

## Динамика дислокаций в поликристалле при наличии дисклинационной стенки

Е. М. Борисовская, Н. М. Марченко, Ю. Н. Подрезов,  
С. А. Фирстов

Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН  
Украины, Киев, e-mail: kmb@ipms.kiev.ua

*Рассмотрено влияние дисклинации на эволюцию дислокационной структуры в соседнем зерне. Показано, что мощные дисклинации приводят к возникновению дислокационных стенок, увеличению количества дислокаций в скоплениях и к упорядочению дислокационной структуры в соседних зернах. Приведены расчетные кривые нагружения, энергии движения и число дислокаций в зависимости от мощности дисклинации в соседнем зерне. Установлено, что при некоторой величине критической мощности дислокационной стенки в процессе деформации изменяется тип дислокационной структуры: от хаотически расположенных дислокаций (или дипольных пар) и образования дислокационных скоплений малой мощности до образования мощных изогнутых дислокационных скоплений.*

**Ключевые слова:** дислокация, кривая упрочнения, дисклинация, прочность.

Среди задач по структурообразованию в деформированном теле вопрос об эволюции структуры на стадии больших деформаций остается одним из самых сложных и актуальных. Проблема заключается в том, что изменение структуры в макрообразце невозможно визуализировать в процессе деформирования, а структура, фиксируемая в электронном микроскопе после разгрузки, не соответствует реальной картине из-за процессов возврата. Одним из возможных решений этой задачи является компьютерное моделирование.

Образованию структуры при больших пластических деформациях и ее влиянию на свойства посвящено много работ, в частности Валиева [1, 2], Эстрина [3] и Малыгина [4]. В этих работах рассмотрены вопросы пластичности и прочности материалов с развитой деформационной структурой, а также описаны технологии их получения. Большой вклад в изучение формирования деформационной структуры, границ зерен и дисклинаций внесли Рыбин [5] и Владимирова [6]. В работе Чувельдеева [7] исследуются природа и свойства большеугловых дисклинационных границ и их влияние на процессы деформации и диффузии. В работах Сарафанова и Перевезенцева [8, 9] изучены вопросы формирования дисклинаций, их влияния на окружающую дислокационную структуру и энергию такой системы. Так, в работе [8] показано, что присутствие дисклинаций приводит к упорядочению близлежащей дислокационной структуры, способствуя выстраиванию дислокаций в полигонизационные стенки. В нашей предыдущей работе [10] показано, что источники Франка-Рида в присутствии близких дислокаций леса могут работать в разных режимах: генерируют pile-up или создают полигонизационные стенки.

© Е. М. Борисовская, Н. М. Марченко, Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов,  
2015

Как известно, пластическая деформация является многостадийным процессом, который характеризуется перестройкой дислокационной структуры на каждой стадии. Эти перестройки не происходят стохастически, в старой структуре появляются зародыши новой, которые увеличиваются и захватывают все новые области, от зерна к зерну, аналогично полосам Людерса [6]. Обычно перестройка осуществляется в узком диапазоне деформации, в пределах ~1%. Качественное изменение дислокационной структуры отражается на механических свойствах материала, в частности на кривой упрочнения [11]. Поэтому представляет интерес исследовать методом дислокационной динамики эволюцию дислокационной структуры при наличии дисклинационной стенки разной мощности в соседнем зерне.

Цель работы — изучить влияние наличия дисклинации и ее параметров на эволюцию дислокационной структуры в соседнем зерне, а также на макросвойства: кривую упрочнения, энергию движения дислокационного ансамбля.

### Методика расчета

Дисклинацию в соседнем зерне представляли как высокоугловую дислокационную стенку с разным количеством дислокаций: 10, 70 и 100, наклоненную к границе зерна под углами 0,  $\pi/8$  и  $\pi/4$ . Материал — молибден:  $E = 290$  ГПа,  $G = 190$  ГПа,  $b = 3,14 \cdot 10^{-10}$  м, напряжение Пайерлса — 5 МПа. Размер модельного кристалла  $10\ 000b$ .

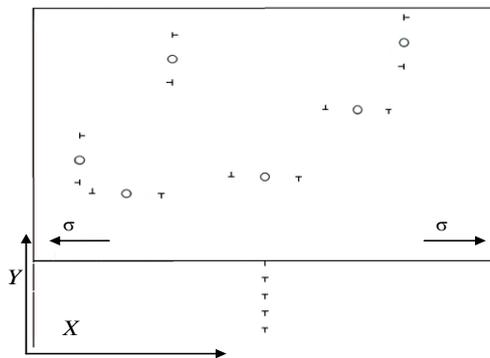
Дислокационную структуру моделировали двумя полосами скольжения, расположенными под углом  $90^\circ$  друг к другу. Текущий шаг по времени выбирали так, чтобы дислокация, на которую действует максимальное напряжение, успела пройти расстояние  $2b$ . Если напряжение на дислокационном источнике превышает напряжение Пайерлса, то считается, что источник эмитировал пару дислокаций. Всего в зерне располагалось 6 источников, из них 3 — в плоскости деформирования и 3 — в перпендикулярной плоскости. Напряжение прикладывалось, как показано на рис. 1.

Напряжение увеличивали пошагово со скоростью  $5 \cdot 10^{10}$  МПа/с. Деформацию рассчитывали как общий путь дислокаций, скользящих в плоскости  $x$ :

$$\varepsilon = \rho b L, \quad (1)$$

где  $\rho$  — плотность дислокаций;  $L$  — длина свободного пробега.

На каждую дислокацию действовало суммарное напряжение, состоящее



из следующих компонентов: внешнего напряжения, собственного изображения, напряжений других дислокаций ансамбля и их изображений (рис. 2):

$$\sigma = \sigma_v + \sigma_{ims} + \sum_i (\sigma + \sigma_{im})_i; \quad (2)$$

Рис. 1. Дислокационная структура в процессе нагружения.

Рис. 2. Дислокация изображения вблизи границы зерна.

$$\sigma_i = -\sigma_{11} \cos \beta \sin \beta + \sigma_{22} \sin \beta \cos \beta + \sigma_{12} (\cos^2 \beta - \sin^2 \beta), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{22} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{12} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \end{aligned} \quad (4)$$

( $b$  — вектор Бюргерса;  $G$  — модуль сдвига;  $\beta$  — угол между векторами Бюргерса дислокаций [12]).

Поскольку моделировали большое зерно, то учитывали силу изображения только от одной стенки, граничащей с зерном с дисклинацией. Скорости дислокаций рассчитывали как линейные функции действующего напряжения в соответствии с работой [12]. В зависимости от того, какой из компонентов действующего на дислокацию напряжения оказывался больше, дислокация или скользила или переползала со скоростью

$$v = v_c \sigma, \quad (5)$$

где

$$v_c = \frac{D_s b}{kT} \quad (6)$$

( $D_s$  — коэффициент самодиффузии;  $\sigma$  — действующее напряжение).

В случае достаточно больших деформаций и высоких температур скорости скольжения и переползания считались равными.

### Результаты моделирования и их обсуждение

В том случае, когда число дислокаций в дисклинации не очень велико ( $n = 10—70$ ), дисклинация не оказывает сильного влияния на структуру: зародившиеся дислокации движутся в плоскости скольжения, создавая плоские нагромождения. При мощной дислокации ( $n = 100$ ) происходит смена механизма генерации дислокационных пар, дислокации начинают переползать сразу после генерации, поэтому источники быстро разблокируются после появления очередной пары дислокаций. Это приводит к быстрому росту полигонизационных стенок в зерне (рис. 3). Наличие мощной дисклинации в соседнем зерне также вызывает изгиб скоплений, которые не упираются в стенку под одним и тем же углом, что

обеспечивает уменьшение напряжений в вершине скоплений вблизи границы зерна. Именно эти напряжения ответственны за образование микротрещин по механизму Стру. Таким образом, материал становится не только более пластичным, но и менее склонным к разрушению.

На рис. 4 представлены кривые нагружения модельного кристалла при разных мощностях дисклинации с нулевым углом наклона. Видно, что кривая упрочнения при низких мощностях дисклинации имеет вид параболы, как и на начальных стадиях пластической деформации (рис. 4, *а*). При наличии мощной дисклинации зависимость напряжение—деформация можно аппроксимировать почти прямой линией (рис. 4, *б*). Такой характер кривых упрочнения типичен именно для больших степеней деформации, где дисклинации играют определяющую роль в механизме упрочнения.

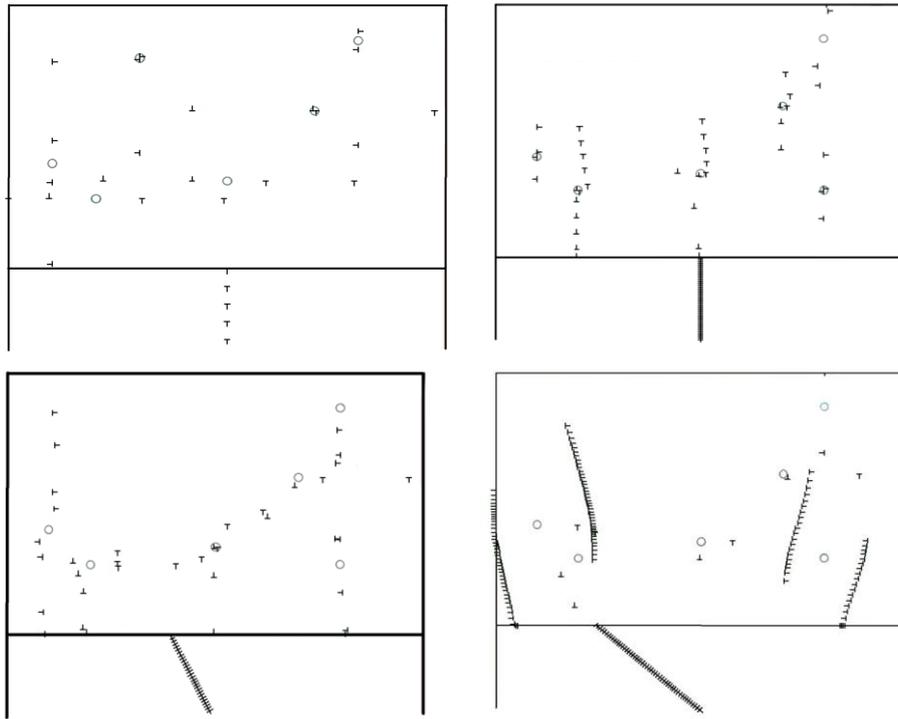


Рис. 3. Эволюция дислокационной структуры в процессе нагружения при разных мощностях дисклинации.

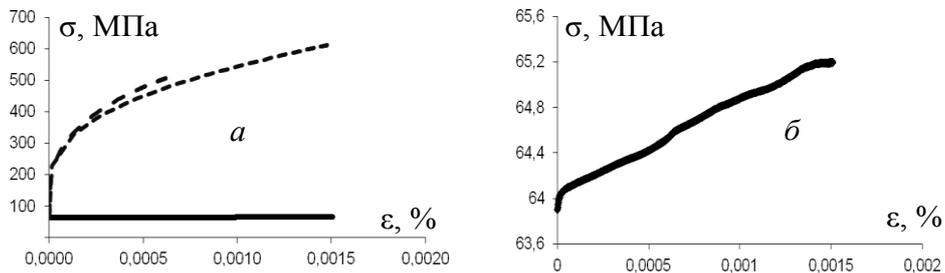


Рис. 4. Кривые нагружения модельного кристалла при разных мощностях дисклинации с углом 0, равных 10 (- · -), 70 (- - -) и 100 (—) (*а*), и последняя кривая более подробно (*б*).

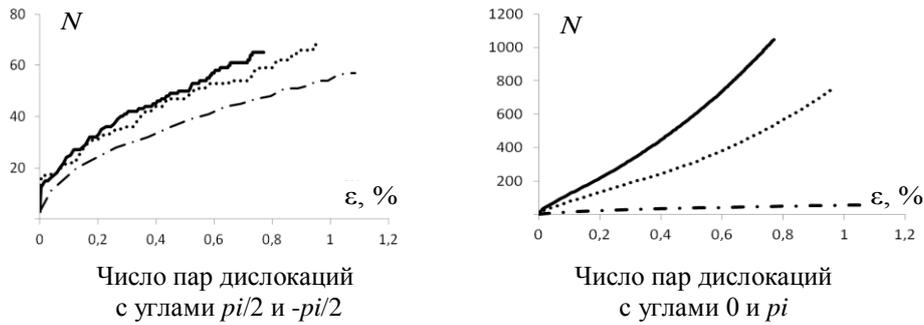


Рис. 5. Число дислокационных пар в зависимости от деформации, угол дисклинации  $\pi/8$ , мощность — 10 ( $\square \cdot \square$ ), 70 (- - -), 100 (—).

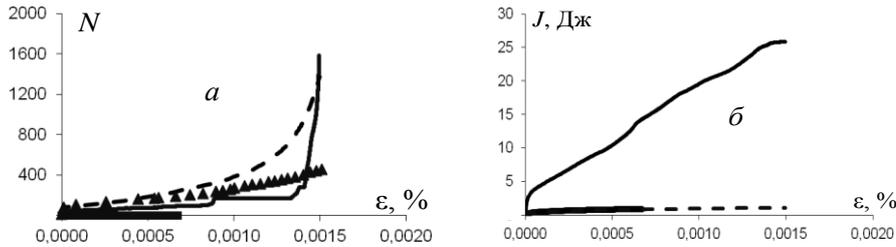


Рис. 6. Общее число дислокаций (*a*) и энергия движения дислокаций (*б*) в зависимости от степени деформации, угол дисклинации 0, мощность — 10 ( $\blacksquare$ ), 30 ( $\blacktriangle$ ), 70 (- - -) и 100 (—).

На рис. 5 представлены зависимости числа дислокационных пар с разными плоскостями легкого скольжения от деформации. Как видно, мощность дисклинации слабо влияет на количество дислокаций в плоскости  $Y$  ( $\pi/2$ ,  $-\pi/2$ ), в отличие от числа дислокаций в плоскости  $X$  ( $0$ ,  $\pi$ ), поскольку в первом случае напряжения, которые вызывают переползания дислокаций ( $\sigma_{11}$ ) от дисклинации, не так велики (см. уравнение (2)). Напряжения полигонизационных стенок также невелики, поэтому они не могут надолго блокировать источники и быстро растет число дислокаций и, соответственно, увеличиваются пластичность и энергия движения дислокаций (рис. 6, *a*, *б*).

$$J = \sum \sigma s, \quad (7)$$

где  $s$  — путь, пройденный дислокацией при действии на нее напряжения  $\sigma$ . В случае, если стенка расположена под углом к плоскости легкого скольжения (рис. 7, *a*, *б*), она практически точно так же влияет на процесс деформации в соседнем зерне.

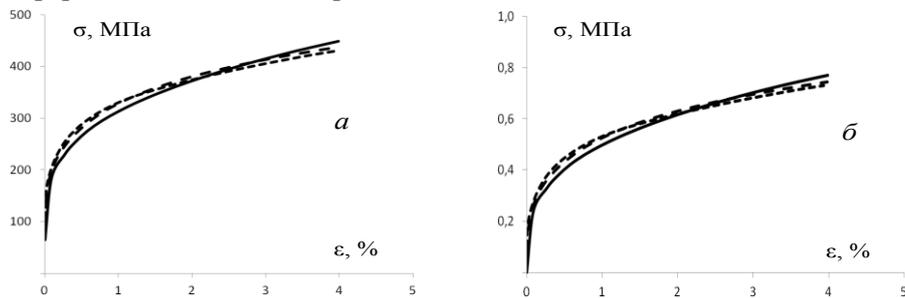


Рис. 7. Кривые нагружения при разных углах ориентации дисклинационной стенки,  $n = 10$  (*a*) и  $100$  (*б*), угол дисклинации 0 (—),  $\pi/8$  (- - -),  $\pi/4$  (· · ·).

## Выводы

Метод дислокационной динамики позволяет проанализировать влияние дисклинации различной мощности в соседнем зерне на эволюцию дислокационной структуры. Показано, что при высоких гомологических температурах увеличение мощности дислокационной стенки ( $\approx 100$  дислокаций) приводит к изменению механизма эволюции структуры из-за переползания дислокационных пар в смежные плоскости скольжения непосредственно из источников. Этот процесс вызывает рост числа дислокаций, увеличение энергии движения дислокаций и пластичности, а также приводит к изгибу скоплений. Вследствие этого материал становится не только более пластичным, но и менее склонным к разрушению.

1. *Валиев Р. З.* Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией / Р. З. Валиев, И. В. Александров. — М. : Логос, 2000. — 272 с.
2. *Валиев Р. З.* Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура, свойства / Р. З. Валиев, И. В. Александров. — М. : ИКЦ "Академкнига", 2007. — 398 с.
3. *Yasnikov I. S.* Dislocation model for the behavior of fractal dimension of the microstructure of a strained solid / I. S. Yasnikov, A. Vinogradov, Yu. Estrin // *Phys. of the Solid State.* — 2013. — **55**, is. 2. — P. 346—352.
4. *Малыгин Г. А.* Пластичность и прочность микронанокристаллических материалов // *Физика тв. тела.* — 2007. — **49**, вып. 6. — С. 961—982.
5. *Rybin V. V., Zisman A. A., Zolotarevsky N. Yu.* // *Acta Met. Mater.* — 1993. — **41**. — P. 2211—2217.
6. *Владимиров В. И.* Физическая природа разрушения металлов. — М. : Metallurgia, 1984. — 280 с.
7. *Чувельдеев В. Н.* Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. — М. : Физматлит, 2004. — 304 с.
8. *Perevezentsev V. N.* Computer simulation of terminated sub-boundary formation in the disclination elastic field / V. N. Perevezentsev, G. F. Sarafanov // *Mater. Sci. and Engineering A.* — 2009. — **503**. — P. 137—140.
9. *Sarafanov G. F.* Screening of the disclination elastic field by a system of dislocations technical / G. F. Sarafanov and V. N. Perevezentsev // *Phys. Lett.* — 2005. — **31**, No. 11. — P. 936—938.
10. *Борисовская Е. М.* Динамика структурных перестроек с учетом процесса зарождения дислокаций / Е. М. Борисовская, Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов // *Электронная микроскопия и прочность материалов.* — К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2007. — Вып. 14. — С. 3—11.
11. *Трефилов В. И.* Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов / [В. И. Трефилов, В. Ф. Моисеев, Э. П. Печковский и др.]. — К. : Наук. думка, 1989. — 256 с.
12. *Хирт Дж.* Теория дислокаций / Дж. Хирт, Н. Лоте. — М. : Атомиздат, 1972. — 599 с.

## Динаміка дислокацій в полікристалі при наявності дисклінаційної стінки

К. М. Борисовська, Н. М. Марченко, Ю. М. Подрезов, С. О. Фірстов

*Розглянуто вплив дисклінації на еволюцію дислокаційної структури в сусідньому зерні. Показано, що потужні дисклінації призводять до появи дислокаційних*

стінок і збільшення кількості дислокацій у скупченнях та упорядкуванню дислокаційної структури у сусідніх зернах. Отримано криві навантаження, енергії руху і числа дислокацій в залежності від потужності дисклінації в сусідньому зерні. Встановлено, що при деякій критичній міцності дислокаційної стінки у процесі деформації відбувається зміна типу дислокаційної структури: від хаотичних дислокацій (або дипольних пар) та появи дислокаційних скупчень малої міцності до появи міцних зігнутих дислокаційних скупчень.

**Ключові слова:** дислокація, крива зміцнення, дисклінація, міцність.

### **Dislocation dynamics in the polycrystal in the presence of disclination wall**

K. M. Borysovska, N. M. Marchenko, Yu. N. Podrezov, S. A. Firstov

*In this work, we considered the influence of disclinations on the evolution of dislocation structures in the neighboring grain. It was shown that powerful disclinations cause of dislocation walls and increase the number of dislocations and regulating structure in neighboring grains. Stress-strain curves were obtained, the energy of motion and the number of dislocations, depending on the power of disclination in the neighboring grain. It is shown that in the presence of some power dislocations wall in process of deformation the dislocation structure rebuilt: from chaotically located dislocation (or dipol) and formation dislocation pile-up to formation powerfull curved dislocation pile-up.*

**Keywords:** dislocation, the hardening curve, disclination, strength.