# МОДЕЛЬ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ СУБСТРУКТУРЫ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ МЕГАПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

**Черепанов Д.Н., Соловьёва Ю.В., Старенченко В.А., Липатникова Я.Д.**
*Томский государственный архитектурно-строительный университет,*
*Томск, Россия, d_n_ch@mail.ru*

В работе представлены результаты математического моделирования процессов деформационного измельчения субструктуры металлических монокристаллов. Расширена модель дислокационной кинетики чистых ГЦК-металлов, учитывающая формирование малоугловых границ разориентации, сформулированная нами ранее [1 – 3]. В предлагаемом варианте модели наряду с накоплением малоугловых границ, учитывается формирование большеугловых границ разориентации. Сформулирован физический критерий образования большеугловых границ, на основе которого сконструировано математическое уравнение кинетики накопления плотности большеугловых границ разориентации. В модели учтены процессы первичной и вторичной динамической рекристаллизации.

При построении модели предполагалось, что $N$ дислокационных источников в единице объёма за время $\Delta t$ испускают порцию в среднем из $\Delta n$ дислокационных петель, которые образуют скопление на границе зоны сдвига. Время $\Delta t$ существования скопления определяется скоростью перемещения межузельных атомов, сгенерированных в зоне сдвига, к краевым сегментам дислокационных петель, поскольку переползание краевых сегментов приводит к перестроению дислокационных скоплений в малоугловые дислокационные стенки на границах зон сдвига. Каждый акт перестроения дислокационных скоплений в стенки приводит к снятию обратных полей напряжений и к испусканию источником очередной порции дислокационных петель. В результате такой пульсирующей работы дислокационного источника вокруг него образуются скопления дислокационных стенок, которые вносят определяющий вклад в локальную избыточную плотность дислокаций одного знака, рост которой ведёт к увеличению разориентировки фрагментов. Продолжение деформационного воздействия на фрагментированный металлический материал до мегапластических степеней деформации приводит последовательно к образованию большеугловых границ разориентации, поликристаллизму, измельчению зёрен, динамической рекристаллизации и вторичной фрагментации.

Предполагается, что основным механизмом формирования большеугловых стенок разориентации является перестроение скоплений из некоторого количества $n_G$ малоугловых стенок наклона на границах зон сдвига вследствие того, что их суммарная энергия $\gamma_W n_G$ оказывается выше, чем энергия $\gamma_G$ большеугловой стенки с разориентировкой, равной суммарной разориентировке $\theta_W n_G$ скопления малоугловых стенок. Таким образом, за время $n_G \Delta t$ каждый дислокационный источник генерирует пару большеугловых границ, и приращения продуктов деформации за этот промежуток времени принимают вид: $n_G \Delta a = n_G S_D b \Delta n N$ для деформации сдвига, производимой петлями, испускаемыми источниками дислокаций; $n_G \Delta c_k = n_G w_k S_D^s c_j b^2 \Delta n N$ для концентраций точечных дефектов $k$ -го типа (межузельных атомов, моно- и бивакансий); $n_G \Delta \rho_d^v = n_G n_d \ell_d \Delta n N$ и $n_G \Delta \rho_d^i = n_G n_d \ell_d \Delta n N$ для плотностей дислокаций в дипольных динамических конфигурациях вакансионного и межузельного типов; $n_G \Delta \rho_m = n_G P_D \Delta n N$ для плотности сдвигообразующих дислокаций, образующих скопления по периметру зон сдвига; $n_G \Delta N_W = n_G d_W F_e D_e^{-1} S_D w_W^m \Delta n N$ для плотности малоугловых границ (их площади в единице объёма). Здесь использованы обозначения: $b$ – модуль вектора Бюргерса; $S_D = D_s D_e$ и $P_D = (F_e D_s + F_s D_e)$ – средняя площадь, заметаемая дислокационной петлёй и её средний периметр; $D_s$ и $D_e$ – средние диаметры зоны сдвига; $F_e$ и $F_s$ – геометрические факторы; $S_D^s$ – площадь заметаемая винтовыми сегментами; $c_j$ – линейная плотность порогов на винтовых сегментах; $w_k$ - доля генерируемых точечных дефектов $k$ -го типа; $n_d$ и $\ell_d$ – число элементарных диполей и их средняя длина; $d_W$ – расстояние между дислокациями, образующими малоугловую стенку наклона; $\theta_W$– угол разориентировки, создаваемой малоугловой стенкой наклона; $w_W^m$ – доля скоплений сдвигообразующих дислокаций, перестраивающихся в малоугловые стенки под воздействием потоков межузельных атомов и сдвигового напряжения.

Для моделирования формирования большеуголовых границ предлагается ввести в рассмотрение плотность большеугловых границ $N_G$, как их площадь в единице объёма, которая в поликристаллах обратно пропорциональна среднему размеру зерна $d_G$. Тогда за время $n_G\Delta t$ образуются большеугловые границы с плотностью $n_G = \gamma_G\gamma_W^{-1}$в $n_G = \gamma_G\gamma_W^{-1}$ раз меньшей чем плотность малоугловых стенок, т. е. $\Delta N_G = n_G^{-1}\Delta N_W$.

Здесь впервые предлагается использовать энергетический критерий: $\gamma_G < n_G\gamma_W$ образования большеугловой стеноки из скопления малоугловых стенок наклона. Для средней энергии малоугловых стенок при условии $\theta_W \le \theta_M$ используется уравнение Рида-Шокли

$$\gamma_W = \frac{Gb\theta_W}{2\pi(1-\nu)}\left(1 - \ln\frac{b}{2\pi r_0\theta_W}\right) = \gamma_M\frac{\theta_W}{\theta_M}\left(1 - \ln\frac{\theta_M}{\theta_W}\right), \tag{1}$$

где $r_0$ – радиус ядра дислокации; $\nu$ – модуль Пуасона; $\theta_M \approx 10°$ – максимальный угол разориентировки малоугловых границ; $\gamma_M$ – максимальная энергия малоугловых границ.

Известные значения $\gamma_G$ [4] незначительно превышают $\gamma_M$, однако малоугловые стенки с максимальной энергией возникают только на поздней стадии фрагментации, поэтому в процессе перестройки в большеугловые границы участвуют малоугловые стенки с энергией значительно меньшей, чем $\gamma_G$, что и обуславливает энергетическую выгодность такой перестройки. Число $n_G$ стенок в перестраивающемся их скоплении убывает с ростом $\gamma_W$.

В результате перестроек скоплений малоугловых стенок появляется большеугловые стенки с разориентировкой $\theta_G = \theta_W n_G$ и плотностью геометрически необходимых дислокаций

$$\rho_G = \frac{\theta_G}{bd_G} = \theta_G N_G b^{-1} = \theta_W n_G N_G b^{-1}. \tag{2}$$

В экспериментально наблюдаемый средний угол разориентировки, подсчитываемый по формуле

$$\theta = 2\arcsin(0{,}5bD_s\rho_\theta)\ . \tag{3}$$

вносят вклад все дислокации, образующие локально избыточную плотность дислокаций $\rho_\theta$, включая скопления сдвигообоазующих дислокаций, малоугловые и большеугловые стенки.

Для интенсивности генерации (в процессе пластической деформации) большеугловых границ здесь впервые предлагается использовать уравнение

$$\frac{\mathrm{d}N_G}{\mathrm{d}a} = \frac{1}{n_G}\frac{\mathrm{d}N_W}{\mathrm{d}a} = n_G^{-1}d_W F_e D_e^{-1} b^{-1} w_W^m. \tag{4}$$

Превращение и измельчение деформационных субструктур происходит за промежутки времени: $\Delta t\Delta n^{-1}$ – испускания одной петли, $\Delta t$ – образования малоугловых стенок, $n_G\Delta t$ – образования большеугловых стенок, различающиеся на порядки. Этим промежуткам соответствует формирование хаотической дислокационной субструктуры за время $\Delta t\Delta n^{-1}$, неразориентированной ячеистой субструктуры за время $\Delta t$ и фрагментированной субструктуры за время $n_G\Delta t$.

Появление поликристаллической субструктуры происходит тогда, когда большеугловые стенки заполняют весь объём материала и начинают взаимодействовать между собой и стенками малоугловых границ.

Вследствие механизмов динамической рекристаллизации плотность границ зёрен уменьшается и начиная с некоторой степени деформации средний размер зерна сохраняется постоянным, хотя в крупных зёрнах происходит вторичная фрагментация и повторяется процесс формирования большеугловых стенок с последующим измельчением субструктуры и динамической рекристаллизацией совокупности зёрен некоторого минимального (для рассматриваемых условий деформирования) диаметра.

Для исследования динамической рекристаллизации методом математического моделирования, как правило, используется уравнение $\dot{d}_G = M_G\Delta F$ для скорости изменения среднего диаметра зерна, где $M_G$ – мобильность границ зёрен, $\Delta F$- разность между движущей силой миграции границ и силами сопротивления [4].

Учитывая $N_G = d_G^{-1}$ и следствие $2d_G\dot{d}_G = 4b^2\gamma_G D_b^* k_B^{-1} T^{-1}$ из закона собирательной рекристаллизации $d_G^2 - d_G^2(0) = 4tb^2\gamma_G D_b^* k_B^{-1} T^{-1}$ (ширина границы принимается равной $2b$), где $D_b^*$ – коэффициент зёрнограничной диффузии в условиях миграции границ [4], для скорости уменьшения плотности большеугловых границ вследствие динамической рекристаллизации получаем уравнение

$$\dot{N}_G = -d_G^{-2}\dot{d}_G = -N_G^2\dot{d}_G = -2N_G^3 b^2\gamma_G D_b^* k_B^{-1} T^{-1}. \quad (5)$$

Для первичной рекристаллизации со скоростью $\dot{d}_G = \alpha\gamma_G d_G^{-1} M$ получаем

$$\dot{N}_G = -\alpha\gamma_G M_G d_G^{-3} = -\alpha\gamma_G M_G N_G^3. \quad (6)$$

В случае вторичной рекристаллизации зависимость более сложная

$$\dot{N}_G = -\gamma_G M_G d_G^{-2}\frac{d_{кр} - d_{мелк}}{d_{кр}d_{мелк}} = -\gamma_G M_G N_G^2\frac{d_{кр} - d_{мелк}}{d_{кр}d_{мелк}}, \quad (7)$$

и зависит от распределения зёрен по размерам.

В итоге, имеем уравнение кинетики для плотности большеугловых границ

$$\dot{N}_G = \dot{a}n_G^{-1}d_W F_e D_e^{-1} b^{-1} w_W^m - \gamma_G\left(2N_G^3 b^2 D_b^* k_B^{-1} T^{-1} + \alpha M_G N_G^3 + M_G N_G^2\frac{d_{кр} - d_{мелк}}{d_{кр}d_{мелк}}\right). \quad (8)$$

В рамках сформулированной модели проведены численные расчеты для меди и никеля без учёта вторичной фрагментации до высокой степени сдвиговой пластической деформации, которую целесообразно называть мегапластической деформацией. Полученные зависимости от сдвиговой деформации для: сопротивления деформированию (кривые упрочнения); среднего размера фрагментов; среднего размера зерен; среднего угла разориентировки; концентраций точечных дефектов; суммарной плотности дислокаций (включая: сдвигообразующие $\rho_m$; в динамических дипольных конфигурациях $\rho_d^v$ и $\rho_d^i$; в малоугловых стенках $\rho_W = N_W/d_W$; геометрически необходимые $\rho_G$); избыточной плотности дислокаций $\rho_\theta$, попадают в полосы, образуемые доверительными интервалами для соответствующих экспериментальных данных, т. е. наблюдается хорошее согласие между данными численного и натурного экспериментов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 17-72-10042.*

Список литературы

1. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Соловьёва Ю.В., Попов Л.Е. Генерация и накопление точечных дефектов в процессе пластической деформации в монокристаллах с ГЦК структурой.// Изв. ВУЗов. Физика.- 2009, № 4, с. 60-71.
2. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Селиваникова О.В. Моделирование пластической деформации кристаллических материалов на основе концепции упрочнения и отдыха в ГЦК-металлах.// Изв. ВУЗов. Физика.- 2014, том. 57, № 2, с. 4-14.
3. Черепанов Д.Н., Старенченко В.А., Селиваникова О.В. Генерация межузельных атомов в монокристаллах с ГЦК - структурой // Изв. ВУЗов. Физика.- 2015, том. 58, № 4, с. 16-23.
4. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. – М.: Физматлит, 2004. 304 с.