

УДК 539.37

**О.И. Данейко, Т.А Ковалевская, С.Н. Колупаева**

Томский государственный архитектурно-строительный университет (Томск)

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НАНОСТРУКТУРНЫХ ДИСПЕРСНО- УПРОЧНЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ГЦК МАТРИЦЕЙ**

### **Abstract**

Influence of scale characteristics of disperse particle on deformation hardening in materials with FCC matrix is investigated. The mathematical model including the differential equations of balance of different type dislocations is used. It is shown, that plastic shear in the dispersion-hardened materials can form by movement of single dislocations or by generation of the large amount of dislocations in a slip zone.

Пластическое поведение и эволюция дефектной подсистемы дисперсно-упрочненных материалов определяются многими факторами – характером внешнего воздействия, материалом матрицы, долей упрочняющей фазы, размерами и формой частиц, их распределением в материале, степенью когерентности частиц, исходным состоянием материала, температурой и скоростью деформации и т.д. Анализ дислокационных механизмов пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов приводит к выводу о возможности двухстадийного развития деформационной дефектной подсистемы [1]. Для гетерофазных материалов с недеформируемыми частицами существует критическая величина плотности дислокаций [1], определяемая масштабными характеристиками упрочняющей фазы, при превышении которой качественно изменяется характер дефектной структуры зоны сдвига. При плотности дислокаций ниже критической величины  $\rho_c \approx 60/(\Lambda_p^2 - \pi\delta^2/4)$  ( $\delta$  – диаметр частиц упрочняющей фазы,  $\Lambda_p$  – расстояние между частицами) дислокационная структура дисперсно-упрочненного материала включает сдвигообразующие дислокации и геометрически необходимые дислокации у частиц. При плотности дислокаций, превышающей критическую величину, начинается образование дислокаций в дипольных конфигурациях [1].

Для анализа влияния масштабных характеристик упрочняющей фазы и температуры деформирования на закономерности деформационного упрочнения и эволюции дефектной подсистемы монокристаллов дисперсно-упрочненных материалов с ГЦК матрицей и некогерентными недеформируемыми частицами упрочняющей фазы в условиях деформации с постоянной скоростью деформирования использована математическая модель пластической деформации скольжением [1–3]. Предполагается, что частицы упрочняющей фазы имеют сферическую форму и равномерно распределены в материале матрицы.

### **Математическая модель**

Математическая модель пластической деформации скольжением в дисперсно-упрочненных материалах с недеформируемыми частицами [1–3] включает уравнения баланса сдвигообразующих дислокаций (плотность которых обозначим  $\rho_m$ ), дислокаций в призматических петлях вакансионного ( $\rho_p^v$ ) и межузельного ( $\rho_p^i$ ) типа, дислокаций в дипольных конфигурациях вакансионного ( $\rho_d^v$ ) и межузельного ( $\rho_d^i$ ) типа:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\rho_m}{da} &= \frac{F}{Db} - c_1(\xi\rho)^{1/2} \frac{\rho_m}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{Gb} \min(n, n^*), \\
 \frac{d\rho_p^{(v)}}{da} &= \frac{\langle\chi\rangle\delta}{2\Lambda_p^2 b} - \frac{c_2}{\langle\chi\rangle b\delta} \frac{\rho_p^{(v)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{G} \min(n, n^*) - c_3(\xi\rho)^{1/2} \frac{\rho_p^{(v)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{Gb} \min(n, n^*), \\
 \frac{d\rho_p^{(i)}}{da} &= \frac{\langle\chi\rangle\delta}{2\Lambda_p^2 b} + \frac{c_2}{\langle\chi\rangle b\delta} \frac{\rho_p^{(i)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{G} \min(n, n^*) - c_1(\xi\rho)^{1/2} \frac{\rho_p^{(i)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{Gb} \min(n, n^*), \\
 \frac{d\rho_d^{(v)}}{da} &= \frac{1}{\Lambda_p b} + \frac{c_4}{\Lambda_p b} \frac{\rho_d^{(v)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{G} \min(n, n^*) - \\
 &\quad - \frac{32\sqrt{6}}{3b^2\Lambda_p^2 P_j \xi \rho} \frac{\rho_d^{(v)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{G} \min(n, n^*) - c_3(\xi\rho)^{1/2} \frac{\rho_d^{(v)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{Gb} \min(n, n^*), \\
 \frac{d\rho_d^{(i)}}{da} &= \frac{1}{\Lambda_p b} + \frac{32}{3\Lambda_p b} \frac{\rho_d^{(i)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{G} \min(n, n^*) - \\
 &\quad - \frac{c_4\sqrt{6}}{b^2\Lambda_p^2 P_j \xi \rho} \frac{\rho_d^{(i)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{G} \min(n, n^*) - c_1(\xi\rho)^{1/2} \frac{\rho_d^{(i)}}{\rho} \frac{\Delta\tau_{\text{dyn}}}{Gb} \min(n, n^*).
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь [1–5]  $a$  – деформация сдвига,  $\tau$  – приложенное напряжение,  $\rho$  – суммарная плотность дислокаций,  $\tau_{\text{dyn}}$  – напряжение, избыточное над статическим сопротивлением движению дислокаций,  $b$  – модуль вектора Бюргерса,  $\xi$  – множитель Смоллмэна,  $\nu_d$  – частота Дебая,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура деформации,  $\langle\chi\rangle$  – средняя величина параметра, характеризующего «геометрию» дислокаций на частицах, параметр  $F$  определяется формой дислокационных петель и их распределением в зоне сдвига,  $D$  – диаметр зоны сдвига,  $B$  – параметр, определяемый вероятностью образования дислокационных барьеров, ограничивающих зону сдвига,  $G$  – модуль сдвига матрицы,  $q$  – параметр, определяющий интенсивность генерации точечных дефектов,  $\omega_s$  – доля винтовых дислокаций,  $\beta_r$  – доля реагирующих дислокаций леса,  $\Lambda$  – длина свободного дислокационного сегмента,  $\alpha$  – параметр междислокационных взаимодействий,  $\alpha_r$  – параметр междислокационных взаимодействий с реагирующими дислокациями леса,  $\tau_a$  – атермическая составляющая сопротивления движению скользящей дислокации,  $\tau_f$  – напряжение трения, обусловленное стопорами недислокационной природы,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $n^*$  – эффективное число дислокаций в скоплении ( $1 \leq n^* \leq n$ ),  $n$  – число дислокаций, испущенных источником [1, 3]:

$$\begin{aligned}
 n &= \frac{1-\nu}{2-\nu} \pi D \left\{ \frac{\Delta\tau_{st}}{Gb} - \left[ (\Lambda_p - \delta) \left( \pi \frac{1-\nu}{2-\nu} \frac{\Lambda_p - \delta}{\delta} - 1 \right) \right]^{-1} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\pi}{12} \frac{2-\nu}{1-\nu} \frac{\delta^2}{\Lambda_p^3} \left[ 2 + \frac{\sqrt{3}G}{\tau + Gb/\delta} \left( \frac{1}{50} - \frac{\gamma}{Gb} \right) \right] \right\},
 \end{aligned} \tag{2}$$

где  $\gamma$  – энергия дефекта упаковки,  $\Delta\tau_{st}$  – избыточное напряжение старта источника.

В уравнениях баланса дислокаций учтена аннигиляция винтовых дислокаций поперечным скольжением, невинтовых – переползанием за счет осаждения на них точечных дефектов. Функции генерации и аннигиляции деформационных дефектов

получены на основе анализа механизмов формирования зоны кристаллографического сдвига в дисперсно-упрочненных материалах [1–4]. При записи явного вида уравнений учтено, что осаждение межузельных атомов на вакансионные петли приводит к сжатию петель и их аннигиляции, при осаждении на них би- и моновакансий призматические петли вакансионного типа разрастаются вплоть до их вовлечения в процессы генерации и аннигиляции по механизмам, свойственным сдвигообразующим дислокациям [1, 2]. При осаждении межузельных атомов призматические петли межузельного типа разрастаются, при осаждении би- и моновакансий – уменьшаются и в конечном итоге могут аннигилировать. Аналогичные механизмы рассмотрены и для дипольных дислокационных конфигураций. Коэффициенты  $c_1, c_2, c_3, c_4$  получены для трех температурных интервалов [1, 2]: 1) для интервала низких температур в предположении, что релаксационные процессы связаны с миграцией и осаждением на дислокациях межузельных атомов; 2) для умеренных температур – межузельных атомов и бивакансий; 3) для высоких температур – межузельных атомов, би- и моновакансий.

Заметим, что в докритической области плотности дислокаций ( $\rho < \rho_c$ ) система уравнений модели включает три уравнения – баланса сдвигообразующих дислокаций и призматических дислокационных петель межузельного и вакансионного типа, в закритической области ( $\rho > \rho_c$ ) – дополнительно уравнения баланса дислокаций в дипольных конфигурациях межузельного и вакансионного типа.

Основные расчеты проведены для значений параметров модели, характерных для дисперсно-упрочненного материала с медной матрицей [1–6]:  $\beta_r=0,14$ ,  $b=2,5 \cdot 10^{-10}$  м<sup>2</sup>,  $v_D=10^{13}$  с<sup>-1</sup>,  $\alpha = 0,5$ ,  $\alpha_r = 0,3$ ,  $\xi = 0,5$ ,  $\tau_f=10$  МПа,  $\alpha_{dyn} \approx 0,33$ ,  $F = 5$ ,  $\omega_s = 0,3$  и начальных условиях:  $\rho_m = 10^{12}$  м<sup>-2</sup>,  $\rho_p^v = \rho_p^i = \rho_d^v = \rho_d^i = 0$ . Размер частиц варьировался в пределах от 5 до 10 нм, расстояние между ними – от 20 до 40 нм.

### **Закономерности формирования зоны сдвига и эволюции дислокационной подсистемы в материалах с наноразмерной упрочняющей фазой**

Зона сдвига, рассматриваемая как базовый структурный элемент при построении модели пластической деформации механизмами кристаллографического скольжения, формируется, как правило, серией дислокаций, испущенных общим дислокационным источником. Образование зон сдвига является механизмом локализации деформации на микроуровне. Продуктивность дислокационного источника обусловлена, прежде всего, изменением конфигурации потенциального сегмента-источника и его дислокационного окружения, которое сопровождается снятием блокировки исходно неподвижного источника. Разблокировка источника может быть связана со следующими дислокационными механизмами: разрушение дипольной конфигурации после того, как одна из образующих ее дислокаций, являющаяся источником, осуществила эмиссию первой дислокационной петли; уменьшение линейной плотности порогов в результате их ухода на сток или аннигиляции на активном сегменте-источнике по сравнению с неподвижным; уход после старта сегмента-источника дислокаций некомпланарных систем, которые до активации источника образовывали с ним дислокационные соединения или зоны аннигиляции.

В дисперсно-упрочненных материалах существует дополнительный фактор, определяющий продуктивность дислокационного источника, – соотношение между масштабными характеристиками дислокационной структуры (длина источника, расстояние между дислокациями) и структуры упрочняющей фазы (размеры частиц и расстояние между ними), в зависимости от которого процессы формирования зоны сдвига могут заметно различаться [1, 3]. Выявлены интервалы плотностей дислокаций,

в которых зона кристаллографического сдвига формируется движением одиночных дислокаций ( $\rho_{Or} < \rho < \rho_s$ ) либо большим количеством дислокаций с существенной локализацией скольжения в зоне сдвига ( $\rho_0 < \rho < \rho_{Or}; \rho > \rho_s$ ). Здесь  $\rho_0$  – начальное значение плотности дислокаций,  $\rho_{Or}(\Lambda_p, \delta)$  – граничная плотность дислокаций между областями локализованного и элементарного скольжения,  $\rho_s = 1/(\beta_r \xi(\Lambda_p - \delta)^2)$  – граничная плотность дислокаций перехода от элементарного к локализованному скольжению.

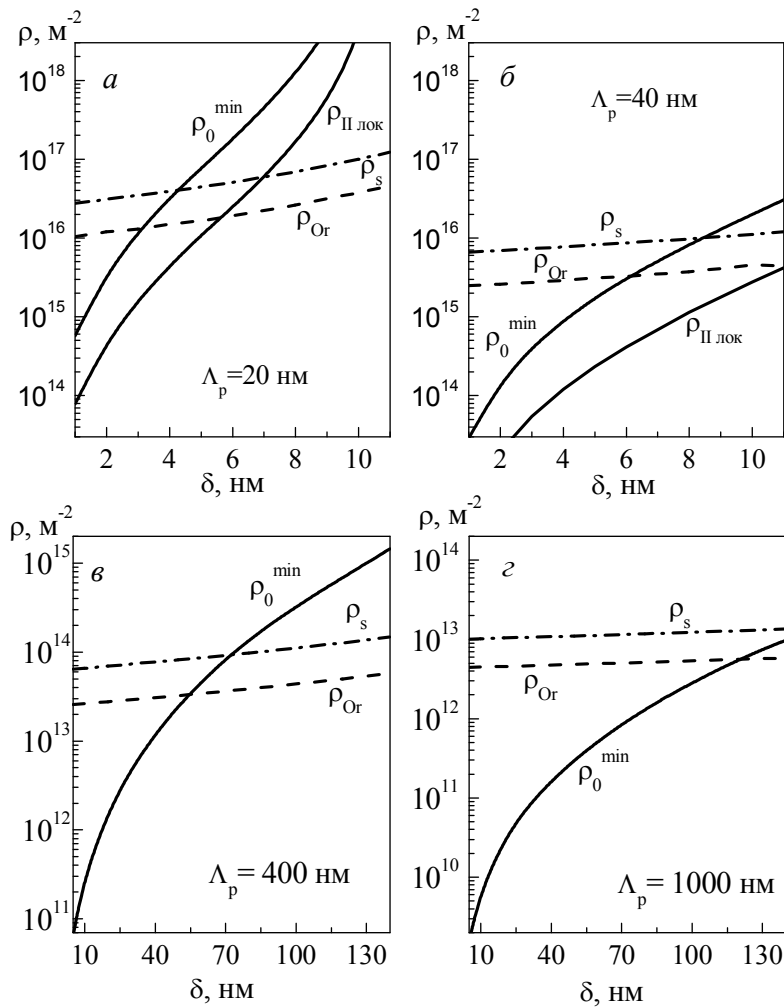


Рис. 1. Соотношение между переходными значениями плотности дислокаций  $\rho_0^{\min}$ ,  $\rho_{Or}$ ,  $\rho_s$  в дисперсно-упрочненном материале с медной матрицей при различных значениях масштабных характеристик упрочняющей фазы

Расчеты показали, что существует несколько сценариев развития элементарных процессов пластической деформации в дисперсно-упрочненных материалах: 1) локализация скольжения → элементарное скольжение → локализация скольжения; 2) локализованное скольжение → элементарное скольжение; 3) элементарное скольжение → локализованное скольжение; 4) элементарное скольжение → локализация скольжения → элементарное скольжение → локализация скольжения; 5) деформация протекает полностью в условиях элементарного скольжения и

б) наблюдается только локализованное скольжение. Чередование стадий пластической деформации зависит от соотношения масштабных характеристик упрочняющей фазы и начальной плотности дислокаций (рис. 1). В нанодисперсных материалах процесс локализации скольжения в зоне сдвига при высоких и средних температурах в основном подавлен, деформация осуществляется элементарным скольжением (рис. 1, а, б).

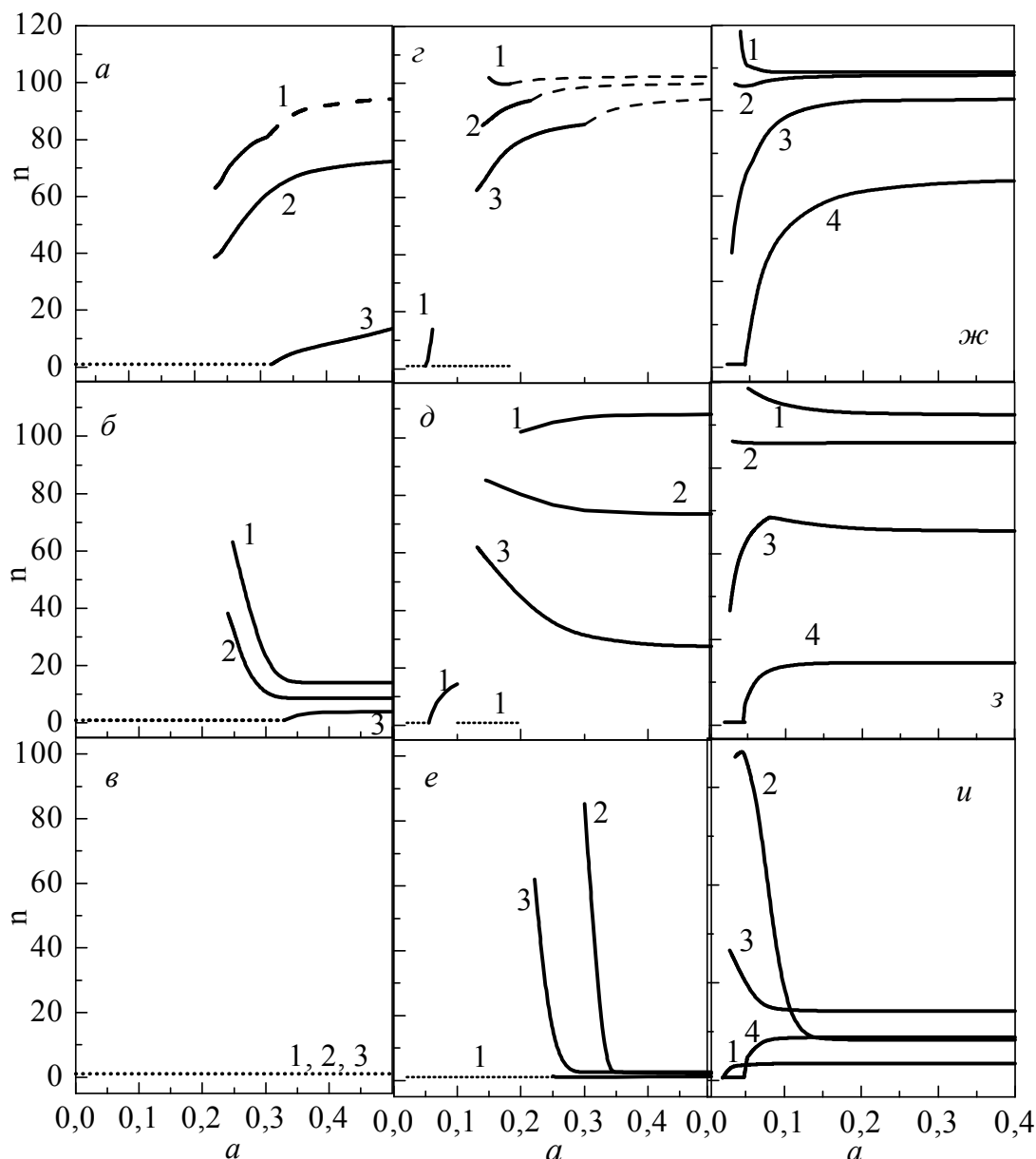


Рис. 2. Зависимость величины локализации (числа дислокаций) в зоне сдвига от степени деформации при низких (а, з, ж), средних (б, д, з) и высоких (в, е, и) температурах. Расстояние между упрочняющими частицами  $\Lambda_p$  (нм): (а-в) – 20, (з-е) – 40, (ж-и) – 400; диаметр частиц  $\delta$  (нм): (а-в) – 1-5; 2-6; 3-7,5; (з-е) – 1-5; 2-7,5; 3-10; (ж-и) – 1-20; 2-50; 3-100; 4-150

Протяженность интервалов локализованного и элементарного скольжения существенно зависит от размера упрочняющих частиц, расстояния между ними и температуры деформации. При возрастании размера частиц  $\delta$  наблюдается

уменьшение протяженности  $l$  интервала локализованного скольжения вплоть до его полного исчезновения. Протяженность стадии элементарного скольжения изменяется немонотонно при увеличении размера частиц: сначала несколько уменьшается, затем увеличивается, вплоть до полного вытеснения стадии локализации.

При увеличении размеров частиц, уменьшении расстояния между ними и повышении температуры снижается величина локализации скольжения (число дислокаций в зоне сдвига) с деформацией (рис. 2). Наблюдается различный характер зависимости  $n(a)$ : при умеренных и низких температурах и малых размерах частиц значения  $n(a)$  монотонно уменьшаются, в материалах с более крупными частицами значения  $n(a)$  монотонно увеличиваются, выходя на некоторый стационар (рис. 2, а–г). В материалах с нанодисперсной упрочняющей фазой число дислокаций в зоне сдвига значительно меньше, чем в материалах с более крупными частицами, расположенными на больших расстояниях, это особенно выражено при средних и высоких температурах деформации. Вид кривых  $n(a)$  соответствует экспериментальным данным о поведении величины сдвига в следе скольжения для дисперсно-упрочнённых сплавов [7].

Кривые деформационного упрочнения на стадиях локализованного и элементарного скольжения имеют различное поведение, которое зависит также от температуры деформации (рис. 3, 4). При низких температурах (в отличие от деформации при средних и высоких температурах) на стадии элементарного скольжения коэффициент деформационного упрочнения ниже, чем на стадии локализованного скольжения. При средних и высоких температурах можно наблюдать деформационное разупрочнение материала на стадии локализованной деформации (см. рис. 3, 4).

Кривые деформационного упрочнения  $\tau = \tau(a)$  при низких и средних температурах деформирования имеют двухстадийный характер (см. рис. 3, а), обусловленный достижением в процессе деформации критической плотности дислокаций  $\rho_c$  и вследствие этого возможностью генерации дислокаций в дипольных конфигурациях и увеличением общей плотности дислокаций. Протяженность докритической области плотности дислокаций растет при увеличении температуры деформации. При высоких температурах критическая плотность дислокаций в материале не достигается, деформация протекает полностью в докритической области ( $\rho < \rho_c$ ). При повышении температуры происходит уменьшение сопротивления деформированию (см. рис. 3, 4), причем наблюдаются области сильной и слабой температурной зависимости.

В материале с мелкими упрочняющими частицами критическая плотность дислокаций, после которой начинается образование дислокаций в дипольных конфигурациях, достигается при более высоких степенях деформации, то есть измельчение частиц приводит к увеличению протяженности докритической области деформации.

При увеличении расстояния между упрочняющими частицами  $\Lambda_p$  критическая плотность дислокаций в материале достигается при меньшей степени деформации (рис. 2, ж, з, и) и, следовательно, дислокационные диполи в таких сплавах формируются на более ранних стадиях деформации, что ведет к дополнительному упрочнению материала. При больших расстояниях между частицами деформация начинается сразу в закритической области (рис. 2, ж, з, и, кривая 3), так как величина критической плотности дислокаций ниже начальной плотности дислокаций.

Напряжение течения дисперсно-упрочнённого сплава в докритической области плотности дислокаций в основном увеличивается при увеличении размера упрочняющих частиц и при уменьшении расстояния между ними при всех

температурах деформирования. В закритической области нет такой однозначной зависимости. Критическая плотность дислокаций существенно зависит от масштабных характеристик упрочняющей фазы, то есть для материалов с разными масштабными характеристиками упрочняющей фазы закритическая область достигается при различных степенях деформации. В связи с этим может сложиться ситуация, когда в материале с меньшей объемной долей частиц напряжение течения будет более высоким, чем в сплаве с большей объемной долей. Экспериментально такой эффект наблюдался Хиршем и Хэмпфри [8].

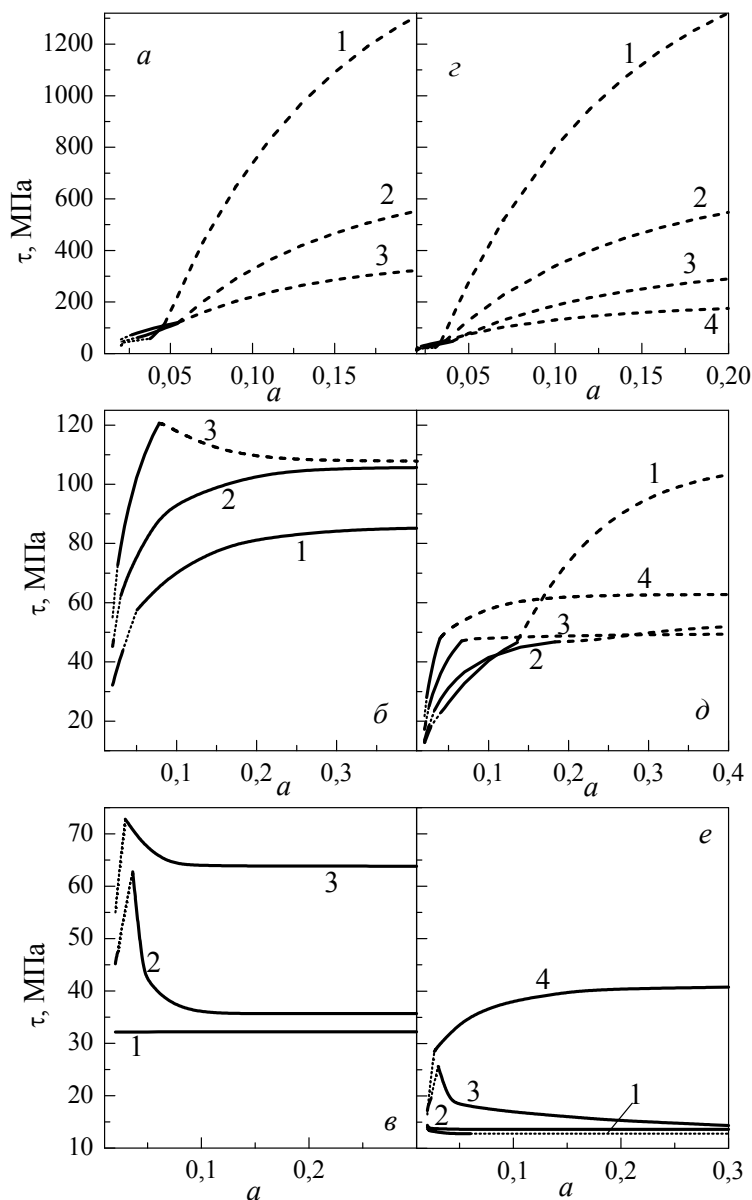


Рис. 3. Кривые деформационного упрочнения дисперсно-упрочненного материала с медной матрицей. Диаметр частиц (нм): 1 – 20, 2 – 50, 3 – 100, 4 – 200, расстояние между ними (нм): (а–в) – 400, (з–е) – 1000. Низкие (а, з), средние (б, д) и высокие (в, е) температуры деформации

### **Основные результаты и выводы**

Показано, что в материалах с нанодисперсной упрочняющей фазой процесс локализации скольжения в зоне сдвига при высоких и средних температурах подавлен, деформация осуществляется в основном элементарным скольжением.

С увеличением диаметра частиц или уменьшением расстояния между ними напряжение течения возрастает и происходит более интенсивное накопление деформационных дефектов.

В дисперсно-упрочненных материалах с нанодисперсной упрочняющей фазой напряжение течения и плотность дислокаций значительно выше, чем в материалах с более крупными частицами (50–150 нм) при одинаковой объемной доле упрочняющей фазы.



### Библиографический список

1. Ковалевская Т.А. Математическое моделирование пластической деформации гетерофазных сплавов / Т.А. Ковалевская, И.В. Виноградова, Л.Е. Попов. – Томск: Изд-во Томск. Ун-та, 1992. – 168 с.

2. Колупаева С.Н. Качественное исследование эволюции дефектной подсистемы гетерофазных сплавов с некогерентной упрочняющей фазой при интенсивных воздействиях / С.Н. Колупаева, Е.В. Ерыгина, Т.А. Ковалевская, Л.Е. Попов. // Физ. Механика. – 2000. – Т. 3. – Вып. 2. – С. 63–79.

3. Ковалевская Т.А. Математическая модель кинетики деформационного упрочнения монокристаллов гетерофазных сплавов / Т.А. Ковалевская, О.И. Данейко, С.Н. Колупаева, В.А. Старенченко/ Известия Академии наук. Серия физическая. – 2003.

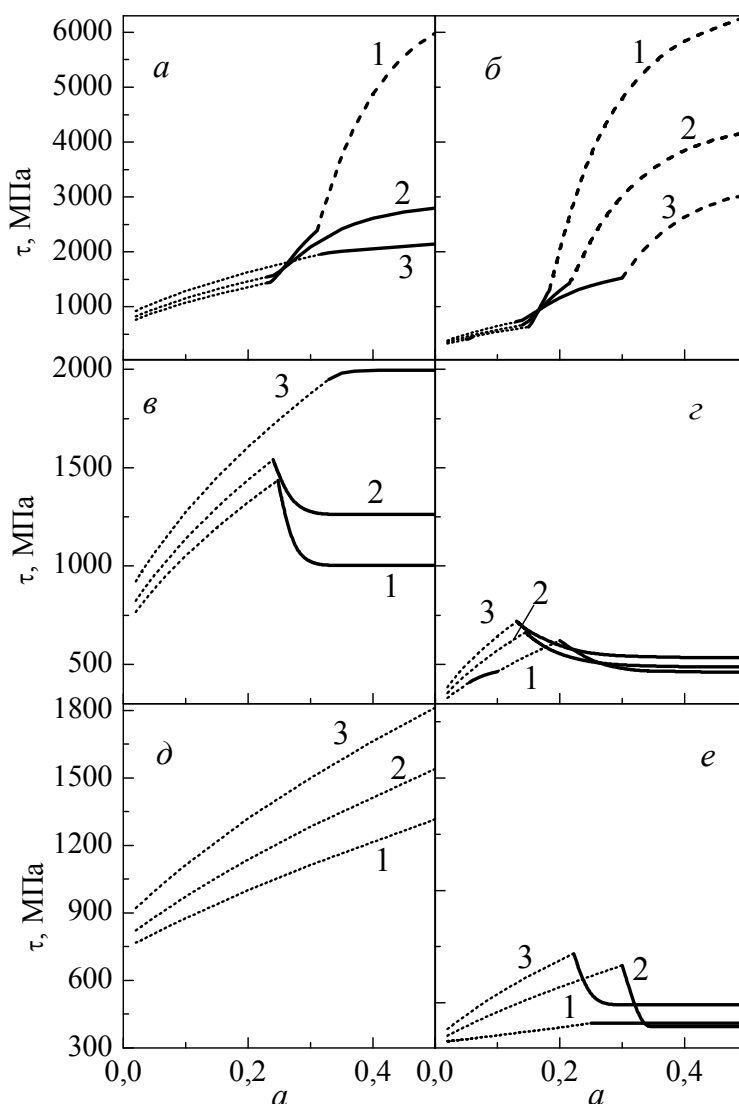


Рис. 4. Кривые деформационного упрочнения.  
Диаметр частиц (нм): а, в, д, кривая 1 – 5, кривая 2 – 6, кривая 3 – 7,5; б, г, е, кривая 1 – 5, кривая 2 – 7,5, кривая 3 – 10. Расстояние между частицами (нм): а, в, д – 20, б, г, е – 40. Низкие (а, б), средние (в, г) и высокие (д, е) температуры деформации

– Т. 67. – №6 – С. 892–896.

4. Попов Л.Е. Пластическая деформация сплавов/ Л.Е. Попов, В.С. Кобытев, Т.А. Ковалевская.– М.: Металлургия, 1984. – 182 с.

5. Колупаева С.Н. Неустойчивости пластической деформации кристаллов / С.Н. Колупаева, В.А. Старенченко, Л.Е. Попов. – Томск: Изд-во Томск. Ун-та, 1994. – 301с.

6. Лариков Л.Н. Тепловые свойства металлов и сплавов. / Л.Н. Лариков, Ю.Ф. Юрченко. – Киев: Наукова думка, 1985. – 438 с.

7. Ковалевская Т.А. Деформационный рельеф и пластическая деформация высокопрочного сплава Al-Zn-Mg / Т.А. Ковалевская, Н.А. Григорьева, А.А. Арцруни // Пластическая деформация сплавов. – Томск: Изд-во – Томск. ун-та, 1986. – С. 194–202.

8. Хирш П.Б. Пластическая деформация двухфазных сплавов, содержащих малые недеформируемые частицы / П.Б. Хирш, Ф. Дж. Хампфри.// Физика прочности и пластичности. – М.: Металлургия, 1972. – С. 158–186.

Получено 10.08.2008