

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗЕРНОГРАНИЧНОГО ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЯ ПРИ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ

Т.В. Останина, П.В. Трусов (Пермь)

Abstract

A model of grain boundary shifts propagation during superplasticity in polycrystal is suggested. Superplasticity is considered as a process of deformation of material with amorphous grain boundaries and low resistance to grain boundary creep. In-grain dislocation sliding and diffusional flow is observed as accommodation mechanisms. The propagation of local shifts along the boundaries is identified to the movement of the chain of elements along rough surface. The numeric experiment result allow assume, that polycrystal deformations are waves.

В связи с разработкой новых технологических процессов обработки материалов в настоящее время возрастает интерес к явлению сверхпластичности.

Особенности проявления эффекта сверхпластичности - сохранение равноосности зерен, образование пористости и др., - свидетельствуют о необходимости детального исследования структурных изменений в материале и делают актуальной задачу построения микро- и мезомеханических моделей данного явления.

Механизмы сверхпластической деформации обсуждаются во многих работах. Часто сверхпластичность рассматривается как явление, обусловленное особым сочетанием процессов зернограничного проскальзывания, внутризеренного дислокационного скольжения и диффузионной ползучести [1-5]. В работах [6,7] демонстрируется существенное влияние порообразования на ход сверхпластической деформации. Авторы работ [8-12] рассматривают сверхпластичность как процесс деформации материала, границы зерен которого находятся в особом аморфном состоянии с низким сопротивлением зернограничному проскальзыванию. Большинство авторов работ, в которых с различных позиций исследуются механизмы сверхпластичности, отмечают такую особенность сверхпластической деформации, как легкое (по сравнению с обычной пластической деформацией) осуществление проскальзывания зерен по границам. Описанию одного из подходов к моделированию распространения зернограничных сдвигов в поликристаллическом агрегате посвящена настоящая работа.

Рассмотрим поликристалл, деформирующийся в условиях сверхпластичности. Будем следовать физической модели сверхпластического течения [9,10], согласно которой границы поликристалла в определенных температурно-скоростных условиях деформирования находятся в высокоактивированном, "аморфном" состоянии. Под "аморфизацией" понимается перестройка атомной структуры границы при ее взаимодействии с решеточными дислокациями, ответственными за объемную деформацию зерна. Решеточные дислокации либо полностью поглощаются границей, либо, при благоприятной разориентировке зерен, проходят через границу; при этом в границе остается дислокация ориентационного несоответствия (ДОН), вектор

Бюргерса которой равен разности $\Delta \vec{b} = \vec{b}_1 - \vec{b}_2$ векторов вошедшей в границу из зерна 1 дислокации и вышедшей из границы в зерно 2 (рис. 1).

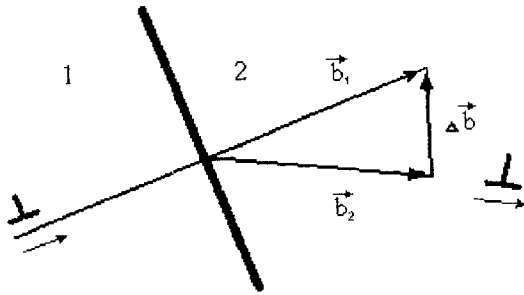


Рис. 1. Схема, поясняющая образование ДОН

Частным случаем ДОН являются решеточные дислокации, полностью захваченные границей. ДОН образуются не только при пересечениях, но и при других реакциях решеточных дислокаций с границами. Например, если с двух сторон к границе подойдут дислокации из соседних зерен, то при их захвате границей и последующем переползании вплоть до объединения не происходит их полной аннигиляции, и в границе остается ДОН. Появление зернограничных дефектов приводит, очевидно, к повышению энергии границы. Когда плотность дефектов увеличивается настолько, что происходит перекрывание ядер ДОН, структура границы теряет устойчивость и скачком релаксирует к равновесной конфигурации. (Равновесной назовем границу, разделяющую свободные от напряжений кристаллы).

Так как пластическая деформация поликристалла не является однородной на микроуровне, то можно предположить, что лишь некоторые участки границ в соответствующих условиях переходят в высокоактивированное состояние. По всему объему материала деформация осуществляется параллельно действующими диффузионной ползучестью и дислокационным скольжением. Эти два механизма пластического течения создают необходимый "фон" для включения в работу механизма зернограничного проскальзывания.

Если часть границ поликристалла находится в аморфном состоянии, то под воздействием внешнего поля напряжений зерна могут проскальзывать по аморфным границам. Заметим, что в соответствии с физической теорией сверхпластического течения [10] пластический сдвиг по границе в поле внешних напряжений развивается неоднородно в силу различия коэффициентов зернограничной диффузии, а следовательно, и вязкости на жидкоподобных и невозбужденных участках. Так как жидкоподобное состояние возникает каждый раз на новых участках границы, то в результате зерна скользят как целые по аморфным границам. Локальные зернограничные сдвиги тормозятся в тройных стыках, изломах и ступеньках границы. Проанализируем процесс распространения зернограничных сдвигов в поликристалле, находящемся в поле сдвиговых напряжений. Пусть в некоторый момент времени произошел сдвиг по границе АВ (рис. 2).

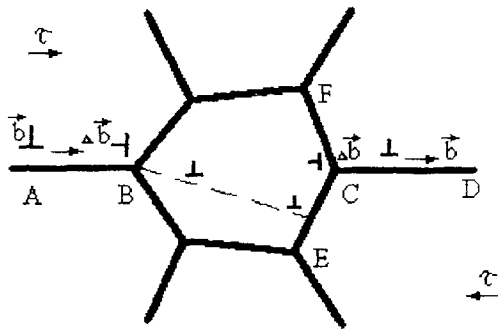


Рис.2. Схема процесса зернограничного сдвига

В тройном стыке В сдвиг остановится, т.к. его продолжение требует напряжений, больших, чем приложенные; новый сдвиг может возникнуть на другом участке границы с благоприятной для его реализации ситуацией. Механизм образования нового сдвига можно представить следующим образом. Благодаря концентрации напряжений в голове скопления зернограничных дислокаций в стыке В легко происходит зарождение краевых решеточных дислокаций и их движение через зерно. Последнее означает релаксацию пластической несовместности в стыке В. На противоположной границе, “встречающей” дислокации, например СЕ, происходит полное или частичное поглощение решеточных дислокаций границей с образованием подвижных зернограничных дислокаций. Движение последних в поле внешних напряжений приводит к сдвигу по границе СЕ, и, как следствие, образованию пластической несовместности в стыке С. Если граница CD не является в данный момент “аморфной”, то аккомодация несовместности в стыке С происходит дислокационным путем. В случае аморфизации границы CD возможен зернограничный сдвиг в направлении действующей внешней силы, либо, если это направление не лежит в плоскости границы, сдвиг, сопровождающийся дислокационной аккомодацией. Данные процессы являются циклическими: после релаксации напряжений в стыке В вновь возможен зернограничный сдвиг по границе АВ и новое накопление ДОН.

Выясним связь между локальным зернограничным сдвигом и объемной деформацией прилегающих зерен. Пусть γ_i - пластический сдвиг по i -й системе скольжения внутри зерна, V_i - скорость скольжения, ρ_i - плотность дислокаций, участвующих в скольжении по данной системе. Уравнение Орована для i -й системы скольжения имеет вид

$$\dot{\gamma}_i = \rho_i b V_i. \quad (1)$$

Очевидно, что величина ρ_i зависит от интенсивности источников решеточных дислокаций. Сверхпластичность наблюдается, как правило, в мелкозернистых материалах, поэтому логично предположить отсутствие источников дислокаций внутри зерен. Если же дислокации решетки зарождаются только на границах, то величина ρ_i должна зависеть от формы зерна и от времени, за которое на границе накапливается сдвиг, равный вектору Бюргера решеточной дислокации:

$$b = \xi_i \dot{\gamma}_i t_u, \quad (2)$$

где \dot{U} - скорость прохождения сдвига, то есть взаимного смещения зерен друг относительно друга в плоскости общей границы в определенном направлении;

ξ_i - геометрический фактор, определяющий взаимную ориентацию границы и рассматриваемой системы скольжения внутри зерна;

t_u - время "накопления" сдвига.

Чем меньше величина t_u , тем быстрее происходит процесс эмиссии решеточных дислокаций в тело зерна. Чем быстрее скользят дислокации через зерно, тем меньше их мгновенная плотность на внутризеренных системах скольжения. Из последних соображений следует, что выражение для ρ_i можно записать в виде

$$\rho_i = \frac{c}{t_u \dot{V}_i}, \quad (3)$$

где константа c имеет размерность $[L]^{-1}$ и определяется формой зерна.

Из уравнений (1)-(3) имеем

$$\dot{\gamma}_i = c \xi_i \dot{U}. \quad (4)$$

Уравнение (4) представляет собой качественную зависимость между скоростями сдвигов внутри зерна и его сдвига по границе с другими зернами.

В то же время сдвиг по границе означает образование скопления ДОН в "дефекте" границы, поэтому необходимо проанализировать кинетику изменения плотности ДОН в границе.

Уравнение баланса для плотности ДОН запишем в виде

$$\dot{\rho}_{\text{ДОН}} = \dot{\rho}_a - \dot{\rho}_d, \quad (5)$$

где $\dot{\rho}_a$ и $\dot{\rho}_d$ - соответственно скорости образования и ухода ДОН.

Время ухода ДОН значительно превышает время их образования, поэтому можно считать, что в ходе зернограничного сдвига справедливо соотношение

$$\dot{\rho}_{\text{ДОН}} = \dot{\rho}_a. \quad (6)$$

Ранее упоминалось о неоднородности распределения сдвига вдоль границы. Внутренние напряжения, вызванные такой неоднородностью, довольно велики, и могут активировать пластические сдвиги в объеме зерна путем испускания решеточных дислокаций с краев жидкоподобных участков [10]. Испускание дислокаций в зерно неизбежно приводит к появлению в границе новых ДОН. Таким образом, поглощение решеточных дислокаций с образованием ДОН и зернограничный сдвиг вызывают появление все новых ДОН. В связи с последним можно предположить, что скорость увеличения плотности ДОН пропорциональна их плотности в данный момент времени:

$$\frac{d\rho_{\text{ДОН}}}{dt} = \frac{\rho_{\text{ДОН}}}{t_a}. \quad (7)$$

Время образования ДОН свяжем со скоростью пластических сдвигов в областях, прилегающих к границе [12],

$$t_a^{-1} = \sum_i \dot{\gamma}_i \phi_i, \quad (8)$$

где ϕ_i характеризует взаимную ориентацию границы и i -й системы скольжения области, прилегающей к границе.

Из уравнений (6) - (8) имеем

$$\dot{\rho}_{\text{ДОН}} = \rho_{\text{ДОН}} \sum_i \dot{\gamma}_i \phi_i. \quad (9)$$

Зернограничный сдвиг продолжается до тех пор, пока локальные напряжения в тройном стыке не уравновесят приложенные. Торможение сдвига по границе на препятствии означает насыщение границы ДОН. Если из объема зерен продолжают поступать решеточные дислокации, то они не поглощаются границей. Последнее возможно при скоростях деформации, превышающих оптимальные для сверхпластичности значения, и означает выход материала из сверхпластического состояния. Анализ данной ситуации выходит за рамки настоящей статьи, поэтому в дальнейшем предполагается, что после торможения сдвига по границе на препятствии процесс образования ДОН прекращается, тогда из уравнения (5) имеем

$$\dot{\rho}_{\text{ДОН}} = \dot{\rho}_d \quad (10)$$

Уход ДОН обусловлен концентрацией напряжений в тройном стыке. Так как локальные напряжения в голове скопления ДОН зависят от текущей плотности ДОН в

границе, то можно предположить, что $\dot{\rho}_d = -\frac{\rho_{\text{ДОН}}}{t_d}$, или

$$\rho_{\text{ДОН}} = A_1 e^{-\frac{t}{t_d}}, \quad (11)$$

где t_d составляет примерно 10 с при деформации образца со скоростью 10^3 с^{-1} [12].

Таким образом, плотность ДОН сначала увеличивается в ходе зернограничного сдвига, затем постепенно уменьшается за счет испускания решеточных дислокаций в тело зерна и образования зернограничных дислокаций на другой границе.

Подобные переходы зернограничных сдвигов могут непрерывно повторяться. В этом случае деформация механизмом зернограничного проскальзывания может быть представлена как совокупность дискретных сдвигов по границам и как движение пластических несовместностей, которые возникают и исчезают в различных областях границы.

Изложенные соображения позволяют предложить следующую модель распространения зернограничных сдвигов в поликристалле (для простоты анализа ограничимся случаем одномерного (в макро-смысле) напряженного состояния).

Отождествим процесс распространения локальных сдвигов по границам с движением цепочки элементов по шероховатой поверхности под действием сдвигающей силы, приложенной к первому элементу. Элементы соединены пружинками, как показано на рис.3.

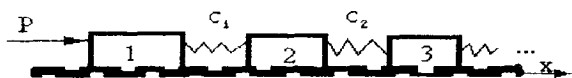


Рис.3. Расчетная схема

Движение одного элемента цепочки соответствует локальному сдвигу по границе между зёрнами и происходит следующим образом. Первый элемент перемещается под воздействием силы P и сжимает пружину c_1 . На второй и последующий элементы действуют силы упругости ближайших пружин. В разрабатываемой модели сжатая пружинка описывает действие поля внешних напряжений, действующего на весь

объем. Движение происходит по шероховатой поверхности, и логично предположить, что коэффициент трения в модели коррелирует с плотностью ДОН в реальной границе. Из уравнений (4) и (9) следует соотношение, характеризующее изменение коэффициента трения f при смещении n -го элемента цепочки на величину x_n :

$$\dot{f} = c_2 f \dot{x}_n, \tag{12}$$

$$f = c_3 e^{c_2 x_n}. \tag{13}$$

Так как коэффициент трения f увеличивается при смещении x_n , то в некоторый момент времени элемент останавливается, под воздействием сжатой пружины начинает скользить второй элемент, тоже до определенного предела, затем третий и т.д. В результате все элементы цепочки сместятся в направлении оси x . Так как возникшая в стыке границ несовместность постепенно релаксирует (это видно из уравнения (10)), то в разрабатываемой модели необходимо учесть релаксацию силы трения, действующей на остановившийся элемент:

$$f = c_4 e^{-\frac{t}{t_d}}. \tag{14}$$

При достаточном уменьшении силы трения остановившийся ранее элемент начинает двигаться снова от действия внешней силы P , и по цепочке вновь проходит волна смещений.

Запишем уравнения движения рассматриваемой цепочки элементов в предположении, что жесткости пружинок равны:

$$m_{(n)} \ddot{x}_{(n)} = c_1 (x_{(n)} - x_{(n-1)}) - c_1 (x_{(n+1)} - x_{(n)}) - F_{(n)TP}, \quad n = \overline{1, N}, \tag{15}$$

$$\text{где } F_{(n)TP} = m_{(n)} f^{(n)}, \quad f^{(n)} = \begin{cases} c_3 e^{c_2 x_n}, & \dot{x}_{(n)} \neq 0, \\ e^{-\frac{t}{t_d}}, & \dot{x}_{(n)} = 0. \end{cases}$$

В уравнениях (15) масса элемента определяется размером зерна и в дальнейшем полагается одинаковой для всех элементов.

Заметим, что в выражение для f входит "локальное" время t , отсчитывающееся с момента последней остановки элемента.

Центрально-разностная аппроксимация системы дифференциальных уравнений(15) (неявная схема) имеет вид:

$$\frac{m}{\Delta T^2} (x^{(j-1)}_{(n)} - 2x^{(j)}_{(n)} + x^{(j+1)}_{(n)}) = c_1 (-x^{(j+1)}_{(n-1)} + 2x^{(j+1)}_{(n)} - x^{(j+1)}_{(n+1)}) - F_{(n)}, \tag{16}$$

$$n = \overline{2, N-1}.$$

Начальные условия:

$$x_{(n)}(T_0) = 0, \dot{x}_n(T_0) = 0, n = \overline{1, N}. \tag{17}$$

Граничные условия:

$$x^{(j+1)}_1 = 2x^{(j)}_1 - x^{(j-1)}_1 + \frac{\Delta T^2}{m} P - \frac{\Delta T^2}{m} \begin{cases} c_3 \exp(c_2 x^{(j)}_1), \\ c_4 \exp(-c_5 t), \end{cases} \tag{18}$$

$$x^{(j+1)}_N = 2x^{(j)}_N - x^{(j-1)}_N + c_1(x^{(j+1)}_N - x^{(j+1)}_{N-1}) - \frac{\Delta T^2}{m} \begin{cases} c_3 \exp(c_2 x^{(j)}_1), \\ c_4 \exp(-c_5 t), \end{cases}$$

где t - "локальное" время.

Выбранная схема является безусловно устойчивой по начальным данным, правой части и граничным условиям [13].

Результаты численного эксперимента по модели (16)-(18) для цепочки из 100 элементов представлены на рис.4.

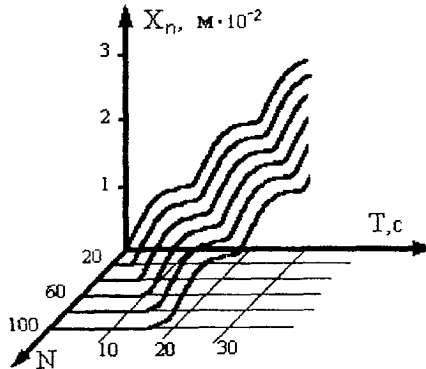


Рис.4. Перемещения элементов модели

Можно видеть, что смещения элементов цепочки, а следовательно, и зернограничные сдвиги происходят волнообразно. Интересно, что амплитуда смещений практически не изменяется от первых элементов к последним, из чего можно сделать вывод о том, что процесс распространения зернограничных сдвигов в поликристалле происходит без рассеяния энергии, то есть солитоноподобным образом. Последнее, однако, требует дополнительного анализа взаимодействия двух и нескольких волн смещений.

Библиографический список

1. Грабский М.В. Структурная сверхпластичность металлов.-М.: Металлургия, 1975.-270 с.
2. Кайбышев О.А. Сверхпластичность сплавов.-М.: Металлургия, 1984.-263 с.
3. Грешнов В.М., Иванов М.А. Полуфеноменологическая модель сверхпластичности на основе учета дислокационных превращений // Металлофизика. -1993.-15, N7.- С.3-12.
4. Murall K., Chandra N. Micromechanical modeling of superplastic deformation //Acta metall. mater. - 1995.-V.43, N5. P.1783-1790.
5. Enikeev F.U.,Kruglov A.A. An analysis of the superplastic forming of a thin circular diaphragm //Int. J Mech.Sci.-1995.-V.37, N5.P.473-483.
6. Наймарк О.Б. О порообразовании, уравнениях состояния и устойчивости сверхпластического деформирования материалов //ЖПМТФ.-1985. -N4. С.144-150.
7. Наймарк О.Б., Ладыгин О.В. Неравновесные кинетические переходы в твердых телах как механизмы локализации пластической деформации//ЖПМТФ.-1993. -N3. С.57-61.

8. Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В., Чувильдеев В.Н. Локальная миграция границ и аккомодация межзеренного проскальзывания в условиях структурной сверхпластичности. //Поверхность. Физика, Химия, Механика.-1985. -N4. С.139-145.
9. Ларин С.А., Перевезенцев В.Н., Чувильдеев В.Н. Механизмы деформации и реология сверхпластического течения в широком интервале скоростей деформации.-Ч.1.Описание модели. //ФММ.-1992. -N6. С.55-61.
10. Ларин С.А., Перевезенцев В.Н., Чувильдеев В.Н. Механизмы деформации и реология сверхпластического течения в широком интервале скоростей деформации.-Ч.2.Реология СП течения //ФММ.-1992. -N6. С.62-69.
11. Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В., Чувильдеев В.Н. Накопление дефектов на границах зерен и предельные характеристики структурной сверхпластичности// Поверхность. Физика, Химия, Механика.-1983. -N10. С.108-115.
12. Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В., Орлов А.Н. Структурные превращения на границах зерен и механизмы деформации на различных стадиях пластического течения// Поверхность. Физика, Химия, Механика.-1985. -N4. С.139-145.
13. Калиткин Н.Н. Численные методы.-М.:Наука,1978.-512 с.