

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 Δt испускают порцию в среднем из Δn дислокационных петель, которые образуют скопление на границе зоны сдвига. Время Δt 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 γ_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, заматаемая 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 заматаемая винтовыми сегментами; c_j – линейная плотность порогов на винтовых сегментах; w_k – доля генерируемых точечных дефектов k -го типа; n_d и ℓ_d – число элементарных диполей и их средняя длина; d_W – расстояние между дислокациями, образующими малоугловую стенку наклона; θ_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 большеугловых 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 стенки из скопления малоугловых стенок наклона. Для средней энергии малоугловых стенок при условии $\theta_W \leq \theta_M$ используется уравнение Риды-Шокли

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

где r_0 – радиус ядра дислокации; ν – модуль Пуассона; $\theta_M \approx 10^\circ$ – максимальный угол разориентировки малоугловых границ; γ_M – максимальная энергия малоугловых границ.

Известные значения γ_G [4] незначительно превышают γ_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 γ_G , что и обуславливает энергетическую выгодность такой перестройки. Число n_G стенок в перестраивающемся их скоплении убывает с ростом γ_W .

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

$$\rho_G = \frac{\theta_G}{b d_G} = \theta_G N_G b^{-1} = \theta_W n_G N_G b^{-1}. \quad (2)$$

В экспериментально наблюдаемый средний угол разориентировки, подсчитываемый по формуле

$$\theta = 2 \arcsin(0,5 b D_s \rho_\theta). \quad (3)$$

вносят вклад все дислокации, образующие локально избыточную плотность дислокаций ρ_θ , включая скопления сдвигообразующих дислокаций, малоугловые и большеугловые стенки.

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

$$\frac{dN_G}{da} = \frac{1}{n_G} \frac{dN_W}{da} = n_G^{-1} d_W F_e D_e^{-1} b^{-1} w_W^m. \quad (4)$$

Превращение и измельчение деформационных субструктур происходит за промежутки времени: $\Delta t \Delta n^{-1}$ – испускания одной петли, Δt – 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 Δt 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, ΔF – 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 зёрнограницной 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

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

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: сдвигобразующие ρ_m ; в динамических дипольных конфигурациях ρ_d^v и ρ_d^i ; в малоугловых стенках $\rho_W = N_W/d_W$; геометрически необходимые ρ_G); избыточной плотности дислокаций ρ_θ , попадают в полосы, образуемые доверительными интервалами для соответствующих экспериментальных данных, т. е. наблюдается хорошее согласие между данными численного и натурального 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.