

КВАНТОВАННО-СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К НАПРЯЖЕНИЮ
ТЕЧЕНИЯ И ОБОБЩЕННЫЙ ЗАКОН ХОЛЛА-ПЕТЧА ДЛЯ
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЯХ

Решетняк А. А., Шаркеев Ю.П., Ерошенко А.Ю.

Институт Физики Прочности и Материаловедения СО РАН, Томск, Россия,

E-mail: reshet@ispms.tsc.ru

Одним из основных направлений исследований в материаловедении являются поиски возможностей управления внутренней дефектной подструктурой кристаллитов для получения наилучших прочностных и пластических свойств поликристаллических (ПК) материалов. Оптимизация указанных свойств невозможна без использования новых технологий, среди которых наиболее известны методы интенсивной пластической деформации и их комбинации с рекристаллизационным отжигом, метод осаждения из газовой фазы и др. [1], позволяющие в широких пределах варьировать ориентацию, линейные размеры, d , элементов микроструктуры материалов, от мезополикристаллических и крупнозернистых (КЗ, 10–1000 мкм), до мелкозернистого (МЗ, 2–10 мкм), ультрамелкозернистого (УМЗ, 0,5–2 мкм), субмикроструктурного (СМК, 100–500 нм), до нанокристаллических (НК, <100 нм) образцов. Экспериментальное изучение физико-механических свойств ПК материалов: микротвердости, H , пределов текучести, σ_y , и прочности, σ_s , выявило особенности механизма упрочнения при переходе к УМЗ, СМК и НК состояниям в материале. Систематически влияние параметров структуры материала на его прочностные свойства при квазистатическом деформировании началось с работ [2] в виде эмпирического соотношения Холла-Петча (ХП):

$$\sigma_y(d) = \sigma_0 + kd^{-1/2}, \quad (1)$$

наблюдаемого на начальной стадии площадки текучести диаграммы “ $\sigma = \sigma(\epsilon)$ ”, для материалов с разными размерами зерен или при формальном значении, $\sigma_y(d) = \sigma(d)|_{\epsilon=0,002} \equiv \sigma_{0,2}(d)$, без ярко выраженной площадки. было продолжено в работах Р. Армстронга, Г. Конрада, Ф. Кокса, Г. Лэнгфорда, А. Томпсона, Дж. Севильяна, С.А.Фирстова, Б.А.Мовчана, Ю.Я. Подрезова, В.В. Рыбина, В.А.Лихачева, Р.З.Валиева, В.Е. Панина, Э.В. Козлова, Н.А.Коновой, описанных в обзорах [3,4]. Для УМЗ, СМК и НК образцов соотношение ХП испытало существенное отклонение, что потребовало модификации его правой части, вначале, квадратичным по степени $d^{-1/2}$ членом [5]:

$$\sigma_y(d) - \sigma_0 = k_1 d^{-1/2} + k_2 d^{-1}, \quad (2)$$

приводящей к учету параболичности графика $(d^{-1/2}, \sigma_y(d))$, а так же максимума у предела текучести, связанного с “отрицательным значением” коэффициента ХП: k : $k = (d\sigma_y)/(d(d^{-1/2}))$ в области “аномальной” ($k < 0$) закономерности ХП. Существует много моделей, цель которых – обосновать выполнимость или исходного “линейного” или “квадратичного” соотношения ХП, на основе эмпирических подходов. Среди них, выделяют [4] модели: Кокса-Хирта; Архарова-Вестбрука; Муграби; упрочнения дислокациями; Коновой; модели ‘кожуха’; Валиева Кима-Эстрина-Буша; трехмерные композитные. Их особенностью является приграничное упрочнение зерен дислокационными ансамблями, включая так называемые тройные и квадрупольные стыки зерен, в связи с их вкладом в (1), (2), и так же с концепцией повышенной кривизны-кручения кристаллической решетки (КР) [6]. При рассмотрении ПК агрегатов двухфазными материалами задача изучения поведения напряжения течения (НТ) в зависимости от размера зерна, являющимся основной-твердой фазой и влияния границ зерен (ГЗ) как мягкой фазы усложняется (их доля при переходе к СМК и НК материалам возрастает до десятков процентов [7]).

Среди теоретических моделей, приводящих к одновременному описанию нормального и аномального законов ХП для σ_y , и микротвердости, H , можно выделить смешанную “модель пластичности ПК металлов, дополняющую дислокационную пластичность внутри зерен механизмом проскальзывания по ГЗ”, на основе сильно-вязкой жидкости Максвелла в рамках моделирования МД для Cu и Al [8]. Во-вторых, это- дислокационно-кинетическая модель Г.А. Малыгина [9], В-третьих, рассмат-

риваются модели с 3D динамикой дискретных дислокаций. Общие выводы из теоретических и экспериментальных работ по отношению к НТ и σ_y , таковы:

- 1) Максимум σ_y достигается для ряда материалов при определенных значениях диаметра кристаллита d_0 в НК области при заданной температуре T и скорости пластической деформации (ПД) $\dot{\epsilon}$;
- 2) d_0 смещается в область крупных зерен с ростом T и независимо с уменьшением $\dot{\epsilon}$;
- 3) как для КЗ, так и НК материалов нет физической модели описывающей как нормальный, так и аномальный законы ХП на основе статистического подхода к спектру механических энергий кристаллитов, как основной фазе ПК материалов при фиксированной ПД в зависимости от распределения ансамбля дислокаций в них.

Наличие до настоящего времени дискуссии о (не)возможности образования 1d дефектов - дислокаций из вакансий - 0d дефектов ввиду отсутствия экспериментального подтверждения той или иной гипотезы подтверждает и отсутствие фундаментально обоснованной теории, учитывающей дефектную субструктуру кристаллической решетки (КР), которая бы приводила к соотношению типа ХП во всех диапазонах зерен для ПК материала при ПД. Заметим, [10], что ситуация с нормальным (КЗ материал) и аномальным (СМК, НК материалы) соотношениями ХП соответствует ситуации с излучением абсолютно черного тела (АЧТ) с участками Рэлея-Джинса (длинноволновая) и Вина (коротковолновая части излучения) для графика $(\lambda, u(\lambda, T))$ спектральной плотности энергии излучения $u(\lambda, T)$ (с размерностью $[u(\lambda, T)] = [\sigma_y] \cdot 1\text{с} = 1\text{эВ} \cdot 1\text{с} \cdot \text{м}^{-3}$), объединенными в рамках теории М. Планка на основе дискретности спектра энергии излучения осцилляторов-атомов АЧТ.

В [10,11] предложена теория НТ, в частности, σ_y , ПК материалов при квазистатической ПД в зависимости от среднего размера, d , зерен в диапазоне от 10^{-8} м - 10^{-2} м. Зависимость основана на статистической модели распределения энергии каждого кристаллита одномодального ПК материала по квазистационарным уровням при пластическом нагружении с наибольшим уровнем равным энергии дислокации максимальной длины в рамках вакансионно-дислокационного механизма деформирования. Найденное распределение скалярной плотности дислокаций в каждом кристаллите для кубической КР с модулем сдвига G

$$\rho(b, d, T) = \frac{6\sqrt{2} m_0}{\pi d^2} \varepsilon \frac{Gb^3}{2k_B T} \left(e^{M(\varepsilon) \frac{b}{d}} - 1 \right)^{-1}, \quad M(\varepsilon) = \frac{Gb\varepsilon^2}{2k_B T}. \quad (3)$$

при длине вектора Бюргерса $b_\varepsilon = b(1 + \varepsilon)$, энергетическом масштабе $M(\varepsilon)$ равном отношению энергии единичной дислокации к тепловой энергии колебаний, $k_B T$, атома в узле КР, в пределах КЗ и НК агрегатов при небольших ПД ε оценивается:

$$\left\{ \lim_{d \gg b}, \lim_{d/b \sim M(\varepsilon)} \right\} \rho = \frac{6\sqrt{2} \varepsilon m_0}{\pi b d} \left\{ (1 + \varepsilon)^{-3}, \frac{Gb^3}{2k_B T d} \left(e^{M(\varepsilon) \frac{b}{d}} - 1 \right)^{-1} \right\} \sim m_0 \{10^{10}, 10^{13}\} \text{м}^{-2}, \quad (4)$$

что выполняется для экспериментально наблюдаемых плотностей дислокаций при параметре полиздральности [10]: $m_0 \sim 10^1 - 10^2$, соответствуя скалярной плотности дислокаций в модели Конрада в КЗ пределе. (3) приводит к НТ из механизма деформационного упрочнения Тейлора,

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_0(\varepsilon) + \alpha m \frac{Gb}{d} \sqrt{\frac{6\sqrt{2} m_0}{\pi} \varepsilon M(0)} \left(e^{M(\varepsilon) \frac{b}{d}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

с экстремальным размером зерна $d_0(\varepsilon, T)$, при котором НТ достигает максимума $\sigma_m(\varepsilon)$

$$d_0(\varepsilon, T) = b \frac{Gb^3(1+\varepsilon)^3}{2 \cdot 1,59363 \cdot k_B T}, \quad \sigma_m(\varepsilon) = \sigma_0 + \alpha m G \sqrt{\frac{6\sqrt{2} m_0}{\pi} \frac{b\varepsilon \cdot 1,59363}{d_0(\varepsilon)}} (e^{1,59363} - 1)^{-\frac{1}{2}}. \quad (6)$$

В (5), (6) m_0 связан с коэффициентом ХП $k(\varepsilon)$ в нормальном законе ХП при $\varepsilon = 0,002$, вытекающем из (5) в КЗ пределе формулой

$$\sigma(\varepsilon)|_{d \gg b} = \sigma_0(\varepsilon) + k(\varepsilon)d^{-\frac{1}{2}} \Rightarrow m_0 = \frac{\pi}{6\sqrt{2}} \frac{k^2(\varepsilon)}{(\alpha m G)^2 \varepsilon b} \frac{M(\varepsilon)}{M_0}, \quad (7)$$

что позволяет уточнить значения m_0 . по экспериментальным данным для $k(\varepsilon)$ в различных КЗ материалах и сформулировать модель в терминах постоянной $m_0 \cdot \alpha^2$. Закон (5) содержит нормальный и аномальный соотношения ХП соответственно для КЗ и НК образцов, имеет максимум для НТ при экстремальном зерне с d_0 порядка 10^{-8} - 10^{-7} м, который смещается в область более крупных зерен с уменьшением Т и увеличением ПД. В рамках предложенной статистической теории НТ, имеются совпадения теоретических и экспериментальных данных для σ_y , d_0 для материалов с ОЦК (α -фаза Fe), ГЦК (Cu, Al, Ni) и ГПУ (α -Ti, Zr) кристаллическими решетками при Т=300К

Таблица 1 - Значения σ_0 , $\Delta\sigma_m=(\sigma_m-\sigma_0)$, E_d^{Le} , k , m_0 , α для ОЦК, ГЦК и ГПУ поликристаллических металлических образцов.

Тип КР	ОЦК	ГЦК			ГПУ	
Вещество	α -Fe	Cu	Al	Ni	α -Ti	Zr
σ_0 , МПа	170 (отожж.)	70 отожж.); 380 (нагарт.)	22 (отожж. 99,95%); 30 (99,5%)	80 (отожж.)	100(~10 0%); 300 (99,6%)	80-115
b , нм	$\frac{\sqrt{3}}{2}a=0,248$	$a/\sqrt{2}=0,2$ 56	$a/\sqrt{2}=0,28$ 6	$a/\sqrt{2}=0,24$ 9	$a=0,295$	$a=0,32$ 3
G, ГПа	82,5	44	26,5	76	41,4	34
T, К	300	300	300	300	300	300
k , МПа· $M^{1/2}$	0,55-0,65; (10^{-5} - $10^{-3}M$)	0,25; (10^{-4} - $10^{-3}M$)	0,15; (10^{-4} - $10^{-3}M$)	0,28; 10^{-5} - $10^{-3}M$	0,38-0,43; 10^{-5} - $10^{-3}M$	0,26; 10^{-5} - $10^{-3}M$
α	-	0,38	-	0,35	0,97	-
$E_d^{Le}=\frac{1}{2}Gb^3$, эВ	3,93	1,28	1,96	3,72	3,33	3,57
$m_0 \cdot \alpha^2$	3,66-5,11	2,57	2,28	1,11	5,83-7,4	3,69
d_0 , нм	23,6	14,4	13,6	22,6	23,8	28,0
$\Delta\sigma_m$, ГПа	2,14-2,56	1,27	0,81	1,12	1,49-1,70	0,90

На рис. 1 представлены графические зависимости $\sigma_y = \sigma_y(d^{-1/2})$ для кристаллитной фазы ПК агрегатов α -Fe, Cu, Al, Ni, α -Ti, Zr с плотноупакованными случайно ориентированными однородными по размеру зернами при Т=300К при наиболее вероятных системах скольжения [11].

Исследована температурная зависимость прочностных характеристик. Показано (см. рис 2 в [11]) на примере Al, что предел текучести, σ_y с уменьшением температуры увеличивается при всех зернах больших $3d_0$, затем уменьшается в НК области. Построены деформационные кривые для кристаллитной фазы α - Fe с выполнением условия разрушения Бэкофена-Консидера (см. рис 3 в [11]).

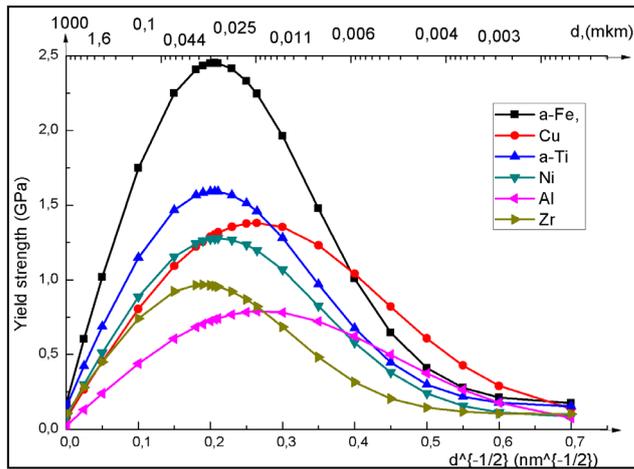


Рисунок 1- Графические зависимости для обобщенного закона ХП (5) при $\varepsilon = 0,002$ с дополнительной верхней шкалой с размером d зерен в мкм. Выбраны меньшие из значений параметров $m_0(k)$ для α -Fe, α -Ti, значения σ_0 для отожженных материалов с максимумами для σ_y вычисленными в соответствующих таблице 1 экстремальных размерах зерен d_0 (6)

Однофазная модель ПК материала расширена включением разупрочняющей зеренно-границной фазы с модификацией соотношения ХП (5) в виде:

$$\sigma_{\Sigma}(\varepsilon) = (1 - n \frac{b}{a})\sigma_C(\varepsilon) + (n - m) \frac{b}{a}\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB}) - m \frac{b}{a}\sigma_P(\varepsilon, d_P), m \leq n \quad (8)$$

где $\sigma_C(\varepsilon, d) = \sigma(\varepsilon, d)$ напряжение для первой фазы - основных зерен диаметра d образца, $\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB})$ и $\sigma_P(\varepsilon, d_P)$ напряжения для зерен и пор из области ГЗ средних размеров d_{GB} и d_P соответственно, с некоторой постоянной $n \sim 10^0 - 10^2$, учитывающей среднее расстояние между зернами и сильно зависящей от подготовки состояний ГЗ. При $n = m$ вся область второй фазы заполнена порами разных диаметров.

Предложенная теоретическая модель имеет очевидные перспективы применения, рассмотренные ранее на образцах α -Ti [12].

Литература:

1. Valiev R.Z, Zhilyaev A.P. Langdon T.G., Bulk Nanostructured Materials: Fundamentals and Applications, Wiley & Sons, New Jersey, 2014.
2. Hall E.O., // Proc. Roy. Soc.B.–1951. – V.64. –P.747–753.; Petch N.J., //J. Iron Steel Inst. –1953.–V.174. – P.25–28.
3. Мовчан Б.А., Фирстов С.А., Луговской Ю.Ф., Структура, прочность и сопротивление усталости микрокристаллических и микрослойных материалов. –Киев: Наукова думка, 2015.
4. Глезер А.М., Козлов Э.В., Конева Н.А. и др., Основы пластической деформации наноструктурных материалов. – М.: Физматлит, 2016.
5. Zhu Y.T., Huang J., Properties and nanostructures of materials processed by spd techniques *Ultrafine Grained Materials II*; Edited by Y.T. Zhu, T.G. Langdon, R.S. Mishra, et al.. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society), 2002.
6. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др., Структурные уровни пластической деформации и разрушения, Под ред. В.Е.Панина. – Новосибирск: Наука, Сиб. Отделение, 1990. –255с.
7. Малыгин Г.А., // УФН. –2011. – Т.131, №11, с. 1129-1157.
8. Бородин И.Н., Майер А.Е., // Физика твердого тела. –2012.–Т.54. –№4.– С.759–766.
9. Малыгин Г.А., // Физика твердого тела. –1995. –Т.37 –№8. –С.2281–2292; Малыгин Г.А., // Физика твердого тела. – 2007.–Т.49 –№6. –С. 961–982.
10. Решетняк А.А., Статистический подход к напряжению течения и обобщенный закон Холла-Петча для поликристаллических материалов при пластических деформациях. // Изв. вузов. Физика, – 2018.–Т.61 –№3.
11. Решетняк А.А. Особенности температурной зависимости обобщенного закона Холла-Петча и двухфазная модель для деформируемых поликристаллических материалов // Изв. вузов. Физика, – 2018.–Т.61 (принята в печать).
12. Курзина И.А., Ерошенко А.Ю., Шаркеев Ю.П. и др., // Материаловедение.–2010.–Т.5.–С.49.