

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ДИСПЕРСНО-УПРОЧНЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ГЦК МАТРИЦЕЙ И НАНОЧАСТИЦАМИ

Данейко О. И., Ковалевская Т. А., Колупаева С. Н., Кулаева Н. А., Семенов М. Е.

Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия,
olya_dan@mail.ru

Математическое моделирование пластической деформации на основе математических соотношений является в настоящее время необходимой составной частью методов исследования физических свойств материалов. В настоящей работе проведено математическое моделирование пластической деформации дисперсно-упрочненного материала с некогерентными наночастицами и металлической ГЦК матрицей.

Введение дисперсной упрочняющей фазы в материал ведет к существенному усложнению объекта моделирования. Взаимодействие дислокаций с частицами в процессе пластической деформации помимо упрочняющего эффекта приводит к появлению ряда новых элементов дислокационной структуры [1]. Между структурными элементами в ходе деформации и последующих релаксационных процессов возможны взаимные превращения. При этом характер и результат взаимодействий элементов дислокационной структуры с частицами может меняться с изменением соотношений масштабных характеристик упрочняющей фазы (размера, формы частиц, расстояния между частицами) и расстояния между дислокациями [1].

Использованная в работе математическая модель [2] представляет собой систему дифференциальных уравнений баланса элементов деформационной дефектной среды (сдвигообразующих дислокаций, призматических дислокационных петель межузельного и вакансионного типа, дислокаций в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа, межузельных атомов, моновакансий и бивакансий). В настоящей работе исследование выполнено в предположении, что частицы являются некогерентными, недеформируемыми, сферическими. В модели учтены основные процессы генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации дислокаций различного типа и точечных дефектов.

В общем виде систему дифференциальных уравнений баланса деформационных дефектов можно представить следующим образом [2]:

$$\frac{d\bar{X}}{da} = G(\bar{X}, \bar{Y}, a, t) - A(\bar{X}, \bar{Y}, a, t) - R(\bar{X}, \bar{Y}, a, t),$$

где $\bar{X}$ – вектор переменных, характеризующих дефектную среду, $\bar{Y}$ – вектор переменных, характеризующих внешнее воздействие, a – степень деформации сдвига, t – время, $G(\bar{X}, \bar{Y}, a, t)$, $A(\bar{X}, \bar{Y}, a, t)$, $R(\bar{X}, \bar{Y}, a, t)$ – функции генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации деформационных дефектов. Математическая модель включает также уравнение, связывающее скорость деформации с приложенным воздействием и дефектностью деформируемого материала [2]:

$$\dot{a} = \frac{8}{\pi} \frac{v_D B \beta_r^{1/2}}{\xi^{1/6} F (1 - \beta_r)} \frac{\tau^3 (((1 - \beta_r) \rho_m + \rho_p + \rho_d) (\tau - \tau_a))^{1/3}}{G^{4/3} b^{1/3} (\tau^2 - G^2 b^2 \xi \beta_r \rho_m) \rho_m^{1/2}} \exp\left[-\frac{0,2 G b^3 - (\tau - \tau_a) \Lambda b^2}{k T}\right],$$

где τ – приложенное напряжение, $v = v_D b / \Lambda$, v_D – частота Дебая, b – модуль вектора Бюргерса, параметр F определяется формой дислокационных петель и их распределением в зоне сдвига, B – параметр, определяемый вероятностью образования дислокационных барьеров, ограничивающих зону сдвига, G – модуль сдвига, k – постоянная Больцмана, T – температура деформирования, β_r – доля реагирующих дислокаций леса,

ξ – доля дислокаций леса, $\tau_a = \tau_f + \frac{Gb}{\Lambda_p - \delta} + \alpha_a Gbp^{1/2}$, τ_f – напряжение трения, δ –

размер частиц, Λ_p – расстояние между частицами второй фазы.

Для реализации математической модели пластической деформации гетерофазных материалов с некогерентной упрочняющей фазой разработан пакет прикладных программ SPFCC [3]. В расчетном модуле пакета использованы многошаговый неявный метод Адамса и многозначный неявный метод Гира переменного порядка в представлении Нордсика. Исследовано влияние температуры, скорости деформации, начальной плотности дислокаций, размера упрочняющих частиц и расстояния между ними на деформационное упрочнение материала и эволюцию его дефектной структуры в процессе пластической деформации. Диаметр частиц варьировался в пределах от 5 нм до 20 нм, расстояние между ними – от 50 нм до 100 нм. Результаты расчетов получены для случая деформирования кристалла с постоянной скоростью деформации.

В дисперсно-упрочненных материалах с нанодисперсной упрочняющей фазой напряжение течения и плотность составляющих деформационной дефектной подсистемы значительно выше, чем в материалах с более крупными частицами при одинаковой объемной доле упрочняющей фазы [4].

Выявлено (рис. 1), что с увеличением размера частиц или уменьшением расстояния между ними напряжение течения возрастает в широком спектре температур деформации. При уменьшении объемной доли упрочняющей фазы за счет увеличения расстояния между частицами (рис. 1) происходит заметное уменьшение напряжения течения, но при этом сохраняется качественное поведение кривых температурной зависимости. При увеличении степени деформации наблюдается увеличение температурной зависимости напряжения течения при низких температурах (до 350 К). Это обусловлено тем, что при увеличении температуры всё больше точечных дефектов становятся подвижными и включаются в аннигиляционные процессы.

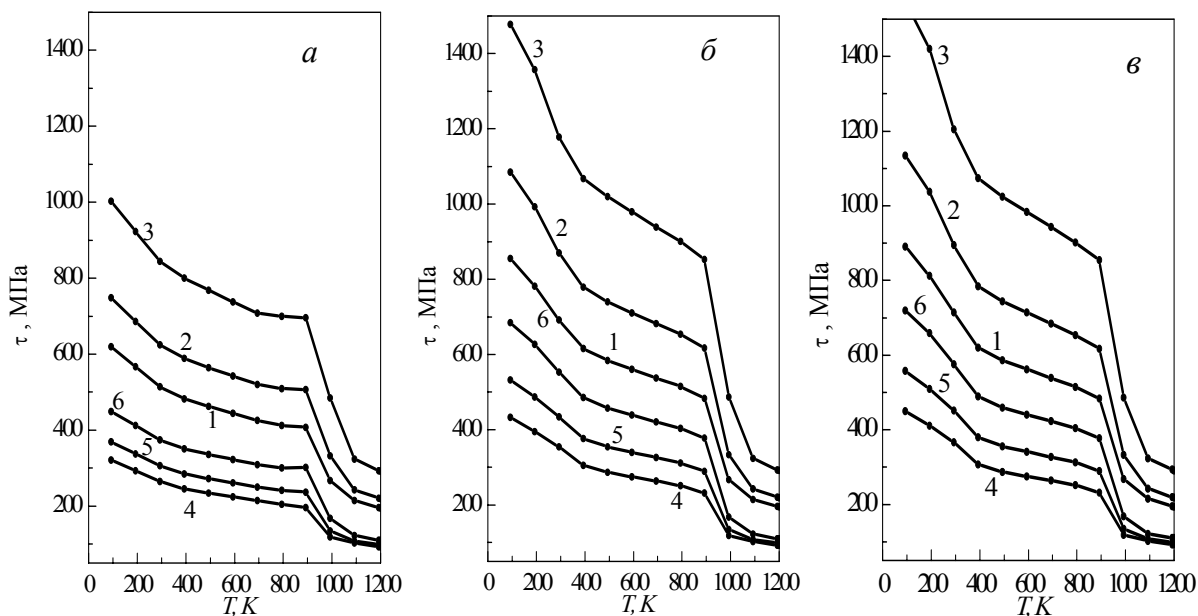


Рис.1. Температурная зависимость напряжения течения. Медная матрица, упрочненная частицами диаметром, нм: 1, 4 – 5; 2, 5 – 10; 3, 6 – 20; расстояние между частицами, нм: 1, 2, 3 – 50; 4, 5, 6 – 100. Степень деформации: а – 0,1; б – 0,3; в – 0,5.

Наиболее сильная температурная зависимость напряжения течения в материале на основе меди наблюдается при температуре деформации 900 К–1000 К на всех кривых напряжения течения, независимо от объемной доли упрочняющей фазы и степени деформации (рис. 1а, б, в). При высоких температурах термодинамически равновесные точечные дефекты становятся подвижными и играют большую роль в аннигиляции дислокаций, что обуславливает значительное снижение напряжения течения.

Качественные закономерности поведения кривых, описывающих температурную зависимость напряжения течения (рис. 2) и плотностей составляющих дислокационной подсистемы в материалах с разной ГЦК матрицей (никелевой, медной или алюминиевой), аналогичны. Наиболее сильно температурная зависимость напряжения течения выражена при низких температурах деформации за счет вовлечения в аннигиляционные процессы всё большего числа деформационных точечных дефектов и при высоких (близких к температуре плавления) температурах за счёт термодинамически равновесных точечных дефектов.

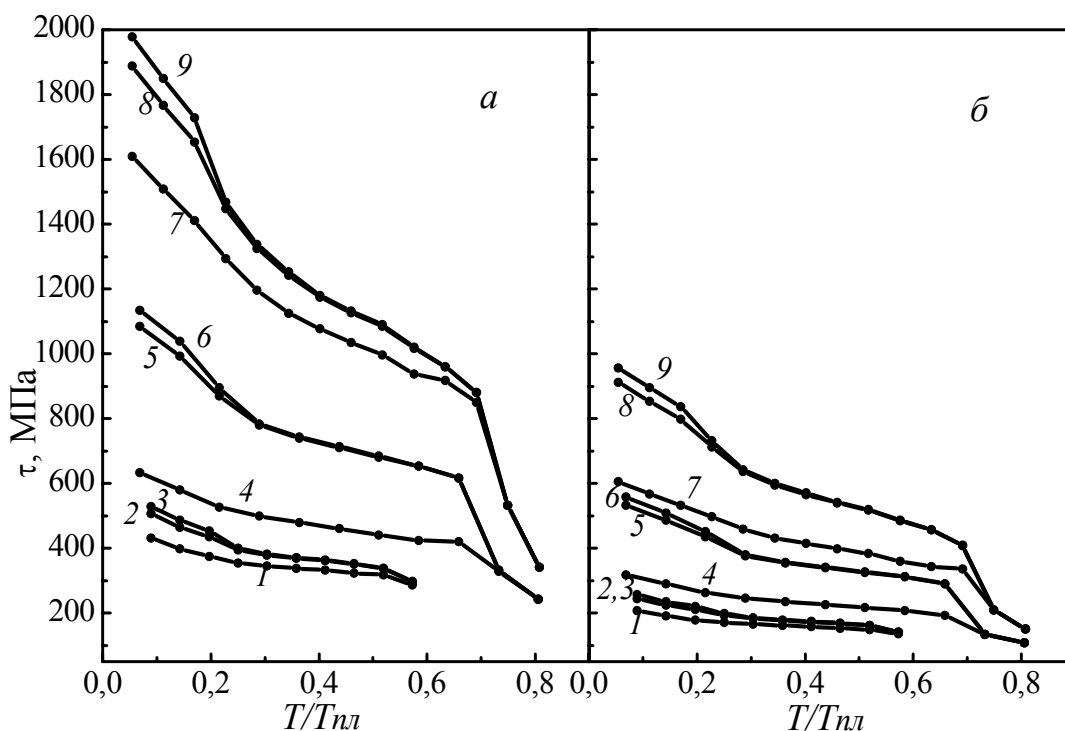


Рис. 2. Зависимость напряжения течения от гомологической температуры. Дисперсно-упрочненный материал на основе: 1, 2, 3 – алюминия, 4, 5, 6 – меди, 7, 8, 9 – никеля. Степень деформации: 1, 4, 7 – 0,1; 2, 5, 8 – 0,3; 3, 6, 9 – 0,5. Диаметр частиц 10 нм; расстояние между частицами, нм: а – 50, б – 100.

Список литературы

1. Ковалевская Т.А., Виноградова И.В., Попов Л.Е.. Математическое моделирование пластической деформации гетерофазных сплавов. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1992. – 168 с.
2. Попов Л.Е., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. Математическое моделирование пластической деформации скольжения в дисперсно-упрочненных материалах / Структурно-фазовые состояния и свойства металлических систем. – Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – С. 135-163.
3. Колупаева С.Н., Семенов М.Е. Пакет прикладных программ для исследования пластической деформации скольжения в ГЦК материалах // Вестник ТГАСУ. - 2005. - №1. - с. 36-46.
4. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. Математическое моделирование пластической деформации наноструктурных дисперсно-упрочненных материалов с ГЦК матрицей / Математическое моделирование систем и процессов. 2008. №16. – С. 28-36.