

DOI: 10.15593/2224-9982/2020.61.04

УДК 541.1; 620.186; 51-74

И.Ю. Зубко, А.В. Зайцев, Ю.В. Соколкин

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

МЕХАНИЧЕСКОЕ ЛЕГИРОВАНИЕ НА МИКРОУРОВНЕ: МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ И ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ

В процессе механического легирования частицы порошка испытывают значительные пластические деформации, микроскопическим механизмом которых является движение образующихся в них дислокаций. Высокие значения плотности дислокаций являются характерной чертой механически легированных твердых растворов. С помощью имитационного подхода моделируется движение дискретного набора взаимодействующих краевых дислокаций и примесных атомов при значительных скоростях деформирования, характерных для процесса механического легирования.

Ключевые слова: механическое легирование, пластическое деформирование частицы порошка, взаимодействие дислокаций и примесных атомов.

I.Yu. Zubko, A.V. Zaitsev, Yu.V. Sokolkin

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

MECHANICAL ALLOYING AT THE MICRO LEVEL: MODELING THE MOTION OF DISLOCATIONS AND IMPURITY ATOMS

In the process of mechanical alloying, powder particles experience significant plastic deformations, the microscopic mechanism of which is the movement of the dislocations formed in them. High values of the density of dislocations are a characteristic feature of mechanically doped solid solutions. In this work, using the simulation approach, we simulate the motion of a discrete set of interacting edge dislocations and impurity atoms at significant strain rates characteristic of the mechanical alloying process.

Keywords: mechanical alloying, plastic deformation of a powder particle, interaction of dislocations and impurity atoms.

Введение

Процесс механического легирования (МЛ) применяется для получения твердых растворов кристаллических материалов и их соединений в виде мелкодисперсного порошка за счет высокоэнергетического механического воздействия на частицы порошка исходных компонентов в планетарной мельнице или атриторе. Указанный процесс применяется для компонентов, получить твердые растворы которых другими методами (например, кристаллизацией из расплава) невозможно либо довольно затруднительно. Получаемые порошковые материалы обладают рядом уникальных свойств [1], причем характеристики порошка (размеры, состав, микроструктура частиц) определяют физико-механические и рабочие характеристики изделий из порош-

ковых материалов. Процесс МЛ является существенно неравновесным и сопровождается диссипацией подводимой механической энергии на трех масштабных уровнях: макроскопическом – за счет сложного движения мельющих шаров и массы порошка [2, 3]; мезоскопическом – за счет значительного неупругого деформирования и разогрева частиц порошка (в том числе их сваривания и разрушения), приводящих к изменению их морфологии и размеров; микроскопическом – за счет процессов диффузии и изменения дефектной структуры частиц. В частности, МЛ с последующим спеканием порошка позволяет получать уникальные высокоазотистые стали и детали из них, обладающие повышенными прочностными, износостойкими и коррозионностойкими свойствами по сравнению с азотистыми сталями и деталями из них, произведе-

денными традиционными методами. Эти уникальные высокоазотистые стали применяются для изготовления отдельных узлов и агрегатов конструкций авиационного и ракетно-космического назначения.

Основной проблемой с инженерной точки зрения является определение параметров ведения процесса МЛ (частот вращения, размеров устройств, их загрузки, временного и температурного режимов) для получения новых материалов с улучшенными физико-механическими свойствами. Экспериментальные методы установления параметров технологического процесса требуют существенных материальных и временных затрат. Кроме того, детальное экспериментальное исследование большинства процессов, протекающих в частицах порошка при МЛ, не всегда возможно. Это связано со сложностью процесса МЛ, идущего при больших скоростях в условиях динамических воздействий на частицы порошка, что ведет к существенному изменению параметров их состояния. В таких условиях математическое моделирование процессов, имеющих определяющее влияние на параметры и физико-механические свойства частиц порошка, в сочетании с экспериментальными исследованиями становится практически единственным возможным путем разработки инженерного подхода, позволяющего предсказывать свойства порошка или подбирать условия проведения процесса механического легирования для достижения требуемых свойств. Подобный подход к оценке морфологии, физико-механических свойств и микроструктуры частиц получаемого порошка должен быть основан на системе математических моделей процесса МЛ и экспериментально определяемых закономерностей исследуемых характеристик в зависимости от параметров проведения процесса. В литературе известен ряд подходов к моделированию отдельных особенностей процесса МЛ [1–9]. Однако в них не учитывается распределение механизмов процесса МЛ по различным масштабным уровням и взаимное влияние процессов, идущих на этих уровнях. Микроуровень процесса, на котором наблюдается коллективное поведение дефектов [10], обычно не моделируется. Данная статья посвящена построению

модели микроуровня, объединяющей подмодели диффузии примесных атомов и динамику дислокаций в деформируемом твердом теле.

Взаимодействие атомов примеси и дислокаций

Для простоты строится плоская модель, описывающая движение дислокаций и диффузии примесных атомов с помощью дискретного имитационного подхода на основе техники клеточных автоматов [11]. Рассматриваются прямолинейные краевые дислокации одной системы скольжения, бесконечно протяженные в третьем направлении, как и в работах [12–14]. Область моделирования, в дальнейшем называемая ячейкой, разбивается на большое количество одинаковых квадратных клеток (сторона ячейки периодичности содержит несколько сотен клеток). Для дислокаций и атомов примеси используются клетки разного размера. Сторона клетки для дислокаций содержит девять клеток для атомов примеси. Каждая клетка дислокационного масштаба может содержать одну дислокацию или не содержать ни одной дислокации. Каждая клетка масштаба атомов примеси может содержать либо один атом примеси, либо ни одного атома. Но поскольку клетка масштаба дислокаций состоит из 81 клетки масштаба атомов, то принимается, что дислокация всегда расположена в центре клетки своего масштаба, при этом содержащиеся в этой клетке дислокационного масштаба клетки атомного масштаба также могут быть заняты атомами примеси. Исключение представляет только одна клетка масштаба атомов примеси, совпадающая с центром дислокационной клетки, – алгоритмически задается, что она не может быть занята атомом примеси во избежание возможного попадания атома в центр ядра дислокации. Применяются периодические граничные условия. Время идет дискретными шагами. В начальный момент времени дислокации и атомы примеси случайным образом распределяются по области моделирования по равномерному закону, количество дислокаций и атомов примеси при моделировании не меняется. Движение дислокаций реализуется методом клеточных автоматов с помощью двухклеточной окрестности, как описано в работах [12–14].

Для описания перераспределения атомов легирующих элементов используются классические диффузионные правила клеточного автомата, реализуемые с помощью окрестности Марголуса [11]. Для учета взаимодействия атомов с дислокациями в потоковый член уравнения баланса концентрации этих атомов включается градиент потенциала взаимодействия атомов и дислокации. В данной работе предлагается численная реализация аддитивности потоков диффузии атомов, вызванных градиентом концентрации атомов примеси и градиентом потенциала их силового взаимодействия с набором дислокаций. Для этого производится чередование движения атомов примеси по чисто диффузионному (градиент концентрации) и силовому (градиент упругого потенциала) механизмам. Сила, действующая на примесный атом со стороны дислокации,

$$\mathbf{F}_0 = -\nabla W = \frac{4}{3} \mu b \chi r_1^3 \frac{1+\nu}{1-\nu} \left\{ \frac{2xy}{(x^2+y^2)^2} \frac{-y^2}{(x^2+y^2)^2} \right\}$$

определяется взятым со знаком минус градиентом потенциала взаимодействия примесного атома и дислокации в изотропной линейно-упругой среде:

$$W = \frac{4}{3} \mu b \chi r_1^3 \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{y}{x^2+y^2}.$$

Здесь x и y – координаты примесного атома в системе координат, связанной с дислокацией; χ – относительное несовпадение радиусов r_0 (внедряемого в материал атома) и r_1 (атома материала), $\chi \equiv (r_1 - r_0) / r_1$. При взаимодействии со многими дислокациями результирующая сила находится как суперпозиция сил, действующих на атом со стороны всех дислокаций:

$$\mathbf{F}_0 = \sum_{i=1}^{M^+} \mathbf{F}_0^i - \sum_{j=1}^{M^-} \mathbf{F}_0^j,$$

где M^+ – число положительных краевых дислокаций, а M^- – число отрицательных краевых дислокаций. Будем предполагать, что движению примесных атомов препятствует пороговая сила, которая связана с энергией активации миграции примесных атомов. Если найденная сила \mathbf{F}_0 превышает по модулю значение порого-

вой силы, то атом переходит в соседнюю клетку в направлении, соответствующем силе \mathbf{F}_0 .

Скольжение отдельной дислокации из какой-либо клетки в соседнюю вызывает минимальное приращение пластической деформации, равное $\gamma_0 = ab / HL$, где a – ширина клетки, b – длина вектора Бюргера дислокации, H и L – соответственно высота и ширина области моделирования. Принимается гипотеза аддитивности однородных упругих γ^{el} и суммарных пластических сдвиговых деформаций $\gamma = \gamma^{el} + \sum_i^N \gamma_i^{pl}$, где N – число дислокаций, реализовавших пластический сдвиг на текущем шаге по времени. Этой гипотезе соответствует структурная схема в виде последовательного соединения упругого и пластического элементов, где в качестве второго используется модель клеточных автоматов, первый же моделирует интегральную реакцию кристаллической решетки. Пластические деформации определяются из модели клеточных автоматов, которой в качестве внешнего воздействия передается однородное поле касательных напряжений от кристаллической решетки $\tau^\# = \mu \gamma^{el}$. Решеточное напряжение складывается с полями напряжений отдельных дислокаций и атомов примеси и учитывается в критерии начала движения для каждой дислокации в области моделирования. Смещение произвольной i -й дислокации в соседнюю клетку происходит, если суммарное касательное напряжение, действующее на нее, превышает порог Пайерлса τ_c : $|\tau_i| = \left| \tau^\# + \sum_{j=1, j \neq i}^M \tau_{ij} + \sum_{k=1}^K \tau_{ik}^{atoms} \right| \geq \tau_c$, где M – количество всех дислокаций, K – количество атомов примеси. Направление скольжения дислокации определяется знаком τ_i . Движение всех дислокаций, для которых выполнен указанный критерий, реализуется одновременно за счет использования двухклеточной окрестности Марголуса, клетки которой расположены вдоль системы скольжения, как описано в работах [12–14]. Переползание дислокаций в параллельную плоскость скольжения в данной работе не моделировалось. При размещении в соседних клетках дислокаций противоположных знаков производилась их

аннигиляция. Размер клеток, используемых для реализации движения дислокаций, принимался в 9 раз большим, чем для атома примеси. Этот размер примерно соответствует области ядра дислокации, которая при описании взаимодействия дислокаций исключалась из рассмотрения, но в которой возможно формирование облака атомов примеси. Объемные деформации области моделирования, возникающие за счет перераспределения атомов примеси, пренебрежимо малы по сравнению со сдвиговыми пластическими деформациями и не учитываются в расчетах. Приложенное к системе напряжение через упругий элемент (кристаллическую решетку) передается подсистеме дислокаций, которая реагирует на него ростом пластических деформаций, возникающих вследствие движения дислокаций. До начала движения дислокаций в рассматриваемой системе накапливается упругая энергия кристаллической решетки. Рост пластических деформаций позволяет системе сбросить часть упругой энергии, после чего уменьшаются касательные напряжения, действующие на дислокации, что приводит к их остановке и началу нового накопления упругой энергии.

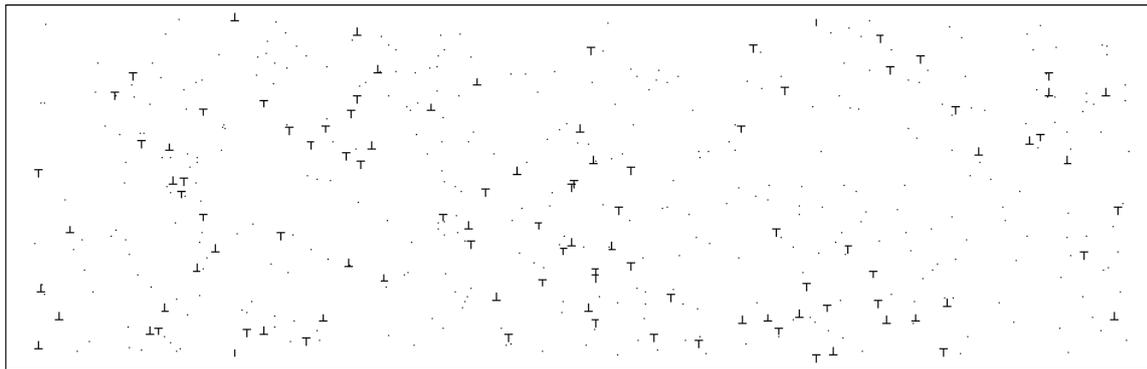
Вопрос учета в клеточных автоматах реального физического времени является открытым, единой методики его решения не существует. В построенной модели удается учесть физическое время, используя экспериментальный факт о линейной зависимости скорости движения дислокации от действующей на эту дислокацию силы при не слишком больших скоростях движения дислокаций. С учетом сил, действующих на каждую дислокацию, определяются их скорости. Согласно правилам клеточного автомата за одну итерацию каждая дислокация смещается не более чем на одну клетку, поэтому, принимая, что самая «быстрая» дислокация должна переместиться не дальше, чем на одну клетку, определяют длительность текущей итерации. Дислокации, которые за это время не успевают покинуть свою клетку, не перемещаются. Таким образом, разные итерации длятся различное физическое время. Отметим, что физическое время перемещения дислокации на расстояние, равное размеру клетки, очень мало. Ввиду этого исследование «медленного» нагру-

жения требует рассмотрения очень большого числа итераций и размеров области моделирования. Результаты, получаемые за разумное вычислительное время, соответствуют очень быстрому изменению приложенных воздействий и применимы к моделированию процессов формирования микроструктуры и диффузии атомов легирующих элементов в частицах порошка при МЛ. Совместное движение дислокаций и примесных атомов реализуется как последовательный пересчет их конфигураций. На каждом новом шаге в качестве начальных условий используются конфигурации дислокаций и примесных атомов, полученные на предыдущем шаге.

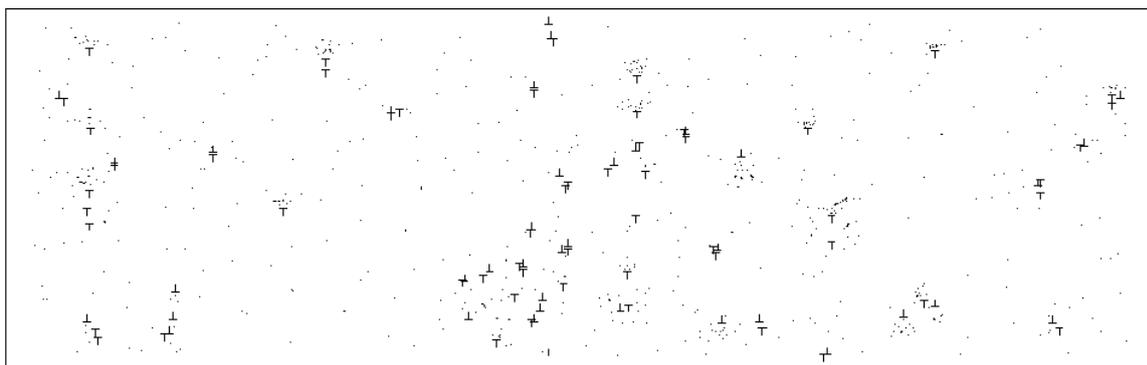
Результаты и их обсуждение

Учет физического времени в дискретном имитационном подходе позволяет исследовать процесс нагружения при различных значениях скорости. Конфигурации дислокаций и примесных атомов (рис. 1) получены в работе при «быстром» нагружении. В начале нагружения дислокации образуют диполи, по мере роста напряжений начинают образовываться дислокационные стенки. При этом атомы примеси диффундируют к отдельным дислокациям и простейшим субструктурам, образуя вокруг них скопления в виде облаков. Система приходит в устойчивую конфигурацию, дислокации совершают лишь незначительные колебания, так что суммарное приращение деформации остается нулевым или меняется крайне незначительно. Распределение примесных атомов в это время становится все более неоднородным – повышается их концентрация в местах скопления дислокаций. Время нахождения системы в этой конфигурации соответствует резкому участку подъема кривой на диаграмме σ – ϵ (рис. 2).

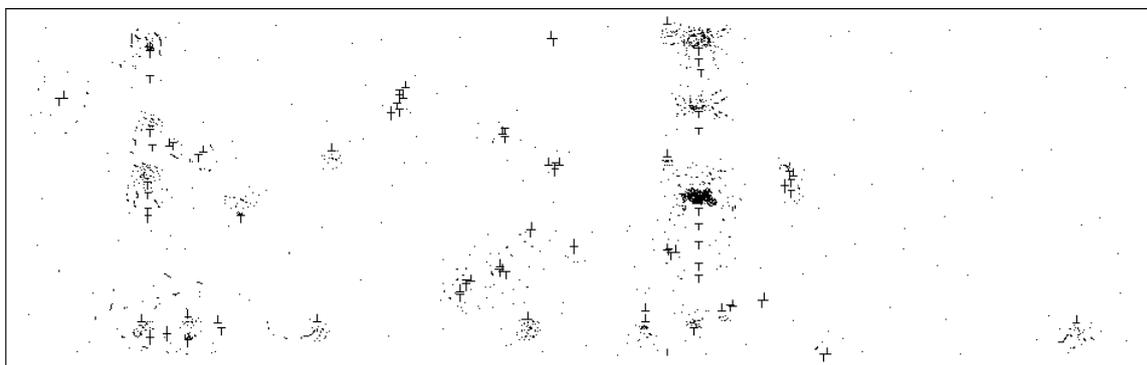
Далее с ростом внешнего приложенного напряжения одна или несколько дислокаций начинают скольжение, что соответствует горизонтальному участку кривой деформирования (см. рис. 2), при этом происходит и перемещение дислокационных диполей вследствие возникающих градиентов напряжений. В первую очередь скользить начинают одиночные дислокации и диполи, еще не закрепленные



a



б



в

Рис. 1. Конфигурации дислокаций и примесных атомов: *a* – начальное распределение; *б* – формирование первых дислокационных субструктур, миграция к ним атомов примеси; *в* – сформировавшиеся дислокационные субструктуры и облака атомов примеси

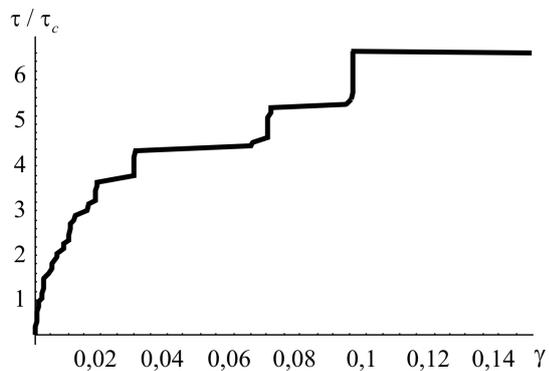


Рис. 2. Диаграмма τ - γ деформирования

облаками примесных атомов. Затем конфигурация вновь приходит в равновесие, и дислокации останавливаются. В результате чередования этапов движения и остановки дислокаций и дислокационных субструктур, реализуемых на микроуровне, на интегральной диаграмме «напряжение – деформация» области моделирования, соответствующей точке более высокого масштабного уровня, образуются ступеньки. При достижении достаточной величины касательного напряжения в плоскости

скольжения свое движение начинают отдельные дислокационные стенки. Приращение интенсивности сдвиговых деформаций при этом получается значительно бóльшим по сравнению со скольжением единичных дислокаций, что соответствует широким ступенькам на диаграмме. При дальнейшем росте приложенного сдвигового напряжения атомы не успевают закреплять дислокационные субструктуры и последние движутся, реализуя значительные пластические деформации.

Заключение

Построенная модель позволяет исследовать довольно «тонкие» процессы, идущие во внутренних областях частиц порошка при интенсивном деформировании в процессе механического легирования. В частности, модель

позволяет исследовать динамику изменения дислокационной подсистемы и диффузию примесных атомов, а также процесс формирования дислокационной микроструктуры в частицах порошка. Модель также позволяет проводить численные эксперименты для проверки физических механизмов, учитываемых при построении макрофеноменологических моделей диффузии в материале с изменяющейся дислокационной структурой.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ FSNM-2020–0027 на выполнение фундаментальных научных исследований на 2020 г. и плановый период 2021 и 2022 гг. и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15–01–08678).

Библиографический список

1. Оглезнева С.А., Михайлов А.О., Зубко И.Ю. Влияние углерода на формирование структуры при механическом легировании и спекании порошковых сталей // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. – 2008. – № 1. – С. 9–16.
2. Зубко И.Ю., Пермяков А.В., Трусов П.В. Динамика многих соударяющихся тел: приложение к механическому легированию // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Сер. Естественные науки. – 2008. – № 2. – С. 29–35.
3. Зубко И.Ю., Зайцев А.В. Моделирование движения мелющих тел в процессе механического легирования // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Аэрокосмическая техника. – 2017. – № 48. – С. 5–15.
4. Aikin B.J.M., Courtney T.H. Modeling of particle size evolution during mechanical milling // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1993. – Vol. 24 A (11). – P. 2465–2471.
5. Courtney T.H., Maurice D. Process modeling of the mechanics of mechanical alloying // Scripta Materialia. – 1996. – Vol. 34 (1). – P. 5–11.
6. Harris J.R., Wattis J.A.D., Wood J.V. A comparison of different models for mechanical alloying // Acta Materialia. – 2001. – Vol. 49 (19). – P. 3991–4003.
7. Maurice D., Courtney T.H. Modeling of mechanical alloying. Part I. Deformation, coalescence, and fragmentation mechanisms // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1994. – Vol. 25A. – P. 147–158.
8. Maurice D., Courtney T.H. Modeling of mechanical alloying. Part II. Development of computational modeling programs // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1995. – Vol. 26 A. – P. 2431–2435.
9. Watanabe R., Hashimoto H., Lee G.G. Computer simulation of milling ball motion in mechanical alloying (overview) // Materials Transactions. – 1995. – Vol. 36 (2). – P. 102–109.
10. Naimark O.B., Bayandin Y.V., Zocher M.A. Collective properties of defects, multiscale plasticity, and shock induced phenomena in solids // Physical Mesomechanics. – 2017. – Vol. 20, no. 1. – P. 10–30.
11. Тоффоли Т., Марголюс Н. Машины клеточных автоматов. – М.: Мир, 1991. – 280 с.
12. Зубко И.Ю., Келлер И.Э., Трусов П.В. Модель образования дислокационных структур при непропорциональном циклическом нагружении // Физическая мезомеханика. – 1999. – № 4. – С. 61–81.
13. Зубко И.Ю., Келлер И.Э., Трусов П.В. Самоорганизация дислокаций как причина неустойчивости при пластической деформации // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2002. – № 10. – С. 63–74.

14. Зубко И.Ю. Модель клеточных автоматов для монокристалла с дислокациями трех систем скольжения // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2004. – № 12. – С. 45–53.

References

1. Oglezneva S.A., Mikhaylov A.O., Zubko I.YU. Vliyaniye ugleroda na formirovaniye struktury pri mekhanicheskom legirovani i spekanii poroshkovykh staley [The effect of carbon on the formation of structure during mechanical alloying and sintering of powder steels]. *Izvestiya vuzov. Poroshkovaya metallurgiya i funktsional'nye pokrytiya (Universities Proceedings. Powder Metallurgy and Functional Coatings)*, 2008, no. 1, pp. 9-16.
2. Zubko I.Yu., Permyakov A.V., Trusov P.V. Dinamika mnogikh soudaryayushchikhsya tel: prilozheniye k mekhanicheskomu legirovaniyu [The dynamics of many colliding bodies: an application to mechanical alloying]. *Science journal. Bulletin of higher education institutes. North Caucasus region. Natural sciences*, 2008, no. 2, pp. 29-35.
3. Zubko I.Yu., Zaytsev A.V. Modelirovaniye dvizheniya melyushchikh tel v protsesse mekhanicheskogo legirovaniya [Modeling the movement of grinding media in the process of mechanical alloying]. *PNRPU Aerospace Engineering Bulletin*, 2017, no. 48, pp. 5-15.
4. Aikin B.J.M., Courtney T.H. Modeling of particle size evolution during mechanical milling // *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1993, Vol. 24 A (11), pp. 2465-2471.
5. Courtney T.H., Maurice D. Process modeling of the mechanics of mechanical alloying // *Scripta Materialia*, 1996, Vol. 34 (1), pp. 5-11.
6. Harris J.R., Wattis J.A.D., Wood J.V. A comparison of different models for mechanical alloying // *Acta Materialia*, 2001, Vol. 49 (19), pp. 3991-4003.
7. Maurice D., Courtney T.H. Modeling of mechanical alloying: Part I, deformation, coalescence, and fragmentation mechanisms // *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1994, Vol. 25A, pp. 147-158.
8. Maurice D., Courtney T.H. Modeling of mechanical alloying: Part II, development of computational modeling programs // *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1995, Vol. 26 A, pp. 2431-2435.
9. Watanabe R., Hashimoto H., Lee G.G. Computer simulation of milling ball motion in mechanical alloying (overview) // *Materials Transactions*, 1995, Vol. 36 (2), pp. 102-109.
10. Naimark O.B., Bayandin Y.V., Zocher M.A. Collective properties of defects, multiscale plasticity, and shock induced phenomena in solids // *Physical Mesomechanics*, 2017, Vol. 20, no. 1, pp. 10-30.
11. Toffoli T., Margolus N. *Mashiny kletochnykh avtomatov [Cellular Automation Machines]*. Moscow: Mir, 1991, 280 p.
12. Zubko I.Yu., Keller I.E., Trusov P.V. Model obrazovaniya dislokatsionnykh struktur pri neproportional'nom tsiklicheskom nagruzhenii [A model for the formation of dislocation structures under disproportionate cyclic loading]. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 1999, No. 4, pp. 61-81.
13. Zubko I.Yu., Keller N.E., Trusov P.V. Samoorganizatsiya dislokatsiy kak prichina nestabilnosti pri plasticheskoy deformatsii [Self-organization of dislocations as a cause of instability during plastic deformation]. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2002, no. 10, pp. 63-74.
14. Zubko I.Yu. Model kletochnykh avtomatov dlya monokristalla s dislokatsiyami trekh sistem skolzheniya [Model of cellular automata for a single crystal with dislocations of three slip systems]. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2004, no. 12, pp. 45-53.

Об авторах

Зубко Иван Юрьевич (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент, декан факультета «Прикладная математика и механика» ФГБОУ ВО ПНИПУ (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29, e-mail: fpmmm@pstu.ru).

Зайцев Алексей Вячеславович (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Механика композиционных материалов и конструкций» ФГБОУ ВО ПНИПУ (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29, e-mail: a-zaitsev@mail.ru).

Соколкин Юрий Викторович (Пермь, Россия) – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Механика композиционных материалов и конструкций» ФГБОУ ВО ПНИПУ (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29, e-mail: mkmk@pstu.ru).

About the authors

Ivan Yu. Zubko (Perm, Russian Federation) – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Dean of Applied Mathematics and Mechanics Faculty, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation; e-mail: fpmm@pstu.ru).

Aleksey V. Zaitsev (Perm, Russian Federation) – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Mechanics of Composite Materials and Structures Department, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation; e-mail: a-zaitsev@mail.ru).

Yuri V. Sokolkin (Perm, Russian Federation) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Mechanics of Composite Materials and Structures Department, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation; e-mail: mkmk@pstu.ru).

Получено 19.06.2020