

## Компьютерное моделирование эстафетного механизма передачи пластического течения от зерна к зерну

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

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

*Проведено компьютерное моделирование эстафетного механизма передачи пластической деформации от зерна к зерну. Показано, что при зернах размером более 1 мкм выполняется закон Холла—Петча. При размерах зерен менее 1 мкм зависимость нарушается, поскольку возрастает роль сил изображения и нужно дополнительное напряжение для срабатывания дислокационных источников, что приводит к скачку зависимости предела текучести от размера зерна.*

**Ключевые слова:** дислокации, граница зерна, дислокационный источник, закон Холла—Петча.

Предел текучести это не просто техническая характеристика материала — напряжение при 0,2% пластической деформации, примерно при этом значении напряжения деформация охватывает все сечение образца [1]. Соответствующее этой деформации напряжение зависит от множества параметров, в частности от температуры, скорости нагружения и состава материала. Одним из основных методов получения более высоких значений напряжения является диспергирование структуры. Зависимость предела текучести от размера зерна известна достаточно давно:

$$\sigma_{0,2} = \sigma_0 + K_y/d^{1/2}, \quad (1)$$

где  $d$  — размер зерна.

Согласно работам Холла и Петча [1—3], параметр  $\sigma_0$  соответствует сопротивлению материала движению дислокаций в зерне, а  $K_y$  — коэффициент, характеризующий способность границы передавать пластическое течение от зерна к зерну [4].

Уравнение Холла—Петча было подтверждено для широкого класса материалов [5—7]. Однако с 90-х годов стало появляться все больше информации о нарушении уравнения Холла—Петча для области размеров зерен менее нескольких сотен нанометров [8—10]. Существует несколько объяснений этого явления:

число дислокаций в pile-up не может быть большим при таких малых зернах, что ограничивает суммарную деформацию [11];

при таких малых размерах зерен возрастают силы изображения, которые притягивают дислокации к границе зерна, что снижает плотность дислокаций в нанокристаллических материалах [12];

плотность границ зерен возрастает при уменьшении размера зерна, поэтому нанокристаллический материал надо рассматривать как композиционный, состоящий из обычного материала и материала границ зерен [13], а также учитывать анизотропию зерен [14].

© К. М. Борисовская, Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов, 2017

Дислокации играют важную роль в формировании макрохарактеристик материала, в связи с этим цель настоящей работы — исследовать структурную чувствительность предела текучести в области микро- и нанозерен с использованием метода дислокационной динамики.

### Методика расчета и результаты

Дислокационная динамика достаточно известный и широко используемый метод компьютерного моделирования в материаловедении, поскольку этот метод позволяет проследить за структурными перестройками *in situ* в процессе нагружения и связать эволюцию структуры с механическими свойствами [15—21]. В работах [20, 21] проведено моделирование пластического течения как коллективного движения дислокаций, а предел текучести считался равным 0,2% пластической деформации. К сожалению, методы работы авторов не позволяют моделировать большое зерно, максимальный размер зерен 40 нм. В данной работе использовались разработанные нами ранее алгоритмы [22—24].

При моделировании рассматривали передачу скольжения через границу двух зерен. Если действующее на дислокационные источники напряжение оказывалось больше напряжения старта, происходила эмиссия одной дислокации, которая двигалась по своей плоскости скольжения. На каждую дислокацию действовали: внешнее напряжение, напряжение трения, напряжение от других дислокаций и напряжение изображения от границ зерен (как собственное, так и от других дислокаций ансамбля). Также учитывались силы изображения, согласно работе [25]. Скорость дислокации рассчитывали как линейную функцию действующего на нее напряжения [25].

Если ансамбль дислокаций был близок к равновесию, внешнее напряжение увеличивалось на 1 МПа. Условие равновесия считалось достигнутым, когда разница напряжений, действующих на второй источник, за 100 шагов была меньше 100 Па. Шаг по времени рассчитывался из условия, чтобы дислокация с максимальным действующим на нее напряжением прошла за него расстояние  $1b$  ( $b$  — вектор Бюргерса).

В качестве модельного материала использовали железо (модуль сдвига  $G$  брался равным 84 ГПа, коэффициент Пуассона — 0,29,  $b = 0,314$  нм), напряжение трения — 300 МПа, размер границы зерна —  $10b$ , размер источника —  $40b$ . Напряжение эмиссии для первого источника было равно напряжению трения решетки 300 МПа, напряжения изображения для него не учитывались.

Предел текучести определяли как напряжение, при котором срабатывал второй источник (рис. 1).

Результаты моделирования представлены на рис. 2, 3. Как видно на рисунках, предел текучести достаточно хорошо подчиняется закону Холла—Петча при размерах зерен более 0,7 мкм.

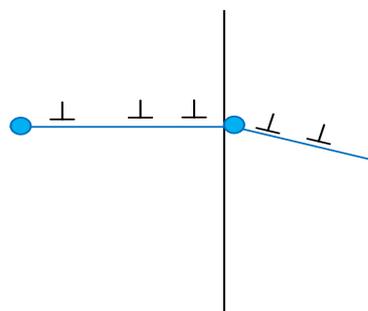


Рис. 1. Инициация пластического течения от зерна к зерну.

В этом случае значительная часть ансамбля дислокаций может отойти от своего источника на большое расстояние и поэтому она не оказывает на свой источник существенного влияния. Число дислокаций линейно растет с  $1/d^{0.5}$ , в pile-up в этом случае более 20 дислокаций. Из-за сил изображения дислокации начинают свое движение при внешнем напряжении несколько ниже напряжения трения, поэтому  $\sigma_0$  оказывается ниже напряжения Пайерлса.

При меньших зернах (рис. 4) возрастает роль сил изображения, поэтому для инициации второго источника нужно дополнительное внешнее напряжение. Как видно на рис. 2, эта стадия хорошо описывается законом

$$\sigma_{0,2} = \sigma_0 + K_y/d . \quad (2)$$

Данная стадия подтверждается экспериментально для многих металлов [26—28]. Интересно отметить, что в случае неучета в модели сил изображения эта стадия исчезает. Таким образом, анизотропия материала, поскольку силы изображения появляются только в случае разных модулей зерен, способствует переходу к зависимости (2).

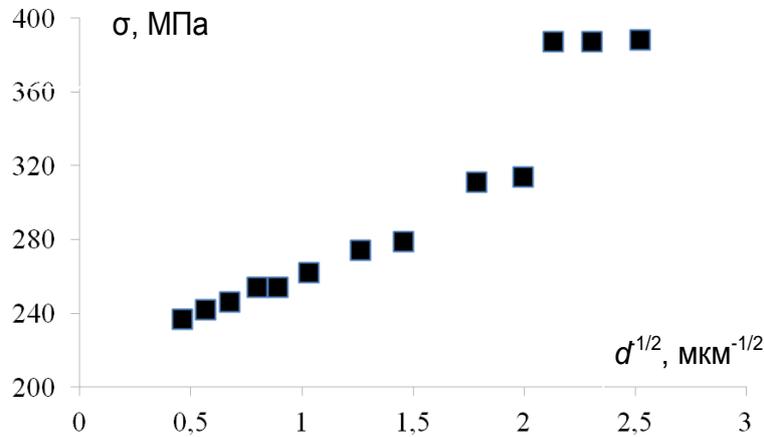


Рис. 2. Зависимость предела текучести от размера зерна.

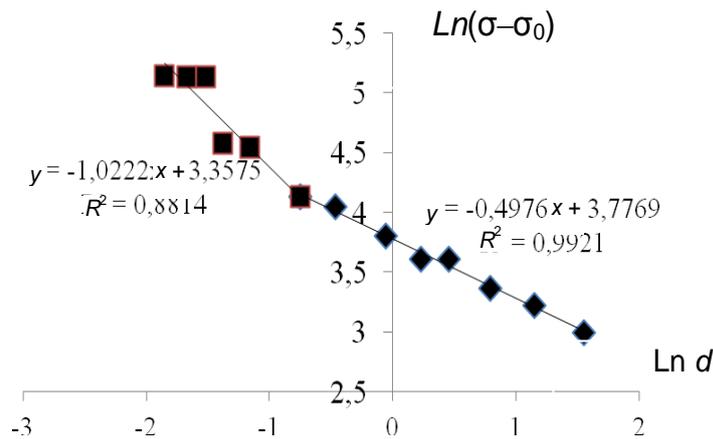


Рис. 3. Логарифм предела текучести от логарифма размера зерна.

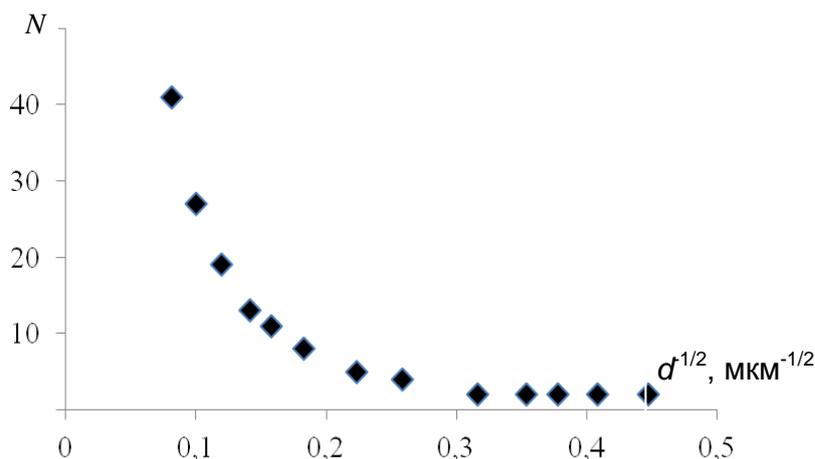


Рис. 4. Число дислокаций в скоплении в зависимости от размера зерна.

В работах С. А. Фирстова [29—33] этот эффект объяснен учетом зависимости  $K_y$  от размера зерна при малых зернах. Согласно модели [29], коэффициент  $K_y = \sigma_c r^{1/2}$ , где  $\sigma_c = \alpha Gb/l$  — напряжение срабатывания дислокационного источника у вершины pile-up в области радиусом  $r$  ( $l$  — размер дислокационного источника). Согласно работам [30—33], при размерах зерен бóльших, чем  $d_{cr}$ , величины  $\sigma_c$ ,  $l$ ,  $r$  усредняются и коэффициент  $K_y$  является постоянной величиной.

При размерах зерен менее критического размера возрастает роль сил изображения, поэтому  $\sigma_c = \alpha Gb/l + \beta Gb/d$  и  $r \sim d$ . Можно показать, что  $K_y = k_1 d^{-1/2}$ , что приводит к  $\sigma_{0,2} = \sigma_0 + K_y/d$ .

### Выводы

Методом компьютерного моделирования показано, что если считать пределом текучести напряжение, при котором происходит инициация пластического течения в соседнем зерне, то предел текучести хорошо подчиняется закону Холла—Петча при размерах зерен 5—1 мкм.

Впервые показано, что учет сил изображения, возникающих из-за упругой анизотропии, может привести к отклонению от зависимости Холла—Петча в области малых размеров зерен (0,7—0,2 мкм). В этом случае зависимость предела текучести от размера зерна становится пропорциональной —  $1/d$ .

1. Дударев Е. Ф. Микропластическая деформация и формирование предела текучести моно- и поликристаллов // Изв. вузов. Физика. — 1976. — №. 8. — С. 1182—1193.
2. Hall E. O. The deformation and ageing of mild steel // Proc. Phys. Soc. — 1951. — **64**, No. 9. — P. 747—753.
3. Petch N. J. The cleavage strength of polycrystalline // J. Iron and Steel Indst. — 1953. — **173**, pt 1. — P. 25—28.
4. Трефилов В. И. Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов / В. И. Трефилов, В. Ф. Моисеев, Э. П. Печковский. — Киев : Наук. думка, 1987.
5. Conrad H. Effect of grain size on the lower yield and flow stress of iron and steel // Acta Metallurgica. — 1963. — **11**, No. 1. — P. 75—77.

6. *Armstrong R. W.* The influence of polycrystal grain size on several mechanical properties of materials // *Metallurgical and Materials Transactions*. — 1970. — **1**, No. 5. — P. 1169—1176.
7. *Harding J.* The effect of grain size and strain rate on the Lower yield stress of pure iron at 288 K // *Acta Metallurgica*. — 1969. — **17**, No. 8. — P. 949—958.
8. *Gertsman V. Y.* The study of grain size dependence of yield stress of copper for a wide grain size range / [V. Y. Gertsman, M. Hoffmann, H. Gleiter, R. Birringer] // *Acta Metallurgica et Materialia*. — 1994. — **42**, No. 10. — P. 3539—3544.
9. *Wilcox B. A.* The role of grain size and shape in strengthening of dispersion hardened nickel alloys / B. A. Wilcox, A. H. Clauer // *Acta Metallurgica*. — 1972. — **20**, No. 5. — P. 743—757.
10. *Thompson A. A. W.* Yielding in nickel as a function of grain or cell size // *Ibid.* — 1975. — **23**, No. 11. — P. 1337—1342.
11. *Masumura R. A.* Yield stress of fine grained materials / R. A. Masumura, P. M. Hazzledine, C. S. Pande // *Ibid.* — 1998. — **46**, No. 13. — P. 4527—4534.
12. *Choi H. J.* Positive deviation from a Hall-Petch relation in nanocrystalline aluminum / [H. J. Choi, S. W. Lee, J. S. Park and D. H. Bae] // *Materials Transactions*. — 2009. — **50**, No. 3. — P. 640—643.
13. *Meyers M. A.* Mechanical properties of nanocrystalline materials / M. A. Meyers, A. Mishra, D. J. Benson // *Progress in Mater. Sci.* — 2006. — **51**. — P. 427—556.
14. *Fu H.-H.* Analytical and computational description of effect of grain size on yield stress of metals / H.-H. Fu, D. J. Benson, M. A. Meyers // *Acta Materialia*. — 2001. — **49**, No. 13. — P. 2567—2582.
15. *Gizynski M.* The low temperature fracture behaviour of hydrostatically extruded ultra-fine grained Armco iron / M. Gizynski, Z. Pakiela, W. Chrominski // *Mater. Sci. and Engineering: A*. — 2015. — **632**. — P. 35—42.
16. *Tarleton E.* Dislocation dynamic modelling of the brittle–ductile transition in tungsten / E. Tarleton, S. G. Roberts // *Philosophical Magazine*. — 2009. — **89**, No. 31. — P. 2759—2769.
17. *Fitzgerald E. A.* Dislocation dynamics in relaxed graded composition semiconductors / [E. A. Fitzgerald, A. Y. Kim, M. T. Currie et al.] // *Mater. Sci. and Engineering: B*. — 1999. — **67**, No. 1. — P. 53—61.
18. *Zbib H. M.* Introduction to discrete dislocation dynamics // *Generalized Continua and Dislocation Theory*. — Springer Vienna, 2012. — P. 289—317.
19. *Messerschmidt U.* Dislocation dynamics during plastic deformation. — Springer Science & Business Media. — 2010. — **129**.
20. *Zhenhuan Li.* Strengthening mechanism in micro-polycrystals with penetrable grain boundaries by discrete dislocation dynamics simulation and Hall–Petch effect / [Zhenhuan Li, Chuantao Hou, Minsheng Huang, Chaojun Ouyang] // *Comp. Mater. Sci.* — 2009. — **46**. — P. 1124—1134.
21. *Quek S. S.* The inverse Hall–Petch relation in nanocrystalline metals: A discrete dislocation dynamics analysis / S. S. Quek, Z. H. Chooi, Z. Wu // *J. of the Mech. and Phys. of Solids*. — 2016. — **88**. — P. 252—266.
22. *Borysovska K.* Influence of the dislocation structure on the crack tip in highly deformed iron / [K. Borysovska, V. Slyunyayev, Y. Podrezov et al.] // *Mater. Sci. Poland*. — 2005. — **23** (2). — P. 521.
23. *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.
24. *Борисовская Е. М.* Анализ условий аннигиляции дислокационных скоплений / Е. М. Борисовская, Ю. Н. Подрезов // *Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении*. — К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2005. — Вып. 7. — С. 99—108.

25. Hirth J. P., Lothe J. Theory of Dislocations. — М. : Атомиздат, 1982.
26. Копылов В. И. Предел измельчения зерен при равноканальной угловой деформации / В. И. Копылов, В. Н. Чувильдеев // Металлы. — 2004. — №. 1. — С. 22—36.
27. Deshpande D. A discrete dislocation plasticity analysis of grain-size strengthening / [D. Deshpande, V. Needleman, A. Vander, E. Giessen] // Mater. Sci. Eng. : A. — 2005. — **400**. — P. 186—190.
28. Fougere G. E. Grain-size dependent hardening and softening of nanocrystalline Cu and Pd / [G. E. Fougere, J. R. Weertman, R. W. Siegel, S. Kim] // Scripta Metall. Mater. — 1992. — **26**. — P. 1879—1883.
29. Трефилов В. И. Физические основы прочности тугоплавких металлов / В. И. Трефилов, Ю. В. Мильман, С. А. Фирстов. — Киев : Наук. думка, 1975.
30. Firstov S. A. Structure and microhardness of polycrystalline chromium produced by magnetron sputtering / [S. A. Firstov, T. G. Rogul, V. T. Marushko, V. A. Sa-gaidak] // Problems of Mater. Sci. — 2003. — No. 1. — P. 201—204.
31. Firstov S. A. Grain boundary engineering of nanostructured chromium films / S. A. Firstov, T. G. Rogul, S. N. Dub // Innovative Superhard Mater. and Sustainable Coatings for Advanced Manufacturing. — Springer, 2005. — P. 225—232.
32. Фирстов С. А. Упрочнение поликристаллов при переходе от микро- к наноструктурированному состоянию / С. А. Фирстов, Т. Г. Рогуль, О. А. Шут // Фіз.-хім. механіка матеріалів. — 2009. — № 6. — С. 5—12.
33. Firstov S. A. Transition from microstructures to nanostructures and ultimate hardening / S. A. Firstov, T. G. Rogul, O. A. Shut // Functional Mater. — 2009. — **16**, No. 4. — P. 364—373.
34. Фирстов С. А. В. И. Трефилов и физика прочности сегодня // Порошковая металлургия. — 2010. — № 7/8. — С. 19—23.

### **Комп'ютерне моделювання естафетного механізму передачі пластичної течії від зерна до зерна**

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

*Проведено комп'ютерне моделювання естафетного механізму передачі пластичної деформації від зерна до зерна. Показано, що при зернах розміром більше 1 мкм виконується закон Холла—Петча. При розмірах зерен менше 1 мкм залежність порушується, оскільки сили зображення збільшуються і потрібно додаткове напруження для старту дислокаційних джерел, що призводить до зворотної залежності границі плинності від розміру зерна.*

**Ключові слова:** дислокації, границя зерна, дислокаційне джерело, закон Холла—Петча.

### **Computer modeling of the relay mechanism of transfer of plastic flow from grain to grain**

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

*In this paper, a computer simulation of the relay mechanism for the transfer of plastic deformation from grain to grain is performed. It is shown that for grains over 1  $\mu\text{m}$  the Hall—Petch law is satisfied. At grain sizes less than 1  $\mu\text{m}$ , the dependence is disrupted, since the image force increase and additional external stress is required to trigger dislocation sources, which leads to an inverse dependence of the yield strength on the grain size.*

**Keywords:** dislocations, grain boundary, dislocation source, Hall—Petch law.