

Анализ разориентированных структур в модельном соединении медь-медь, полученном сваркой взрывом

© В.В. Рыбин,¹ Н.Ю. Золоторевский,¹ Э.А. Ушанова²

¹ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия

² ЦНИИ конструкционных материалов „Прометей“, Санкт-Петербург, Россия
email: rybin.spb@gmail.com

(Поступило в Редакцию 27 мая 2014 г.)

Представлен аналитический обзор существующих представлений о механизмах формирования фрагментированных структур в условиях интенсивной пластической деформации кристаллических твердых тел. Последовательный учет трансляционных и ротационных мод пластичности, развивающихся соответственно на микро- и мезоскопическом структурных уровнях, позволяет 1) правильно описывать морфологические особенности эволюции фрагментированных структур, 2) предсказывать спектры разориентировок для различных механизмов фрагментации, 3) определять парциальный вклад каждого из них в случаях, когда фрагментацию ведут одновременно несколько различных механизмов деформационного измельчения. Разработанный на базе этих представлений метод компьютерного моделирования спектров разориентировок деформационного происхождения дает в руки исследователей новый метод изучения физической природы процессов структурообразования, пригодный для самых разных материалов, температурно-скоростных условий деформации и технологических схем нагружения. В качестве примера подробно разобран случай формирования фрагментированных структур в экстремальных условиях сварки взрывом пластин технической чистой меди. Сравнение модельных спектров разориентировок, рассчитанных для референтной структуры, а также для фрагментированной структуры приконтактной зоны сварного соединения, с имеющимися экспериментальными данными показало эффективность и надежность предложенного метода исследований.

Введение

Изучение физической природы и механизмов образования разориентированных структур деформационного происхождения (СДП) является одной из актуальных задач современного материаловедения. Особый интерес представляет случай экстремально высоких скоростей пластической деформации $\dot{\epsilon}$ [1–5]. Типичным примером задач такого рода, имеющих не только фундаментальное, но и большое прикладное значение, служит изучение особенностей СДП в приконтактных слоях металлических пластин, соединенных сваркой взрывом [6–12]. Недавно были опубликованы результаты подобных исследований применительно к модельному соединению листовых заготовок технической чистой меди [13,14]. В этих работах была предпринята попытка выявить картину иерархического соподчинения процессов пластической деформации (ПД), развивающихся на микро-, мезо- и макроструктурно-масштабных уровнях, а также учесть влияние величины ϵ , скорости $\dot{\epsilon}$ и степени пространственной неоднородности ПД на особенности формирования СДП при сварке взрывом. Для этого методами оптической, ТЕМ- и EBSD-микроскопии исследовали СДП на участках, расположенных на разном удалении от поверхности контакта (ПК) сваренных листов. Один участок находился на расстоянии ~ 1.5 mm от ПК, что соответствовало примерно середине толщины верхнего (метаемого) листа. В этом месте металл во время сварки подвергался относительно небольшой по величине и относительно однородной по объему пластической

деформации. В первом приближении ее можно описать последовательностью двух разнонаправленных пластических изгибов, происходящих со скоростью $\dot{\epsilon} \approx 10^5$ s⁻¹ на угол ~ 0.19 rad каждый. Второй участок включал в себя непосредственно ПК и примыкающие к ней области. Здесь пластическое течение металла происходило турбулентно, пространственно неоднородно и локализовалось в виде специфических структурных образований, названных в [13,14] пластическими струями. По оценкам, приведенным в [13,14], величина локальной ПД внутри пластических струй достигает значений $\epsilon \approx 2$ при скоростях $\dot{\epsilon} \approx 10^6$ s⁻¹. За пределами пластических струй названные величины были на порядок меньше.

В настоящей работе на базе анализа ранее опубликованных в литературе идей и экспериментальных данных, касающихся физической природы и механизмов формирования СДП, сделана попытка объяснить, как возникает такого рода структура в экстремальных условиях сварки взрывом на разном удалении от ПК. При этом особое внимание уделено изучению средне и сильно разориентированных структурных состояний, типичных для внутреннего строения пластических струй.

1. Общее описание структуры и постановка задачи

Согласно [13,14], структура металла вдали от ПК по своим морфологическим характеристикам качественно подобна структуре катаных листов технической чистой

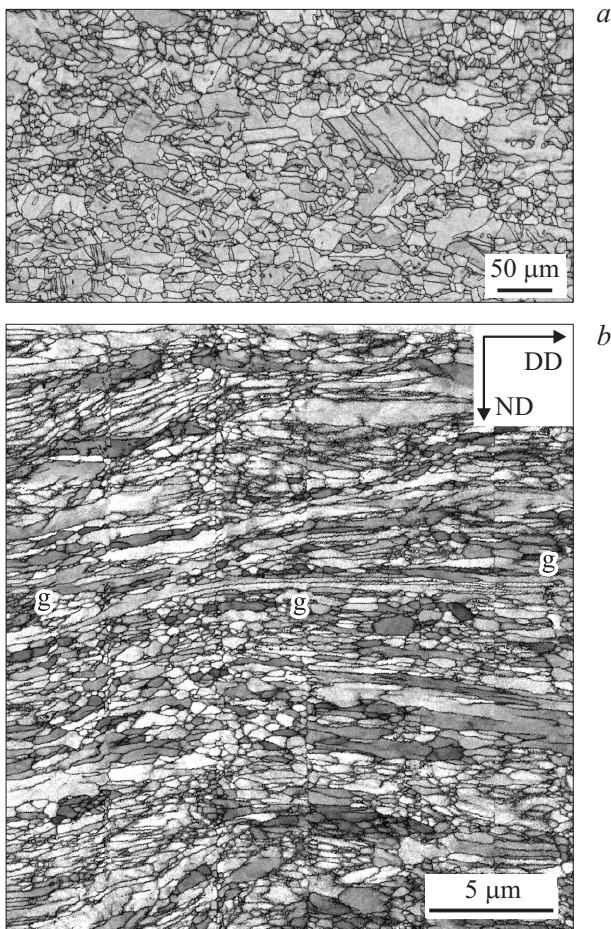


Рис. 1. Структурные состояния участков сварного соединения, для которых определены и промоделированы спектры разориентировок (EBSD): *a* — референтная структура в верхней (метаемой) пластине на расстоянии 1.5 mm от ПК; *b* — фрагментированная структура пластической струи, примыкающей к ПК (*g* — *g* — *g* — граница между верхней и нижней пластинами).

меди в состоянии поставки, т.е. представляет собой конгломерат крупных, слегка вытянутых в направлении прокатки зерен. Практически каждое зерно содержит внутри себя одну или несколько прямолинейных границ двойников отжига, которые разбивают зерна на более мелкие части (кристаллиты) (рис. 1, *a*). Средний размер кристаллитов D_{cr}^1 в *S*-представлении [14] составляет 16.7 μm. Степень вытянутости их χ равна 0.4. В дальнейшем будем называть эту структуру референтной. Морфологически референтная структура отличается от исходной наличием внутри кристаллитов регулярной, хаотически разориентированной (на углы $\theta_{cell} \approx 0.1-0.2^\circ$) ячеистой структуры, которая выявляется методами ТЕМ. Средний размер ячеек $D_{cell} \approx 0.5 \mu m$.

Иная картина характерна для металла, непосредственно примыкающего к ПК, где пластическая де-

¹ Величина D_{cr} (или D_{fr}) равна диаметру круга, площадь которого *S* равновелика площади исходного кристаллита (или фрагмента).

формация реализуется в форме пластических струй, рис. 1, *b*. Внутри струи протяженные границы исходных кристаллитов исчезли, а на месте классической крупнозернистой структуры поликристаллического агрегата сформировалась ультрадисперсная фрагментированная структура (ФС) [15]. Под действием локализованной в струе интенсивной пластической деформации произошло дробление (по терминологии [16] — фрагментация) исходных кристаллитов. Поскольку средний размер фрагмента $D_{fr} \approx 0.32 \mu m$ [14], на месте каждого исходного кристаллита возникло примерно $(D_{cr}/D_{fr})^2 \approx (16.7/0.32)^2 \approx 2700$ фрагментов. В большинстве своем фрагменты вытянуты в направлении распространения струи, которое не постоянно, а плавно меняется, следуя волнообразной форме ПК. Из-за вытянутости фрагментов их поперечные размеры $d_{fr} \approx 0.27 \mu m$ существенно меньше средних D_{fr} . Приведенные экспериментальные факты требуют специальной интерпретации, поскольку, согласно фундаментальным положениям физики прочности и пластичности, большеугловые границы (БУГ) зерен и двойников отжига не могут бесследно исчезать в ходе ПД. Они могут лишь менять свою форму, кристаллографическую и пространственную ориентацию, а также параметры вектора разориентировки θ [17,18]. Следует предположить поэтому, что, по крайней мере, некоторые из наблюдаемых внутри пластической струи границ фрагментов представляют собой участки границ исходных кристаллитов, измельченные (фрагментированные) в ходе пластической деформации и, возможно, изменившие свою разориентировку.

Возникает вопрос — какова доля η таких участков среди общего числа границ фрагментов? Сделаем простые оценки. Обозначим через L_{fr}^S общую протяженность границ, выявляемых на участке фрагментированной структуры площадью *S*, а через L_{cr}^S — общую протяженность исходных границ зерен и двойников отжига, выявляемых на такой же площади референтной структуры. Имея в виду, что $L_{cr}^S \approx 2S/D_{cr}$, а $L_{fr}^S \approx 2S/D_{fr}$, получим

$$\eta \equiv (L_{cr}^S/L_{fr}^S) = (D_{fr}/D_{cr}). \quad (1)$$

Подставляя в (1) экспериментально измеренные значения D_{cr} и D_{fr} , обнаружим, что во фрагментированной структуре пластической струи лишь два процента от общего количества наблюдаемых границ являются остатками исходных границ зерен и двойников отжига. Остальные 98% представляют собой новые по своей физической природе дефекты кристаллического строения. В дальнейшем будем называть их границами деформационного происхождения (ГДП). Эти необычные дефекты сформировались в пластической струе в результате действия там одного или нескольких механизмов деформационного дробления (фрагментации) кристаллитов и их границ. Такими механизмами могут быть классическая фрагментация объема [16,19], фрагментация границ деформационных двойников (ДД) [20], а также динамическая рекристаллизация [21–23]. Парци-

альные вклады η_α^2 каждого из этих механизмов зависят от физико-механических свойств деформируемого материала, температурно-скоростного режима пластической деформации и ее величины.

Оценка величины η_α является одной из главных задач физики интенсивной пластической деформации (ИПД). В настоящей работе мы покажем, что парциальные вклады η_α можно определить количественно, с высокой степенью точности даже в столь сложных условиях деформирования, как сварка взрывом. Для этого, помимо морфологии, необходимо получить и должным образом проанализировать данные по распределению разориентировок в СДП. Общая схема рассуждений такова.

Представим экспериментально измеренный спектр разориентировок $F^{\text{exp}}(\theta)$ в виде линейной суперпозиции парциальных спектров $\eta_\alpha^{\text{exp}} F_\alpha(\theta)$, генерируемых действующими механизмами деформационного измельчения:

$$F^{\text{exp}}(\theta) = \sum_a \eta_a^{\text{exp}} F_\alpha(\theta) \quad (2)$$

при выполнении обычных как условий нормировки для $F_\alpha(\theta)$, так и для

$$\eta_a^{\text{exp}} : \int_0^\infty F_\alpha(\theta) d\theta = 1 \quad (a), \quad \sum_a \eta_a^{\text{exp}} = 1 \quad (b). \quad (3)$$

Здесь $F_\alpha(\theta)$ парциальная функция распределения разориентировок (ФРП). На основании общефизических представлений о механизмах формирования ГДП, имеющих на этот счет литературных данных [24–28], а в необходимых случаях и с помощью компьютерного моделирования конкретизируем вид $F_\alpha(\theta)$ для всех задействованных в процессе ПД механизмов фрагментации. После этого, варьируя в уравнении (2) значения парциальных вкладов η_a^{exp} определим такой их набор, который обеспечит наилучшее совпадение экспериментального и смоделированного спектров разориентировок.

Ниже данная эта процедура реализована применительно к изучению механизмов структурообразования внутри пластических струй, возникающих в приконтактной зоне сварного соединения медь–медь, полученного взрывом по режиму, описанному в работах [13,14].

2. Материал и методика эксперимента

Статистику распределения кристаллитов и фрагментов по размерам, форме и разориентировкам в референтной и фрагментированной структурах изучали на сканирующем электронном микроскопе Quanta 200 3D FEG, используя стандартные методики EBSD-анализа. В качестве кристаллографической разориентировки θ принимали минимальное значение угла поворота из множества кристаллографически эквивалентных, т.е. также приводящих к совмещению осей кристаллических решеток

² Нижний индекс α использован для перечисления действующих механизмов фрагментации.

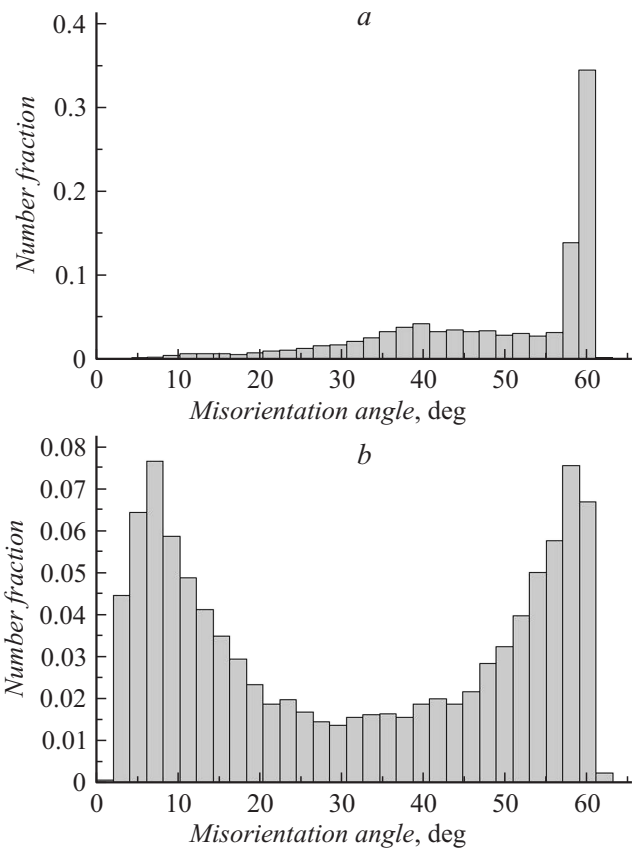


Рис. 2. Гистограммы распределения углов разориентировки для референтной структуры (а) и для фрагментированной структуры пластической струи (б).

исходно разориентированных кристаллитов. Таким образом, определяемая разориентировка не может быть сколь угодно большой и всегда ограничена некоторым предельным значением $\theta_{\text{cr}}^{\text{max}}$.³ Величина $\theta_{\text{cr}}^{\text{max}}$ определяется сингонией кристалла. Для меди (кубическая сингония) $\theta_{\text{cr}}^{\text{max}} = 62.8^\circ$.

Экспериментальная погрешность измерения разориентировки в нашей работе составляет $\sim 1.5^\circ$. Это позволило достоверно аттестовать разориентировки БУГ при исследовании их на близость к специальным вплоть до $\Sigma = 55$, и с высокой степенью надежности восстанавливать парциальные спектры разориентировок для границ, близких к двойниковым $\Sigma = 3$ и $\Sigma = 9$.

Дискретные значения функции распределения по разориентировкам $F(\theta_i)$ находили по предварительно построенным частотным гистограммам:

$$F(\theta_i) = \frac{1}{\Delta\theta_{\text{st}}} \left(\frac{\Delta N_i}{N_g} \right), \quad (4)$$

где $\theta_i = \theta_t + i(\Delta\theta_{\text{st}})$, θ_t — угол толерантности, $\Delta\theta_{\text{st}}$ — шаг гистограммы, N_g — общее число границ в выборке,

³ Следует иметь в виду, что истинный материальный разворот соседних кристаллитов пропорционален ϵ и при больших деформациях может значительно превышать $\theta_{\text{cr}}^{\text{max}}$ [16]. В таких ситуациях будем говорить об „истинной“ разориентировке.

i — номер столбца на гистограмме, ΔN_i — число границ, попавших в i -ый столбец. В настоящей работе анализировали границы только идентифицированных кристаллитов, т.е. не рассматривали оборванные дислокационные границы (ОДГ). Угол толерантности и шаг гистограммы выбирали равными 2° .

Методика прицельного приготовления образцов для электронно-микроскопических исследований дефектной структуры на участках, расположенных вблизи ПК, описана в [29]. Морфологию, кристаллографию и кристаллогеометрию референтной и фрагментированной структур изучали на участках, представленных на рис. 1, *a* и 1, *b*. Экспериментально найденные для этих участков гистограммы распределения разориентировок приведены на рис. 2, *a* и 2, *b*.

3. Качественное описание процесса фрагментации

В работах [16,19], а позже в обзорах [30,31] был приведен обширный экспериментальный материал, который со всей очевидностью демонстрирует, что фрагментацию следует рассматривать не как некий частный случай, наблюдаемый для одного специфического материала или условия нагружения, а как вполне закономерную для широкого класса пластически деформируемых кристаллических тел стадию эволюции дефектных структур деформационного происхождения (ДП). Эта закономерность проявляется в том, что в широком диапазоне технологических приемов и температурно-скоростных режимов нагружения ($T \leq T_m$; $10^{-3} \text{ s}^{-1} \leq \dot{\epsilon} \leq 10^0 \text{ s}^{-1}$) изначально однородно ориентированные зерна поликристаллов и даже монокристаллы разбиваются (дробятся, фрагментируются) на множество субмикроскопических областей (фрагментов), у которых поперечные размеры d_{fr} близки к некому „магическому“ числу $d_{mag} = 0.2-0.3 \mu\text{m}$, а разориентировки более чем на порядок превышают типичные для ячеистых структур значения ($0.1-0.2$)°. Важным отличительным признаком фрагментации служит и то, что по мере увеличения ϵ поперечные размеры фрагментов меняются слабо, а углы разориентировки, напротив, монотонно нарастая, достигают величин, равных

$$\theta^{\max} = \alpha(T)(\epsilon - \epsilon_0), \quad (5)$$

где $\alpha(T)$ — зависящий от температуры коэффициент пропорциональности ($\alpha \leq 1$), а ϵ_0 — деформация, при которой появляются первые фрагменты. В широком диапазоне температур и скоростей ПД величина $\epsilon_0 \approx 0.2$.

Недавно было показано, что фрагментация проявляется в том числе и при экстремально высоких скоростях ПД (на шесть порядков (!) величины превышающих типичные для ОМД значения $\dot{\epsilon} \approx \text{s}^{-1}$) [2,13,14].

Перед тем как перейти к моделированию распределения фрагментов по разориентировкам, необходимо

представлять себе качественную картину процесса фрагментации в трех основных интервалах разориентировок: 1) интервал малоугловых разориентировок ($1^\circ \leq \theta \leq 3^\circ$), 2) интервал среднеугловых разориентировок ($3^\circ \leq \theta \leq 15^\circ$), 3) интервал большеугловых разориентировок ($15^\circ \leq \theta \leq \theta_{cr}^{\max}$).

3.1. Малоугловые разориентировки

Известно, что, начиная с деформаций $\epsilon_0 \approx 0.2$, в ансамбле сильно взаимодействующих решеточных дислокаций (РД) зарождаются коллективные моды движения [16,32]. О них можно судить по появлению в структуре деформируемых кристаллитов характерных структурных образований, получивших название мезодефекты. На фоне однородно распределенных дислокаций и рыхлых, бесформенных границ ячеек мезодефекты выделяются как морфологически, так и кристаллографически [16,19,32]. Морфологически тем, что представляют собой оборванные дислокационные границы (ОДГ), однако более плотные, узкие и прямолинейные по сравнению с обычными границами ячеек. Кристаллографические отличия касаются разориентировок ОДГ. Они колеблются в интервале $(1-3)^\circ$, т.е. на порядок величины превосходят разориентировки, типичные для существующей ячеистой структуры. В терминах общей теории дефектов оборванная дислокационная граница является ничем иным, как дислокационной моделью частичной дисклинации или более сложного мезодефекта ротационного типа [16,33-37]. Это означает, что коллективные формы движения дислокаций, ответственные за возникновение подобных мезодефектов, порождают в кристаллах ротационные моды пластичности [16].

В литературе известны две основных модели возникновения ОДГ. Согласно одной из них, ОДГ зарождаются на стыковых дисклинациях [16,38-40]. Согласно другой, оборванные дислокационные границы возникают в объеме пластически деформируемых кристаллов в ходе спонтанной перестройки однородно распределенных дислокаций в тех местах, где их локальная плотность ρ_{loc} достигает критического значения порядка 10^{15} m^{-2} . В модели спонтанной перестройки оборванные дислокационные границы образуются парами и представляют собой дипольные и квадрупольные конфигурации частичных дисклинаций противоположного знака. Теоретические оценки и экспериментальные наблюдения показывают, что плотность дислокаций внутри диполя снижается до уровня $\rho_{int} \approx 10^{11} \text{ m}^{-2}$, плечо диполя, т.е. расстояние между образующими диполь ОДГ, оказывается близким к $d_{mag} \approx (0.2-0.3) \mu\text{m}$, а разориентировки на его границах примерно соответствуют θ_0 . Наблюдение за эволюцией подобных диполей и квадруполей в процессе продолжающейся ПД показывает, что они являются зародышами фрагментов. Накопление в пластически деформируемых кристаллитах одиночных ОДГ и их дипольных конфигураций порождает „двухградусный“

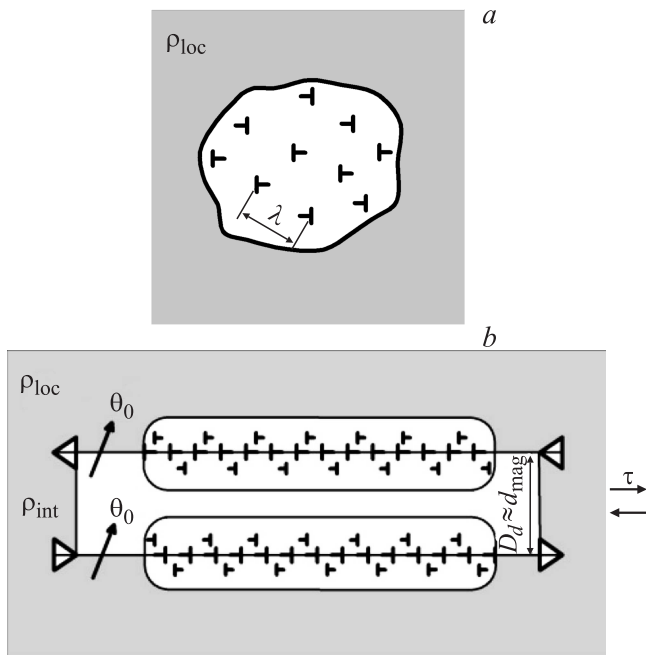


Рис. 3. Схема зарождения квадруполя ОДГ в кристаллите, заполненном однородно распределенными дислокациями.

пик распределения разориентировок. При небольших деформациях ($\epsilon < 0.4$) „двухградусный“ пик доминирует однако с ростом ϵ постепенно диссипируется. В модели спонтанной перестройки, разориентировки на ОДГ, очевидно, должны быть пропорциональны локальной плотности дислокаций ρ_{loc} . Учитывая это, а также стохастичность распределения решеточных дислокаций по объему кристаллита, следует полагать, что вблизи θ_0 форма малоуглового пика должна отвечать нормальному распределению. В работах [27,28,41] подобная гипотеза нашла теоретическое и экспериментальное подтверждение. Схема перестройки дислокационной структуры на начальном этапе формирования мезоуровня изображена на рис. 3.

3.2. Среднеугловые границы фрагментов

3.2.1. Эволюция оборванных дислокационных границ. Продолжающаяся пластическая деформация кристаллита ведет к монотонному увеличению числа и общей протяженности ОДГ. Кроме того, из-за непрерывного налипания решеточных дислокаций на ранее возникшие ОДГ разориентировки на них в ходе ПД непрерывно увеличиваются. Этот процесс, однако, имеет естественное ограничение, связанное с тем, что на участке границы, непосредственно примыкающей к „линии обрыва“, разориентировка не может сколь угодно существенно отличаться от θ_0 .⁴ Как только она становится больше θ_0 , первичная ОДГ разветвляется и

⁴ Мощность нескомпенсированной частичной дисклинации не может превышать $\sim \theta_0$.

от нее отщепляется боковая ветвь (вторичная ОДГ) с разориентировкой, близкой к $0.5\theta_0$. Процесс зарождения одиночной ОДГ на стыке b фасеток ab и bc большеугловой границы abc схематически изображен на рис. 4, a . Там же видно, что на вновь образовавшемся участке ОДГ последовательность событий повторяется: увеличение разориентировки вплоть до критического значения θ_0 , отщепление новой боковой ветви и т.д. Такого рода ветвящиеся ОДГ действительно часто наблюдаются вблизи изломов и стыков БУГ [32]. Ветвление ОДГ следует признать базовым механизмом фрагментации. Благодаря ветвлению в пластически деформируемом кристаллите создается трехмерная сетка границ ДП и формируется фрагментированная структура.

Другим базовым механизмом является образование и последующая эволюция конфигураций, составленных из скомпенсированных или частично скомпенсированных по разориентировкам ОДГ. Простейшей из них является диполь частичных дисклинаций мощностью $\theta_1 \approx \theta_2 \approx \theta_0$ и плечом $D_d \approx (0.2-0.3)\mu m$ [16,19,32,42-45]. Дипольные конфигурации из ОДГ типичны для начальных стадий развитой ПД. По мере увеличения ϵ разориентировки на границах, образующих диполь, и их длина L_d монотонно нарастают, однако поперечные размеры D_d практически не меняются. В результате длина экспериментально наблюдаемых диполей на порядок превышает величину D_d . При таком соотношении между L_d и D_d скольжение решеточных дислокаций внутри диполя должно происходить по плоскостям, приблизительно параллельным плоскости залегания ОДГ, поскольку для других плоскостей деформирующее напряжение пример-

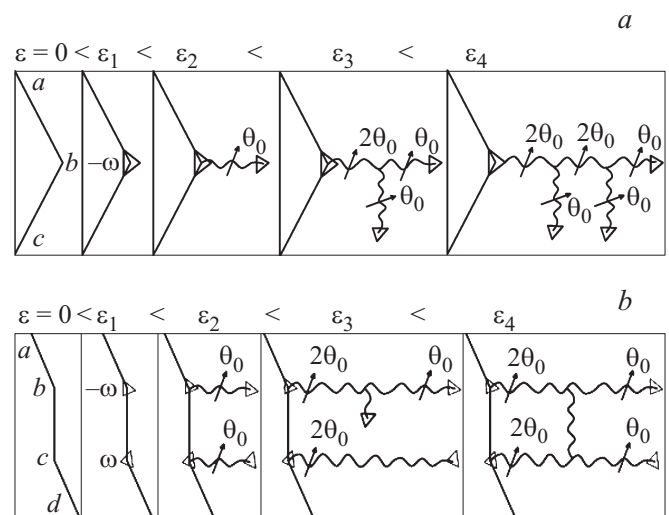


Рис. 4. Схематическое изображение процесса эволюции оборванных дислокационных границ, образующихся на стыковых дисклинациях: a — одиночные ОДГ, b — диполи ОДГ; abc и $abcd$ — большеугловые границы зерен. На изломах БУГ (b и c) формируются стыковые дисклинации, при $\omega > \theta_0$ они испускают в объем кристаллита ОДГ с углом разориентировки θ_0 . По мере дальнейшего роста деформации происходит ветвление ОДГ и формируется фрагментированная структура.

но в $\sqrt{L_d/D_d}$ раз больше и скольжение по ним затруднено. Следовательно, диполь ОДГ фактически является микрополосой сдвига. От классической микрополосы он отличается тем, что, помимо локализованного пластического сдвига приводит еще и к переориентации своей внутренней области на угол θ_0 [46]. Если образующие микрополосы параллельные ОДГ раскомпенсированы по разориентировкам ($\theta_1 < \theta_2$), то распространение такого мезодефекта по кристаллиту, в дополнение к пластическому сдвигу и переориентации внутренней области на угол θ_1 вызывает еще и разворот на угол $\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1$ кристаллической решетки прилегающей матрицы. По этой причине его логично назвать микрополосой сдвига-разориентации.

На изломах оборванных дислокационных границ точно так же, как и на обычных границах разориентации, в процессе пластической образуются стыковые дисклинации. Достигая с ростом ε критической мощности θ_0 , они также релаксируют свои поля упругих напряжений, испуская аккомодационные ОДГ с разориентировками $\sim 0.5\theta_0 \approx 1^\circ$, рис. 4, а [16,19,47]. Применительно к эволюции микрополос это означает, что на определенном этапе своего развития микрополосы будут фрагментироваться, т.е. внутри них будут возникать аккомодационные поперечные границы. Разориентировки на аккомодационных границах микрополосы меньше, чем на продольных границах и даже при больших ε находятся на уровне, близком к θ_0 . Схематическое изображение такого процесса применительно к зарождению диполя ОДГ на уступе bc большеугловой границы $abcd$ представлено на рис. 4, б. При дальнейшем увеличении деформации ($\varepsilon > 1$) фрагментированные микрополосы объединяются в пучки по 3–10 штук, образуя более крупные и сложные элементы мезоструктуры. Ширина таких мезополос колеблется от ~ 1 до $\sim 5 \mu\text{m}$. Мезополосы отчетливо видны на изображениях дефектных структур пластических струй (рис. 1, б).

Разориентировки, характерные для рассмотренного здесь механизма эволюционного развития фрагментации,⁵ составляют основное наполнение среднеуглового пика на распределении $F^{\text{exp}}(\theta)$ (рис. 2, б).

3.3. Большеугловые границы деформационного происхождения

Согласно (5), БУГ ДП накапливаются во фрагментированной структуре, начиная с $\varepsilon > 0.4$. Одним из механизмов их формирования является классическая фрагментация объема кристаллита (разд. 4.2). Кроме того, БУГ ДП могут возникать в результате действия альтернативных механизмов, таких как: 1) образование „ножевых“ границ, 2) фрагментация границ деформационных двойников, 3) фрагментация исходных БУГ, 4) динамическая рекристаллизация (ДР).

⁵ В дальнейшем будем называть этот механизм „классической фрагментацией“.

3.3.1. „Ножевые“ границы получили свое название благодаря необычному внешнему виду [16].⁶ Это длинные, прямолинейные или плавно изогнутые, тонкие границы ДП, протяженность которых намного превосходит протяженность среднестатистических границ фрагментов. По своим морфологическим признакам „ножевые“ границы кажутся инородными для ФС образованиями, которые появляются в ней уже после того, как в своих основных чертах фрагментированная структура успела сформироваться. Например, встретив на своем пути фрагмент, они не обходят его, следуя извилистому контуру имеющихся границ, а пересекают, как бы разрезая его, не меняя прямолинейности траектории. Сопоставляя характерные элементы структуры на прилежащих сторонах „ножевой“ границы, можно видеть, что с „ножевыми“ границами связаны не только большеугловые развороты соседних фрагментов, но и существенные, на $0.1\text{--}0.2 \mu\text{m}$, межкристаллитные сдвиги. В настоящее время механизм образования „ножевых“ границ окончательно не установлен и является предметом дискуссий. Опубликовано несколько подробных исследований, где показано, что, по крайней мере, некоторые „ножевые“ границы разделяют крупные фрагментированные области (метафрагменты), ориентировки которых соответствуют разным вариантам кристаллографической текстуры деформации [26,48,49]. Текстурированная модель „ножевых“ границ однозначно определяет исходную природу соответствующих метафрагментов: ими должны быть участки исходного кристаллита, в которых по каким-либо случайным причинам оказались задействованными разные, но обеспечивающие одинаковые тензоры пластической деформации ε наборы дислокационных систем скольжения. Следовательно, „ножевые границы“ должны спонтанно формироваться на ранних этапах пластической деформации — до того, как в каждом из исходных „метафрагментов“ сформируется развитая фрагментированная структура. Это заключение, впрочем, плохо согласуется с упомянутыми выше морфологическими признаками „ножевых“ границ.

3.3.2. Границы деформационных двойников.

В условиях сварки взрывом динамическое деформационное двойникование (ДД) технической чистой меди начинается на ранних стадиях ПД. Отдельные микропластинки двойников деформации системы $(\{11\bar{2}\} \{111\})$ характерной стамескообразной формы с углом в вершине, примерно равным 30° , и шириной $0.5\text{--}1.0 \mu\text{m}$, наблюдаются уже в референтной структуре, т.е. до того как начинается классическое фрагментирование кристаллитов (рис. 5, а). По мере приближения к ПК, т.е. по мере увеличения локальных ε и $\dot{\varepsilon}$, ДД усиливается, постепенно превращаясь из экзотической в одну из основных мод ПД. В качестве примера обратимся к рис. 5, б, где представлена структура меди на расстоянии $\sim 40 \mu\text{m}$ от ПК. Судя по вытянутости кристаллитов, локальная деформация здесь близка к $\varepsilon \approx 1$. Хорошо видно, что после такой

⁶ В терминологии [25,26,49] — это GNB границы (геометрически необходимые границы).

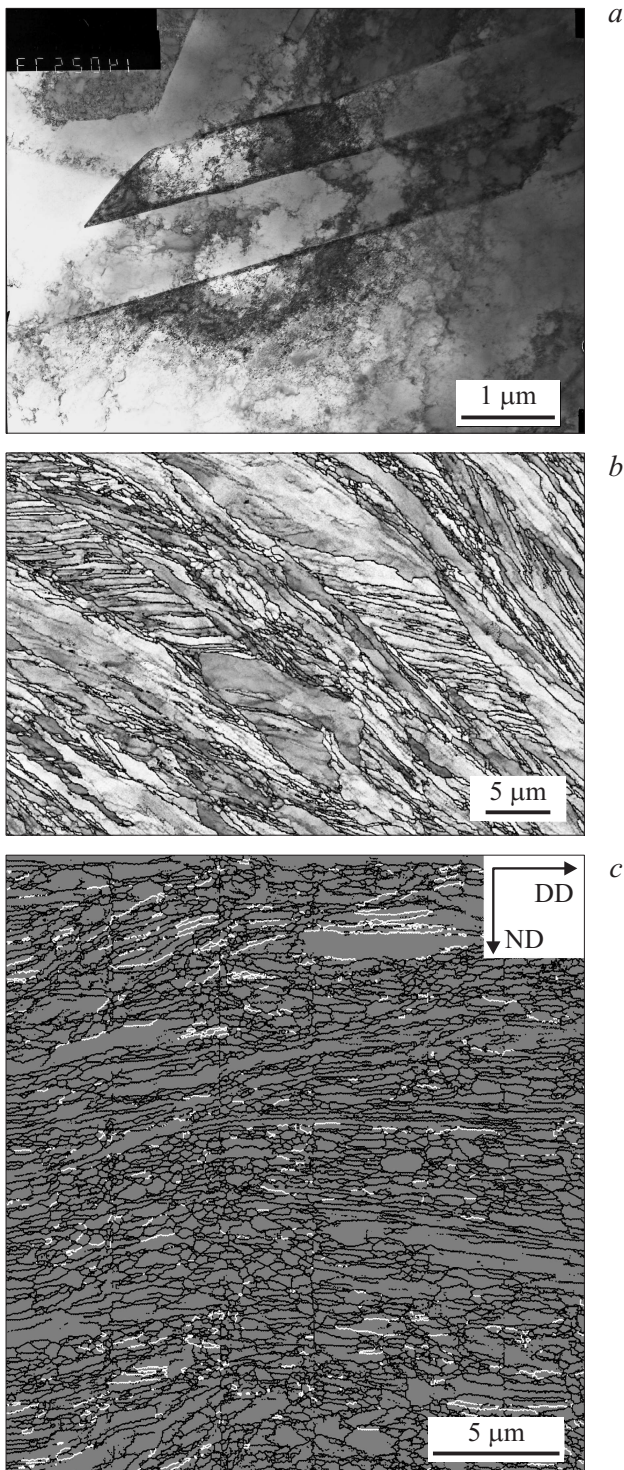


Рис. 5. Динамическое деформационное двойникование: *a* — микродвойникование при малых степенях ПД (референтная структура, $\varepsilon \approx 0.2$), *b* — картина распределения двойников деформации в областях, примыкающих к пластической струе ($\varepsilon \approx 1$), *c* — тот же участок фрагментированной структуры пластической струи, что и на рис. 1, *b*, но со специально выделенными границами, разориентировки на которых близки к двойниковым $\Sigma 3$.

a деформации примерно половина исходных кристаллитов испытали динамическое ДД, в результате чего они оказались заполненными пачками параллельных сдвоенных пластин толщиной $\sim 0.3 \mu\text{m}$. Кристаллиты, в структуре которых отсутствуют подобные морфологические признаки, заполнены ФС, соответствующей разным этапам ее эволюционного развития. Однако и в этой „обычной“ с виду фрагментированной структуре имеются наследственные признаки ДД. Выявляются они не морфологически, а кристаллографически: среди границ фрагментов обнаруживается аномально большая доля, $\eta_{\Sigma 3}$, границ, близких к специальным $\Sigma 3$, табл. 1. При этом $\eta_{\Sigma 3}$ оказывается тем большей, чем больше величина ε (рис. 5, *c*, табл. 1). Обобщая приведенные экспериментальные факты, можно прийти к следующим заключениям: *a*) деформационные двойники возникают в нефрагментированных областях кристаллита, *b*) деформационные двойники останавливаются на БУГ исходных кристаллитов, *c*) последующая фрагментация „перемалывает“, дробит границы динамических ДД ровно так же, как наследственные границы двойников отжига и большеугловые границы общего типа.

3.3.3. Деформационное дробление (фрагментация) большеугловых границ. Остановка деформационных двойников на большеугловых границах происходит потому, что образующие их частичные дислокации будучи дефектами кристаллической решетки (микроуровень ПД) могут скользить только по строго определенным кристаллографическим плоскостям и останавливаются в местах их обрыва. В противоположность этому микрополосы способны пересекать встретившиеся на их пути БУГ, не отклоняясь (или слабо отклоняясь) от траектории движения. Это происходит потому, что частичные дислокации, образующие микрополосы, являются мезодефектами и, следовательно, не привязаны к каким-либо определенным кристаллографическим плоскостям. Они могут легко пересекать большеугловые границы, если в дислокационном ансамбле соседнего кристаллита создадутся условия для формирования оборванных дислокационных границ с нужным вектором разориентировки. Поперечные размеры микрополос D_d практически совпадают с $d_{\text{mag}} \approx 0.2-0.3 \mu\text{m}$. По этой причине пересечение большеугловой границы микрополосами приводит к дроблению ее на множество микроскопических кусочков примерно тех же размеров. Смещаясь и поворачиваясь друг относительно друга, в соответствии с ротационными и сдвиговыми характеристиками действующей микрополосы эти кусочки БУГ становятся морфологически неотличимы от границ классической фрагментированной структуры.

3.3.4. Большеугловые границы зародышей динамической рекристаллизации. Ранние стадии динамической рекристаллизации (ДР) меди наблюдаются уже в референтной структуре, при этом зародыши ДР располагаются на тройных стыках исходных БУГ. Кристаллографический анализ векторов разориентировок на границах одного из таких зародышей показал, что механизмом образования зародыша ДР является отщепление

Таблица 1. Экспериментальные данные, характеризующие референтную структуру и структуру пластической струи

	$\dot{\epsilon}$, s^{-1}	Расстояние от ПК, μm	Структурные элементы	D , μm	d , μm	κ	d_{cell} , μm	Доля двойниковых разориентировок	
Референтная структура	10^5	0	Зерна	16.7	5.2	0.4	0.5	0.45	0.047
Структура пластической струи	10^6	1500	Фрагменты	0.32	0.27	0.3	Ячейки отсутствуют	0.08	0.008

от одной из образующих стык большеугловых границ участка новой двойниковой границы [14]. Такого рода реакции, стимулированные ПД, но термоактивируемые по своей природе, наиболее вероятны в зонах локализации пластической деформации, где скорость и локальная температура ПД существенно выше, чем в референтной структуре. Как видно из рис. 1, *b* и 5, *c*, в пластической струе, действительно, достаточно часто встречаются микрообласти с характерными размерами $0.2 \mu m$ до $0.5 \mu m$, которые по их морфологическим признакам можно отождествить с зародышами ДР. Расположение, размеры и форма этих зародышей говорят о том, что динамическая рекристаллизация во фрагментированной структуре проходит на поздних стадиях ее формирования, когда значительная часть границ фрагментов имеет разориентировки, близкие к специальным $\Sigma 3$, и находится в метастабильном, энергетически неустойчивом состоянии. Дополнительную неустойчивость такой структуре придают стыковые дисклинации, вследствие чего именно на стыках и изломах границ образуются зародыши динамической рекристаллизации. Что касается механизма подрастания зародышей ДР, то, скорее всего, им является механизм аномально быстрого роста за счет поглощения соседних фрагментов. За пределами струи также встречаются зародыши и даже микрзерна ДР. Как правило, это более крупные⁷ и вытянутые вдоль оси деформации образования.

3.4. Основные механизмы формирования границ ДП

Проведенное рассмотрение показывает, что существует 5 механизмов формирования границ деформационного происхождения посредством фрагментации. В том числе

- 1) классическая фрагментация объема кристаллитов (M1),
- 2) фрагментация исходных границ двойников отжига (M2),
- 3) фрагментация исходных специальных границ (M3),
- 4) фрагментация исходных БУГ общего типа (M4),
- 5) фрагментация границ деформационных двойников (M5).

⁷ Размерами, превышающими $1 \mu m$.

К этому списку необходимо добавить механизмы образования „ножевых“ границ и границ зерен ДР. Такие границы следует рассматривать особо, поскольку они появляются на заключительных стадиях ПД и не подвергаются фрагментации. Все перечисленные механизмы образования границ ДП мы учитывали при моделировании спектров разориентировок (уравнение 2).

4. Разориентировки ДП и их изменение в ходе ПД

Первый этап моделирования заключается в вычислении вектора θ и величины θ разориентировки двух произвольно ориентированных фрагментов для случая действия каждого из перечисленных выше механизмов фрагментации.

4.1. Микро- и мезо-уровни описания изменения разориентировок

В ходе пластической деформации происходит непрерывное взаимодействие границ с дислокациями, осуществляющими активную или аккомодационную ПД соседних кристаллитов. Дислокации выходят на границу, частично ее проходят, частично остаются на ней. В результате распределение дислокаций на исходной границе непрерывно меняется. Скомпенсированные по напряжениям группы дислокаций создают дополнительную (деформационного происхождения) разориентировку (обозначим ее вектором θ_{pl}), а оставшиеся являются источниками дальнедействующих напряжений σ_{int}^N . В экспериментах измеряется результирующая разориентировка θ . При малых значениях θ_{pl} она является суммой исходной разориентировки $\theta_{initial}$ и разориентировки деформационного происхождения θ_{pl} :

$$\theta = \theta_{initial} + \theta_{pl}. \quad (6)$$

При больших θ_{pl} , которые могут формироваться в условиях интенсивной пластической деформации (ИПД), связь между θ и θ_{pl} становится нелинейной. Собственно, установление этой нелинейной связи и является предметом анализа (см. разд. 5.2), поскольку необходимо определять векторы разориентировки θ_{pl} и θ для произвольно ориентированных кристаллитов,

испытывавших большие ($\epsilon > 1$) пластические деформации. Последовательно решать такую задачу на микроуровне, т. е. анализируя процесс изменения разориентировки как результат взаимодействия с исходной границей множества индивидуальных решеточных дислокаций весьма затруднительно.

Проще обратиться к рассмотрению мезоуровня ПД, поскольку именно на мезоуровне зарождаются и развиваются ротационные моды пластичности. На мезоуровне понятие „разориентировка ДП“ приобретает простое и естественное толкование: это скалярная, векторная или тензорная мера рассогласования ротационных мод пластичности смежных кристаллитов. Для нахождения вектора θ_{pl} достаточно определить для каждого из сопрягающихся кристаллитов ротационную моду пластичности, выразив ее через привычные для дислокационной физики характеристики дислокационного скольжения.

4.1.1. Микроуровень пластической деформации. В наиболее общем виде конечный результат трансляционного скольжения множества индивидуальных решеточных дислокаций выражает тензор пластической дисторсии

$$\gamma^{(k)} : \gamma^{(k)} = \sum_i (\gamma \mathbf{ne})_i^{(k)} \quad (7)$$

где k обозначает номер кристаллита, i — номер системы дислокационного скольжения ($i = 1, 2, \dots, 5$), \mathbf{n}_i — нормаль к плоскости скольжения, \mathbf{e}_i — единичный вектор, описывающий направление вектора Бюргерса соответствующей дислокации. Скалярной характеристикой деформации пластического сдвига для i -й системы скольжения служит величина парциального сдвига:

$$\gamma_i^{(k)} = (\rho b \lambda)_i^{(k)}, \quad (8)$$

где ρ_i — плотность, b_i — модуль вектора Бюргерса, λ_i — средний пробег дислокаций i -й системы скольжения.

Симметричная часть тензора $\gamma^{(k)}$ дает тензор пластической деформации, описывающий собственно формоизменение кристаллита:

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\text{micro}}^{(k)} = \sum_i \boldsymbol{\epsilon}_i^{(k)} = \frac{1}{2} \sum_i \gamma_i^{(k)} (\mathbf{ne} + \mathbf{en})_i^{(k)}, \quad (9)$$

а антисимметричная часть — тензор материального поворота на микроуровне рассмотрения:

$$\boldsymbol{\omega}_{\text{micro}}^{(k)} = \sum_i \boldsymbol{\omega}_{\text{micro}}^{(k)} = \frac{1}{2} \sum_i \gamma_i^{(k)} (\mathbf{ne} - \mathbf{en})_i^{(k)}. \quad (10)$$

Поскольку на микроуровне элементарным актом пластичности является сдвиг на минимальный вектор трансляции, материальный поворот кристаллита, описываемый формулой (10), должен происходить в условиях сохранения ориентации кристаллической решетки⁸ [50]. Между тем многочисленные экспериментальные наблюдения свидетельствуют, что в действительности при

пластической деформации кристаллита в составе поликристаллического агрегата его решетка не остается инвариантной, а непрерывно поворачивается относительно исходного состояния [51].

4.1.2. Мезоуровень, ротационные моды пластичности. Чтобы устранить это противоречие, Тейлор предположил, что при совместной пластической деформации поликристалла каждое его зерно, помимо поворота с инвариантной решеткой (10), совершает еще один — компенсирующий поворот [52]. Иными словами, чтобы согласовать микроскопическую теорию ПД с макроскопическим экспериментом, потребовалось выйти за пределы чисто дислокационного описания и кроме обычных для микроуровня трансляционно-сдвиговых мод ввести в рассмотрение дополнительные — ротационные моды пластичности. По Тэйлору дополнительные материальные повороты должны испытывать исходные зерна. Они должны вращаться как жесткое целое, сохраняя при этом свою идентичность и соответственно меняя ориентацию кристаллической решетки. Это предположение полностью отвечало существовавшему в то время представлениям о характере развития пластической деформации поликристаллов. Однако после открытия явления фрагментации [16] стало ясно, что реальная картина принципиально иная. Оказалось, что в ходе ПД зерна не сохраняют свою идентичность, а разбиваются на множество элементарных фрагментов, характерные поперечные размеры которых близки к $(0.2-0.3) \mu\text{m}$. Оказалось, что именно в процессе фрагментации происходят дополнительные повороты, которые связывают между собой микро-, мезо- и макроуровни пластичности.

Тензор действующего на мезоуровне дополнительного материального поворота k -го фрагмента (будем обозначать его $\boldsymbol{\omega}_{\text{meso}}^{(k)}$) определяется из уравнения баланса

$$\boldsymbol{\omega}_{\text{micro}}^{(k)} + \boldsymbol{\omega}_{\text{meso}}^{(k)} = \boldsymbol{\omega}_{\text{makro}}^{(k)}, \quad (11)$$

где $\boldsymbol{\omega}_{\text{makro}}^{(k)}$ — тензор материального поворота деформируемого образца, определяемый на макроуровне рассмотрения задачи, а $\boldsymbol{\omega}_{\text{mikro}}^{(k)}$ — тензор материального поворота с инвариантной решеткой k -го кристаллита, определяемый на микроуровне рассмотрения (10).

4.2. Разориентировки деформационного происхождения

Рассмотрим два соседних фрагмента, $k = 1, 2$. Как видно из (11), разориентировка между ними возникает вследствие рассогласования ротационных мод, действующих на мезоуровне ПД. Ее малое приращение можно представить тензором

$$d\mathbf{R}_{pl}^{(1,2)} \equiv d\boldsymbol{\omega}_{\text{meso}}^{(2)} - d\boldsymbol{\omega}_{\text{meso}}^{(1)} = d\boldsymbol{\omega}_{\text{micro}}^{(1)} - d\boldsymbol{\omega}_{\text{micro}}^{(2)}. \quad (12)$$

⁸ Так называемый „поворот с инвариантной решеткой“.

При этом вектор приращения разориентировки $d\theta_{pl}$ равен присоединенному к $d\mathbf{R}_{pl}^{(1,2)}$ вектору:

$$d\theta_{pl} = \frac{1}{2}\epsilon \cdots d\mathbf{R}^{(1,2)}, \quad (13)$$

где ϵ — единичный полностью антисимметричный тензор Кронекера 3-го ранга.

При компьютерном моделировании удобно пользоваться не тензорным, а матричным представлением разориентировок. Чтобы перейти к нему, введем в рассмотрение ориентационные матрицы $\mathbf{A}^{(k)}$, устанавливающие соответствие между компонентами одного и того же вектора в исходном (0) и разориентированном относительно исходного k -м кристаллитах:

$$\mathbf{r}^{(k)} = A_k \mathbf{r}_0. \quad (14)$$

Матрица разориентировки фрагментов (1) и (2), находящихся по одну сторону от исходной границы, равна

$$\mathbf{R}_{pl}^{(1,2)} = \mathbf{S}_{min} \mathbf{A}_2 \mathbf{A}_1^{-1}, \quad (15)$$

где \mathbf{S}_{min} обозначает матричный оператор, минимизирующий разориентировку среди множества кристаллографически эквивалентных значений угла разориентировки $\theta_{pl}^{(1,2)}$.

Матрица разориентировки фрагментов, расположенных по разные стороны от исходной границы, имеет более сложный вид:

$$\mathbf{R}^{(1,2)} = \mathbf{S}_{min} \mathbf{R}_{pl}^{(1,2)} \mathbf{R}_{initial}^{(1,2)}, \quad (16)$$

где $\mathbf{R}_{initial}^{(1,2)}$ — матрица разориентировки на исходной границе — „подложке“. Матрицу можно преобразовать в вектор разориентировки и обратно с помощью известных соотношений [53]. Так, угол разориентировки θ определяется из соотношения:

$$\cos \theta = \frac{1}{2} [\text{Sp}(\mathbf{R}) - 1],$$

где $\text{Sp}(\mathbf{R})$ — след матрицы \mathbf{R} , а единичный вектор в направлении оси разориентировки:

$$\mathbf{c} = \frac{1}{2 \sin \theta} [R_{32} - R_{23}; R_{13} - R_{31}; R_{21} - R_{12}].$$

5. Компьютерное моделирование спектра разориентировок границ ДП

5.1. Спектр хаотически разориентированных кристаллитов

Задав случайно выбранные ориентировки для двух соседних кристаллитов, можно, пользуясь формулой (15), вычислить матрицу разориентировки $\mathbf{R}_{pl}^{(1,2)}$, а затем по стандартным формулам [53] найти значение θ_{pl} и,

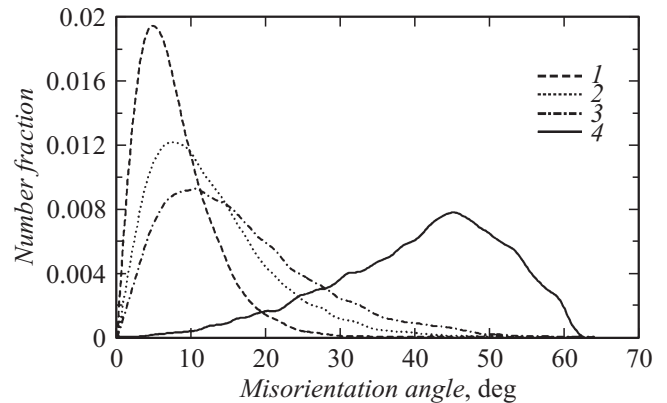


Рис. 6. Функции распределения разориентировок в случае гамма-распределения (17) для $\epsilon = 1$ (1), $\epsilon = 2$ (2), $\epsilon = 3$ (3) и ансамбля (ХРА) (4).

наконец, θ_{pl} . Повторяя эту процедуру N_g раз, получим выборку из N_g^{ch} случайных разориентировок θ_{pl} , позволяющую построить функцию распределения разориентировок (ФРР) для хаотически разориентированного ансамбля (ХРА) зерен [54,55]. Полученный спектр ХРА представлен на рис. 6. Максимум распределения разориентировок для ХРА соответствует $\theta_p = 45^\circ$, а высота пропорциональна η_{ch} (в данном случае $\eta_{ch} = 1$). В настоящей работе мы использовали выборки N_g^{ch} при моделировании спектра разориентировок референтной структуры (рис. 2, а), а также при моделировании частичного вклада η_{ch} хаотически разориентированных кристаллитов в спектр разориентировок фрагментированной структуры пластической струи (рис. 2, б). При этом надо иметь в виду, что доля малоугловых и среднеугловых границ в спектре разориентировок для ХРА составляет примерно 2%:

$$\int_0^{0.26} F_{ch}(\theta_{pl}) d\theta_{pl} \cong 0.02 \eta_{ch}.$$

Иными словами, вклад хаотически разориентированных границ может быть заметен только в большеугловой части интегрального спектра ($\theta_{pl} > 15^\circ \approx 0.26 \text{ rad}$).

5.2. Функции распределения разориентировок

5.2.1. Функция распределения разориентировок (ФРР) для случая классической фрагментации (М1). Классическая фрагментация пластически деформируемых кристаллов включает в себя: а) возникновение и рост оборванных дислокационных границ, б) увеличение их длины и разориентации, в) ветвление оборванных дислокационных границ и г) непрерывное изменение направления и величины вектора разориентировки. Ориентировки соседних фрагментов сильно коррелированы и являются функцией от ϵ . Количественной теории этого сложного эволюционного процесса

пока нет. Соответственно нет возможности напрямую рассчитать ФРП для границ фрагментов. В этих условиях в качестве ФРП мы использовали эмпирически подобранную, но надежно верифицированную на базе большого массива экспериментальных данных функцию вида

$$F(x) = \frac{a^a}{\Gamma(a)} x^{a-1} \exp(-ax), \quad (17)$$

где a — параметр распределения, $x = \frac{\theta}{\theta_{\text{mean}}}$, а θ_{mean} — средний угол разориентировки [25,26,49].⁹ Гамма-распределение (17) имеет колоколообразную форму и достигает максимального значения при значениях угла разориентировки

$$\theta_p = \left(\frac{a-1}{a} \right) \theta_{\text{mean}}. \quad (18a)$$

Из (18a) следует, что

$$a = \frac{\theta_{\text{mean}}}{\theta_{\text{mean}} - \theta_p}. \quad (18b)$$

Безразмерная функция $F(x) \equiv F\left(\frac{\theta}{\theta_{\text{mean}}}\right)$ связана с экспериментально определяемой функцией $F(\theta)$ (4) соотношением вида

$$F(\theta) = \frac{1}{\theta_{\text{mean}}} F\left(\frac{\theta}{\theta_{\text{mean}}}\right). \quad (19)$$

Чтобы конкретизировать вид гамма-распределения применительно к реальной гистограмме, необходимо поступить следующим образом:

- определить по гистограмме значения θ_p и θ_{mean} ,
- вычислить по ним параметр a ,
- подставить полученные значения a и θ_{mean} в формулу (17).

Имея в виду эволюционную природу развития фрагментации, легко понять, что при прочих равных условиях параметры распределения разориентировок θ_p и θ_{mean} должны определяться величиной пластической деформации ε . Согласно [49], средняя разориентировка зависит от ε как

$$\theta_{\text{mean}} = C\varepsilon^{2/3}, \quad (20)$$

где эмпирически подобранный коэффициент $C = 8^\circ$.

На рис. 6 представлены гамма-распределения для $\varepsilon = 1, 2$ и 3 . Видно, что увеличение ε от 1 до 3 приводит к сильному размытию распределения и смещению θ_p от ~ 5 до $\sim 10^\circ$.

При моделировании реальных спектров разориентировок использование зависимости θ_p и θ_{mean} от ε оказывается весьма удобным в тех случаях, когда одновременно действуют нескольких механизмов фрагментации.

⁹ Впервые гамма-распределение было предложено в работах Хансена и Хьюза [25,26,49] для описания распределения разориентировок в фрагментированных структурах после многопроходной холодной прокатки сверхчистого крупнозернистого алюминия (Al 99.996%, $D_{\text{gr}} = 300 \mu\text{m}$) в интервале обжатий $0.06 \leq \varepsilon_{\text{pl}} \leq 0.8$.

В этом случае определить характеристику θ_{mean} по форме экспериментально найденного распределения не представляется возможным, и моделирование удастся провести только за счет варьирования величины ε . Параметр a гамма-распределения подбирали эмпирически. Наилучшее согласие получено при $a = 2.5$.

5.2.2. Моделирование ФРП для случая классической фрагментации (M1). Чтобы создать выборку разориентировок для границ фрагментов N_g^{M1} , использовали датчик случайных чисел, отвечающих гамма-распределению (17) в среде Matlab. С помощью его определяли промежуточную выборку углов разориентировки θ_{pl}^* . При определении выборки промежуточных векторов θ_{pl}^* их считали случайно ориентированными. В такой модели направление θ_{pl}^* определяли, задав с помощью датчика случайных чисел соответствующие сферические углы ρ и φ . Векторы разориентировок θ_{pl}^* преобразовывали в матрицу разориентации $\mathbf{R}_{\text{pl}}^{(1,2)}$, из которой находили вектор θ_{pl} и величину θ_{pl} кристаллографической разориентировки.

5.2.3. Моделирование ФРП для случая фрагментации исходных БУГ (M2, M3, M4, M5). В этом случае моделирование состояло из трех этапов. Первый этап заключается в нахождении набора матриц кристаллографической разориентировки $\mathbf{R}_{\text{pl}}^{(1,2)}$, отвечающего гамма-распределению углов разориентации. Он выполняется так же, как в разд. 6.2.2. На втором этапе каждая из матриц $\mathbf{R}_{\text{pl}}^{(1,2)}$ справа умножается на матрицу $\mathbf{R}_{\text{initial}}^{(1,2)}$, будь то матрица двойникования (M2, M5), матрица разориентировки на специальной (M3) или на обычной (M4) БУГ. На третьем этапе для каждой полученной таким образом промежуточной матрицы $\mathbf{R}^{*(1,2)}$ производится операция минимизации разориентировки и находится ее минимизированная форма $\mathbf{R}^{(1,2)}$. Значение минимальной (кристаллографической) разориентировки θ_{pl} определяется из матрицы $\mathbf{R}_{\text{pl}}^{(1,2)}$.

6. Результаты моделирования

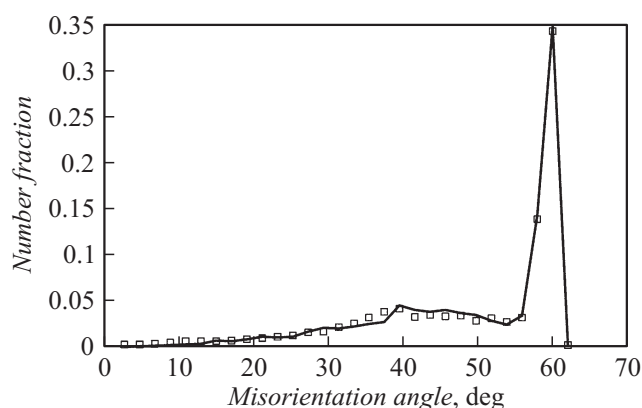
Моделировали форму спектра разориентировок для референтной структуры и фрагментированной структуры пластической струи. Степень соответствия модельного и экспериментально измеренного спектров определяли среднеквадратичным отклонением

$$\chi = \sqrt{\left(\frac{1}{32}\right) \sum_{i=1}^{i=32} [F_{\text{exp}}(\theta_i) - F_{\text{mod}}(\theta_i)]^2}, \quad (21)$$

где $F_{\text{exp}}(\theta_i)$ — экспериментальное значение интегральной ФРП, равное высоте i -го столбца на гистограмме разориентировок (4), $F_{\text{mod}}(\theta_i)$ — то же для модельного спектра. Целью моделирования являлся подбор таких значений парциальных вкладов η_a и таких величин локальной пластической деформации ε , при которых среднеквадратичное отклонение χ оказывалось минимальным. При этом надо учитывать, что в случае

Таблица 2. Результаты моделирования спектров разориентировок

	Референтная структура	Структура пластической струи
η_{M1}	—	0.5
$\eta_{\Sigma 3}$	0.47	0.25
$\eta_{\Sigma 9}$	0.03	—
$\eta_{ХРА}$	0.5	0.25
ε_{eff}	0.1	1.6
χ	0.0045	0.0064

**Рис. 7.** Интегральный спектр разориентировок для референтной структуры, $\chi = 0.0045$. Моделирование — сплошная линия, экспериментальные данные — квадраты.

референтной структуры мы находили некую эффективную величину ε_{eff} , а именно деформацию, которая в условиях монотонного нагружения приводит к такому же распределению разориентировок, как и при двух противоположного знака изгибах с амплитудой:

$$\varepsilon_a \approx \varepsilon_0 \approx 0.2. \quad (22)$$

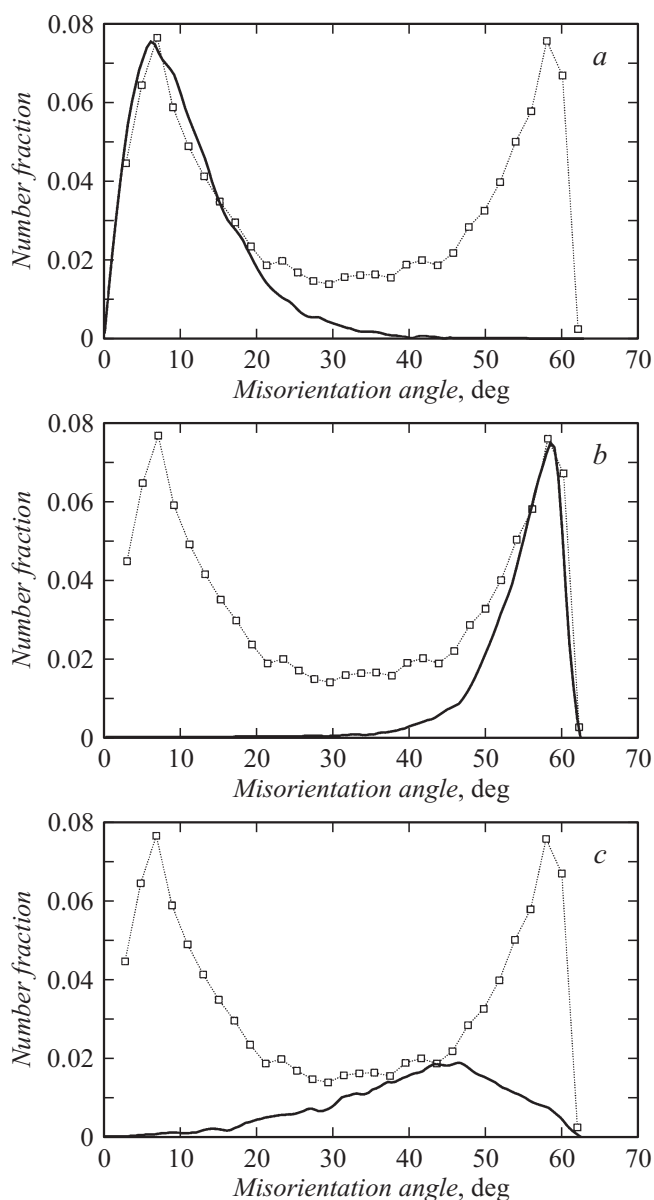
6.1. Референтная структура

В референтной структуре в виду соотношения (22) отсутствует фрагментация объема кристаллитов. Кроме того, по причине малости ε_a , хаотическое распределение БУГ общего типа остается таковым и после деформации. Единственно, где можно экспериментально обнаружить статистически достоверные признаки границ ДП, является распределение границ, близких к двойниковым. Поэтому мы моделировали фрагментацию границ только по механизмам М2 ($\Sigma 3$) и М3 ($\Sigma 9$). Результаты моделирования парциальных вкладов этих механизмов представлены в табл. 2, а построенный для них интегральный спектр разориентировок в референтной структуре изображен на рис. 7. Видно хорошее согласие с экспериментальными данными. Среднеквадратичное отклонение χ в данном случае равно 0.0045 при эффективной деформации $\varepsilon_{\text{eff}} = 0.1$, т.е. примерно равной

половине амплитудного значения макропластического изгиба пластины ε_a .

6.2. Фрагментированная структура пластической струи

6.2.1. Среднеугловой пик спектра разориентировок (рис. 2, *b*) связан с механизмом фрагментации (М1) объема кристаллитов. Возможный вклад от ХРА в этом угловом интервале не превышает 1%, и им можно пренебречь. По этой причине при моделировании

**Рис. 8.** Результаты моделирования парциальных спектров разориентировки для границ ДП фрагментированной структуры пластической струи: *a* — классическая фрагментация, механизм М1 ($\eta_{M1} = 0.5$, $\varepsilon = 1.6$), *b* — фрагментация двойниковых границ, механизмы М2, М3 и М5 ($\eta_{tw} = 0.3$, $\varepsilon = 1.6$), *c* — ХРА ($\eta_{ХРА} = 0.2$, $\varepsilon = 1.6$). Моделирование — сплошная линия, экспериментальные данные — квадраты.

среднеугловой части спектра рассматривался только механизм М1. На рис. 8, *a* можно видеть, насколько точно можно смоделировать экспериментальный пик действием одного этого механизма фрагментации при $\eta_{M1} = 0.50$ для $\varepsilon = 1.6$. Хорошее согласие наблюдается вплоть до $\theta = 20^\circ$. За пределами этого углового интервала теоретическая и экспериментальная кривые резко расходятся. Очевидно, что при $\theta > 20^\circ$ начинает превалировать другой механизм фрагментации.

6.2.2. Большеугловой пик на распределении разориентировок. Естественно предположить, что происхождение большеуглового пика связано с фрагментацией двойниковых границ. Однако конкретные расчеты показывают, что это справедливо лишь отчасти. Действительно, на рис. 8, *b*, где смоделированный для $\eta_{(\Sigma 3)} = 0.3$ и $\varepsilon = 1.6$ парциальный спектр разориентировок М2 изображен на фоне большеуглового пика. Видно, что фрагментация двойниковых границ обеспечивает заполнение примерно половины его площади. В то же время механизм фрагментации двойниковых границ позволяет достаточно точно воспроизвести форму пика при $\theta > 57^\circ$ и естественным образом описать такой нетривиальный эффект, как смещение вершины пика с 60 до 57° .

6.2.3. Вклад хаотически разориентированных границ. Классическая фрагментация объема ($\eta_{M1} = 0.50$) и фрагментация двойниковых границ ($\eta_{(\Sigma 3)} = 0.3$) объясняют природу происхождения 80% границ ДП в пластической струе. Оставшиеся следует отнести на счет хаотически разориентированных БУГ. Согласно данному выше анализу, ими могут быть исходные границы ($\sim 2\%$), а также границы „ножевые“ и возникшие при динамической рекристаллизации. Суммарный вклад хаотически разориентированных границ, смоделированный для $\eta_{ХРА} = 0.2$, изображен на рис. 8, *c*.

Заключение

Интегральный спектр разориентировок, являющийся суммой трех парциальных спектров, генерируемых разными по своей физической природе механизмами фрагментации: классической фрагментации, фрагментации границ двойников деформации, а также хаотически разориентированных границ ДП, представлен на рис. 9. Наилучшее согласие экспериментального и смоделированного спектров получилось при $\eta_{M1} = 0.50$, $\eta_{(\Sigma 3)} = 0.25$ и $\eta_{ХРА} = 0.25$ (табл. 2). Среднеквадратичное отклонение $\chi = 0.0064$! Этот впечатляющий результат показывает, что развитая в настоящей работе двух (микро-мезо) уровневая модель структурообразования обеспечивает не только качественное, но и количественное соответствие между теорией и экспериментом при описании статистики распределения разориентировок деформационного происхождения. Опираясь на эту модель, можно сформулировать несколько важных выводов относительно физической природы процесса фрагментации кристаллов в условиях интенсивной ПД.

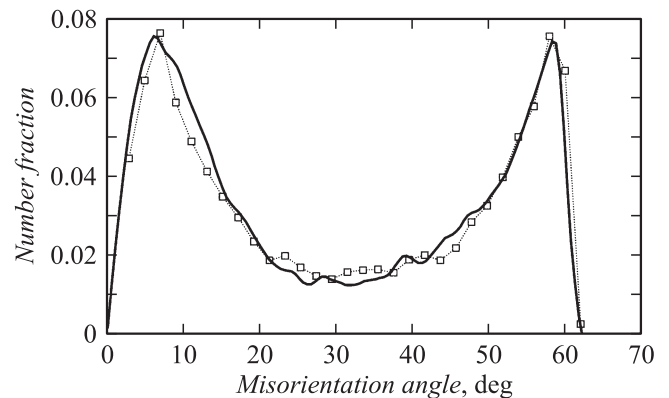


Рис. 9. Интегральный спектр разориентировок границ ДП для фрагментированной структуры пластической струи, $\chi = 0.0064$. Моделирование — сплошная линия, экспериментальные данные — квадраты.

1. Основные этапы эволюционного развития сильно разориентированных структур деформационного происхождения на стадии развитой ПД¹⁰ остаются неизменными вплоть до сверхвысоких скоростей пластической деформации $\dot{\varepsilon} \approx 10^6 \text{ s}^{-1}$. Этот факт свидетельствует о том, что в своей основе фрагментация является деформационным явлением. Термически активируемые процессы играют вспомогательную роль (вливают на форму фрагментов, скорость накопления разориентировок и некоторые другие параметры).

2. Следует различать два типа фрагментации: фрагментация объемов исходных пластически деформируемых кристаллитов и фрагментация большеугловых границ различного происхождения. На стадии развитой фрагментации доля исходных БУГ среди всех границ фрагментов составляет 1–2%, и ею можно пренебречь. Отсюда следует важный практический вывод: при прочих равных условиях характеристики фрагментированной структуры подвергнутых ИПД металлов и сплавов (и их физико-механические свойства) будут слабо зависеть от балла зернистости исходных поликристаллов.

3. Деформационное двойникование играет значительную роль в процессе формирования фрагментированной структуры. В тех материалах, где ДД является активной модой ПД, доля большеугловых границ фрагментов, генетически связанных с границами деформационных двойников $\eta_{(\Sigma 3)}$, может существенно превосходить долю большеугловых границ, возникших по механизму классической фрагментации η_{M1} . При прочих равных

¹⁰ Их можно представить в виде цепочки структурных превращений: появление в дислокационных ансамблях при критической плотности дислокаций ρ_c коллективных мод движения \rightarrow формирование мезодефектов ротационного типа \rightarrow возникновение на их основе мезоуровня структуры и на базе его ротационно-сдвиговых мод пластичности \rightarrow эволюционное развитие фрагментированной структуры и границ с разориентировками, превышающими $\theta_0 \approx 2^\circ$, \rightarrow монотонное нарастание разориентировок фрагментов θ при слабо меняющемся поперечном размере фрагмента на уровне $D_{fr} \approx d_{mag} \approx 0.2 \mu\text{m}$.

условиях доля БУГ среди границ ДП

$$\eta_{\text{БУГ}} = \int_{0.26}^{\infty} F(\theta) d\theta$$

наибольшая у тех подвергнутых ИПД металлов и сплавов, у которых максимально развито деформационное двойникование (Cu, α -Ti, аустенитная сталь и пр.). В частности, в настоящей работе было обнаружено, что в технически чистой меди уже после относительно небольшой по величине интенсивной пластической деформации $\varepsilon = 1.6$ среди всех границ деформационного происхождения на долю большеугловых приходится 65%.

4. Следует обратить внимание еще на один примечательный факт. При моделировании спектра разориентировок ДП мы использовали гамма-распределение (17), эмпирически подобранное для описания структур деформационного происхождения высокочистого Ni и Al, полученных при однородной пластической деформации прокаткой при комнатной температуре и скорости деформации $\dot{\varepsilon} = 10^1 \text{ s}^{-1}$ [25,26,49]. Оказалось, однако, что такое распределение хорошо описывает экспериментальные данные, полученные и в совершенно иных условиях деформации: медь, сварка взрывом, крайне неоднородная пластическая деформация, пластическая струя, скорость пластической деформации $\dot{\varepsilon} = 10^6 \text{ s}^{-1}$. Это удивительное на первый взгляд обстоятельство еще раз подтверждает, что для широкого класса кристаллических твердых тел и температурно-скоростных условий нагружения фрагментация является наиболее общей и фундаментальной закономерностью процесса структурообразования.

5. В научной литературе часто обсуждается вопрос о природе измельчения структуры в условиях ИПД. В частности, предполагается, что измельчение зерен есть следствие динамической рекристаллизации. В настоящей работе методами компьютерного моделирования показано, что при высокой температуре деформации механизм динамической рекристаллизации действительно имеет место и может внести определенный вклад в создание ультрамелкозернистого состояния. В нашем случае, судя по наличию расплавления в конце пластической струи, локальная температура деформации высока и во всяком случае превышает $0.5T_m$. Однако даже при этом вклад хаотически разориентированных фрагментов составляет только 25%. Доля границ динамической рекристаллизации не может превысить эту величину. При более низких температурах ПД ее вклад должен резко снижаться.

На этом примере видно, что разработанный в работе метод количественного определения величины парциальных вкладов позволяет уйти от субъективных оценок и получить объективную картину физических процессов структурообразования даже в экстраординарных условиях пластического течения кристаллических твердых тел.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований, проект № 13-02-00118а.

Список литературы

- [1] Johari O., Thomas G. // *Acta Metall.* 1964. Vol. 12. P. 1153–1159.
- [2] Brodova I.G., Shorokhov E.V., Petrova A.N. et al. // *Reviews on Advanced Material Science.* 2010. N 25. P. 128–135.
- [3] Хомская И.В., Шорохов Е.В., Зельдович В.И. и др. // *ФММ.* 2011. Т. 111. № 6. С. 639–650.
- [4] Бродова И.Г., Петрова А.Н., Ширинкина И.Г. // *Известия РАН. Сер. Физическая.* 2012. Т. 76. № 11. С. 1378–1383.
- [5] Хомская И.В., Зельдович В.И., Хейфец А., Лутвинов Б.В. // *Известия РАН. Сер. Физическая.* 2012. Т. 76. № 11. С. 1364–1369.
- [6] Hammerschmidt M., Kreye H. *Microstructure and Bonding Mechanism in Explosive Welding / Shock Waves and High Strain-Rate Phenomena in Metals.* NY: Plenum Press, 1981. P. 961–973.
- [7] Лысак В.И., Кузьмин С.В. *Сварка взрывом.* М.: Машиностроение, 2005. 544 с.
- [8] Nesterova E.V., Rybin V.V. // *Proceedings of the Ninth World conference on Titanium, Saint-Petersburg, 1999.* Vol. 2. P. 768–774.
- [9] Рыбин В.В., Гринберг Б.А., Антонова О.В., Елкина О.А., Иванов М.А., Иноземцев А.В., Пацелов А.М., Сидоров И.И. // *ФММ.* 2009. Т. 108. № 4. С. 371–384.
- [10] Гринберг Б.А., Иванов М.А., Рыбин В.В. и др. // *Сварка и диагностика.* 2010. № 6. С. 34–38.
- [11] Song J., Kostka A., Veehmayer M., Raabe D. // *Mater. Sci. Eng.* 2011. Vol. A528. P. 2641–47.
- [12] Findik F. // *Mater. Des.* 2011 Vol. 32. P. 1081–1093.
- [13] Рыбин В.В., Ушанова Э.А., Кузьмин С.В., Лысак В.И. // *Письма в ЖТФ.* 2011. Т. 37. Вып. 23. С. 26–33.
- [14] Рыбин В.В., Ушанова Э.А., Золоторевский Н.Ю. // *ЖТФ.* 2013. Т. 83. С. 63–72.
- [15] Рыбин В.В., Вергазов А.Н., Лихачев В.А. // *ФММ.* 1974. Т. 37. Вып. 3. С. 620–624.
- [16] Рыбин В.В. *Большие пластические деформации и разрушение металлов.* М.: Металлургия. 1986. 224 с.
- [17] Фридель Ж. *Дислокации.* М.: Мир, 1967. 644 с.
- [18] Хирт Дж., Лоте И. *Теория дислокаций.* М.: Атомиздат. 1972. 599 с.
- [19] Рыбин В.В. // *Вопросы материаловедения.* 2002. Т. 1 (29). С. 11–34.
- [20] Huang C.X., Wang K., Wu S.D., Zhang Z.F., Li G.Y., Li S.X. // *Acta Materialia.* 2006. Vol. 54. P. 655–665.
- [21] Humphreys F.J., Hatherly M. *Recrystallization and related annealing phenomena.* NY: Elsevier Science, 2004.
- [22] Горелик С.С., Добаткин С.В., Капуткина Л.М. *Рекристаллизация металлов и сплавов.* М.: МИСИС, 2005. 432 с.
- [23] Beladi H., Cizek P., Hodson P.D. // *Metallurgical and Materials Transactions A,* 2009. Vol. 40. P. 1175–1189.
- [24] Engler O., Randle V. *Introduction to texture analysis: microtexture, microtexture and orientation mapping* NY: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2010. 488 p.
- [25] Hughes D.A., Liu Q., Chrzan D.C., Hansen N. // *Acta Mater.* 1997. V. 45. P. 105–112.
- [26] Hughes D.A., Hansen N. // *Acta Mater.* 1997 Vol. 45. P. 3871–3886.
- [27] Pantleon W. // *Materials Science and Engineering.* A. 2001. Vol. 319–321. P. 211–215.
- [28] Pantleon W. // *Materials Science and Engineering.* A. 2005. Vol. 400–401. P. 118–124.

- [29] Ушанова Э.А., Нестерова Е.В., Петров С.Н., Рыбин В.В., Кузьмин С.В., Гринберг Б.А. // Вопросы материаловедения. 2011. № 1 (65). С. 110–117.
- [30] Terence G., Langdon. // Acta Materialia. 2013. Vol. 61. N 19. P. 7035–7059.
- [31] Estrin Y., Vinogradov A. // Acta Materialia. 2013. Vol. 61. P. 782–817.
- [32] Вергазов А.Н., Лихачев В.А., Рыбин В.В. // ФММ. 1976. Т. 42. Вып. 1. С. 146–154.
- [33] Панин В.Е. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. Новосибирск: Наука, 1990. 256 с.
- [34] Лихачев В.А., Хайров Р.Ю. Введение в теорию дисклинаций. Л.: ЛГУ, 1975. 183 с.
- [35] Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.
- [36] Рыбин В.В., Золоторевский Н.Ю., Жуковский И.М. // ФММ. 1990. Т. 69. Вып. 1. С. 5–26.
- [37] Romanov A.E., Kolesnikova A.L. // Progress in Materials Science. 2009. Vol. 54. P. 740–769.
- [38] Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. // Acta Metall. Mater. 1993. Vol. 41. N 7. P. 2211–2217.
- [39] Zisman A.A., Rybin V.V. // Acta Mater. 1996. Vol. 44. N 1. P. 403–407.
- [40] Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. // Rev. Adv. Mater. Sci. 2012. Vol. 30. P. 73–89.
- [41] Pantleon W. // Problems of Mat. Sci. 2003. Vol. 33. P. 142–150.
- [42] Владимиров В.И., Романов А.Е. // ФТТ. 1978. Т. 20. С. 3114–3116.
- [43] Luft A. // Progr. Mater. Sci. 1991. Vol. 35. P. 97–204.
- [44] Klemm V., Klimanek P., Seefeldt M. // Phys. Stat. Solid (A). 1999. Vol. 175. P. 569–576.
- [45] Klemm V., Klimanek P., Motylenko M. // Mater. Sci. Eng. A. 2001. Vol. 324. P. 174–178.
- [46] Zisman A., Nesterova E., Rybin V., Teodosiu C. // Scri. Mater. 2002. Vol. 46. P. 729–733.
- [47] Zisman A.A., Van Boxel S., Seefeldt M., Van Houtte P. // Mater. Sci. and Engin. A. 2008. Vol. 474. P. 165–172.
- [48] Bay B., Hansen N., Hughes D.A., Kuhlmann-Wilsdorf D. // Acta Metall. Mater. 1992 Vol. 40. P. 205–219.
- [49] Hughes D.A., Hansen N. // Scri. Metal. Mater. 1995. Vol. 33. P. 315–321.
- [50] Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М.: Мир, 1974. 496 с.
- [51] Вассерман Г., Гревен И. Текстуры металлических материалов. М.: Металлургия, 1969. 655 с.
- [52] Taylor G.I. // J. Inst. Metals. 1938. Vol. 62. P. 307–324.
- [53] Корн Г.А., Корн Т.М. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1974. 832 с.
- [54] Handscomb D.C. // Canad. J. Math. 1958. Vol. 10. P. 85–88.
- [55] Mackenzie J.K. // Biometrika. 1958. Vol. 45. P. 229–240.