

## ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКА НА НЕУПОРЯДОЧЕННЫЕ ДИСЛОКАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ В НЕРАВНОВЕСНЫХ ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН

Мурзаев Р.Т., Назаров А.А.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН  
г. Уфа, Россия, E-mail: mur611@mail.ru

Многочисленные экспериментальные исследования показывают, что ультразвуковая обработка вызывает значительные изменения дислокационной структуры кристаллических материалов [1–4]. При высоких амплитудах воздействия эти изменения связаны с интенсивной генерацией дислокаций и формированием ячеистой структуры [2,5–7], зарождением усталостных трещин и разрушением [8], а также упрочнением материала [4]. При интенсивной ультразвуковой обработке может происходить наноструктурирование поверхности [9,10]. В случае умеренных амплитуд, не превышающих динамического предела текучести, наблюдается релаксация внутренних напряжений, связанная с перераспределением дислокаций и формированием более равновесной структуры, что в свою очередь приводит к снижению прочности и пластификации материала [11].

Моделирование больших неупорядоченных дислокационных ансамблей при ультразвуковом воздействии с последующей их перестройкой в динамически упорядоченные стенки проводилось в ряде работ [7], в которых было выяснено, что формирование дислокационных стенок происходит при скольжении как одиночных, так и связанных в мультипольные конфигурации дислокаций. Причем, после прекращения ультразвукового воздействия, сформировавшиеся структуры не распались. Подобные неупорядоченные дислокационные ансамбли, образовавшиеся в результате действия ультразвука, наблюдались также экспериментально.

Изучение перестроек систем дислокаций в поликристаллах с границами зерен, имеющими дефектную структуру, представляет значительный интерес для понимания механизмов воздействия ультразвука на структуру объемных наноматериалов. В настоящей работе при помощи численного моделирования изучалась эволюция неупорядоченных дислокационных систем в отдельно взятом зерне поликристалла под действием ультразвука с учетом неравновесного состояния границ зерен. Главной особенностью работы является то, что скольжение дислокаций рассматривалось в трех плоскостях скольжения. Задача решалась в рамках дискретно-дислокационного подхода.

Скорость движения краевой дислокации описывается выражением вида [12]:

$$V = B|\dot{\tau}|^m \text{sign}(\tau), \quad (1)$$

где  $B$  – коэффициент подвижности дислокаций;  $m$  – показатель, который при небольших сдвиговых напряжениях равен нескольким единицам;  $\tau$  – суммарное сдвиговое напряжение в плоскости скольжения дислокации в направлении вектора Бюргерса. Сдвиговые напряжения одиночной краевой дислокации с вектором Бюргерса  $\vec{b} = (b, 0, 0)$  в плоскостях, параллельных плоскости скольжения, имеют вид:

$$\tau(x, y) = Db \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (2)$$

где  $D = \mu / 2\pi(1 - \nu)$ ;  $\mu$  и  $\nu$  – модуль сдвига и коэффициент Пуассона, соответственно.

Рассмотрим модельный двумерный поликристалл, состоящий из зерен квадратной формы, и одно зерно этого поликристалла. Пусть его границы зерен содержат мезодефект, поле напряжений которого описывается с помощью квадруполья клиновых стыковых дисклинаций (рис. 1). Такой мезодефект может образоваться при

пластической деформации поликристалла [13] и является характерным элементом неравновесной структуры ультрамелкозернистых материалов, полученных интенсивной пластической деформацией [14].

Обозначим через  $x_i$  смещения  $i$ -ой дислокации из положения равновесия, а через  $\tau_{ij}$  – сдвиговое напряжение, создаваемое  $i$ -ой дислокацией в месте расположения  $j$ -ой, со стороны всех остальных дислокаций системы. Значение  $\tau_{ij}$  определяется по формуле (2). Для простоты будем считать  $m$  целым нечетным числом. Тогда система уравнений движения для  $i$ -й дислокации системы запишется в виде:

$$\frac{dx_i}{dt} = B \left( S_i \cdot \tau(t) + \sum_{j=1}^n \tau_{ji}(x_i - x_j, y_i - y_j) + \tau_{xy}^{quad}(x, y) \right) \quad (3)$$

Здесь  $S_i = \pm 1$  в зависимости от знака дислокации;  $n$  – общее число дислокаций;  $\tau(t)$  – внешнее напряжение (в данном случае вызванное действием ультразвука), которое изменяется по синусоидальному закону  $\tau(t) = \tau_0 \sin \omega t$ , где  $\tau_0$  и  $\omega$  – амплитуда и частота, соответственно. Сдвиг по фазе положен равным нулю, что соответствует стоячей волне. В записи учтено также, что  $\tau_{ji} = \tau_{ij}$ .

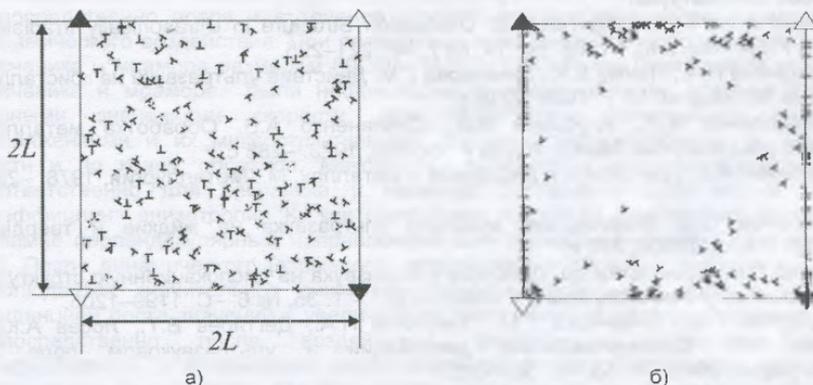


Рисунок 1 – Положения дислокаций (в трех плоскостях скольжения) в модельном зерне с неравновесными границами зерен: (а) исходное неупорядоченное распределение дислокаций ( $n=200$ ); (б) после ультразвукового воздействия. Черные треугольники обозначают положительную стыковую дисклинацию, а белые – отрицательную. Линиями показано квадратное зерно в модельном двумерном поликристалле

Решение системы уравнений (3) проводилось численно при помощи метода Рунге–Кутты четвертого порядка. При этом были использованы следующие параметры модели и начальные условия. Поскольку нелинейность зависимости (1) является необходимым условием дрейфа дислокаций, а также для учета изменения направления скорости при изменении знака напряжения, показатель степени напряжения был выбран равным  $m = 3$ . Полученное соотношение достаточно хорошо описывает зависимость скорости дислокаций от напряжения в  $\alpha$ -железе при комнатной температуре. В начальный момент времени все дислокации имеют нулевые значения скорости.

На рисунке 1а представлена исходная конфигурация, составленная из случайно распределенных дислокаций. Расчеты с «непроницаемыми» границами, проведенные для большого числа систем с различными параметрами, показали, что под действием ультразвука имеет место значительная перестройка дислокационной структуры, а именно все дислокации из тела зерна начинают перемещаться в границы зерен (см. рис. 1б). При движении они могут объединяться в триполи и более сложные

мультипольные конфигурации [15]. После ультразвукового воздействия все дислокации (или большинство из них) оказываются в границах зерен, как показано на рисунке 16. Однако при большей начальной плотности дислокаций не все решеточные дислокации могут встроиться в границы и образуют скопления. Сформировавшиеся дислокационные структуры являются стабильными и не распадаются после прекращения ультразвукового воздействия. При высоких амплитудах внешнего воздействия таких мультипольных конфигураций внутри зерен не образуется. Практически все дислокации оказываются в границах зерен, то есть, происходит более тщательная «очистка» зерен ультразвуком.

Для оценки степени релаксации дислокационной системы рассчитывалось среднеквадратичное значение суммы диагональных компонент (шпур) тензора внутренних напряжений в зерне путем усреднения по узлам сетки, составленной из  $100 \times 100$  точек. Если точки сетки находились ближе чем  $0.1b$  от ядра дислокации или дисликации, то они в расчет не принимались. Расчеты показали, что в общем случае изменение шпура для различных систем с одним и тем же числом дислокаций различно. Кроме того, шпур систем, подвергнутых ультразвуковому воздействию, всегда меньше чем при его отсутствии, что является прямым подтверждением релаксации дислокационной структуры.

#### **Список литературы:**

1. Westmacott K.H., Langenecker B. Dislocation Structure in Ultrasonically Irradiated Aluminum // *Phys. Rev. Lett.* –1965. –V. 14, № 7. –P. 221–225.
2. Тяпунина Н.А., Наими Е.К., Зиненкова Г.М. Действие ультразвука на кристаллы с дефектами. М.: Изд-во МГУ, 1999. –239 с.
3. Северденко В.П., Клубович В.В., Степаненко А.В. Обработка металлов давлением с ультразвуком. Минск: Наука и техника, 1973. –288 с.
4. Кулемин А.В. Ультразвук и диффузия в металлах. М.: Металлургия, 1978. –200 с.
5. Абрамов О.В. Воздействие мощного ультразвука на жидкие и твердые металлы. М.: Наука, 2000. –297 с.
6. Ковш С.В., Котко В.А.и др. Действие ультразвука на дислокационную структуру и механические свойства молибдена // *ФММ.* –1973. – Т. 35, № 6. –С. 1199–1205.
7. Бушуева Г.В., Зиненкова Г.М., Тяпунина Н.А., Дегтярев В.Т., Лосев А.Ю., Плотникова Ф.А. Самоорганизация дислокаций в ультразвуковом поле // *Кристаллография.* 2008. –Т. 53. –С. 507–512.
8. Полоцкий И.Г., Белостоцкий В.Ф., Кашевская О.Н. Действие ультразвукового облучения на твердость монокристаллов никеля. // *Физика и химия обработки материалов.* –1971. –№ 4. –С. 152–155.
9. Лотков А.И., Батурин А.А., Гришков В.Н., Ковалевская Ж.Г., Кузнецов П.В. Влияние ультразвуковой пластической обработки на структурно-фазовое состояние поверхности никелида титана // *Письма в ЖТФ.* –2005. –Т. 31, № 21. –С. 24–29.
10. Асташев В.К., Крупенин В.Л. Об оптимизации виброударных процессов в решетчатых конструкциях // *Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского.* –2011. –№ 4–5. – С. 1975–1977.
11. Мац А.В., Нетёсов В.М., Соколенко В.И., Ковтун К.В. Релаксационные эффекты в деформированном гафнии при ультразвуковом воздействии // *Вопросы атомной науки и техники.* –2009. –№ 4. – С. 167–169.
12. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М.: Высшая Школа, 1983. –144 с.
13. В. В. Рыбин // *Большие пластические деформации и разрушение металлов,* М.: Металлургия. 1986. –223 с.
14. Nazarov A.A., Valiev R.Z., Romanov A.E. Random disclination ensembles in ultrafine-grained materials produced by severe plastic deformation // *Scripta Materialia.* – 1996. –Т. 34, № 5. –С. 729–734.
15. Murzaev R.T., Bachurin D.V., Nazarov A.A. Drift of dislocation triplets under ultrasound influence // *Ultrasonics.* –2016. –V. 64. –P. 77–82.