиями на границе области Ω_ψ. Если область Ω_ψ ограничивается свободной поверхностью, то граничные условия имеют вид [8]

$$n_i\sigma_{ik}\big|_S = 0 \tag{4}$$

и означают, что порождаемые дислокациями и дисклинациями внутренние напряжения не могут привести к появлению нескомпенсированных поверхностных сил.

Численное исследование краевой задачи (3) проведем для случая прямоугольной области $\Omega_\psi = \{-L/2\leqslant x\leqslant L/2,\ -L/2\leqslant y\leqslant L/2\}$ с заданием внутри нее пластической зоны $\Omega_i = \{-L/2\leqslant x\leqslant L/2,\ -d_y/2\leqslant y\leqslant d_y/2\}$, где $d_y\leqslant L$. Разбивая область Ω_ψ на прямоугольную сетку, состоящую из $(N+1)\times(N+1)$ узлов, с использованием соответствующей конечно-разностной аппроксимации дифференциальных операторов системы (3) получаем систему линейных уравнений, которую будем решать численно-итерационным методом Гаусса–Зейделя [9].

Рассмотрим некоторые результаты численного исследования исходной задачи в сформулированной постановке.

1. Влияние граничных условий на изменение упругой энергии. В [5] была получена зависимость (1) упругой энергии от характерного размера некоторой конечной области (радиуса R) бесконечной пластической зоны ($\Omega_i = \Omega_\psi$), включающей особенность упругого поля — дисклинацию. Чтобы получить подобную зависимость численно в по-

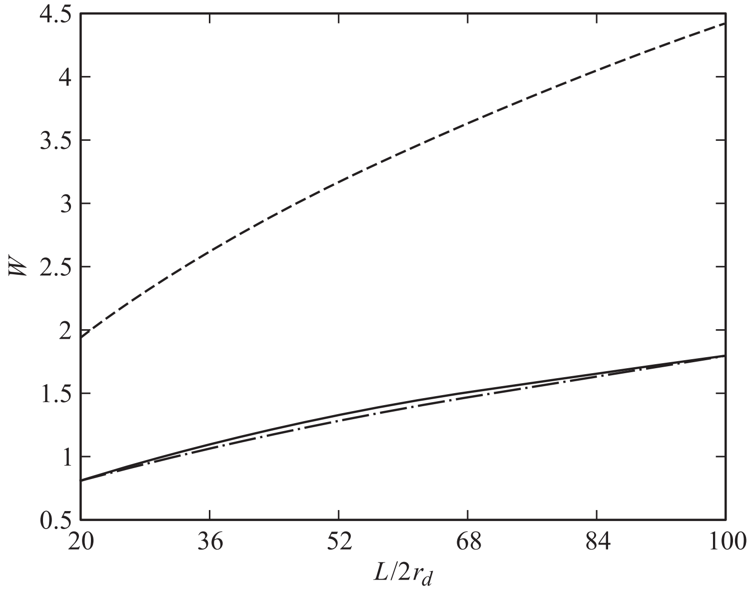

Рис. 1. Зависимость упругой энергии W (в единицах $D\omega^2 r_d^2$) от размера области L пластической зоны при граничных условиях (4) (сплошная линия) и (5) (штриховая линия). Штрихпунктирной линией показана зависимость, рассчитанная согласно выражению (6) для граничных условий (4).

становке краевой задачи [3], необходимо на границе области $\Omega_i = \Omega_\psi$ задать распределение упругих полей

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r})\big|_S = \sigma_{ij}^{\Sigma}(\mathbf{r}) \tag{5}$$

согласно решениям σ_{ij}^{Σ} [5]. Для этого случая, когда дисклинация расположена в центре области $\Omega_\psi(\mathbf{r}_0 = 0)$, зависимость изменения упругой энергии W от размера пластической области L, полученная численно как решение краевой задачи (3), показана на рис. 1 (штриховая линия). Эта зависимость практически совпадает с аналитической зависимостью (1) при $R = L/2$.

Рассмотрим теперь решение задачи (3) для случая задания на границе области Ω_ψ граничных условий (4), когда область Ω_ψ ограничена некоторой свободной поверхностью S.

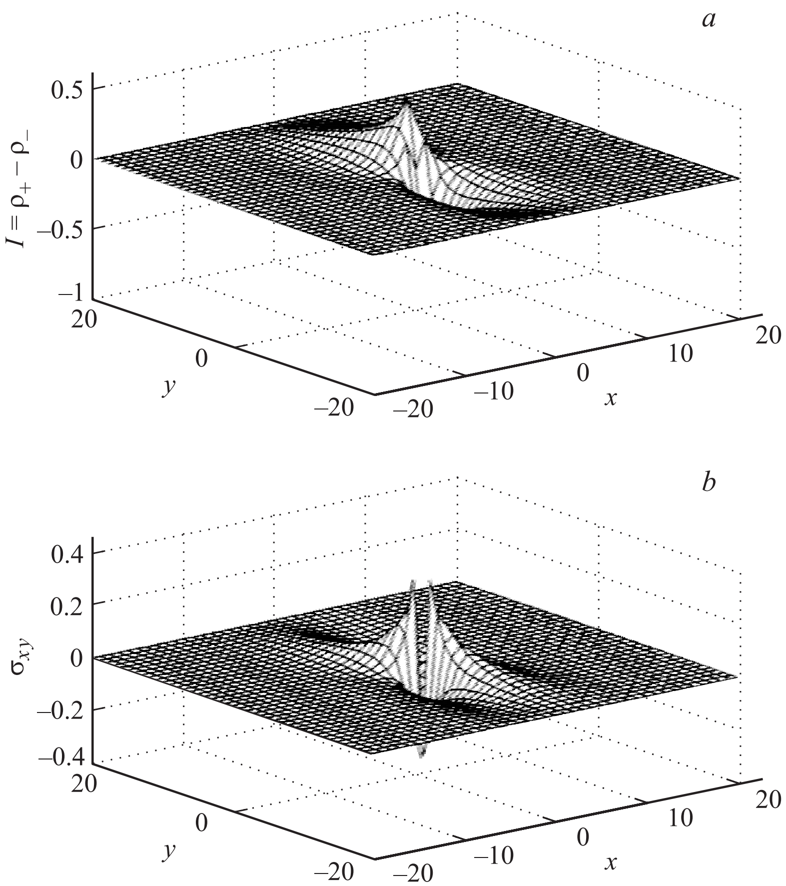

Рис. 2. Результаты численных расчетов в случае краевой задачи (3) с граничными условиями (4) в области $\Omega_\psi = [40r_d \times 40r_d]$: *a* — распределение избыточной плотности дислокаций (в единицах $I_c = \omega/\pi b r_d$); *b* — распределение компоненты поля напряжений σ_{xy} (в единицах $D\omega$). Координаты x, y нормированы на величину r_d. Дисклинация расположена в начале координат.

Результаты численных расчетов распределения избыточной плотности дислокаций и полей напряжений (на примере компоненты σ_{xy}) приведены на рис. 2. Наличие свободной поверхности, ограничивающей исследуемую область, приводит к снижению упругой энергии системы (рис. 1). Из сравнения двух зависимостей на рис. 1 (сплошная и штрихования линии) непосредственно видно, что наличие свободной поверхности усиливает эффект упругого поля дисклинации системой дислокаций (примерно в 2.5 раза). Таким образом, обобщенное выражение для упругой энергии системы можно записать в виде

$$W \simeq \alpha_c \frac{\sqrt{\pi}}{4} D\omega^2 r_d^2 \sqrt{\frac{R}{r_d}}, \tag{6}$$

где $R = L/2$, α_c — фактор краевых условий (численный расчет при выполнении граничных условий (4) дает $\alpha_c \simeq 0, 4$).

Зависимость (6), учитывающая влияние свободной границы, при $\alpha_c = 0.4$ показана на рис. 1 штрихпунктирной линией.

2. Изменение упругой энергии в зависимости от расположения дисклинации. Рассмотрим ситуацию, когда дисклинация смещается из центра области, включающей пластическую зону ($\Omega_i = \Omega_\psi$), и достигает границы области Ω_ψ. На рис. 3 показана зависимость упругой энергии W системы (при $L = 40r_d$) от смещения x_0 дисклинации из центра области Ω_ψ. Значение упругой энергии имеет максимальную величину в центре области Ω_ψ и уменьшается до нуля по мере приближения к ее границе.

Такое изменение энергии можно объяснить тем, что при выходе дисклинации на свободную поверхность устраняется особенность упругого поля, связанная с этим дефектом. Полученную зависимость можно приближенно описать следующим образом. Для отдельной дисклинации, расположенной в центре цилиндра, ее энергия равна $W_d = D\omega^2 R^2/8$. При смещении дисклинации из центра на расстояние x_0 энергия уменьшается до значения $W_d = Dw^2 R_{eff}^2/8$, где $R_{eff} = R(1 - x_0^2/R^2)$ — эффективное расстояние до свободной границы [8]. При наличии пластической зоны вместо формулы $W_d = D\omega^2 R^2/8$ для несмещенной дисклинации ($x_0 = 0$) мы получили формулу (6). Логично предположить, что при $x_0 \neq 0$ в этом случае мы должны использовать обобщенную формулу

$$W \simeq \alpha_c \frac{\sqrt{\pi}}{4} D\omega^2 r_d^2 \sqrt{\frac{R_{eff}}{r_d}}, \tag{7}$$

где $R_{eff} = L/2 - 2x_0^2/L$. График зависимости (7) при $\alpha_c = 0.4$ показан на рис. 3 штриховой линией. Наблюдается некоторое отличие от кривой,

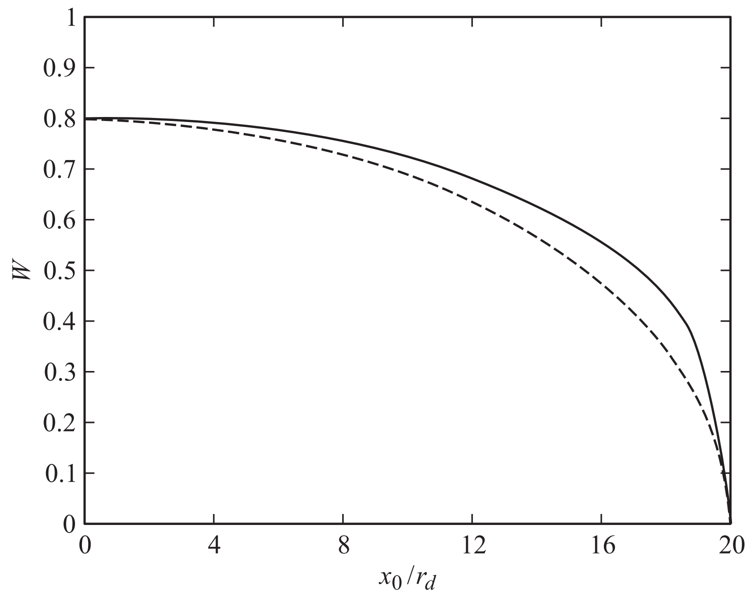

Рис. 3. Зависимость упругой энергии W системы (в единицах $D\omega^2 r_d^2$) от смещения дисклинации на величину x_0 из центра области Ω_ψ, рассчитанная численно (сплошная линия) и построенная (штриховая линия) по приближенной формуле (7).

расчитанной численно, что можеть быть связано с влиянием геометрии области Ω_ψ на конечную формулу, при смещении дисклинации из центра.

3. Зависимость упругой энергии от размера и геометрии пластической зоны. Рассмотрим теперь случай, когда варьируется размер пластической зоны ($\Omega_i \leqslant \Omega_\psi$), а дисклинация расположена в центре области $\Omega_\psi(\mathbf{r}_0 = 0)$. На рис. 4, *a* показана зависимость упругой энергии W системы, рассчитанная для области Ω_ψ (при $L = 40r_d$), когда протяженность пластической зоны $\Omega_i = \{-L/2 \leqslant x \leqslant L/2,\ \eta \leqslant y \leqslant L/2\}$ изменяется от максимального значения $\Omega_i = \Omega_\psi$ $(\eta = -L/2)$ до нуля $(\eta = L/2)$.

Аналогичная зависимость показана на рис. 4, *b*, где пластическая зона задана в виде полосы $\Omega_i = \{-L/2 \leqslant x \leqslant L/2,$

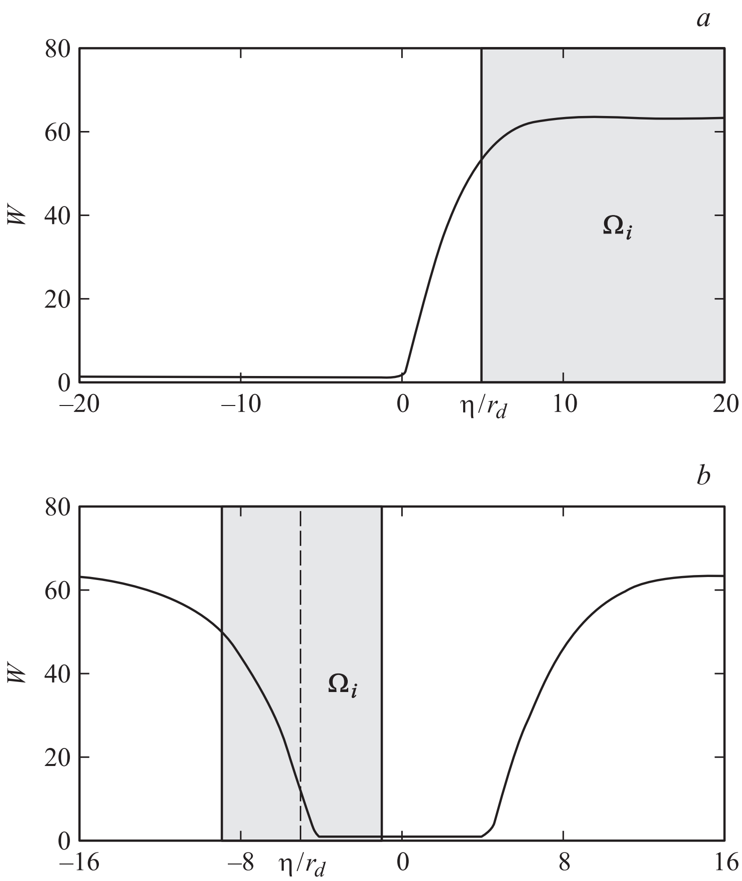

Рис. 4. Зависимость упругой энергии W от размера и геометрии пластической зоны $(d_x = L = 40r_d)$: a — при уменьшении протяженности зоны от максимального значения $(d_y = L = 40r_d)$ до нуля; b — при перемещении зоны как целого в виде полосы шириной $d_y = 8r_d$ вдоль оси $0y$ от одного конца области Ω_ψ $(\eta = -16r_d)$ до другого $(\eta = 16r_d)$.

$\eta - d_y/2 \leqslant y \leqslant \eta + d_y/2\}$ и имеет фиксированные размеры $(d_x = 40r_d$, $d_y = 8r_d)$. Величина упругой энергии W исследуется в зависимости от смещения полосы η как целого от одной границы области $(\eta = -L/2 + d_y/2)$ до другой $(\eta = L/2 - d_y/2)$.

Представленные на рис. 4 зависимости для упругой энергии показывают, что энергия системы W резко уменьшается, если дисклинация попадает внутрь пластически деформируемой области или расположена непосредственно на ее границе $(\mathbf{r}_0 \in \Omega_i)$.

Таким образом, исходя из энергетических соображений, можно предположить, что если дисклинация в исходном состоянии расположена на границе или в стыке зерен, а в зерне развивается процесс пластической деформации, то дисклинации энергетически выгодно переместиться с границы в объем зерна. Физически это событие означает возникновение субграницы, выходящей с границы и обрывающейся в теле зерна, что может рассматриваться как начало фрагментации материала.

Список литературы

[1] *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.

[2] *Рыбин В.В., Зисман А.А., Золоторевский Н.Ю.* // ФТТ. 1985. Т. 27. С. 181–185.

[3] *Рыбин В.В.* // Вопросы материаловедения. 2002. № 4 (32). С. 11–33.

[4] *Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В.* // Поверхность. Физика, химия, механика. 1982. № 10. С. 134–142.

[5] *Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н.* // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 21. С. 73–78.

[6] *Сарафанов Г.Ф.* // ФТТ. 1997. Т. 39. В. 9. С. 1575–1579.

[7] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.

[8] *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинация в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.

[9] *Калиткин Н.Н.* Численные методы. М.: Наука, 1978. 620 с.