

УДК 539.37

МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ И НАКОПЛЕНИЯ РАЗОРИЕНТАЦИЙ В ДЕФОРМИРУЕМЫХ МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

© 2024 г. Д. Н. Черепанов^{a, b, *}, Ю. В. Соловьева^{a, **}, В. А. Старенченко^a

^aТомский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, 634003 Россия

^bТомский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, 634050 Россия

*e-mail: d_n_ch@mail.ru

**e-mail: j_sol@mail.ru

Поступила в редакцию 29.04.2023 г.

После доработки 20.06.2023 г.

Принята к публикации 20.06.2023 г.

Теоретически исследовано формирование разориентированных субструктур в пластически деформируемых металлических материалах. Получены выражения для интенсивности накопления малоугловых и высокоугловых границ разориентации. В рамках математической модели сдвиговой пластической деформации и упрочнения выполнены численные расчеты зависимостей средних характеристик дефектной среды от степени деформации в условиях одноосного сжатия с постоянной скоростью деформации при комнатной температуре. Показано, что интенсивность генерации малоугловых стенок наклона существенно зависит от сценария изменения плотности порогов на винтовых сегментах дислокационных петель, выпускаемых дислокационными источниками. Основным механизмом формирования малоугловых стенок является перестроение скоплений краевых сегментов дислокационных петель в стенки наклона под воздействием потоков межузельных атомов, генерируемых движущимися винтовыми сегментами. Предполагается, что малоугловые стенки сливаются в одну до тех пор, пока суммарный угол разориентации слившихся стенок не достигнет критической величины около 10° , после чего расстояние между дислокациями в стенке уменьшается до соответствующей критической величины и дальнейшее проникновение отдельных дислокаций в стенку становится невозможным. Выражение для интенсивности формирования высокоугловых границ получено как следствие продолжения работы дислокационных источников и формирования скоплений малоугловых стенок, суммарная энергия которых выше, чем энергия равновесной высокоугловой границы при той же разориентации.

Ключевые слова: металлы, сдвиговая пластическая деформация, напряжение, математическое моделирование, дефекты, дислокации, межузельные атомы, стенки наклона, угол разориентации, высокоугловые границы, энергия границы, кинетика дефектов, плотность порогов.

DOI: 10.31857/S1028096024010133, **EDN:** DGOHFK

ВВЕДЕНИЕ

Способность металлов и сплавов при определенных условиях мегапластически деформироваться без разрушения связана с образованием деформационных дефектных субструктур по мере накопительной эволюции одних субструктур и формирования на этом фоне энергетически более выгодных субструктур. Большой практический и научный интерес представляет решение двух основных проблем: определение условий и режимов деформирования, при которых реали-

зуются субструктуры, достаточно пластичные для применения технологий создания металлических элементов разнообразных конструкций, в частности сверхпластичные; определение субструктур, которые при изменении технологий создания элементов конструкций в целях эксплуатации приобретают особые свойства кратковременной или долговременной прочности на период, обусловленный экономическими причинами, включающими как стоимость создания, так и стоимость эксплуатации. Одним из направлений исследований является изучение

формирования в металлических материалах субструктур с зернами диаметром порядка от сотен до десятков нанометров. Существующие технологии получения таких нанокристаллических материалов обладают рядом недостатков, связанных как с большими затратами на производство, так и с недостаточной длительностью сохранения этих субструктур для применения в некоторых крайне важных эксплуатируемых конструкциях.

Механизмы формирования необходимых субструктур неоднократно обсуждались на конференциях [1], в монографиях [2–7], в обзорных публикациях [8, 9] и во многих работах [10–15]. Однако, несмотря на эти многочисленные исследования, удалось лишь определить средние параметры структур, такие как угол разориентации и размер области, окруженной границами разориентации. Что касается механизмов появления этих границ, увеличения их разориентации и объемной плотности, то высказаны только некоторые гипотезы и предложены некоторые феноменологические модели.

В связи с этим целью настоящей работы было теоретическое исследование влияния точечных дефектов на один из возможных механизмов формирования малоугловых стенок наклона, а также определение условий, при которых начинается формирование высокоугловых границ разориентации, в рамках математической модели сдвиговой мегапластической деформации и упрочнения, полученной на основе концепции упрочнения и отдыха [16, 17].

МОДЕЛЬ ЗОНЫ СДВИГА

Математическое моделирование сдвиговой пластической деформации, которая возникает вследствие движения сдвигообразующих дислокаций, испускаемых дислокационными источниками Франка–Рида, подразумевает получение соотношений между числовыми характеристиками субструктур или зависимостей этих характеристик от сдвиговой деформации или времени. Наиболее часто используемыми характеристиками являются плотности дислокаций, образующих элементы субструктуры, размеры элементов (например, размер ячеек d_c , фрагментов d_{fr} , зерен d_g) и параметры их относительного расположения (например, угол разориентации).

Числовые характеристики деформационных дефектов

Первоначальная трехмерная дислокационная сетка, рассматриваемая как множество дислока-

ционных соединений, может быть представлена плотностью дислокаций ρ_j , а характерным размером такой сетки является средняя длина дислокационного соединения $\rho_j^{-1/2}$. Дислокационные скопления характеризуются плотностью сдвигообразующих дислокаций ρ_m и средним числом дислокаций в скоплении n_D . Следует заметить, что скопления сегментов краевой ориентации располагаются вдоль направления их движения, а скопления сегментов винтовой ориентации при определенных условиях имеют возможность в ходе поперечного скольжения перестроиться в равновесные конфигурации, расположенные под углом 45° к направлению движения. Клубковая структура, формируемая внутри каждой зоны сдвига после испускания источником первых дислокационных петель, характеризуется плотностью дислокационных “обрывков”, таких как дислокации в дипольных динамических конфигурациях вакансионного ρ_d^v и межузельного типов ρ_d^i , а также плотностью дислокаций ρ_j в огибаемых дислокационных соединениях, образующихся при взаимодействии расширяющейся дислокационной петли с реагирующими дислокациями некомпланарных систем скольжения, совместно с длиной элементарного диполя ℓ_d и средней длиной огибаемого соединения. Предполагается, что сегменты дислокационной петли останавливаются в случае почти одновременной встречи с четырьмя реагирующими дислокациями “леса” с образованием соединений длиной не меньше, чем диаметр петли на этот момент времени. Все соединения меньшей длины огибаются соседними сегментами, и петля продолжает расширяться, оставляя “обрывок”, который может существовать некоторое время – до принятия некоторой равновесной конфигурации на дислокации “леса”. Разориентированная ячеистая структура, формируемая внутри каждой зоны сдвига после испускания источником более чем десятка дислокационных петель, характеризуется плотностью дислокаций в дипольных динамических конфигурациях вакансионного ρ_d^v и межузельного ρ_d^i типов, длиной элементарного диполя ℓ_d и числом элементарных диполей n_d , образующихся при испускании одной петли. Границы ячеек в этом случае состоят из мультиполей, и поэтому разориентация соседних ячеек отсутствует.

Сетчатая структура формируется в областях, где происходит взаимодействие реагирующих дислокаций “леса” различных систем скольжения. Например, сетки могут образоваться при пересечении скоплений соседних зон сдвига.

В этом случае сетчатая структура характеризуется плотностью дислокаций в дислокационных соединениях ρ_j и средней длиной стороны ячейки сетки. Скопления одной зоны сдвига могут пересекать другие зоны сдвига и взаимодействовать с дислокациями в мультипольных динамических конфигурациях, образуя ячеисто-сетчатую структуру.

Фрагментированная структура образуется в результате переползания скоплений краевых сегментов под действием межузельных атомов и перестройки выведенных из равновесия скоплений в малоугловые дислокационные стенки наклона. Характеристиками фрагментированной структуры являются плотность малоугловых стенок N_w – площадь в единице объема, расстояние между дислокациями в стенке d_w , плотность дислокаций в этих стенках $\rho_w = N_w d_w^{-1}$, угол разориентации $\theta_w \approx b d_w^{-1}$.

Ячеисто-сетчатая дислокационная субструктура с разориентациями образуется при взаимодействии малоугловых дислокационных стенок со скоплениями винтовых сегментов. Зоной сдвига называется объем кристалла, занимаемый продуктами сдвиговой пластической деформации, такими как точечные, линейные и планарные дефекты, которые образовались в результате действия одного дислокационного источника. Интенсивности генерации всех продуктов сдвиговой пластической деформации непосредственно связаны со средними геометрическими характеристиками зон сдвига и характером движения сдвигообразующих дислокаций.

Основная часть сдвиговой деформации определяется расширением дислокационных петель, испускаемых дислокационными источниками Франка–Рида в результате потери сдвиговой устойчивости некоторыми дислокационными сегментами, движение концов которых ограничено, поскольку они являются узлами дислокационной сетки. Если на различном расстоянии от источника имеются четыре притягивающиеся дислокации некомпланарных систем скольжения, которые образуют с движущимися сегментами петли дислокационных соединений, оказывающихся непреодолимыми прямолинейными барьерами на пути движения сегментов петли, то эти соединения формируют границу зоны сдвига. Внутри ее периметра содержатся все деформационные дефекты кристаллического строения, образовавшиеся при расширении дислокационной петли.

Числовые характеристики зоны сдвига

Для простоты будем считать, что зона сдвига – это граница параллелограмма, одна сторона которого параллельна вектору Бюргерса, а другая образует с ним угол 60° (рис. 1). Обозначим через $S_D = S_D^s + S_D^e = D_e D_s$ среднюю площадь, заматаемую дислокационной петлей, составленную из площадей S_D^s и S_D^e , заматаемых винтовыми и краевыми дислокационными сегментами соответственно, где D_e и D_s – сторона и высота параллелограмма соответственно. Таким образом, сегменты дислокационной петли пробегают расстояние, приблизительно равное $0.5D_e$, в направлении вектора Бюргерса и $0.5D_s$ в перпендикулярном направлении. Тогда за время Δt произойдет приращение сдвиговой пластической деформации на величину $\Delta a \approx b S_D n N$. Предположим, что N дислокационных источников в единице объема испускают в среднем порцию из n дислокационных петель, которые образуют скопление на границе зоны сдвига.

Максимальное число дислокаций в скоплении винтовых сегментов n_D^s можно найти из условия, что напряжение, необходимое для слияния частичных дислокаций $n_D^{-1} (0.25\sqrt{2}G\pi^{-1} - 2\gamma_{SFE}b^{-1})$, не превышает приложенного напряжения. Поскольку это условие выполняется на третьей стадии, тогда $n_D^s \approx \tau_{III}^{-1} (0.25\sqrt{2}G\pi^{-1} - 2\gamma_{SFE}b^{-1})$. При выполнении этого условия винтовое скопление перестраивается в низкоэнергетическую конфигурацию, и обратные поля напряжений всех дислокаций снижаются, что способствует дальнейшей работе источника.

Без перестройки скоплений краевых сегментов, снижающей обратные напряжения, при некотором числе n_D^e источник запирается, и испускание петель прекращается. Единственным способом, обеспечивающим необходимое пере-

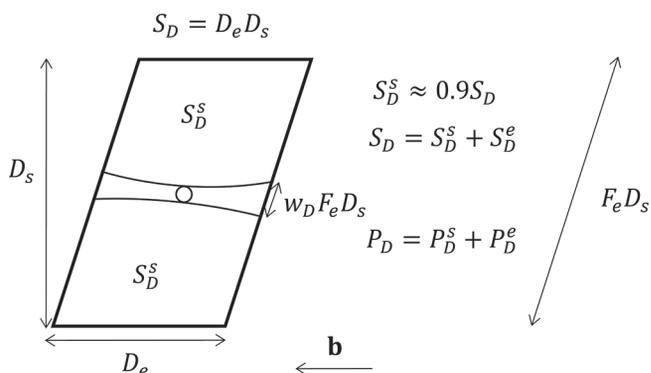


Рис. 1. Геометрия зоны сдвига.

строение, является переползание краевых сегментов, которое происходит достаточно быстро при дрейфе имеющихся межузельных атомов или медленнее при образовании точечных дефектов при высокой концентрации напряжений.

Если β_D – доля дислокаций некомпланарных систем скольжения, образующих вышеупомянутые непреодолимые барьеры, то $S_D \beta_D \beta_r \xi \rho = 4$ – число барьеров, где $\xi \rho$ – плотность дислокаций некомпланарных систем скольжения. Для периметра параллелограмма примем $P_D = F_s D_e + F_e D_s = P_D^e + P_D^s$ где $F_s = 2$, $F_s = \sin 60^\circ F_e$, $F_e^{-1} = 0.25\sqrt{3}$.

Доля w_s винтовых сегментов дислокационных петель, остановленных на границе зоны сдвига, может быть определена из отношения части периметра P_D^s винтовой ориентации ко всему периметру петли, остановленной сильными непреодолимыми препятствиями, т.е. $w_s = P_D^s P_D^{-1}$.

Если принять в качестве среднего размера зоны сдвига величину $D = S_D^{1/2}$, то получаем $D = (D_s D_e)^{1/2}$. Значит, если

$$S_D = D_e D_s = 4(\beta_D \beta_r \xi \rho)^{-1} = 4(\beta_D^e \beta_D^s \beta_r^e \beta_r^s)^{-1/2} (\xi \rho)^{-1},$$

то для средних размеров зоны сдвига получаем:

$$D_e = 2(\beta_D^s \beta_r^s \xi \rho)^{-1/2} \text{ и } D_s = 2(\beta_D^e \beta_r^e \xi \rho)^{-1/2}.$$

Если бы требовалось остановить краевые сегменты по всей длине D_s , то таких дислокационных соединений настолько мало, что это можно считать маловероятным событием. Однако в действительности достаточно остановить краевые сегменты только по длине $w_D D_s$, которая, по-видимому, того же порядка, что и D_e , но меньше. Приведенные оценки очень грубые, поэтому необходимо теоретически оценивать β_D^s и β_D^e исходя из моделей разрушения дислокационных соединений в различных металлах и сплавах. Доля сегментов винтовой ориентации для чистых металлов $w_s = P_D^s P_D^{-1}$. Число n_D^e можно оценить исходя из равенства напряжения, создаваемого плоским скоплением n_D^e дислокаций на расстоянии $0.5D_e$, и эффективного напряжения, т.е.

$$\tau_{\text{eff}} = \alpha_{\text{eff}} G b \rho^{1/2} = G b n_D^e (\pi(1-\nu)D_e)^{-1}.$$

Согласно данным моделирования расширения дислокационных петель, краевые сегменты достигают границ зоны сдвига значительно быстрее, чем винтовые сегменты, а значит, некоторая часть краевых сегментов генерируется при движении винтовых сегментов. Поэтому средняя

длина $w_D F_e D_s$ краевых сегментов по достижении границы зоны сдвига

$$S_D^s \approx (1 - w_D) D_s D_e \approx 0.9 S_D.$$

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ И НАКОПЛЕНИЯ РАЗОРИЕНТАЦИЙ

Скопления n дислокаций на границах зоны сдвига порождают высокие локальные напряжения, что препятствует дальнейшей работе источника и может спровоцировать образование микротрещин. Однако происходит релаксация этих напряжений в результате поперечного скольжения винтовых сегментов скопления и переползания краевых сегментов скопления в соседние плоскости скольжения под действием потоков межузельных атомов, генерируемых при движении винтовых сегментов.

Хорошо известно [18], что расстояния между дислокациями в плоских скоплениях распределены неравномерно (рис. 2а). Вследствие смещения дислокаций в скоплениях уменьшаются обратные поля напряжений, что существенно меняет распределение расстояний между дислокациями в двух измерениях (рис. 2б). Если сопротивление движению дислокаций невелико, то краевые дислокации стремятся занять положения, соответствующие неустойчивому состоянию равновесия при $x_D = y_D$, а распределение расстояний стремится к равномерному с математическим ожиданием x_D , поэтому оценка для n_D^e существенно изменяется в сторону увеличения. Если же сопротивление велико, то генерируемых межузельных атомов может оказаться недостаточно для такого расположения. Неустойчивость состояния равновесия приводит к тому, что дислокации скопления перестраиваются в малоугловую дислокационную стенку наклона.

Число междуузлий, необходимых для получения среднего расстояния y_D , равно

$$D_e b^{-2} (y_D + 2y_D + \dots + n y_D) = 0.5 D_e b^{-2} n(n+1).$$

Число междуузлий, которые генерируются при движении свободного винтового сегмента длиной Λ_s на расстоянии свободного пробега ℓ_d , равно $0.5 \Gamma \Lambda_s \ell_d b^{-1} c_j$, где Γ – геометрический фактор, связанный с усреднением площадок по их величине и форме. Число n_s площадок, на которых генерируются точечные дефекты, можно оценить как отношение S_D^s к $0.5 \Gamma \Lambda_s \ell_d$.

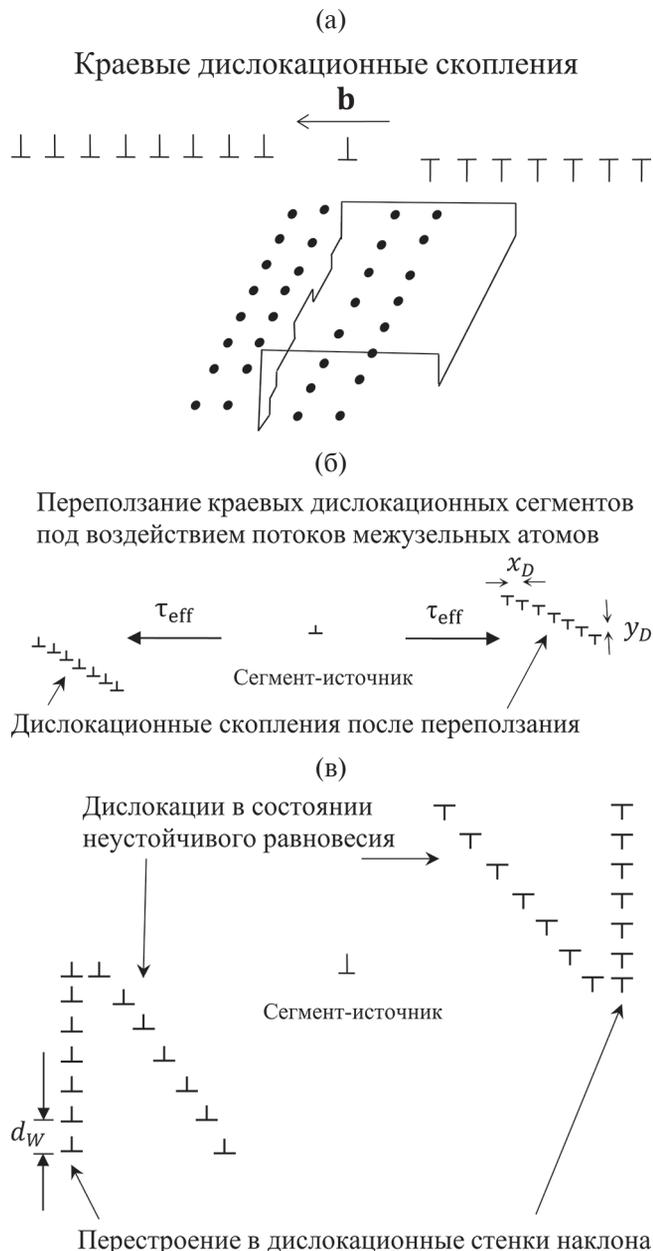


Рис. 2. Схема перестроения дислокационных скоплений в малоугловые дислокационные стенки наклона: дислокационные скопления (а); переползание краевых сегментов (б); перестроение скоплений в малоугловые стенки наклона (в).

Средняя плотность c_j порогов на винтовых сегментах зависит от плотности дислокаций, от степени неоднородности распределения дислокаций “леса” по знаку, а также может зависеть от скорости движения порогов, если они двигаются консервативно (вдоль линии дислокации). Этот вопрос практически не исследован, поэтому в настоящей работе выражение для $c_j(\rho)$ не приводится. Однако можно сделать вывод о том, что из очевидного равенства $n x_D \approx 0.5 F_e D_s$, когда дис-

локации скопления заполняют все пространство от сегмента источника до границы зоны сдвига, следует, что число дислокаций в состоянии неустойчивого равновесия ($d_w \approx x_D \approx y_D$) зависит от плотности порогов как

$$n + 1 \approx 4c_j b F_e^{1-} S_D^s S_D^{-1},$$

так же, как и среднее расстояние между дислокациями в стенке $d_w \approx 0.5 F_e D_s n^{-1}$ и соответствующий угол разориентации малоугловой стенки $\theta_w \approx b d_w^{-1}$.

Модель перестроения скоплений в стенки наклона

В системе координат, в которой начало находится на границе зоны сдвига в исходной плоскости скольжения сегмента-источника, ось абсцисс направлена перпендикулярно вектору Бюргера, а ось ординат – перпендикулярно плоскости скольжения, центр сегмента источника находится в точке с координатами $(0.5 D_e, 0)$. Если x_D – среднее расстояние между дислокациями в скоплении, то дислокации переползающего скопления находятся в точках $(0,0)$, (x_D, d_w) , $(2x_D, 2d_w)$, ..., $((n-1)x_D, (n-1)d_w)$, где d_w – среднее расстояние, на которое переползает скопление. На n -ю дислокацию,двигающуюся от источника, со стороны источника действует эффективное напряжение $\tau_{eff} = \alpha_{eff} G b \rho^{1/2}$, а со стороны переползшего скопления – напряжение

$$\sigma_{xy}(x, y) = \sum_{k=0}^{n-2} \frac{Gb(x - kx_D)}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x - kx_D)^2 - (y - kd_w)^2}{((x - kx_D)^2 + (y - kd_w)^2)^{3/2}},$$

где $y = (n-1)d_w$.

При условии $x_D = y_D \approx d_w$ краевые сегменты в смещенном скоплении находятся в неустойчивом положении равновесия и, следовательно, при условии

$$\int_{(n-1)x_D}^{0.5D_e} b \tau_{eff} dx > \int_{(n-1)x_D}^{0.5D_e} b \sigma_{xy}(x, (n-1)d_w) dx$$

приближение дислокаций на расстояние $x_D \geq d_w$ приводит к дальнейшему их движению (сваливанию) вплоть до состояния равновесия в дислокационной стенке.

Приравнивая число междоузлий $D_e b^{-2}(y_D + y_D + \dots + n y_D) = 0.5 y_D D_e b^{-2} n(n+1)$, необходимых для получения среднего расстояния y_D , к числу

междоузлий $0.5\Gamma\Lambda_s\ell_d b^{-1}c_j$, которые генерируются при движении свободного винтового сегмента длиной Λ_s на расстояние свободного пробега ℓ_d , где Γ – геометрический фактор, число n_s можно оценить как отношение S_D^s к $0.5\Gamma\Lambda_s\ell_d$ из очевидного равенства $n x_D \approx 0.5F_e D_s$. Когда дислокации скопления заполняют все пространство от сегмента источника до границы зоны сдвига, получим, что от плотности порогов c_j зависят и число дислокаций в скоплении $n+1 \approx 4cb(F_e)^{-1}S_D^s S_D^{-1}$ ($x_D = y_D = d_w$), и среднее расстояние между дислокациями в стенке $d_w \approx 0.5F_e D_s n^{-1}$, и соответствующий угол разориентации малоугловой стенки $\theta_w \approx bd_w^{-1}$.

Модель слияния стенок наклона

Средняя энергия единицы площади (или, другими словами, удельная поверхностная энергия) малоугловых стенок при условии $\theta_w \leq \theta_M$ определяется хорошо верифицированным экспериментально уравнением Рида–Шокли:

$$\begin{aligned} \gamma_w &= \frac{Gb\theta_w}{4\pi(1-\nu)} \left(1 + \ln \frac{b}{2\pi r_0 \theta_w} \right) = \\ &= \gamma_M \frac{\theta_w}{\theta_M} \left(1 + \ln \frac{\theta_M}{\theta_w} \right) = \gamma_M \frac{\theta_w}{\theta_M} \left(1 - \ln \frac{\theta_w}{\theta_M} \right), \end{aligned}$$

где r_0 – радиус ядра дислокации, ν – модуль Пуассона, θ_w – средний угол разориентации малоугловых границ, $\theta_M \approx 10^\circ$ – максимальный угол разориентации малоугловых границ, γ_M – максимальная энергия таких границ.

После образования зародыша стенки в результате перестроения первого дислокационного скопления источник дислокаций испускает следующую серию петель, с которой происходит то же самое, что и с первой. Если расстояние между дислокациями в этих стенках достаточно велико, то при достаточно большом эффективном напряжении стенки могут сливаться в одну стенку с сохранением суммарной разориентации. Действительно, суммарная энергия границ скопления больше, чем энергия одной границы с такой же разориентацией:

$$\begin{aligned} n_w \gamma_w &= n_w \gamma_M \frac{\theta_w}{\theta_M} \left(1 - \ln \frac{\theta_w}{\theta_M} \right) > \\ &> \gamma_M \frac{n_w \theta_w}{\theta_M} \left(1 - \ln \frac{n_w \theta_w}{\theta_M} \right), \end{aligned}$$

поэтому слияние малоугловых стенок энергетически выгодно. При слиянии разориентация $n_w \gamma_w$ не меняется, а площадь и, следовательно, плотность границ N_w уменьшается в n_w раз (рис. 3).

В случае большого числа дислокаций можно считать, что упругое поле стенки убывает экспоненциально и сосредоточено в объеме слоя толщиной $h_w \sqrt{2}$, где $h_w = d_w n$ – высота стенки. Учитывая силу сопротивления скольжению дислокации со стороны дислокационной стенки:

$$F_w(x, y) = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{h_w}{d_w} \frac{x(x^2 - y^2 + (0.5h_w)^2)}{(x^2 - y^2 + (0.5h_w)^2)^2 + 4x^2 y^2},$$

получаем условие слияния нескольких стенок в одну малоугловую границу разориентации в виде:

$$\begin{aligned} \int_{\sqrt{2}h_w}^{0.5D_e} b\tau_{\text{eff}} dx &= b\tau_{\text{eff}} (0.5D_e - \sqrt{2}h_w) \geq \\ &\geq \int_{\sqrt{2}h_w}^{0.5D_e} F_w(x, 0) dx = \frac{Gb^2 n}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{D_e^2 + (h_w)^2}{9(h_w)^2}. \end{aligned}$$

Перепишем это условие в форме:

$$\alpha_{\text{eff}} \geq \frac{n}{D_e \pi (1-\nu) \sqrt{\rho}} \ln \frac{D_e}{3d_w n}.$$

Предположим, что слияние заканчивается при уменьшении расстояния между дислокациями в стенке до

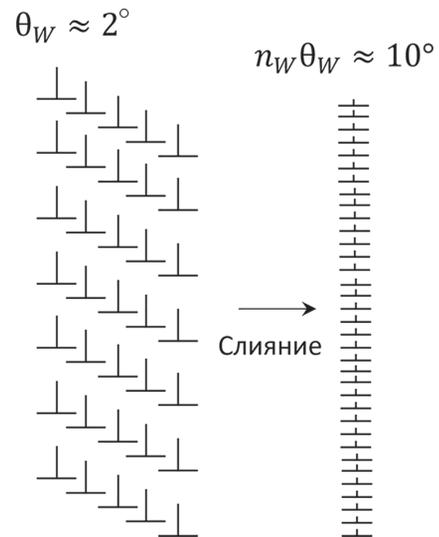


Рис. 3. Схема слияния стенок наклона в одну малоугловую границу разориентации с сохранением суммарной разориентации.

$$d_w = 2w_D^{-1}w_i c_j b D_e F_e^{-1} F_w^{-1} n_w^{-1},$$

где n_w – максимальное число сливающихся стенок, а множитель F_w учитывает как увеличение числа дислокаций, так и увеличение высоты стенки за счет пристраивания дислокаций к концам стенки. Тогда с учетом $D_e d_w^{-1} \approx 0.35 n_w F_w c_j^{-1} b^{-1}$ получаем число дислокаций nn_w , образующих границу после слияния n_w стенок и, следовательно, долю $w_w^m \approx n(nn_w)^{-1} = n_w^{-1}$ сдвигообразующих дислокаций, перестраивающихся в стенки а время Δt .

Предполагая, что на некотором этапе в результате встраивания число дислокаций в стенке увеличилось, а среднее расстояние между дислокациями в стенке уменьшилось до

$$d_w = 2w_D^{-1}w_i c_j b D_e F_e^{-1} F_w^{-1} n_w^{-1},$$

где множитель F_w учитывает увеличение числа дислокаций в стенке за счет встраивания, получаем минимальное число дислокаций n_w , образующих стенку после встраивания в нее дислокаций, испускаемых источником, в виде:

$$n_w \approx \frac{\pi(1-\nu)\alpha_{\text{eff}} D_e \sqrt{\rho}}{\ln(0.12 F_w c_j^{-1} b^{-1})}.$$

Увеличение высоты стенки за счет пристраивания дислокаций к ее концам не уменьшает расстояния между ними.

Доля краевых сегментов петель сдвигообразующих дислокаций:

$$w_w^m \approx n(nn_w)^{-1} = n_w^{-1},$$

образующих малоугловые границы разориентации за время Δt , может быть представлена в виде отношения среднего числа n испускаемых источником петель к числу nn_w всех дислокаций, образующих границу. При некоторых предположениях относительно c_j для чистых ГЦК-металлов можно получить:

$$w_w^m \approx \min \left(\frac{1}{n} \frac{\alpha B_r \pi (1-\nu) \alpha_{\text{eff}}}{\ln 8 - \ln(3\beta_j \xi b \alpha B_r \sqrt{\rho_m})}; 1 \right).$$

В результате формирования стенок плотность краевых сегментов сдвигообразующих дислокаций уменьшается на $n_w F_e D_s$, поэтому интенсивность этого процесса имеет вид:

$$d_w w_w^m F_e D_e^{-1} b^{-1},$$

где $F_e D_e^{-1} b^{-1}$ – интенсивность генерации сдвигообразующих дислокаций. Учитывая, кроме того, механизмы разрушения малоугловых стенок и диффузионное разрастание дислокационных стенок в результате присоединения дислокаций их объема к концам стенок, можно получить уравнение кинетики малоугловых границ разориентации в виде:

$$\begin{aligned} \dot{N}_w = & \left[\dot{a} d_w F_e D_e^{-1} b^{-1} w_w^m + w_{wm} D_w b^{-1} \cdot \right. \\ & \cdot \left(D_i w_m^j c_i + D_{1v} w_m^{1v} c_{1v} + D_{2v} w_m^{2v} c_{2v} \right) w_e \rho_m N_w d_w \left. \right] \cdot \\ & \cdot \left(1 - n_g^{-1} \right) - K_\tau N_w - K_{wg} N_w N_g. \end{aligned}$$

Фрагментированная структура в монокристалле наблюдается, когда по мере заполнения малоугловыми границами объема кристалла расстояние между стенками достигает величины $d_{\text{fr}} = N_w^{-1} \approx 1$ мкм.

Модель формирования высокоугловых границ

В условиях развитой фрагментации размеры новых зон сдвига продолжают уменьшаться, и в результате действия дислокационных источников формируются дислокационные стенки внутри фрагментов. Возникают скопления дислокационных стенок, состоящие из дислокаций одного и того же знака, которые при условии энергетической выгоды далее перестраиваются в высокоугловые стенки. Помимо этого, происходит взаимодействие стенок, сформировавшихся под действием источников разных систем скольжения, и образуются высокоугловые границы наклона или границы кручения. Все эти механизмы не уменьшают плотности дислокаций, составляющих границы разориентации, но уменьшают площадь границ и увеличивают угол разориентации.

Далее предполагается, что основной механизм формирования высокоугловых границ разориентации – зародышей границ зерен – это перестроение скоплений некоторого количества n_g малоугловых границ разориентации на границах зон сдвига (рис. 4). Известные значения γ_g для специальных границ зерен близки к γ_M , поэтому суммарная энергия $\gamma_w n_g$ скопления малоугловых стенок при некотором значении n_g выше, чем энергия γ_g специальной высокоугловой границы с разориентацией, представляющей собой суммарную разориентацию $\theta_w n_g$ скопления малоугловых границ ($\gamma_g < n_g \gamma_w$).

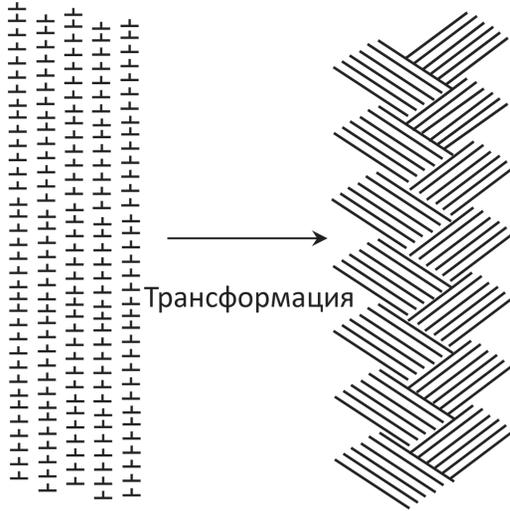


Рис. 4. Схема трансформации скопления малоугловых границ разориентации в одну высокоугловую границу с сохранением суммарной разориентации.

Целесообразно определить минимальное число малоугловых границ в скоплении, необходимых для трансформации, как целое число, приблизительно равное отношению средней энергии высокоугловой стенки γ_g к средней энергии малоугловой стенки, т.е. $n_g \approx \gamma_g \gamma_w^{-1}$.

В результате перестроек скоплений малоугловых границ появляются высокоугловые стенки с разориентацией $\theta_g = \theta_w n_g$ и плотностью геометрически необходимых дислокаций $\rho_g = \theta_g d_g^{-1} b^{-1} = \theta_g N_g b^{-1} = \theta_w n_g N_g b^{-1}$. Плотность высокоугловых стенок N_g растет, расстояние между границами N_g^{-1} уменьшается, в какой-то момент высокоугловые границы заполняют весь объем кристалла, и возникают зерна с размером $d_g = N_g^{-1}$. Накопление малоугловых границ внутри зерен приводит к формированию субзерен.

Умножая интенсивность генерации малоугловых границ на величину n_g^{-1} , можно получить выражение $\dot{N}_g = n_g^{-1} \dot{N}_w$ для интенсивности генерации высокоугловых стенок. Из выражения для скорости изменения среднего размера зерна $\dot{d}_g = -\dot{N}_g N_g^{-2}$ можно получить скорость динамической рекристаллизации в виде $v_M^1 w_g^2 N_g^2 + v_M^2 (1 - w_g)^3 N_g^3$, где v_M^1 и v_M^2 — скорости миграции равновесных и неравновесных границ, w_g — доля равновесных границ. Учитывая механизмы взаимодействия малоугловых границ с границами зерен, уравнение кинетики границ зерен можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \dot{N}_g = & \left[\dot{a} d_w F_e D_e^{-1} b^{-1} w_w^m + w_{wm} D_w b^{-1} \cdot \right. \\ & \cdot \left. \left(D_i w_m^j c_i + D_{1v} w_m^{1v} c_{1v} + D_{2v} w_m^{2v} c_{2v} \right) w_e \rho_m N_w d_w \right] n_g^{-1} + \\ & + K_{wg} N_w N_g - \dot{a}^{-1} \left(v_M^1 w_g^2 N_g^2 + v_M^2 (1 - w_g)^3 N_g^3 \right). \end{aligned}$$

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Исследование влияния точечных дефектов на формирование и накопление разориентаций проводили методом математического моделирования одноосной пластической деформации исходного монокристаллического образца металла, ориентированного для максимально множественного скольжения при постоянной скорости деформации в условиях комнатной температуры и атмосферного давления.

Математическая модель квазистатической сдвиговой пластической деформации и упрочнения имеет вид замкнутой системы обыкновенных дифференциальных уравнений кинетики деформационных дефектов:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_m = & \dot{a} \left(F_e b^{-1} D_e^{-1} (1 - w_w^m) + F_s b^{-1} D_s^{-1} (1 - P_{as}) \right) \\ & + K_\tau N_w d_w^{-1} - \left(\min \left\{ r_a, (0.125 w_e \rho_m)^{-\frac{1}{2}} \right\} w_e \rho_m + \right. \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \left. + D_w N_w \right) b^{-1} \left(D_i w_m^j c_i + D_{1v} w_m^{1v} c_{1v} + D_{2v} w_m^{2v} c_{2v} \right) w_e \rho_m, \\ \dot{\rho}_d = & \dot{a} \left(K_{Gd} \rho_m^{1/2} - w_d^j h^{-1} b^{-1} \rho_d^v c_i D_i \right), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\dot{\rho}_d^i = \dot{a} K_{Gd} \rho_m^{1/2} - h^{-1} b^{-1} \rho_d^i \left(D_{1v} w_d^{1v} c_{1v} + D_{2v} w_d^{2v} c_{2v} \right), \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \dot{c}_i = & \dot{a} w_i S_D^s S_D^{-1} c_j b - \\ & - \left(w_e \rho_m + \rho_d^v + K_R w_{1v}^j c_{1v} + K_R w_{2v}^j c_{2v} \right) D_i c_i, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \dot{c}_{1v} = & \dot{a} w_{1v} S_D^s S_D^{-1} c_j b - \\ & - \left(w_e \rho_m + \rho_d^i + K_R w_{1v}^j c_i \right) D_{1v} c_{1v} + K_R w_{2v}^{2v} w_{2v}^j c_i c_{2v} D_i, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \dot{c}_{2v} = & \dot{a} w_{2v} S_D^s S_D^{-1} c_j b - \left(w_e \rho_m + \rho_d^i \right) D_{2v} c_{2v} - \\ & - K_R w_{1v}^{2v} c_i c_{2v} D_i + K_R \left(w_{1v}^{1v} c_{1v} \right)^2 D_{1v}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \dot{N}_w = & \left[\dot{a} d_w F_e D_e^{-1} b^{-1} w_w^m + w_{wm} D_w b^{-1} \cdot \right. \\ & \cdot \left. \left(D_i w_m^j c_i + D_{1v} w_m^{1v} c_{1v} + D_{2v} w_m^{2v} c_{2v} \right) w_e \rho_m N_w d_w \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left(1 - n_g^{-1} \right) - K_\tau N_w - K_{wg} N_w N_g, \\ \dot{N}_g = & \left[\dot{a} d_w F_e D_e^{-1} b^{-1} w_w^m + w_{wm} D_w b^{-1} \cdot \right. \\ & \cdot \left. \left(D_i w_m^j c_i + D_{1v} w_m^{1v} c_{1v} + D_{2v} w_m^{2v} c_{2v} \right) w_e \rho_m N_w d_w \right] n_g^{-1} + \\ & + K_{gw} N_w N_g - \dot{a}^{-1} \left(v_M^1 w_g^2 N_g^2 + v_M^2 \left(1 - w_g \right)^3 N_g^3 \right), \end{aligned} \quad (8)$$

дополненной выражением, связывающим сопротивление движению дислокации

$$\tau = \tau_f + \alpha G b \rho_m^{1/2} + \alpha_w G b \rho_{\pm}^{1/2} + \alpha_g G b \rho_g^{1/2} - (4\pi)^{-1} G b N_w \lg(N_w b) \quad (9)$$

через дефектную структуру, содержащую дислокации леса и границы разориентации, с характеристиками линейных и плоских дефектов и уравнением для скорости сдвиговой деформации $\dot{\epsilon} = \text{const}$.

Система (1)–(8) отражает лишь общую методику построения уравнений кинетики деформационных дефектов, полное выписывание уравнений нецелесообразно. Получение выражения для каждого из параметров представленных уравнений, как правило, сводится к решению отдельной задачи. Существуют некоторые отличия для разных типов сплавов, однако эти задачи могут быть решены. Тем не менее в силу большого числа этих задач и вследствие трудностей, возникающих при их решении, чаще всего с целью планирования эксперимента при создании сплава или разработки технологии его последующей обработки имеет смысл произвести подбор значений тех параметров, которые еще не имеют достоверной оценки.

В различных металлах могут реализовываться следующие сценарии эволюции величины c_j . Первый сценарий: пороги неподвижны, и при высокой энергии дефекта упаковки за каждым порогом, начиная с места его образования, тянется цепочка точечных дефектов до конца площадки $\Gamma \Lambda_s \ell_d$. Второй сценарий: пороги подвижны, плотность дислокаций высокая, а расстояние между порогами настолько мало, что пороги разных знаков успевают аннигилировать за время, значительно меньшее, чем время заметания площадки $\Gamma \Lambda_s \ell_d$ винтовым сегментом; на сегменте образуется стационарная плотность порогов, соответствующая плотности дислокаций. Третий сценарий: на первой стадии расстояние между порогами велико, и они не успевают аннигилировать; на второй стадии начинается активная аннигиляция, и возможно достижение стационарной плотности; однако если при дальнейшем повышении плотности дислокаций формируются разориентированные субструктуры, то аннигиляция уменьшается вследствие снижения вероятности наличия рядом порога другого знака и реализуется переход в другое равновесное состояние.

В представленном исследовании использовано выражение для динамически равновесной плотности дислокаций $c_j^{\text{dyn}}(v_s) = (\beta_j \xi \rho v_s w_j^{-1} v_j^{-1})^{1/2}$, где средняя скорость винтовых сегментов подчиняется экспериментально непротиворечивой логистической зависимости (рис. 5) [19, 20]:

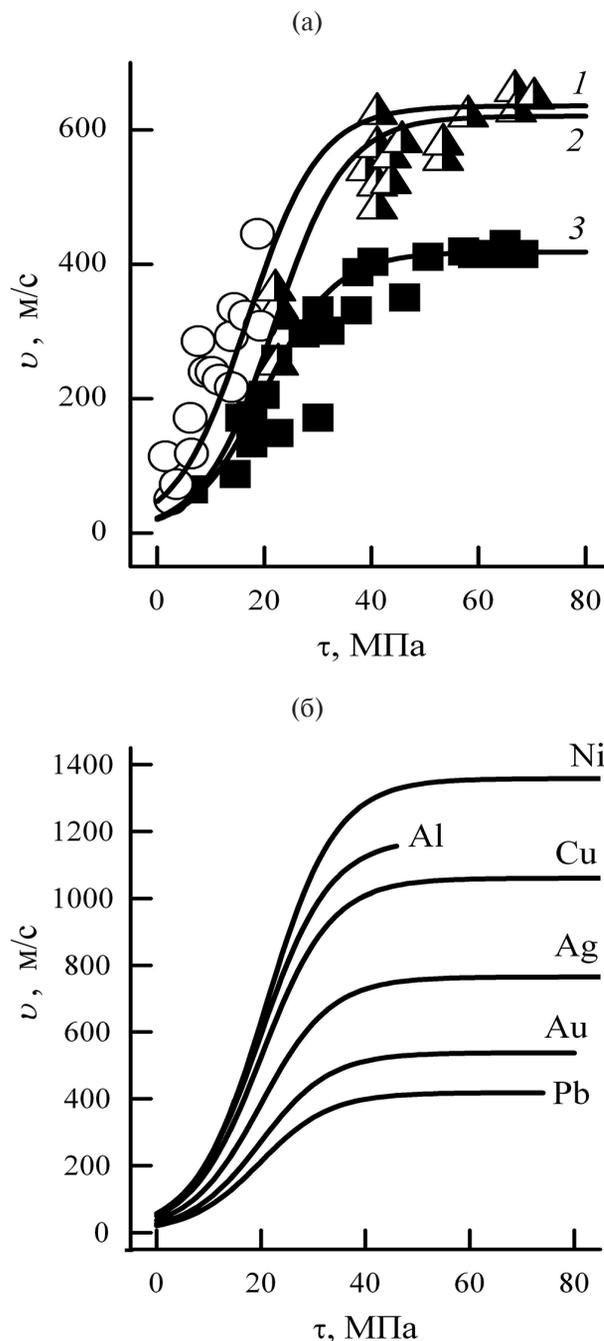


Рис. 5. Логистическая кривая зависимости средней скорости движения винтовых сегментов от напряжения [19]: сравнение с экспериментальными данными для свинца при 4.2 (1), 77 (2), 300 К (3) (а); данные расчетов для различных металлов при комнатной температуре (б).

$$\begin{aligned}
 v_s(\tau, T) &= (v_m^{-1}(T) + v_T^{-1}(\tau, T))^{-1} = \\
 &= (v_m^{-1}(T) + v_0^{-1} \exp(k_B^{-1} T^{-1} (U_0 - \gamma\tau)))^{-1} = \\
 &= w_j^2 \beta_j^{-1} \xi^{-1} v_j V_a (V_a K_v^{-2} + \exp(V_a (\tau_n - \tau)))^{-1},
 \end{aligned}$$

которая может быть представлена как среднее гармоническое термоактивируемой и динамически равновесной скорости движения дислокационных сегментов.

На рис. 6 приведены данные моделирования формирования и накопления разориентаций,

представленные в виде характеристик деформационных структур в условиях умеренной и глубокой деформации. Проведено сравнение с экспериментальными данными. Очевидно уменьшение расстояния между малоугловыми стенками (рис. 6а) до стадии формирования фрагментов, которая соответствует среднему расстоянию, равному размеру фрагментов ~1 мкм, и углу разориентации ~8° (рис. 6б). Из рис. 6в можно понять, что при мегапластических деформациях плотность границ зерен на порядок превосходит плотность границ фрагментов. Вследствие механизмов динамической

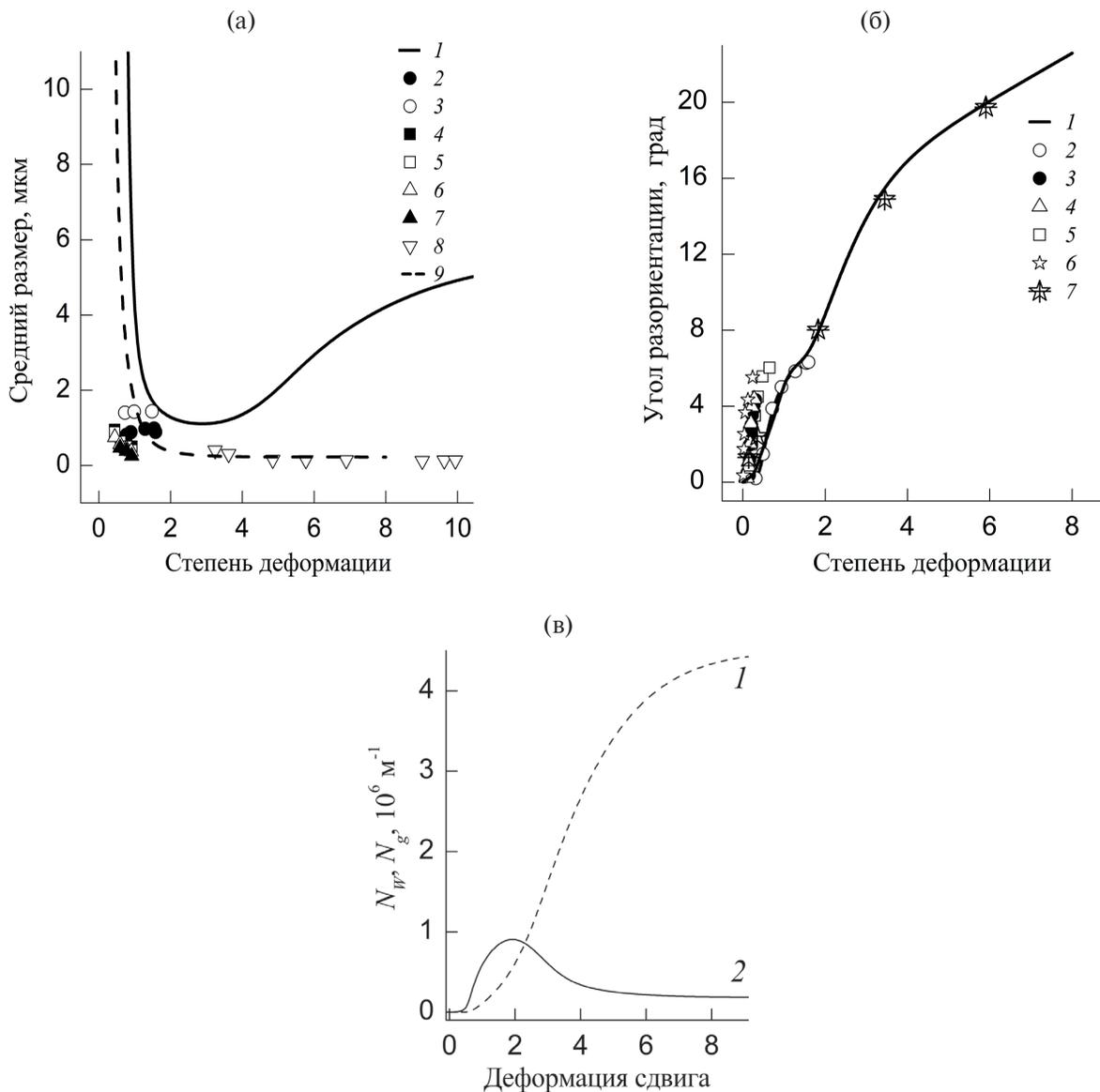


Рис. 6. Зависимости параметров разориентированных субструктур от степени сдвиговой деформации (а): средние размеры фрагментов (1) и зерен (9); экспериментальные данные: монокристалл Ni, ориентация [100] при температурах 293 (2) и 673 К (3), Cu + 0.5Al (4), Cu + 5Al (5), Cu + 0.4Mn (6), Cu + 6Mn (7), Ni (8) [21]. Непрерывный средний угол разориентации (1), экспериментальные данные для: никеля (2, 3); Cu (4) [22]; сплава меди Cu + 12Al (5); Al (4–6) [23]; Cu (7) [24] (б). Плотности высокоугловых N_g (1) и малоугловых N_w (2) границ разориентации в Ni (в).

рекристаллизации интенсивность накопления высокоугловых стенок уменьшается и, начиная с некоторой степени деформации, средний размер зерна сохраняется постоянным.

Последующее деформирование ведет к росту суммарной разориентации фрагментов зерен, но наблюдается увеличение расстояния между малоугловыми стенками, если рассматривать весь объем деформируемого материала. Однако локально деформация сконцентрирована внутри зерен, где происходит накопление малоугловых стенок, приводящее к измельчению зеренной структуры. Выбранный набор параметров модели не позволяет получить вторичную фрагментацию на фоне динамической рекристаллизации. Это недостаток выбранного набора параметров модели, и требуется дальнейший поиск возможных режимов работы динамической системы, отвечающих наблюдаемым явлениям.

В экспериментально фиксируемый средний угол разориентации:

$$\theta = 2\arcsin\left[0.5Db\left(w_m^{\pm}w_m^w\rho_m + w_w^{\pm}\rho_w + w_g^{\pm}\rho_g\right)\right] = 2\arcsin(0.5bD\rho_0),$$

вносят вклад все дислокации, образующие локально избыточную плотность ρ_0 , включая скопления сдвигообразующих дислокаций, малоугловые и высокоугловые границы разориентации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты моделирования формирования и накопления разориентаций свидетельствуют о том, что используемая при исследовании математическая модель сдвиговой пластической деформации и упрочнения соответствует физическим представлениям о механизмах генерации, взаимодействия и трансформации деформационных субструктур. В частности, она подтверждает влияние точечных дефектов на формирование разориентированных субструктур.

В случае ГЦК-металлов с высокой энергией дефекта упаковки получены зависимости изменения параметров разориентированных субструктур с увеличением степени сдвиговой деформации, количественно близкие к экспериментально наблюдаемым. Для металлов с низкой энергией дефекта упаковки, а также упорядоченных сплавов требуется дополнительное исследо-

вание влияния энергии упаковки на накопление порогов и другие параметры представленной выше математической модели.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hoffmann A.L.* Metal Forming: Interrelation Between Theory and Practice. // Proc. Symp. on the Relation Between Theory and Practice of Metal Forming. Cleveland, Ohio, October, 1970. Boston: Springer, 2012. P. 503.
2. *Новиков И.И., Портной В.К.* Сверхпластичность сплавов с ультрамелким зерном. М.: Металлургия, 1981. 168 с.
3. *Смирнов О.М.* Обработка металлов давлением в состоянии сверхпластичности. М.: Машиностроение, 1979. 184 с.
4. *Утяшев Ф.З., Рааб Г.И.* Научные основы деформационных технологий формирования ультрамелкозернистых и наноструктурных объемных материалов. Вологда: Инфра-Инженерия, 2021. 160 с.
5. *Zhilyaev A.P., Pshenichnyuk A.I., Utyashev F.Z., Raab G.I.* Superplasticity and Grain Boundaries in Ultrafine-Grained Materials. Elsevier, 2020. 416 p.
6. *Утяшев Ф.З., Рааб Г.И., Валитов В.А.* Деформационное наноструктурирование металлов и сплавов. Монография. СПб.: Научно-технические технологии, 2020. 185 с.
7. *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
8. *Корзникова Г.Ф., Халикова Г.Р., Миронов С.Ю., Алетдинов А.Ф., Корзникова Е.А., Конькова Т.Н., Мышляев М.М.* // Физическая мезомеханика. 2022. Т. 25. № 2. С. 47. https://doi.org/10.55652/1683-805X_2022_25_2_47
9. *Еникеев Ф.У.* // Изв. вузов. Цветная металлургия. 2008. № 1. С. 43.
10. *Варгин А.Н., Бурханов Г.С., Зунг Нгуен Суан, Полькин В.И.* // Международный научный журнал. 2013. № 6. С. 65.
11. *Рудаев Я.И.* // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 2005. № 2. С. 57.
12. *Перевезенцев В.Н., Свирина Ю.В.* // Журнал технической физики. 1998. Т. 68. № 12. С. 39.
13. *Higashi K., Nieh T.G., Mabuchi M., Wadsworth J.* // Scr. Metall. Mater. 1995. V. 32. № 7. P. 1079.
14. *Demirtas M., Kawasaki M., Yanar H., Purcek G.* // Mater. Sci. Eng. A. 2018. № 730. P. 73. Doi: 10.1016/j.msea.2018.05.104

15. Demirtas M., Purcek G., Yanar H., Zhang Z.J., Zhang Z.F. // J. Alloys Compd. 2016. № 663. P. 775. Doi: 0.1016/j.jallcom.2015.12.142
16. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Соловьёва Ю.В., Попов Л.Е. // Изв. вузов. Физика. 2009. № 4. С. 60.
17. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Селиваникова О.В. // Изв. вузов. Физика. 2014. Т. 57. № 2. С. 4.
18. Кульман-Вильсдорф Д. // Физическое металловедение / Ред. Кан Р. Вып. 3. Дефекты кристаллического строения механические свойства металлов и сплавов. М.: Мир, 1968. 484 с.
19. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Слободской М.И. // Изв. вузов. Физика. 2009. № 9/2. С. 108.
20. Parameswaran V.R., Weertman J. // Met. Trans. 1971. V. 2. P. 1233.
21. Красноперова Ю.Г., Воронова Л.М., Дегтярев М.В., Чашухина Т.И., Реснина Н.Н. // Физика металлов и металловедение. 2015. Т. 116. № 1. С. 1.
22. Mader S., Seeger A. // Acta Metall. 1960. V. 8. P. 513.
23. Staubwasser N. // Acta Metall. 1959. V. 7. Iss. 1. P. 43.
24. Беляков А.Н. // Физика металлов и металловедение. 2009. Т. 108. № 4. С. 412.

Mechanisms of Formation and Accumulation of Misorientations in Deformable Metals and Alloys

D. N. Cherepanov^{1, 2, *}, Yu. V. Solov'eva^{1, **}, V. A. Starenchenko¹

¹Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, 634003 Russia

²Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, 634003 Russia

*e-mail: d_n_ch@mail.ru

**e-mail: j_sol@mail.ru

The formation of misoriented substructures in plastically deformable metal materials has been theoretically studied. Expressions are obtained for the intensity of accumulation of low-angle and high-angle misorientation boundaries. Within the framework of a mathematical model of shear plastic deformation and hardening, numerical calculations of the dependences of the average characteristics of a defective medium on the degree of deformation under conditions of uniaxial compression with a constant strain rate at room temperature are performed. It is shown that the intensity of generation of low-angle tilt walls depends significantly on the scenario of changes in the density of jogs on the screw segments of dislocation loops emitted by dislocation sources. The main mechanism for the formation of low-angle walls is the rearrangement of clusters of edge segments of dislocation loops into tilt dislocation walls under the influence of flows of interstitial atoms generated by moving screw segments. It is assumed that low-angle walls merge into one until the total misorientation angle of the merged walls reaches a critical value of about 10°, after which the distance between dislocations in the wall decreases to the corresponding critical value and further penetration of individual dislocations into the wall becomes impossible. The expression for the intensity of the formation of high-angle boundaries was obtained as a consequence of the continuation of the work of dislocation sources and the formation of clusters of low-angle walls, the total energy of which is higher than the energy of an equilibrium high-angle boundary at the same misorientation.

Keywords: metals, shear plastic deformation, stress, mathematical modeling, defects, dislocations, interstitial atoms, tilt dislocation walls, misorientation angle, high-angle boundaries, boundary energy, defect kinetics, jog density.