

УДК 539.374

И.Ю. Зубко

Пермский государственный технический университет

## МОДЕЛЬ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ ДЛЯ МОНОКРИСТАЛЛА С ДИСЛОКАЦИЯМИ ТРЕХ СИСТЕМ СКОЛЬЖЕНИЯ

### Abstract

*A plane model based on cellular automata technique is suggested for simulation of dislocation structures formation under nonproportional cyclic loading with prescribed stiffness. Dislocations of three equispaced slip systems are considered. Effects of additional hardening, of jerky flow in pure metals and corresponding dislocation structures formation are showed to be obtaining with the model.*

Явление пластического течения металлов изучается экспериментаторами уже около 140 лет и многие эффекты пластичности, имеющие важное прикладное значение, удовлетворительно описываются построенными классическими и новыми макрофеноменологическими уравнениями состояния. Однако запросы современных технологий обработки металлов деформированием ушли довольно далеко от возможностей этих моделей. Перспективные модели должны описывать эволюцию пластических свойств образца в связи с развитием в нем микроструктуры. Природой пластического течения кристаллов при обычных температурах является движение образующихся в них при деформировании в огромном количестве дефектов кристаллического строения – дислокаций. Учет этих дислокаций в одночастичном приближении в моделях пластичности объяснил многие особенности пластического течения. Эти теории применимы при малых деформациях, когда дислокаций в кристалле не так много, чтобы учитывать их многочастичное взаимодействие. Достаточно тонкие наблюдения фиксируют временную нестабильность (проявляющуюся на макроскопической диаграмме деформирования образца в виде участков локальных падений напряжений) и пространственную локализацию пластического течения, отражающие возникновение режимов самоорганизации дислокаций, приводящих к структурным переходам. Для описания этих процессов нужна модель, трактующая пластичность и описывающая разнообразные эффекты пластичности как результат коллективных явлений в ансамблях дислокаций. Такая модель кристалла могла бы естественным образом учесть хорошо известные структурные факторы: строение решетки, зависимость порога решеточного трения при движении дислокации от температуры, различие порогов трения для краевых и винтовых дислокаций, энергию дефекта упаковки, дислокационные реакции. Это позволило бы, в частности, проверить гипотезу о природе эффекта дополнительного упрочнения при непропорциональном циклическом нагружении, основанную на роли сильных дислокационных реакций (барьеров Ломера – Коттрелла) в кристаллах с низкой энергией дефекта упаковки при геометрически необходимом в ходе непропорционального нагружения взаимодействии определенных систем скольжения [1]. Модель должна описывать развитие дислокационной микроструктуры в зависимости от сложности и жесткости нагружения, позволять учитывать структурные факторы, проверять гипотезы о механизмах, приводящих к нестабильности деформируемого материала, появлению дополнительного упрочнения в зависимости от сложности нагружения и другим эффектам пластичности. Предлагаемая численная модель строится для плоского кристалла с одной и тремя системами скольжения на основе техники клеточных автоматов [2].

**Модель клеточных автоматов для одной системы скольжения.** Плоская модель, описывающая самоорганизацию дислокаций, построена для прямолинейных нерасщепленных краевых дислокаций одной системы скольжения, ортогональных плоскости моделирования и бесконечно протяженных в третьем направлении. На плоскости моделирования дислокации представлены своими следами. Область моделирования – ячейка, разбивается на большое количество одинаковых клеток (сторона ячейки содержит несколько сотен клеток). Время идет дискретными шагами. Клетка может быть занята одной дислокацией любого знака, источником дислокаций Франка–Рида или оставаться пустой. Перемещение произвольной дислокации в соседнюю клетку и реакции близкого действия – аннигиляция пары дислокаций разных знаков из соседних клеток, выход пары дислокаций из источника – описываются единым набором локальных правил и происходят на каждом шаге одновременно для всех клеток автомата (параллельно). Учитывается дальнедействующее силовое взаимодействие всех рассматриваемых дислокаций. Рассматриваются как скольжение дислокаций в собственных плоскостях залегания, так и атермическое, происходящее лишь силовым способом, переползание дислокаций в ортогональном направлении, поэтому форма клетки принимается прямоугольной. Принимаются периодические граничные условия для взаимодействия и движения дислокаций, в силу последних отдельная дислокация в результате прямолинейного движения через определенное количество шагов возвращается в исходное положение. При расчете взаимодействия дислокаций с периодическими граничными условиями учитывается несколько копий рассматриваемой ячейки – текущая ячейка представляется окруженной несколькими слоями ее образов.

Дислокации разных систем взаимодействуют дальнедействующими полями согласно решению, полученному для линейной изотропной упругой среды [3]:

$$F_{\tau} = \pm \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad F_n = \mp \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (1)$$

где  $F_{\tau}$  – отнесенная к единице длины дислокации сила, вызывающая скольжение, а  $F_n$  – переползание дислокации с координатами  $\{x, y\}$  за счет взаимодействия с дислокацией из начала координат. Также исследовалось взаимодействие дислокаций согласно ряду других решений: "градиентным" законам, полученным для градиентной среды Е. Айфантисом с коллегами, и решению, полученному для геометрически и физически нелинейной упругой среды К.Ф. Черных. Принципиального влияния на поведение дислокаций эти законы не оказывают, так как они уточняют решение вблизи ядра дислокации и на расстоянии, сравнимом с диаметром ядра дислокации, и совпадают с классическим. Сила, действующая на выбранную дислокацию, определяется с помощью окрестности дальнего действия. Верхний знак в формулах (1) соответствует взаимодействию одноименных дислокаций, нижний – противоположных по знаку дислокаций. Окрестность дальнего действия имеет форму прямоугольника, в нее попадают все рассматриваемые дислокации или их образы, кроме образов выбранной дислокации. Дислокации приписывается статус движения в случае выполнения следующих локальных статических критериев:

$$\text{а) } |f_{E_{\tau}} + f_{I_{\tau}}| > f_{\tau}^* \text{ (скольжение),} \quad \text{б) } |f_{I_n}| > f_n^* \text{ (переползание),} \quad (2)$$

где  $f_I$  – суперпозиция упругих сил парных взаимодействий данной дислокации со всеми дислокациями, попавшими в ее окрестность дальнего действия,  $f_E$  – однородная внешняя нагрузка,  $f_{\tau}^*$  – порог трения по скольжению (Пайерлса),  $f_n^*$  – порог трения пере-

ползания. Новые дислокации генерируются парами, испускаемыми источниками Франка–Рида, при выполнении критерия активации

$$|f_{E\tau} + f_{I\tau}| > f_{\tau}^* + f_{\#}, \quad (3)$$

где  $f_{\#}$  – порог активации источника.

Одна итерация движения дислокаций делится на две последовательные части – реализацию скольжения и реализацию переползания. За одну итерацию дислокация может переместиться лишь на одну клетку в пределах двуклеточной локальной окрестности. После перемещения дислокация теряет текущий статус движения. Новый статус определяется согласно (2) на следующей итерации. Скольжение и переползание дислокаций осуществляются независимо в отдельных (четном и нечетном) проходах по консервативной схеме, обеспечивающей сохранение субстанции, с использованием двуклеточной локальной окрестности. На каждом проходе перебираются все объекты (дислокации и источники) и, в зависимости от четности прохода и положения текущего объекта, для него выбирается своя окрестность. Окрестности в течение каждого прохода не перекрываются, что обеспечивает консервативность субстанции. После реализации движения всех дислокаций управление передается блоку размножения дислокаций. Последнее происходит в однородно распределенных по пространству источниках Франка – Рида при выполнении критерия (3). В этом случае в плоскости залегания источника справа и слева от него выбрасывается пара дислокаций противоположных знаков, принадлежащих той же системе скольжения: положительная дислокация в направлении действия силы, отрицательная – в противоположном направлении. Положение и количество источников в ходе процесса не меняются. При определении дальнедействующих напряжений источники воспринимаются как обычные дислокации, а в близком действии по локальным правилам – как препятствия для движения дислокаций.

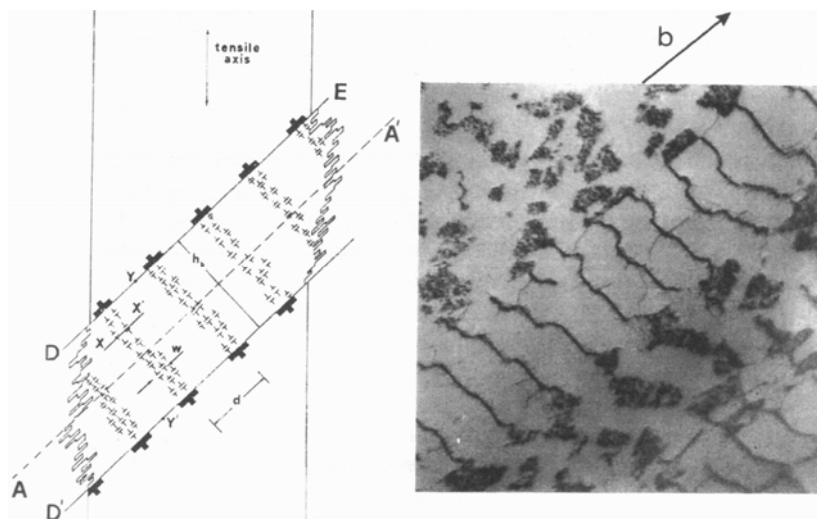


Рис.1. Модель идеальной устойчивой полосы скольжения со стеночной структурой и одинаково ориентированная микрофотография (просвечивающая электронная микроскопия) нерегулярной структуры с наклонными мультипольными стенками [4]

Рассматриваемая система дислокаций соответствует строению устойчивой полосы скольжения, состоящей, как правило, из параллельных краевых дислокаций одной

системы скольжений и образующих структуры в виде мультипольных стенок, ортогональных направлению скольжения (рис.1).

**Схема нагружения образца.** Принимается гипотеза аддитивности приращений однородных упругих и осредненных по области пластических деформаций  $\Delta\epsilon = \Delta\epsilon^{el} + \Delta\epsilon^{pl}$ . Это соответствует структурной схеме материала в виде последовательного соединения упругого и пластического элементов. Упругий элемент моделирует кристаллическую решетку материала и нагружающую систему. Модуль клеточных автоматов описывает поведение пластического элемента в структурной схеме (рис.2). Такая схема позволяет исследовать поведение системы при нагружении с произвольной жесткостью. При мягком нагружении образца изменяется приложенное касательное усилие. В соответствии со значениями напряжений на текущей итерации изменяется конфигурация дислокаций и пересчитывается суммарная (упруго-пластическая) деформация образца. При жестком же нагружении накладываемое приращение деформаций представляется как  $\Delta\epsilon = \Delta\epsilon^{el} + \Delta\epsilon^{pl}$ , то есть изменение деформаций кристаллической решетки и нагружающей системы находится как  $\Delta\epsilon^{el} = \Delta\epsilon - \Delta\epsilon^{pl}$ . Изменение отклика  $\Delta\sigma$ , то есть напряжения, определяемого в упругом элементе после изменения пластической составляющей полной деформации  $\Delta\epsilon^{pl}(\Delta\sigma)$  за счет движения дислокаций, определяется итерационно из самосогласованного уравнения

$$\Delta\sigma = C:\Delta\epsilon^{el} = C:(\Delta\epsilon - \Delta\epsilon^{pl}(\Delta\sigma)), \quad (4)$$

где тензор четвертого ранга  $C$  определяет линейно-упругие свойства решетки. Приращение пластической составляющей полной деформации определяется по текущей итерации в модели клеточных автоматов. Решая итерационно уравнение (2) можно строить диаграмму деформирования при нагружении по траектории с любой жесткостью [5].

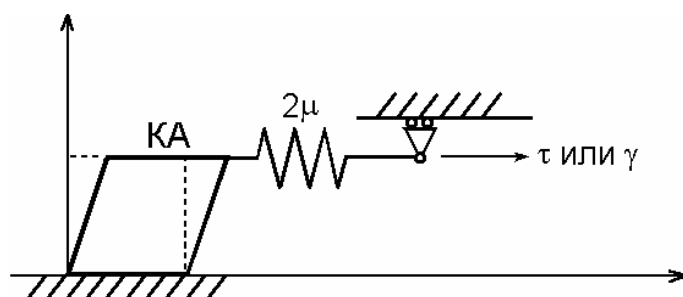


Рис.2. Структурная схема исследуемого упруго-пластического материала, содержащая пластический элемент (КА) и упругий элемент (решетка плюс нагружающая система)

**Модель клеточных автоматов для трех систем скольжения.** Рассматриваются прямолинейные краевые дислокации, принадлежащие трем равнонаклоненным системам скольжения (рис.3). Линии дислокаций ортогональны плоскости моделирования. Ситуация соответствует гипотетическому кристаллу, представленному стопкой (111)-плоскостей. Время и пространство полагаются дискретными, плоскость разбита на большое количество одинаковых клеток, граничные условия периодические. Каждая клетка может иметь один из нескольких статусов: быть занятой дислокацией одной из трех систем скольжения, быть занятой источником Франка–Рида, барьером или оста-

ваться пустой. Дислокации могут быть расщепленными. Допускается скольжение и переползание дислокаций.

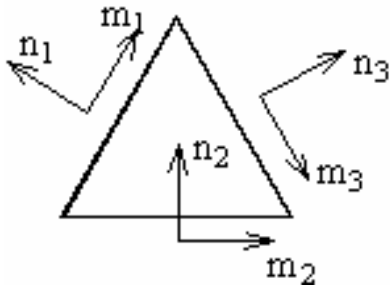


Рис.3. Равнонаклоненные системы скольжения характеризуются нормальными и касательными векторами  $\mathbf{n}_i, \mathbf{m}_i$

Дислокация с координатами  $(x, y)$ , принадлежащая плоскости скольжения с нормалью, составляющей угол  $\alpha$  с вертикалью, действует на дислокацию горизонтальной системы скольжения в начале координат, вызывая появление напряжений,

$$\tau = \pm \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)(x \cos(\alpha) - y \sin(\alpha))}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (5)$$

$$\sigma = \mp \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)\cos(\alpha) + x(x^2 - y^2)\sin(\alpha)}{(x^2 + y^2)^2}.$$

Движение и близкое действие определяются набором локальных правил, учитывающих аннигиляцию, дислокационные реакции и работу источника. Движение дислокаций происходит квазистатически и управляется критерием порогового типа, учитывающим сопротивление Пайерлса кристаллической решетки скольжению и механическое сопротивление переползанию. Клетка может содержать дислокацию любой из трех систем скольжения, поэтому ее геометрия имеет симметрию 3-го порядка, и форма клетки принималась гексагональной. Форма области моделирования также задавалась в виде шестиугольника, что гарантирует равноправность систем скольжения (рис.4), и содержит на каждой своей стороне сотни клеток.

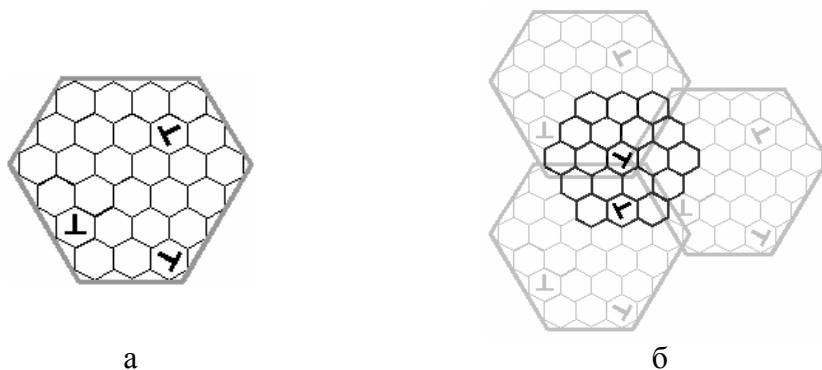


Рис.4. Ячейка делится на гексагональные клетки: а) форма ячейки периодичности, б) периодические граничные условия (окрестность дальнего действия для отдельной дислокации показана сплошной черной линией)

Модель предназначена для исследования сложных траекторий нагружения, которые реализуются в опытах на тонкостенных трубках при одновременном растяже-

нии-сжатии и скручивании. Область моделирования соответствует малому элементу поверхности трубки, расположенному вдали от захватов, поэтому предполагается выполнение гипотез плоско-напряженного состояния. Принимается гипотеза аддитивности упругих и пластических деформаций, приводящая к схеме с последовательным соединением элементов. При жестком нагружении итерационно решается уравнение (4). Тензор пластических деформаций есть  $\boldsymbol{\varepsilon}^{pl} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \gamma_k (\mathbf{m}_k \mathbf{n}_k + \mathbf{n}_k \mathbf{m}_k)$ , где  $k$  – номер системы скольжения,  $\mathbf{m}_k$  – единичный вектор, направленный вдоль линии скольжения,  $\mathbf{n}_k$  – единичный вектор нормали к линии скольжения,  $\gamma_k$  – суммарная сдвиговая деформация по  $k$ -й системе в результате скольжения дислокаций этой системы. При мягком нагружении напряжения в упругой матрице и пластическом элементе равны приложенным. Модель позволяет исследовать сложные траектории при разной жесткости нагружения. Одновременно отслеживается эволюция дислокационной микроструктуры.

**Результаты численных экспериментов.** В результате расчетов с константами материала, взятыми для меди ( $\mu = 5,46 \cdot 10^{10}$  (Па),  $b = 2,56 \cdot 10^{-10}$  (м),  $\nu = 0,33$ ), в опыте на простой сдвиг для одной активной системы скольжения были получены последовательности сменяющихся субструктур, типы которых принципиально не зависели от жесткости нагружения. Эволюция дислокационной структуры проходит ряд стадий. Сначала происходит образование мультипольных скоплений (жгутов) и появление вблизи этих скоплений стенок из дислокаций одного знака. Далее – разрастание появившихся стенок; сближение стенок противоположного заряда, сопровождающееся разрушением части дислокационных диполей в первоначальных скоплениях и вовлечением других диполей в движение вслед за стенкой за счет сильной неоднородности поля напряжений вблизи стенки; образование из стенок противоположного заряда и вовлеченных в движение диполей мультипольных стенок. Образовавшиеся в результате мультипольные стеночные структуры находятся в равновесии как при приложенной, так и при снятой внешней нагрузке. Расстояние между стенками в конечной конфигурации (рис.5) составляет примерно 1 мкм, что согласуется с экспериментальными данными о структуре устойчивой полосы скольжения.

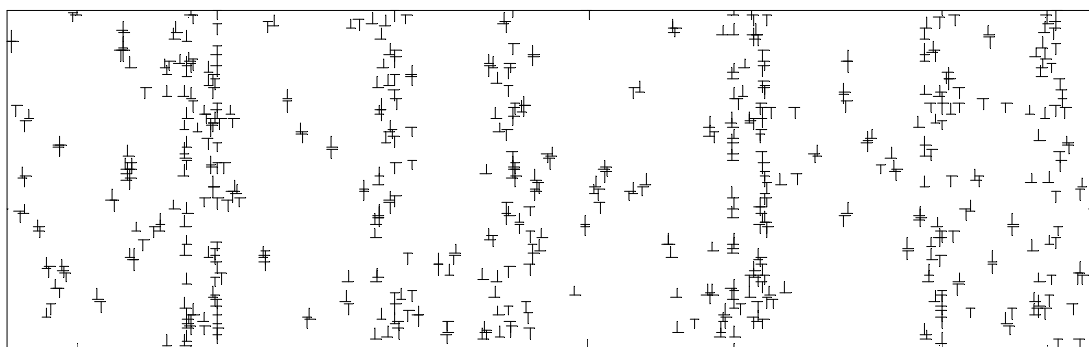


Рис.5. Дислокационная структура при одиночном скольжении (результаты численных экспериментов в опыте на простой сдвиг при монотонном деформировании)

При исследовании поведения дислокаций одной системы скольжения с помощью клеточных автоматов получены результаты, аналогичные результатам моделирования методом дислокационной динамики [5]. Диаграмма, построенная при жестком нагружении, имеет пилообразный профиль с участками падения напряжений, соответствующими моментам быстрой перестройки дислокационной структуры. При мягком

нагрузении этим моментам соответствуют изломы на кривой зависимости пластической деформации от времени. Самоорганизация дислокаций в изучаемой модели сопровождается одновременными событиями локализации деформации и временного падения напряжения. Таким образом, модель клеточных автоматов также описала известный эффект Портевена – Ле Шателье в чистых металлах. Совпадение эффектов образования структур, описанных моделями дислокационной динамики и клеточных автоматов, говорит о том, что факт образования структур не зависит от термофлуктуационных процессов, таких как вязкость, а имеет чисто пластическую природу.

Прямые расчеты показали, что образующиеся при единичном скольжении квазипериодические мультипольные стеночные структуры обладают дальнедействующими полями напряжений (рис.6), вопрос о существовании которых является дискуссионным и однозначного экспериментально обоснованного ответа не имеет.

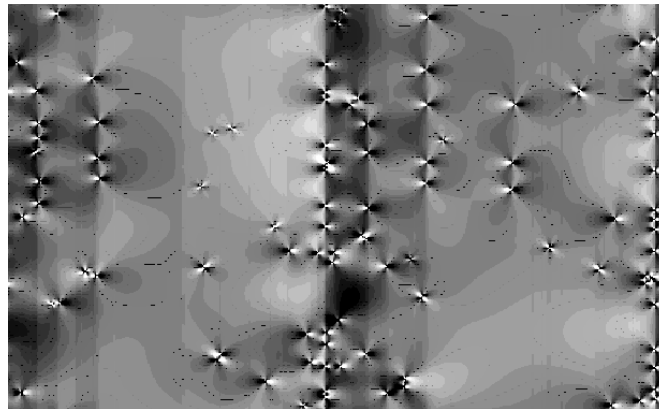


Рис.6. Поле касательных напряжений материала с дислокационной структурой

Модель клеточных автоматов с тремя системами скольжения частично повторила описанные выше эффекты при монотонном деформировании. При действии трех систем скольжения и расщепленности дислокаций эффект Портевена–Ле Шателье проявляется четче за счет формирования более прочных субструктур. В процессе деформирования по сложным траекториям в осях растяжение-сдвиг (например, по эллиптической, рис.7) наблюдается упрочнение материала в виде расширения петли в пространстве напряжений, соответствующей замкнутой траектории в пространстве деформаций, что свидетельствует об упрочнении материала за счет формирования дислокационной структуры.

Дислокационная структура имеет ячеистый вид и состоит из прослоек, разделяющих практически свободные от дислокаций области. Строение границ ячеек неодинаково. В одних своих частях прослойки состоят из монополярных дислокационных стенок одной системы скольжения, в других – из мультипольной смеси дислокаций одной системы или разных систем (рис.8). Обнаружено, что при непропорциональном циклическом деформировании появляется дополнительное упрочнение по сравнению с циклическим деформированием по пропорциональным траекториям. Величина дополнительного упрочнения также зависит от расщепленности дислокаций (рис.9), в опытах с нагружением системы расщепленных дислокаций получено значительно большее упрочнение.

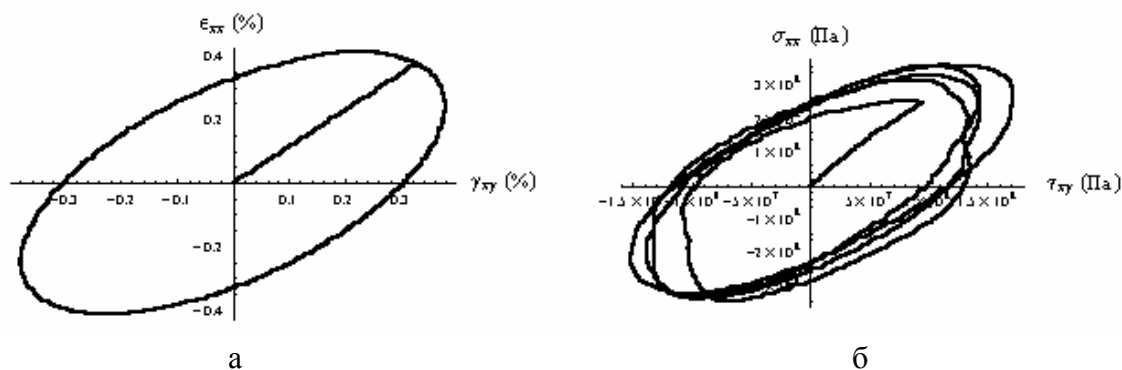


Рис.7. Материал с системой нерасщепленных дислокаций: а) деформирование по эллиптической траектории, б) отклик в пространстве напряжений после 4 циклов

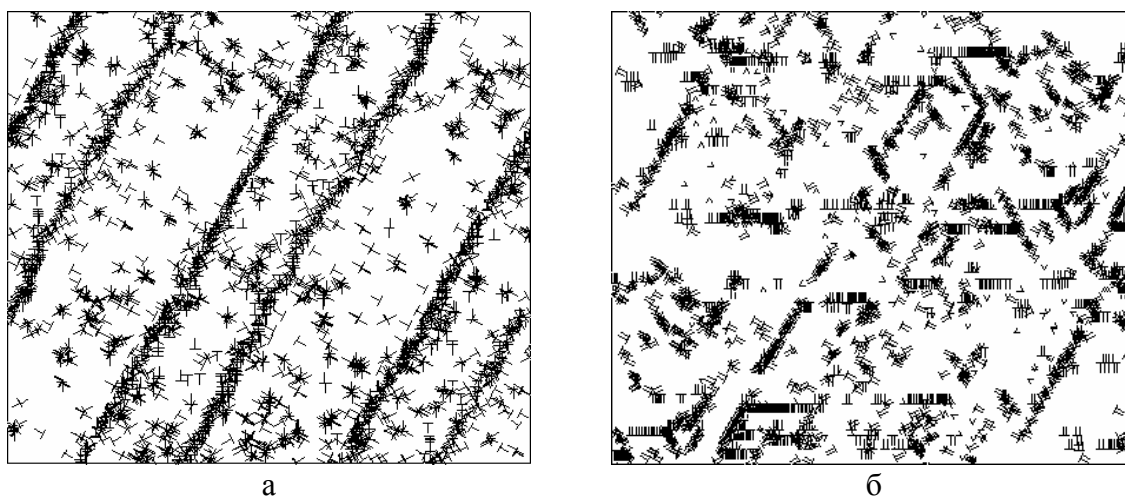


Рис.8. Примеры дислокационных структур, полученных при непропорциональном нагружение (траектория – эллипс): а) полные дислокации, б) расщепленные дислокации, видно большое количество скоплений, запертых барьерами Ломера–Коттрелла

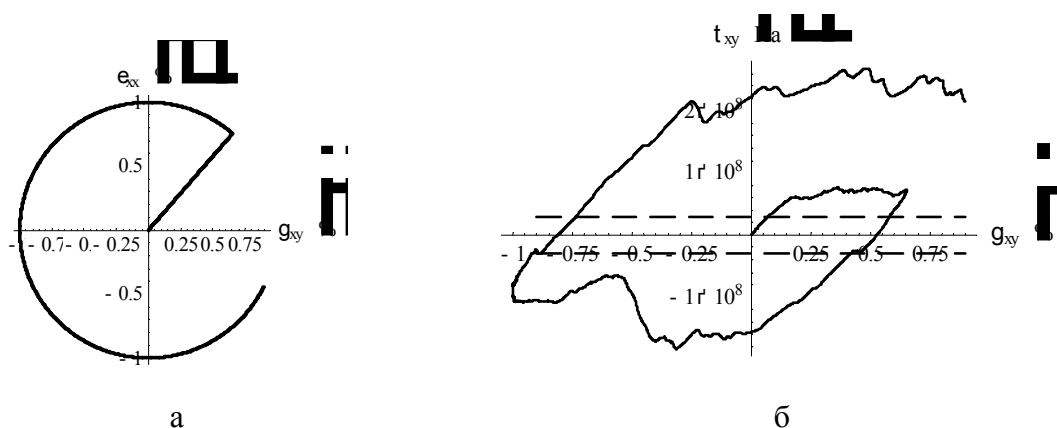


Рис.9. Непропорциональное деформирование: а) вид траектории нагружения в пространстве деформаций, б) диаграмма деформирования. Пунктирная линия соответствует порогу Пайерлса. Дислокации расщеплены

Итак, в численных экспериментах подтверждена гипотеза о механизме эффекта дополнительного упрочнения при непропорциональном циклическом деформировании, основанном на образовании барьеров Ломера–Коттрелла при взаимодействии дислока-



ций разных систем скольжения. Величина дополнительного упрочнения зависит от сложности нагружения и величины энергии дефекта упаковки материала (определяющей расщепленность дислокаций). Модель также описала известный эффект Портевена – Ле Шателье в чистых металлах, который в таких материалах, по-видимому, экспериментально не исследовался. Причиной эффекта в данном случае являлось локальное разупрочнение материала, вызванное разрушением ранее образовавшихся дислокационных субструктур, приводящее к быстрому нарастанию пластической деформации и локальному падению напряжения на диаграмме деформирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке из средств гранта "Урал-2001" N01-01-96481 Российского фонда фундаментальных исследований, гранта PE-009-0 и программы «Фундаментальные исследования и высшее образование» (BRNE) Американского фонда гражданских исследований и развития (АФГИР).

### Библиографический список

1. Зубко И.Ю., Келлер И.Э., Трусков П.В. Модель образования дислокационных структур при непропорциональном циклическом нагружении // Физическая мезомеханика. – 1999. – № 4. – С. 61-68.
2. Тоффоли Т., Марголюс Н. Машины клеточных автоматов. – М.: Мир, 1991. – 280 с.
3. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 599 с.
4. Pedersen O.B. Fatigue and associated microstructural aspects. // J. Lepinoux et al. (eds.), Multiscale phenomena in plasticity. 2000. Kluwer Academic Publishers. – P. 83-97.
5. Зубко И.Ю., Келлер И.Э., Трусков П.В. Самоорганизация дислокаций как причина нестабильности при пластической деформации. // Математическое моделирование систем и процессов: Межвуз. сб. научн. тр./ Перм. гос. техн. ун-т. – Пермь, 2002. – № 10. – С. 63-74.

Получено 9.08.2004.