

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ ГЦК КРИСТАЛЛОВ ПРИ ИНТЕНСИВНЫХ ДЕФОРМИРУЮЩИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Попов Л.Е., Колупаева С.Н., Вихорь Н.А. (Томск)

Abstract

The dislocation subsystem stability for f.c.c. single- and polycrystal at various intensity of deformed effects is investigated. Availability of two stationary significances of dislocation density is shown: steady $\rho_s^{(1)}$ and unstable $\rho_s^{(2)}$. For single $\rho_s^{(1)} = 0$. At $\rho_s^{(1)} < \rho < \rho_s^{(2)}$ the dislocation density decreases with deformation, in polycrystals at $\rho < \rho_s^{(1)}$ - having increased, coming nearer to stationary significance $\rho_s^{(1)}$. At $\rho > \rho_s^{(2)}$ growth of dislocation density occurs. When the dislocation density is near to $\rho_s^{(2)}$ the material can separate on the areas of a steady crystal condition and the highdefects areas, which state can come nearer to amorphous. With reduction of the grain size d stationary significances of dislocation density draw together, the area dynamic disstrengthening gets narrow and disappears, when both stationary states coincide.

Пластическое формоизменение кристаллических тел в условиях деформирующих воздействий происходит преимущественно посредством локальных кристаллографических скольжений [1-4]. Каждая область локального кристаллографического сдвига ("зона сдвига" [5-7]) появляется в результате потери им серии замкнутых дислокационных петель, расширяющихся в плоскости скольжения сегмента-источника [1-7]. Дислокационная петля в процессе ее расширения пересекает тысячи дислокаций некомпланарных систем скольжения [8], часть из них оставляет пороги на скользящей дислокации. Пороги, скользящие вместе с дислокациями порождают точечные дефекты - межузельные атомы и вакансии, которые могут осуществлять массоперенос, то есть являются носителями деформации наряду с дислокациями.

Кроме того, точечные дефекты являются важным структурообразующим фактором, определяющим интенсивность аннигиляции дислокаций в процессе деформации. При температурах, при которых диффузионная подвижность точечных дефектов достаточно высока, они достигают дислокации, захватываются и поглощаются их экстраплоскостями. При этом площади экстраплоскостей возрастают, если на них осаждаются межузельные атомы, и уменьшаются в случае вакансий. В обоих случаях дислокации совершают диффузионный дрейф (переползание), который сопровождается аннигиляцией дислокаций при полном растворении экстраплоскостей или их слиянии (с образованием совершенной кристаллографической плоскости). В зависимости от соотношения между интенсивностями генерации и аннигиляции дислокаций плотность дислокаций в кристалле может возрастать, убывать или оставаться постоянной [6,7].

При экспериментальном исследовании пластического поведения кристаллических материалов обычно используют невысокие скорости деформации ("статические" испытания) [2,9,10]. К таким же испытаниям относится большая часть экспериментальных и теоретических исследований микромеханизмов

пластической деформации и формирования деформационных структур [1.4.11,12,13]. Основанием называть пластическую деформацию при несильных деформирующих воздействиях статической является то, что в каждое мгновение такой деформации приложенное деформирующее усилие τ уравновешивается сопротивлением материала деформированию τ_R , определяемым прежде всего структурой деформируемого тела.

Однако в технологиях получения материалов и при изготовлении изделий из них, как правило, имеют дело с режимами деформирования, далекими от статических. При ковке, штамповке, прокатке, волочении, гидрозэкструзии, обработке порошковых смесей в шаровых мельницах и аттриторах, резании и т. д. деформация материала осуществляется в условиях, когда $\tau \gg \tau_R$.

Но даже при "статическом" режиме деформирования напряжение, необходимое для начала работы источника, обычно превышает величину напряжения, при котором может осуществляться дальнейшее испускание дислокационных петель. Это может быть обусловлено несовершенством дислокационных источников, различными механизмами, реализующими принцип Ле Шателье-Брауна в дислокационных ансамблях на уровнях атомно-дислокационных взаимодействий, а также уменьшение сил линейного натяжения дислокации при увеличении радиуса ее нелокальной кривизны. Поэтому движение дислокаций при распространении элементарных кристаллографических скольжений, их взаимодействие и формирование первичных (нерелаксированных) дислокационных структур происходит в динамическом режиме под действием избыточного напряжения [6.7]

$$\tau_{dyn}^{(1)} = \alpha_{dyn} G b \rho^{1/2}, \quad (1)$$

где $\alpha_{dyn} \approx 0,1$.

Таким образом, если деформация осуществляется под действием напряжения $\tau > \tau_R$, то величину избыточного (будем называть его динамическим) напряжения, используя соотношение $\tau = \tau_f + \alpha G b \rho^{1/2}$, можно представить в виде

$$\tau_{dyn} = \tau - \tau_f - (\alpha - \alpha_{dyn}) G b \rho^{1/2}. \quad (2)$$

Здесь τ_f - напряжение трения. α - параметр, характеризующий интенсивность междислокационных взаимодействий [13], G - модуль сдвига, b - модуль вектора Бюргерса, ρ - плотность дислокаций, определяемая как суммарная длина дислокаций в единице объема.

В предлагаемой работе исследована кинетика в г.ц.к. кристаллах, деформируемых в динамическом режиме. Дислокационная подсистема кристалла рассматривается в широком интервале изменения интенсивности деформирующих воздействий, характеризуемых параметром τ_{dyn} .

Скорость накопления дислокаций с деформацией может быть представлена как разность интенсивностей их генерации $\left(\frac{d\rho}{da}\right)_g$ и аннигиляции $\left(\frac{d\rho}{da}\right)_a$:

$$\left(\frac{d\rho}{da}\right) = \left(\frac{d\rho}{du}\right)_g - \left(\frac{d\rho}{da}\right)_a. \quad (3)$$

Дислокационная кинетика при деформации монокристаллов в условиях интенсивных динамических воздействий

Интенсивность генерации дислокаций может быть представлена модифицированным кристаллогеометрическим соотношением Инденбома-Орлова

$$\left(\frac{d\rho}{da}\right)_k = \frac{F}{Dh}, \quad (4)$$

где F - параметр, характеризующий геометрию дислокационных петель [5]. D - диаметр элементарного кристаллографического скольжения (зоны сдвига). В случае динамического режима деформирования пробег краевой дислокации практически не ограничен [6,14] и размер областей в плоскостях скольжения, где произошел кристаллографический сдвиг определяется пробегом винтовых дислокаций, движение которых происходит медленнее вследствие генерации скользящими винтовыми дислокациями точечных дефектов в количестве, нарастающем с увеличением длины пробега [15].

Длину свободного пробега винтовой дислокации под воздействием напряжения τ_{dyn} , избыточного над статическим сопротивлением движению дислокации τ_R , можно приближенно оценить следующим соотношением [6].

$$l_d^{(s)} = \frac{4 \tau_{dyn}^2}{\rho_j \xi \rho <\Delta E_k>}, \quad (5)$$

где $<\Delta E_k>$ - средняя энергия образования точечного дефекта, ρ_j - вероятность встречи порогаобразующей дислокации среди дислокаций некомпланарных систем скольжения (дислокаций "леса"), ξ - доля дислокаций "леса".

Если принять средний диаметр зоны сдвига D равным удвоенному пробегу винтовой дислокации, $D = 2l_d^{(s)}$, соотношение (4) для интенсивности генерации дислокаций в процессе деформации принимает вид

$$\left(\frac{d\rho}{da}\right)_k = \frac{F \rho_j \xi <\Delta E>}{8 \tau_{dyn} b^3} \rho. \quad (6)$$

При высоких скоростях движения дислокаций, характерных для деформации в динамическом режиме, изменение направления движения порогов приводит к возникновению сил, сравнимых с теоретической прочностью решетки, поэтому консервативное движение порогов на быстрых дислокациях затруднено. При этом интенсивность генерации межузельных атомов и вакансий возрастает [6,7]. Поэтому при записи соотношений (5)-(7) предполагается, что аннигиляция порогов вообще отсутствует: это предположение тем более приемлемо, чем выше уровень $\tau_{dyn} = \tau - \tau_R$.

Межузельные атомы ввиду их высокой диффузионной подвижности значительно быстрее, чем вакансии и даже бивакансии, достигают дислокаций и осаждаются на их экстраплоскостях. При этом площади экстраплоскостей возрастают, дислокации совершают диффузионное перемещение (переползание), которое сопровождается аннигиляцией дислокаций при слиянии экстраплоскостей дислокаций противоположного знака с образованием совершенных кристаллографических плоскостей. В зависимости от соотношения между интенсивностями генерации и аннигиляции дислокаций плотность дислокаций в процессе деформации может возрастать, уменьшаться или оставаться постоянной [6,13].

Для температурного интервала, в котором

- 1) аннигиляция дислокаций осуществляется преимущественно в результате осаждения на их экстраплоскостях межузельных атомов.
- 2) подвижность межузельных атомов достаточно высока, чтобы аннигиляционные процессы осуществлялись за гораздо меньшее время, чем время деформации. интенсивность аннигиляции дислокаций может быть представлена в виде [6]:

$$\left(\frac{d\rho}{da}\right)_g = \frac{8 \tau_{dyn} \rho^{1/2}}{G b} \quad (7)$$

где G - модуль сдвига.

Для монокристаллов при $\tau_f \ll \tau$ уравнение баланса дислокаций (1) может быть записано в виде

$$\left(\frac{d\rho}{da}\right) = \left(\frac{F \rho_j \xi <\Delta E_k>}{8 \tau_{dyn} b^3} \rho^{1/2} - \frac{8 \tau_{dyn}}{G b}\right) \rho^{1/2} \quad (8)$$

Уравнение (8) имеет стационарные точки $\rho_s^{(1)} = 0$ и

$$\rho_s^{(2)} = \left(\frac{64 b^2}{F \rho_j \xi <\Delta E_k > G}\right)^2 \tau_{dyn}^4$$

Из (8) следует, что тривиальное решение $\rho_s^{(1)} = 0$ устойчиво, $\rho_s^{(2)}$ - неустойчиво.

В области $0 < \rho < \rho_s^{(2)}$ плотность дислокаций уменьшается с увеличением степени деформации. Дислокации, осуществив сдвиговые процессы пластической деформации, аннигилируют в результате диффузии к ним межузельных атомов. Величина плотности дислокаций $\rho_s^{(2)}$, соответствующая неустойчивому стационарному состоянию, уменьшается с уменьшением величины τ_{dyn} . Динамическая аннигиляция дислокаций, сопровождающаяся динамическим разупрочнением, может быть достигнута при достаточно малых плотностях дислокаций уже при небольших избыточных напряжениях. Так при $\tau_{dyn} = 10 \text{ МПа}$, $b = 2,5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $F = 2$, $\rho_j = 0,5$, $\xi = 0,5 \cdot 10^4 \text{ МПа}$ получаем $\rho_s^{(2)} = 10^5 \text{ см}^{-2}$. Кристалл может, таким образом, освобождаться от дислокаций в процессе деформации, и это возможно при вполне достижимых напряжениях (рис. 1).

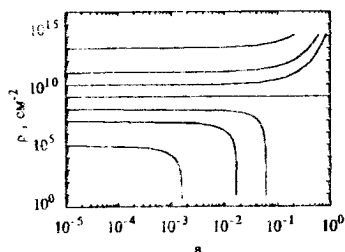


Рис.1. Зависимость плотности дислокаций от деформации при различных ρ_0 для никеля, $\tau_{din} = 100 \text{ МПа}$

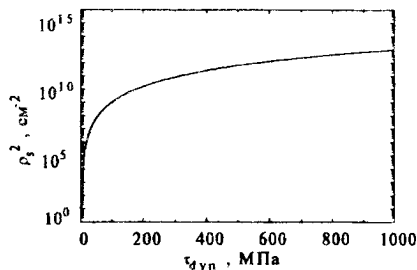


Рис.2. Зависимость $\rho_s^{(2)}$ от напряжения τ_{din}

При $\rho > \rho_s^{(2)}$, генерация дислокаций доминирует над аннигиляционными процессами и происходит неограниченное нарастание плотности дислокаций, вплоть до таких значений, при

которых едва ли можно говорить о кристаллическом состоянии: величины плотности дислокаций $\rho = 10^{13} \dots 10^{14} \text{ см}^{-2}$ соответствуют аморфному состоянию кристалла [14] (рис. 1). Отметим, что $\rho_s^{(2)}$ возрастает с увеличением τ_{dyn} (рис. 2).

Эффекты деформационной очистки кристаллических материалов от дислокаций наиболее выражены и наиболее легко реализуемы в случае исходно высокосовершенных кристаллов. Это дает основание рекомендовать небольшие импульсные деформирующие воздействия, резко обрываемые сразу после начала деформирования, как метод дальнейшего уменьшения плотности дислокаций. Надо, однако, иметь в виду, что при этом происходит накопление в кристалле подвижных атомных дефектов: вакансий и бивакансий.

Исследования устойчивости дислокационной подсистемы в поликристаллах г.ц.к. материалов при интенсивных деформирующих воздействиях

В поликристаллических материалах накопление дислокаций происходит не только на дислокациях, но и на границах кристаллитов. Воспользуемся модифицированным соотношением Эшби для расстояний между барьерами, на которых происходит накопление дислокаций [16]

$$\frac{F}{D} = \frac{F_1}{D^{(s)}} + \frac{F_2}{d}, \quad (9)$$

где F_1, F_2 - кристаллогеометрические параметры, учитывающие геометрию дислокационных петель и зерен, D - эффективное расстояние между двумя барьерами, у которых происходит накопление дислокаций, d - средний диаметр кристаллита (зерна) в поликристалле, и $D^{(s)} = 2 l_d^{(s)}$.

Дифференциальное уравнение баланса дислокаций в поликристаллическом материале при деформации в динамическом режиме можно записать следующим образом:

$$\frac{d\rho}{da} = \frac{F_1 \rho_j \xi \langle \Delta E_k \rangle}{8 \tau_{dyn} b^3} \rho + \frac{F_2}{d b} - \frac{8 \tau_{dyn} \rho^{1/2}}{G b}. \quad (10)$$

Уравнение (10) имеет две стационарные точки

$$\rho_s^{(1),(2)} = \left(\frac{\frac{8 \tau_{dyn}}{G b} \pm \sqrt{\frac{64 \tau_{dyn}^2}{G^2 b^2} - \frac{\rho_j \xi \langle \Delta E_k \rangle F_1 F_2}{2 \tau_{dyn}}}}{\frac{F_1 \rho_j \langle \Delta E_k \rangle}{4 \tau_{dyn} b^3}} \right). \quad (11)$$

Стационарное состояние, характеризуемое плотностью дислокаций $\rho_s^{(1)}$, соответствует устойчивому равновесию, $\rho_s^{(2)}$ - неустойчивому.

Возрастание плотности дислокаций при $\rho > \rho_s^{(2)}$ ничем не ограничено. Это дает основание предполагать, что в поликристаллическом материале в процессе деформации в динамическом режиме могут быть достигнуты плотности дислокаций, несовместимые с сохранением кристаллического состояния.

На рис. 3 - 4 представлены результаты расчетов для поликристаллов никеля. Как свидетельствуют результаты расчетов, существует область значений величины зерна и интенсивности деформирующих воздействий τ_{dyn} , в которой плотность

дислокаций убывает, приближаясь к стационарному значению $\rho_s^{(1)}$. При деформации поликристалла в режиме динамического разупрочнения плотность дислокаций может уменьшаться на несколько (в проведенных расчетах от двух до десяти) порядков. Если начальная плотность дислокаций ниже устойчивой стационарной величины, $\rho_0 < \rho_s^{(1)}$, то плотность дислокаций в процессе динамической деформации возрастает, асимптотически приближаясь с ростом деформации к $\rho_s^{(1)}$. С уменьшением размера зерна и избыточного напряжения τ_{dyn} стационарные значения плотности дислокаций сближаются и область значений исходной плотности дислокации, при которой наблюдается динамическое разупрочнение, сужается. При некоторой величине τ_{dyn} , определенной для каждого данного размера зерна, оба стационарных значения плотности дислокаций - равновесное и неравновесное - совпадают ($\rho_s^{(1)} = \rho_s^{(2)}$), то есть область динамического разупрочнения отсутствует (рис. 3.а). При меньших величинах τ_{dyn} стационарные точки отсутствуют; при любых начальных значениях ρ_0 плотность дислокаций в процессе деформации неограниченно возрастает. Физически это может быть связано с двумя причинами:

- с уменьшением τ_{dyn} снижается интенсивность производства точечных дефектов дислокациями, так как замедление быстрых дислокаций, а затем их иммобилизация происходит при меньших линейных плотностях порогов;
- уменьшается пробег дислокации l_d , поэтому осуществление той же деформации связано с генерацией большей плотности дислокаций.

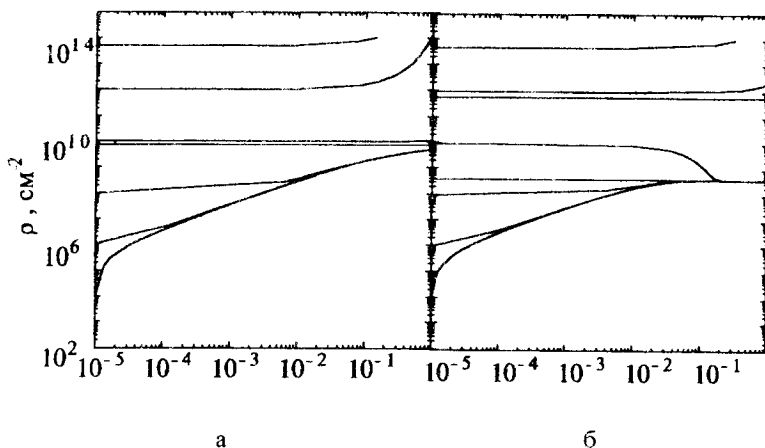


Рис.3. Зависимость плотности дислокаций от деформации при различных начальных плотностях дислокаций ρ_0 при $d=0,001$ мм для различных значений напряжения τ_{dyn} (Мпа): а - 232; б - 500.

Область динамического разупрочнения расширяется с увеличением интенсивности деформирующего воздействия и с увеличением размера зерна. Значения, при которых реализуется динамическая аннигиляция дислокаций в

поликристалле с величиной зерна $d \approx 100 \text{ МПа}$, достигается при $\tau_{dyn} > 100 \text{ МПа}$, то есть в условиях технически легко достижимых, как эксперимента, так и технологических процессов (прокатка, волочение, гидроэкструзия и др.).

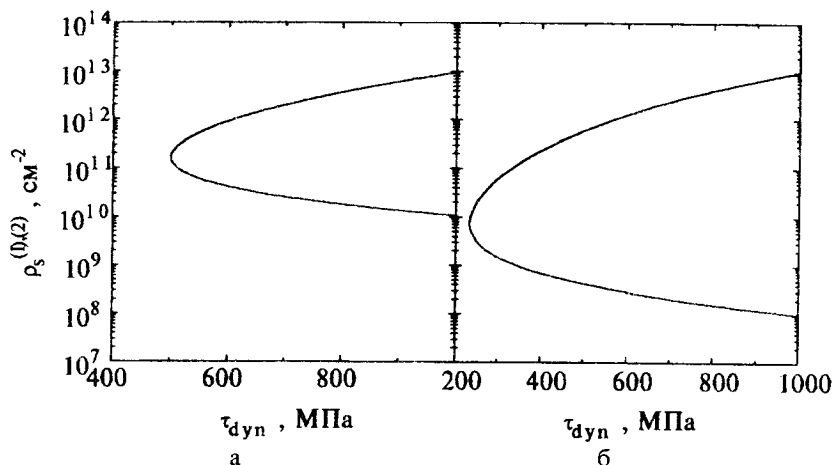


Рис.4. Зависимость плотностей дислокаций $\rho_s^{(1)}$ и $\rho_s^{(2)}$ от напряжения τ_{dyn} при разных значениях d (мм): а - 0,001; б - 0,01.

Заключение

Из приведенных в работе расчетов следует, что вблизи значений неустойчивых стационарных плотностей дислокаций происходят интенсивные процессы деформационного структурообразования. При плотностях дислокаций близких к $\rho_s^{(2)}$ вследствие неоднородности по кристаллу деформационной подсистемы, размера зерна и интенсивности деформирующего воздействия, плотность дислокаций в локальных объемах может быть больше или меньше стационарной величины. В областях, где $\rho < \rho_s^{(2)}$, плотность дислокаций с деформацией монотонно уменьшается. В локальных объемах, где $\rho > \rho_s^{(2)}$, напротив, происходит неограниченное возрастание плотности дислокаций, пока существует кристаллическая решетка. Дислокационная подсистема распадается на две "фазы", различающиеся по плотности дислокаций на порядки величины. Это соответствует распаду кристаллического материала на области устойчивого кристаллического состояния и высокодефектные области, состояние которых может приближаться к аморфному (нанокристаллические состояния). Во всяком случае неоднородность величины зерна или (и) деформирующего напряжения может приводить к динамическому разупрочнению одних групп зерен и интенсивному упрочнению других. Группы упрочненных зерен при этом проявляют кооперативное поведение (перемещения, повороты) за счет высокопластических областей, в которых происходит динамическое разупрочнение. При этом возникновение сильно упрочненных, кооперативно перемещающихся групп кристаллитов можно ожидать в областях более

мелкозернистой структуры (как видно из рис. 4), область динамического разупрочнения уменьшается с уменьшением размера зерна.

Необходимо подчеркнуть, что проведенное здесь рассмотрение устойчивости дислокационной подсистемы основано на упрощенном представлении о межкристаллитных границах, как о барьерах, совершенно непроницаемых для дислокаций. В действительности дислокации, особенно быстрые, могут проходить из одного кристалла в другой, при этом может производиться большое количество "геометрически необходимых" точечных дефектов (как вакансий, так и межузельных атомов [7]). Поэтому в некоторых приграничных областях процессы динамической аннигиляции могут происходить интенсивнее, чем внутри зерна. Толщина приграничной зоны по оценкам [17] составляет несколько десятков микрометров. Можно ожидать, что приведенный анализ окажется неприменимым к поликристаллическим материалам с размером зерна 50-100 мкм.

Библиографический список

1. Фридель Ж. Дислокации. - М.: Мир, 1967. - 643с.
2. Хоникоб Р. Пластическая деформация металлов. - М.: Мир, 1972. - 408с.
3. Бернер Р., Кронмюллер Г. Пластическая деформация монокристаллов. -М.: Мир, 1969. - 271с.
4. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. - М.: Атомиздат, 1972. -408с.
5. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. Концепция упрочнения и динамического возврата в теории пластической деформации // Изв. вузов. Физика. -1982.- № 6.- С. 56-82.
6. Попов Л.Е., Пудан Л.Я., Колупаева С.Н. и др. Математическое моделирование пластической деформации. Томск: Изд-во Том. ун-та, 1990. -185с.
7. Колупаева С.Н., Старченко В.А., Попов Л.Е. Неустойчивости пластической деформации кристаллов. -Томск: Изд-во Том. ун-та, 1994. - 301с.
8. Кобытев В.С., Слободской М.И., Руссиян А.А. Моделирование на ЭВМ процессов взаимодействия и скольжения дислокаций. - Томск: Изд-во Том. ун-та, 1992. - 180с.
9. Давиденков Н.Н. Проблемы механики материалов. -Киев: Наукова думка, 1981.- С. 9-99.
- 10.Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. - Новосибирск: Наука, 1985. - 230с.
- 11.Набарро Ф.Р.Н., Базинский З.С., Холт Д.Б. Пластичность чистых монокристаллов. - М.: Металлургия, 1967. -214с.
- 12.Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно-аналитическая теория прочности. - Санкт-Петербург : Наука, 1993. - 472с.
- 13.Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. Пластическая деформация сплавов. -М.: Металлургия, 1984. - 183с.
- 14.Жигилей Л.В., Лихачев Л.Е., Михайлин А.И. Характеристики локальной структуры в двумерной дислокационной модели аморфного состояния // Планарные дефекты в упорядоченных сплавах интерметаллидах: Межвуз. сб. научн. тр. / Алтайский политехи. ин-т им. И.И. Ползунова. Барнаул. 1989.- С. 95-101.
- 15.Орлов А.Н. К теории источников Франка-Рида // ФММ.- 1962.- Т. 13. Вып. 1.- С. 18-24.
- 16.Ashby M.F. The Deformation of plastically non-homogeneous materials. // Phil. Mag. 1970.- V. 21, № 170.- P. 399-424.

17. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Колупаева С.Н., Кобытева Г.В. Генерация точечных дефектов при взаимодействии скользящих дислокаций с межкристаллитными границами // Физ. мет. и металловед. 1991. № 12.- С. 24-29.