

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ ЗНАКОПЕРЕМЕННЫХ НАГРУЗОК НА ДИСЛОКАЦИОННУЮ СТРУКТУРУ В ПОЛЕ НАПРЯЖЕНИЙ НЕРАВНОВЕСНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН

Мурзаев Р.Т., Назаров А.А., Бачурина Д.В.

¹Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, murzaevrt@gmail.com

Ультразвуковая обработка (УЗО) значительно влияет на структуру и свойства кристаллических материалов [1]. Экспериментально установлено, что результат может быть совершенно разным в зависимости от амплитуды (мощности) и частоты используются. В области низких амплитуд колебаний, дислокации не могут сдвинуть с места, происходит только микропластическая деформация [2]. В случае умеренно высоких амплитуд, когда дислокации становятся подвижными, может происходить их перераспределение и аннигиляция. Наблюдаются процессы релаксации внутренних напряжений [1,3]. При ультразвуковом воздействии с высокими амплитудами, превышающими динамический предел текучести, начинается интенсивная генерация дислокаций. Это способствует формированию ячеистой структуры [4], упрочнению материала [1].

Работ, в которых проводилось численное моделирование ультразвукового воздействия на дислокационные системы, мало. В работе [5] было показано, что воздействие ультразвука на дислокационные границы, формирование которых не завершено из-за действия сил сухого трения, приводит к формированию совершенных границ, не создающих дальнедействующих напряжений. В работах [6] методом моделирования было исследовано поведение системы краевых дислокаций в монокристаллах.

Общим недостатком вышеперечисленных работ по моделированию является то, что в них моделируется воздействие ультразвука на дислокации одной системы скольжения. При этом эффекты, связанные со взаимодействием дислокаций, движущихся в пересекающихся плоскостях скольжения, оказываются недоступными для рассмотрения. В настоящей работе при помощи компьютерного моделирования исследуется релаксация под действием ультразвука неупорядоченной системы дефектов, состоящей из дислокаций, способных двигаться по трем некомпланарным плоскостям скольжения в отдельно взятом модельном зерне поликристалла.

Для проведения моделирования исходное зерно было выбрано квадратной формы. Для имитации неравновесного состояния границ зерен, характеризующегося дальнедействующими полями напряжений, на вершинах квадратного зерна помещены стыковые клиновые дисклинации, образующие квадрупольную конфигурацию (см. рис. 1). В зерне действуют три плоскости скольжения, расположенные под углом 60° друг к другу (рис. 1). Начальные координаты краевых дислокаций в пределах рассматриваемого зерна задавались случайным образом. Для простоты считалось, что на каждой плоскости скольжения находится равное число дислокаций; кроме того, число положительных и отрицательных дислокаций (дислокаций с противоположными знаками вектора Бюргерса) в пределах каждой плоскости также одинаково. Рассматривалось только скольжение дислокаций без учета переползания. В процессе моделирования число дислокаций в системе остается всегда постоянным. Возможные реакции слияния, которые могут происходить между дислокациями, движущимися в разных плоскостях скольжения и встречающимися в одной линии, также не рассматривались. Все четыре границы в зерне считались непроницаемыми для дислокаций, что соответствует случаю большеугловых границ зерен.

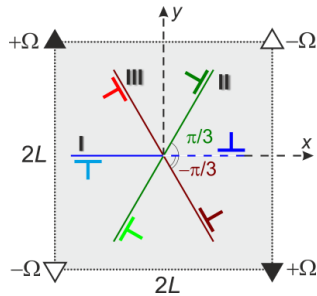


Рисунок 1 - Схематическое изображение модельного квадратного зерна с тремя плоскостями скольжения.

Уравнение движения для i -ой дислокации рассматриваемой системы может быть записано в виде:

$$\frac{dx_i}{dt} = B(\tau_{us}(t) + \tau_{xy}^{d-d}(x, y) + \tau_{xy}^{dq}(x, y))^m \quad (1)$$

Выражение в скобках представляет собой сумму сдвиговых напряжений, действующих на i -ю дислокацию в плоскости скольжения вдоль направления вектора Бюргерса. Первое слагаемое связано с действием внешнего знакопеременного напряжения. Второе слагаемое является суммой сдвиговых напряжений, действующих на i -ю дислокацию со стороны всех остальных дислокаций системы. Третье слагаемое

представляет собой сдвиговое напряжение, создаваемое дисклинационным квадруполем [9].

Система дифференциальных уравнений (1) решалась. При этом использовались безразмерные параметры для расстояния $\tilde{x} = x \cdot \omega / B\tau_0^m$ и времени $\tilde{t} = t \cdot \omega$, подстановка которых в выражение (1) дает

$$\frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}} = \left[S_i \sin \tilde{t} + \frac{1}{K} \cdot \tilde{\tau}_{ji}^{d-d}(\tilde{x}_i - \tilde{x}_j, \tilde{y}_i - \tilde{y}_j) + Q \cdot \tau_{xy}^{dq}(\tilde{x}, \tilde{y}) \right]^m, \quad (2)$$

где $S_i = \pm 1$ в зависимости от знака дислокации. Из выражения (2) видно, что скорость движения i -ой дислокации зависит от параметров $K = B\tau_0^{m+1} / Db\omega$, отвечает за взаимодействие между дислокациями и пропорционален амплитуде внешнего знакопеременного напряжения, в то время как второй, $Q = D\Omega / \tau_0$ - за взаимодействие дислокаций с дисклинационным квадруполем и определяющим степень неравновесности границ зерен.

В результате компьютерного моделирования установлено, что действие внешнего знакопеременного поля вызывает значительную перестройку дислокационной структуры, в результате чего дислокации из тела зерна перемещаются в границы зерен. Расчеты показывают, что степень релаксации системы, которая напрямую связана с перестройкой дислокационной структуры, сильно зависит от значений параметров K и Q . Первый из них прямо пропорционален амплитуде внешнего ультразвукового воздействия, а второй определяет степень неравновесности границ зерен. На рис. 2 представлена зависимость шнура напряжений от времени моделирования для различных значений K и при $Q=1.0$. Поскольку значения шнура зависят от данного конкретного распределения дислокаций в системе, то в этом случае для «чистоты» эксперимента все расчеты проводились для одной и той же системы, составленной из 300 случайно распределенных дислокаций. На рис. 3 показаны конечные положения дислокаций после ультразвукового воздействия в течение 5000 периодов колебаний. Были построены карты сдвиговой компоненты поля напряжений. В исходной неупорядоченной системе на рис. 4а уровень напряжений внутри зерна довольно неоднороден. После ультразвуковой обработки большинство дислокаций попадает в границы, поле внутри зерна становится более однородным и значительно уменьшается. Попавшие в границы и выстроившиеся в стенки краевые дислокации частично гасят поле квадруполя и не создают дальнедействующих полей напряжений, как видно на рис. 4в.

Результаты моделирования показывают, что шнур напряжений для рассматриваемого зерна с тремя плоскостями скольжения может уменьшаться в пределах от 7 до 30%. Это близко к тем средним значениям (4-20%), которые были получены для случая дислокаций одной плоскости скольжения [7]. Полученный результат моделирования также удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными работ [8], в которых рентгеноструктурным анализом

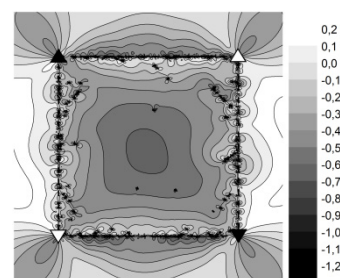
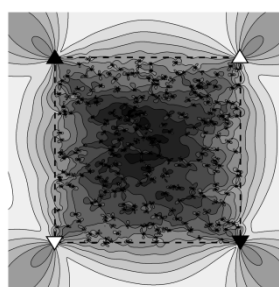
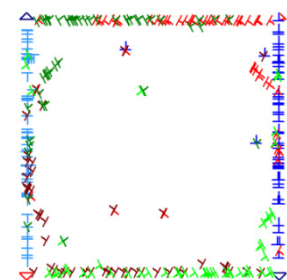
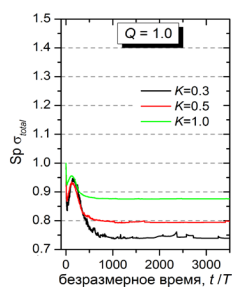


Рисунок 2- Зависимость изменения относительного шпура напряжений, рассчитанная для одной и той же системы от времени УЗО.

Рисунок 3 - Расположение дислокаций в расчетной ячейке после УЗО в течение 5000 периодов колебаний при значениях параметров $K=0.3$ и $Q=1.0$.

Рисунок 4 - Карты напряжений сдвиговой компоненты σ_{xy} : а) неупорядоченная система из 300 дислокаций в начальный момент времени до ультразвукового воздействия; б) та же система после ультразвукового воздействия в течение 5000 периодов колебаний.

определены среднеквадратичные упругие микродеформации в ультрамелкозернистых металлах, подвергнутых УЗО с различными амплитудами, и получено изменение микродеформаций в пределах от 10 до 47%.

Таким образом, учет, наряду с «главной», и второстепенных систем скольжения дислокаций приводит к обнаружению новых процессов структурной перестройки в деформированных материалах, происходящих при УЗО. В частности, взаимодействие между дислокациями различных плоскостей способствует образованию субструктуры внутри зерна. Рассмотренная модель все еще является неполной, так как не принимает во внимание такие процессы, как генерация дислокаций, их перемещение, дислокационные реакции, в том числе их аннигиляция и др. Развитие моделирования с учетом казанных факторов позволит глубже понять происходящие при УЗО процессы и целенаправленно влиять на структуру и механические свойства материалов.

Список литературы:

1. В.П. Северденко, В.В. Клубович, А.В. Степаненко. Обработка металлов давлением с ультразвуком, Наука и техника, Минск, 1973.
2. Д. Ниблетт, Дж. Уилкс. Внутреннее трение в металлах, связанное с дислокациями. УФН. 1963. Т. 80. № 1. С. 125-187.
3. Гиндин И.А., Волчок О.И., Неклюдов И.М. Релаксация внутренних напряжений в кремнистом железе под действием ультразвуковых колебаний // ФТТ. 1975. Т. 17. В. 3. С. 655-657.
4. Кулемин, А.В. Ультразвук и диффузия в металлах. М.: Металлургия, 1978. 200 с.
5. Г.В. Бушуева, Г.М. Зиненкова, Н.А. Тяпунина, В.Т. Дегтярев, А.Ю. Лосев, Ф.А. Плотникова. Самоорганизация дислокаций в ультразвуковом поле Кристаллография 53 (2008) 507-512.
6. О.В. Абрамов. Воздействие мощного ультразвука на жидкие и твердые металлы, Наука, Москва, 2000.
7. D.V. Bachurin, R.T. Murzaev, J.A. Baimova, A.A. Samigullina, K.A. Krylova. Ultrasound influence on behavior of disordered dislocation systems in a crystal with non-equilibrium grain boundaries, Letters on materials 6 (2016) 183-188.
8. Мухаметгалина А.А., Самигуллина А.А., Сергеев С.Н., Жияев А.П., Назаров А.А., Загидуллина Ю.Р., Пархимович Н.Ю., Рубаник В.В., Царенко Ю.В. Влияние ультразвуковой обработки на микроструктуру и микротвердость ультрамелкозернистого никеля, полученного методом кручения под высоким давлением. Письма о материалах. 2017. Т. 7. № 2. С. 85-90.