

ДИСКРЕТНО-ДИСЛОКАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА РЕЛАКСАЦИЮ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ КОЛОНЧАТОГО ПОЛИКРИСТАЛЛА

Мурзаев Р.Т.

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия,
murzaevrt@gmail.com*

Ультразвуковая обработка (УЗО) значительно влияет на структуру и свойства кристаллических материалов [1]. Экспериментально установлено, что результат может быть совершенно разным в зависимости от амплитуды (мощности) и частоты используются. В области низких амплитуд колебаний, дислокации не могут сдвинуть с места, происходит только микропластическая деформация [2]. В случае умеренно высоких амплитуд, когда дислокации становятся подвижными, может происходить их перераспределение и аннигиляция. Наблюдаются процессы релаксации внутренних напряжений [1,3]. При ультразвуковом воздействии с высокими амплитудами, превышающими динамический предел текучести, начинается интенсивная генерация дислокаций. Это способствует формированию ячеистой структуры [4], упрочнению материала [1].

Работ, в которых проводилось численное моделирование ультразвукового воздействия на дислокационные системы, мало. В работе [5] было показано, что воздействие ультразвука на дислокационные границы, формирование которых не завершено из-за действия сил сухого трения, приводит к формированию совершенных границ, не создающих дальнедействующих напряжений. В работах [6] методом моделирования было исследовано поведение системы краевых дислокаций в монокристаллах.

Основным недостатком вышеперечисленных работ по моделированию является то, что в них исследуется воздействие ультразвука на дислокационные системы, находящиеся в плоскостях только одной системы скольжения (с максимальным фактором Шмидта), при этом существование других кристаллографических систем (с меньшим фактором Шмидта), по которым также могут скользить дислокации, полностью пренебрегается. В настоящей работе при помощи численного компьютерного моделирования изучается релаксация неупорядоченной системы дислокаций, способных скользить по трем непараллельным системам в отдельно взятом зерне под действием ультразвука. Задача решается в рамках дискретной дислокационной динамики. Данное исследование является продолжением ранее начатых исследований по моделированию воздействия ультразвука на неупорядоченные дислокационные системы в зерне, содержащем неравновесные границы зерен [7-12].

Рассмотрим двумерный поликристалл, состоящий из 3×3 зерен, каждое из которых имеет квадратную форму. Для создания неравновесного состояния границ зерен, характеризующихся дальнедействующими полями напряжений, в центральном зерне вдоль вертикальных границ располагаются стенки прямолинейных краевых дислокаций (см. рис. 1а). В каждом зерне имеется три различных непараллельных системы скольжения. Одна из систем, перпендикулярная вертикальным границам, имеет наивысший фактор Шмидта, а другие две системы скольжения наклонены по отношению к первой под углами 60° и 120°, соответственно. Уравнение движения для i -ой дислокации рассматриваемой системы может быть записано в виде:

$$\frac{dx_i}{dt} = B(\tau_{us}(t) + \tau_{xy}^{d-d}(x, y))^m \quad (1)$$

Выражение в скобках представляет собой сумму сдвиговых напряжений, действующих на i -ю дислокацию в плоскости скольжения вдоль направления вектора Бюргерса. Первое слагаемое связано с действием внешнего знакопеременного напряжения. Второе слагаемое является суммой сдвиговых напряжений, действующих на i -ю дислокацию со стороны всех остальных дислокаций системы. Для проведения

численных расчетов частота колебаний ультразвука была выбрана постоянной и равной 22 кГц. Представленные в данной работе расчеты были проведены для α -Fe.

Действие внешнего знакопеременного поля вызывает значительную дислокационную перестройку, в результате чего дислокации из тела зерна перемещаются в границы зерен. Это особенно заметно в центральном зерне, содержащем неравновесные границы зерен (см. рис. 1). Расчеты показывают, что степень перестройки дислокационной структуры сильно зависит от мощности ультразвука. Зависимость упругой энергии всего поликристалла от времени для различных значений мощности ультразвукового воздействия представлена на рис. 2. Поскольку, как показывают многочисленные предыдущие исследования, значения упругой энергии зависят от конкретного распределения дислокаций в зернах, то для «чистоты численного эксперимента» все расчеты проводились для одной и той же выбранной конфигурации поликристалла, содержащей в каждом зерне 60 случайно распределенных дислокаций.

Как видно из рис. 2, во всех случаях воздействие ультразвука разной мощности на дислокационную структуру приводит к релаксации упругой энергии. При воздействии ультразвуком малой мощности (50 МПа), релаксация структуры происходит не полностью, но за более короткий промежуток времени. При обработке ультразвуком высокой мощности (100 МПа) релаксация происходит медленнее, но глубже. В то время как при средней мощности (75 МПа) достигается наиболее оптимальная скорость релаксации упругой энергии и глубина релаксации структуры. Таким образом, проведенные расчеты показывают, что мощность ультразвука 75 МПа является оптимальной мощностью ультразвука для обработки поликристаллического материала при заданных начальных условиях.

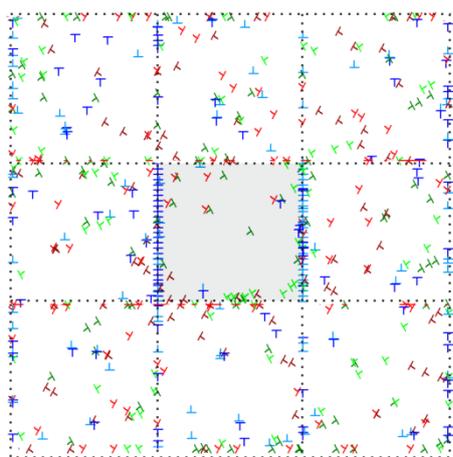


Рисунок 1 - Двумерный поликристалл, состоящий из 3×3 квадратных зерен. Каждое зерно содержит 60 краевых дислокаций. В центральном зерне (выделено серым цветом) неравновесное состояние границ имитируется добавлением в вертикальные границы двух дислокационных стенок. Показана структура после ультразвуковой обработки.

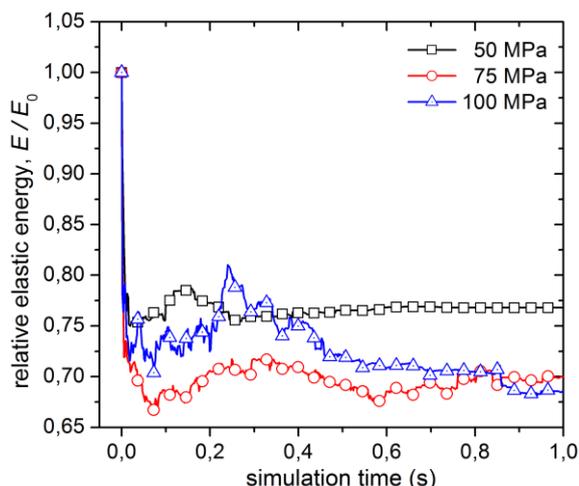


Рисунок 2 - Зависимости упругой энергии от времени, рассчитанная для различных амплитуд ультразвукового воздействия при размере зерен 200 нм

Под воздействием ультразвука дислокации из тела зерна перемещаются в границы зерен. В результате этого происходит компенсация полей напряжений, связанных с неравновесным состоянием границ и, как следствие, релаксация полей напряжений внутри зерна.

Степень релаксации дислокационной структуры зависит от амплитуды внешнего ультразвукового воздействия: чем выше амплитуда, тем меньше дефектов остается внутри зерна и тем больше дислокаций оказывается в границах. В зернах большого

размера релаксация дефектной структуры поликристалла происходит быстрее, чем в материале с более мелкими зёрнами.

Существуют оптимальная амплитуда, при которой наблюдается максимальное релаксирующее воздействие ультразвука.

Литература

1. В.П. Северденко, В.В. Клубович, А.В. Степаненко. Обработка металлов давлением с ультразвуком, Наука и техника, Минск, 1973.
2. Д. Ниблетт, Дж. Уилкс. Внутреннее трение в металлах, связанное с дислокациями. УФН. 1963. Т. 80. № 1. С. 125-187.
3. Гиндин И.А., Волчок О.И., Неклюдов И.М. Релаксация внутренних напряжений в кремнистом железе под действием ультразвуковых колебаний // ФТТ. 1975. Т. 17. В. 3. С. 655-657.
4. Кулемин, А.В. Ультразвук и диффузия в металлах. М.: Металлургия, 1978. 200 с.
5. Г.В. Бушуева, Г.М. Зиненкова, Н.А. Тяпунина, В.Т. Дегтярев, А.Ю. Лосев, Ф.А. Плотникова. Самоорганизация дислокаций в ультразвуковом поле Кристаллография, 2008, № 53, С. 507-512.
6. О.В. Абрамов. Воздействие мощного ультразвука на жидкие и твердые металлы, Наука, Москва, 2000.
7. D.V. Bachurin, R.T. Murzaev, J.A. Baimova, A.A. Samigullina, K.A. Krylova. Ultrasound influence on behavior of disordered dislocation systems in a crystal with non-equilibrium grain boundaries, Letters on materials, 2016, № 6, P.183-188.
8. D.V. Bachurin, R.T. Murzaev, A.A. Nazarov A.A., Relaxation of dislocation structures under ultrasonic influence // International Journal of Solids and Structures. 2018. № 3, P. 136-137.
9. Р.Т. Мурзаев, Д.В. Бачурин, А.А. Назаров, Моделирование воздействия ультразвука на дислокационную структуру деформированного поликристалла // Физика металлов и металловедение. 2018. Т. 119. № 10. С. 1050-1060.
10. D.V. Bachurin, R.T. Murzaev, A.A. Nazarov, Ultrasonic influence on evolution of disordered dislocation structures // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2017. V. 25. № 8. С. 085010.
11. Р.Т. Мурзаев, Д.В. Бачурин, А.А. Назаров, Релаксация остаточной дефектной структуры в деформированных поликристаллах под действием ультразвука // ФТТ. 2017. Т. 118. № 7. С. 655-664.
12. R.T. Murzaev, D.V. Bachurin, A.A. Nazarov, Drift of dislocation triplets under ultrasound influence // Ultrasonics. -2016. - V. 64. - С. 77-82.