

## **Зависимость предела текучести монокристалла тантала от температуры при растяжении и сжатии**

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

Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН  
Украины, Киев, e-mail: kmborysovska@ukr.net

*Показано, что разные значения предела текучести тантала в зависимости от фактора Шмидта и типа нагружения могут быть связаны с процессом диссоциации дислокаций и отсутствием зеркальной симметрии кристаллической решетки. Использование модифицированной теории о термически активируемых скачках дислокации с учетом их диссоциации позволяет описать этот эффект.*

**Ключевые слова:** диссоциация дислокаций, предел текучести, монокристалл, фактор Шмидта.

Из всех механических характеристик материалов предел текучести является одной из самых важных, поскольку показывает, насколько просто и при каких параметрах можно обработать данный материал. Поэтому построение теории, которая позволит понять, как данная характеристика зависит от внутренних и внешних параметров, — одна из важнейших задач материаловедения. Материалы, для которых данная задача представляет особый интерес, это ОЦК металлы с диссоциацией дислокаций: вольфрам, тантал, ниобий и молибден, поскольку у них наблюдаются разные значения предела текучести, полученные при растяжении и сжатии для монокристаллов [1—3] (рис. 1).

Согласно Трефилову и Мильману [4], этот эффект вызван существующей асимметрией потенциала в ОЦК металлах, поскольку в них нет зеркальной симметрии кристаллической решетки, и, таким образом, движение дислокации вправо и влево при действии напряжения неэквивалентно. В работах [5, 6] считают, что этот эффект можно объяснить отсутствием симметрии винтовых дислокаций, а в [7] — разными значениями модуля сдвига при различных ориентациях. К сожалению, дискуссия по этому вопросу далека от завершения. В предыдущей нашей работе [8] показано, что предел текучести монокристаллов с диссоциацией дислокаций можно учесть, введя добавочный член. Цель настоящей работы — учесть влияние диссоциации дислокаций на температурную зависимость предела текучести ОЦК металлов.

Как известно, пластическая деформация возникает в металлах из-за движения линейных дефектов кристаллической решетки — дислокаций. Их движение является термодинамическим процессом, то есть определяется вероятностями образования той или иной атомной конфигурации в данный момент времени и поэтому определяется энергией активации и температурой. Дислокационная линия не стоит на месте, даже при отсутствии действия на нее внешнего напряжения, а выпускает петли в одну и другую стороны [4, 9] (рис. 1).

© К. М. Борисовская, Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов, 2018

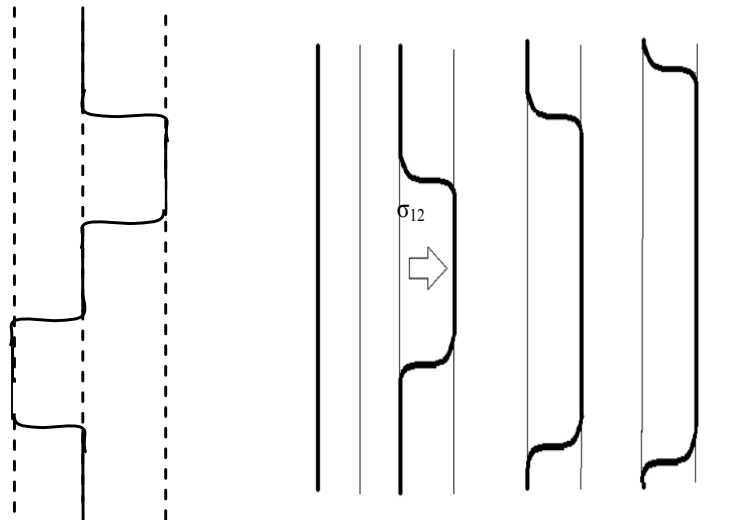


Рис. 1. Движение дислокации при помощи термически активируемых скачков.

Поскольку в ОЦК металлах скачок дислокации вправо и влево неэквивалентен из-за асимметрии решетки (рис. 2, 3) [4—6], зависимость предела текучести от факторов Шмидта наблюдается у всех ОЦК металлов даже без диссоциации дислокаций [10].

В этом случае можно записать по аналогии с [9]

$$\dot{\epsilon} = \rho b v = b \rho_0 e^{-H_0/kT} (\exp(\tau V_1/kT) - \exp(-\tau V_2/kT)), \quad (1)$$

где  $b$  — вектор Бюргерса;  $\rho_0$  — дислокационная плотность;  $\tau$  — внешнее касательное напряжение;  $V_1, V_2$  — активационные объемы для скачков по напряжению и против напряжения соответственно;  $k$  — константа Больцмана;  $T$  — температура. Для ОЦК металлов  $V_1 = 2V_2$ , поскольку для

плоскости легкого скольжения  $\langle 111 \rangle \{110\}$  межатомное расстояние чередуется с вектором трансляции то  $a$ , то  $2a$ .

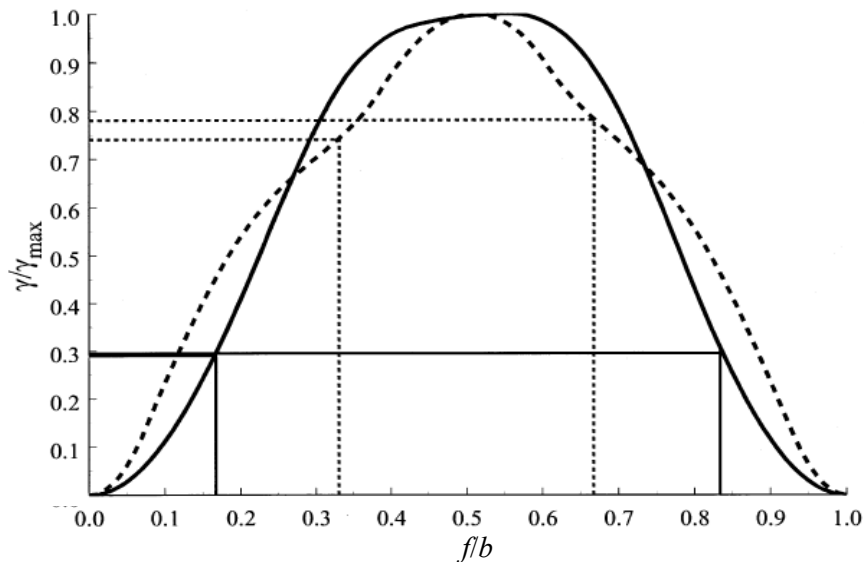


Рис. 2. Асимметрия потенциала в ОЦК металлах [4]: - - - — Мо; — — — Та.

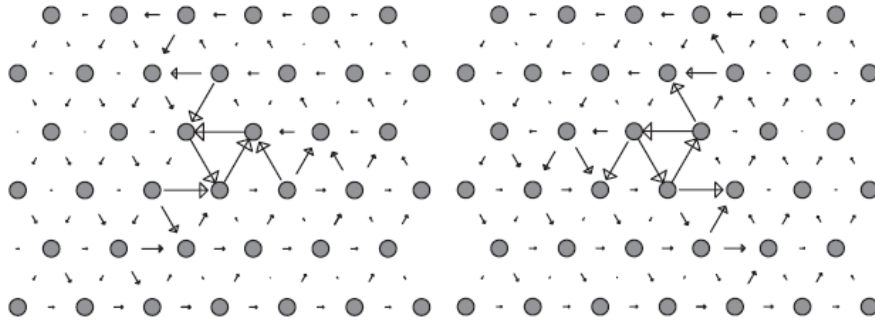


Рис. 3. Ядро винтовой дислокации  $\frac{1}{2}[111]$  в молибдене, найденное при помощи многочастичного потенциала [4].

Введя величины  $\Delta V = (V_1 - V_2)/2 = V_1/2$  и  $V = (V_1 + V_2)/2 = 3V_1/2$ , получаем

$$\dot{\varepsilon} = \rho b v = b \rho_0 e^{-H_0/kT} (\exp(\tau(V - \Delta V)/kT) - \exp(-\tau(V + \Delta V)/kT)), \quad (2)$$

и

$$\dot{\varepsilon} = \rho b v = b \rho_0 e^{-(H_0 + \tau \Delta V)/kT} (\exp(\tau V/kT) - \exp(-\tau V/kT)). \quad (3)$$

Интегрируя данное выражение с учетом, что пластическая деформация является линейной функцией от напряжения, как и время нагружения, как это предложено в работе [9], и оставляя только самый большой член —  $\tau V/kT \exp(-2\tau V/kT)/2$ , в случае  $\Delta V < 0$  получаем

$$\sigma_{0,2} = \sqrt[2]{\frac{2B \varepsilon kT}{V} \exp\left[\frac{H + 2\sigma_{0,2} s \Delta V}{kT}\right]} / s. \quad (4)$$

В случае  $\Delta V > 0$  —

$$\sigma_{0,2} = \sqrt[2]{\frac{4B \varepsilon kT}{V} \exp\left[\frac{H + 4\sigma_{0,2} s \Delta V}{kT}\right]} / s. \quad (5)$$

Из сравнения (4) и (5) следует, что значения предела текучести будут различны при растяжении и сжатии монокристалла ОЦК металла.

В случае диссоциации дислокации ее движение значительно затрудняется [11, 12] и она оказывается в своего рода глубокой долине рельефа Пайерлса, что делает ее практически неподвижной, даже при действии на нее значительных напряжений. В этом случае она, как правило, может начать движение только в случае редиссоциации. Согласно работе [13], при действии внешнего напряжения вероятность диссоциации дислокации  $W$  возрастает:

$$W = a \exp(-H_d + \sum_i \tau_i V_i) / kT, \quad (6)$$

где  $H_d$  — энергия активации диссоциации;  $\tau_i$  — внешнее касательное напряжение, действующее в плоскостях, где происходит диссоциация;  $V_i$  — активационный объем диссоциации;  $a$  — частотный множитель.

Эмпирически в работе [1] получено уравнение

$$\sigma_{0,2} \sim \exp\left[\frac{-H_d + \sigma_{0,2}s_d V_{id}}{3kT}\right] / s, \quad (7)$$

где  $s_d$  — фактор Шмидта плоскости, в которой происходит диссоциация.

По нашему предположению, при низких температурах диссоциация дислокаций не столько влияет на процесс деформации, сколько эти дислокации являются дальнедействующими стопорами для других дислокаций. В этом случае их влияние можно учесть, прибавив как дополнительный член  $\tau_d$  к энергии активации [14]:

$$\dot{\varepsilon} = \rho b v = b \rho_0 e^{-(H_0 - H_d + \tau_d V_{id}) / kT} sh(\tau_d V / kT). \quad (8)$$

В случае диссоциации в ОЦК металлах предел текучести зависит от нескольких факторов Шмидта: плоскостей диссоциации, плоскостей скольжения дислокаций, поскольку в случае, когда напряжение из-за процессов диссоциации возрастает, скольжение иногда начинается по другой плоскости. Нужно отметить, что факторы Шмидта не являются независимыми друг от друга, при повороте кристалла на какой-то угол их значения изменятся согласно закону Шмидта.

Можно предположить для достаточно широкого интервала температур и поворотов, что справедливо выражение  $\tau_d = \sigma_d s \sim \Sigma(\sigma_d s_i + \sigma_d s_j f(\nu, \beta)) + \sigma_d s f(\nu, \beta)$ , где первый член под знаком суммы равен касательному напряжению по другим плоскостям с фактором Шмидта  $s_i$ , а средний и последний — пропорциональны числу продиссоциировавших дислокаций;  $f(\nu, \beta)$  — функция от углов между диссоциировавшимися дислокациями. Поскольку и  $s_i < 1$  и  $f(\nu, \beta) < 1$ , можно предположить, что напряжение  $\sigma_d$  не зависит от  $s$  [8].

Данное уравнение отличается от предложенного В. И. Трефиловым и Ю. В. Мильманом в работе [9] только членом  $\exp(-(H_d + \sigma_d s V_{id}) / kT)$ , то есть переопределенной энергией активации. Таким образом, его решение для высоких температур и малых напряжений будет

$$\sigma_{0,2} = \sqrt[3]{\frac{3B \varepsilon kT}{V}} \exp\left[\frac{H + \sigma_d s V_{id}}{3kT}\right] / s. \quad (9)$$

Или, пренебрегая кубическим корнем из температуры и активационного объема, поскольку это сильно усложняет обработку данных и не оказывает большого влияния из-за узкого диапазона применимости, можно записать

$$\sigma_{0,2} = A \exp\left[\frac{H + \sigma_d s V_{id}}{3kT}\right] / s. \quad (10)$$

В качестве модельного материала для проверки уравнения (10) нами был выбран тантал, поскольку по нему есть хорошие экспериментальные данные [14]. В работе [15] наблюдали двойникование в тантале, но, согласно [2], это не дает большого вклада в предел текучести при

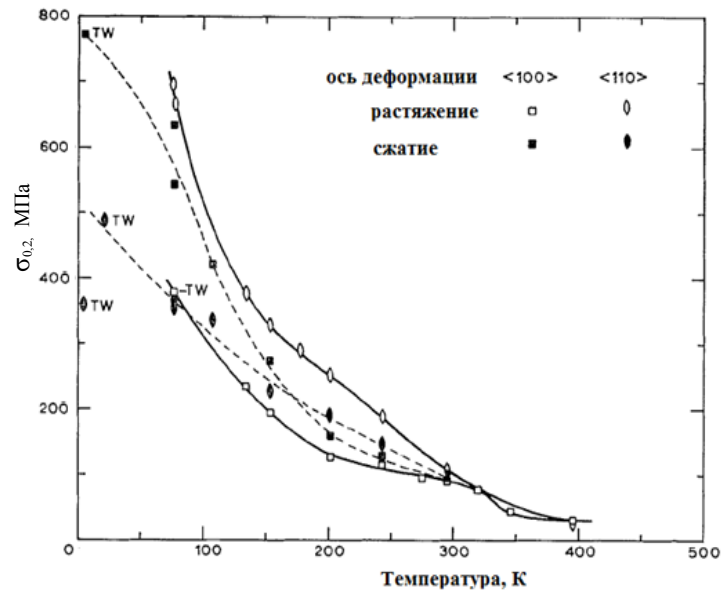


Рис. 4. Экспериментальная зависимость предела текучести монокристалла тантала при разных ориентировках и типах нагружения.

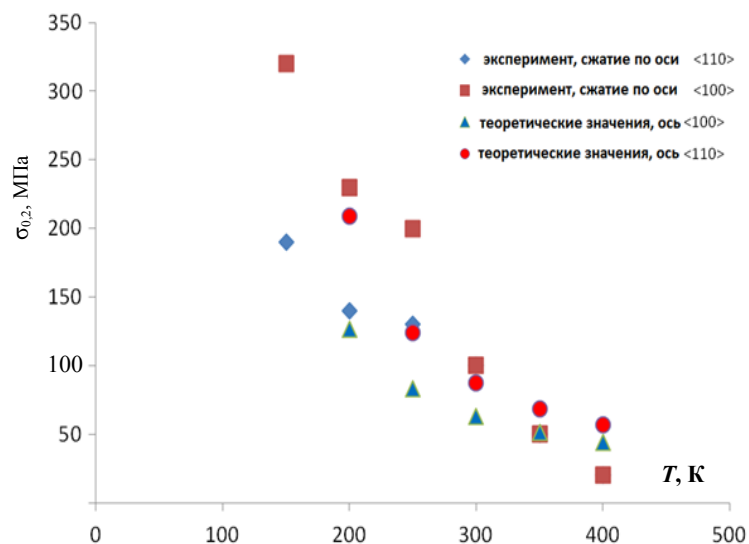


Рис. 5. Зависимость предела текучести монокристалла тантала при разных ориентировках и типах нагружения: эксперимент и экстраполяция уравнения (10). Значения параметров:  $A = 1,55$  МПа,  $H + \sigma_{dS}V_{1d} = 420$ к,  $H + \sigma_{dS}V_2 = 520$ к.

температурах выше  $100$  °С. Экспериментальная зависимость предела текучести монокристалла тантала при разных ориентировках и типах нагружения представлена на рис. 4. Как видно на рис. 5, предложенное нами уравнение (10) достаточно хорошо описывает экспериментальные данные.

Таким образом, учет отсутствия зеркальной симметрии потенциала решетки в материалах с диссоциацией дислокаций позволяет описать зависимость предела текучести монокристаллов при помощи теории о термически активируемых скачках дислокаций от факторов Шмидта плоскости скольжения и типа нагружения.

1. *Takeughi S.* Orientation dependence of slip in tantalum single crystals / S. Takeughi, Eiichi Kuramoto and Taira Suzuki // *Acta Metallurgica*. — 1972. — **20**, No. 7. — P. 909—915.
2. *Sherwood P. J.* Plastic anisotropy of tantalum, niobium, and molybdenum / [P. J. Sherwood, F. Gviv, N. C. Kim and P. L. Pratt] // *Canadian J. Phys.* — 1967. — **45**, No. 2. — P. 1075—1089.
3. *Ju-Young Kim.* Tensile and compressive behavior of tungsten, molybdenum, tantalum and niobium at the nanoscale / Kim Ju-Young, Dongchan Jang and Julia R. Greer // *Acta Materialia*. — 2010. — **58**, No. 7. — P. 2355—2363.
4. *Трефилов В. И.* Физические основы прочности тугоплавких металлов / В. И. Трефилов, Ю. В. Мильман, С. А. Фирстов. — Киев : Наук. думка, 1975. — 315 с.
5. *Vitek V.* Core structure of screw dislocations in body-centred cubic metals: relation to symmetry and interatomic bonding // *Philosophical Magazine*. — 2004. — **84**, No. 3—5. — P. 415—428.
6. *Duesbery M.* Plastic anisotropy in bcc transition metals / M. Duesbery and V. Vitek // *Acta Materialia*. — 1998. — **46**, No. 5. — P. 1481—1492.
7. *Mitchell T. E.* Three-stage hardening in tantalum single crystals / T. E. Mitchell and W. A. Spitzig // *Acta Metallurgica*. — 1965. — **13**, No. 11. — P. 1169—1179.
8. *Борисовская К. М.* Зависимость предела текучести монокристалла тантала от ориентации / К. М. Борисовская, Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов // *Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении*. — К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2018. — Вып. 20. — С. 33—38.
9. *Мильман Ю. В.* О физической природе предела текучести / Ю. В. Мильман, В. И. Трефилов // *Механизм разрушения металлов*. — Киев : Наук. думка, 1966.
10. *Hahn G. T.* A model for yielding with special reference to the yield-point phenomena of iron and related bcc metals // *Acta Metallurgica*. — 1962. — **10**, No. 8. — P. 727—738.
11. *Гринберг Б. А.* Некоторые особенности образования и разрушения дислокационных барьеров в интерметаллидах. V. Однодолинный и многодолинный потенциальный рельеф дислокации / Б. А. Гринберг, М. А. Иванов // *Физика металлов и металловедение*. — 2008. — **105**, № 6. — P. 587—597.
12. *Гринберг Б. А.* Интерметаллиды Ni<sub>3</sub>Al и TiAl: микроструктура, деформационное поведение / Б. А. Гринберг, М. А. Иванов. — Екатеринбург : УрО РАН. — 2002. — № 2. — С. 359.
13. *Takeuchi Sv.* Temperature and orientation dependence of the yield stress in Ni {in3} Ga single crystals / Sv. Takeuchi and E. Kuramoto // *Acta Metallurgica*. — 1973. — **21**, No. 4. — P. 415—425.

14. Пуарье Ж. П. Высокотемпературная пластичность кристаллических тел. — М. : Металлургия, 1982. — Т. 4. — С. 1—137.
15. Byron J. F. Plastic deformation of tantalum single crystals: II. The orientation dependence of yield // J. Less Common Metals. — 1968. — **14**, No. 2. — P. 201—210.

### **Залежність границі плинності монокристала танталу від температури під час випробувань на розтяг та стиск**

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

*Показано, що різні значення границі плинності танталу залежно від фактора Шмідта і типу навантаження можуть бути пов'язані з процесом дисоціації дислокацій і відсутністю дзеркальної симетрії кристалічної ґратки. Використання модифікованої теорії про термічно активовані скачки дислокації з урахуванням їх дисоціації дозволяє описати цей ефект.*

**Ключові слова:** дисоціація дислокацій, границя плинності, монокристал, фактор Шмідта.

### **Dependence of the yield strength of a monocrystal of tantalum on the temperature under tension and compression**

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

*It was shown that different values of the yield strength of tantalum, depending on the Schmidt factor and the type of loading, can be connected with the process of dissociation of dislocations and the absence of the mirror symmetry of the crystal lattice. The use of a modified theory of thermally activated dislocation jumps taking in to account their dissociation makes it possible to describe this effect.*

**Keywords:** dislocation dissociation, yield strength, monocrystal, Schmidt factor.