УДК 539.4.01

ДИСЛОКАЦИОННАЯ КИНЕТИКА ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ДВУМЕРНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Е.Е. Бадиян, А.Г. Тонкопряд, Е.В. Фтемов, О.В. Шеховцов
Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Харьков, Украина
E-mail: Evgeny.E.Badiyan@univer.kharkov.ua; тел. +38(057)707-53-47

Дислокационно-кинетический подход применен к исследованию пластического течения плоских образцов двумерных поликристаллов чистых металлов в условиях одноосного растяжения с постоянной скоростью деформации при умеренных температурах. Сформулировано дислокационно-кинетическое уравнение, в котором учтены роль свободной поверхности плоского образца, являющейся источником и стоком дислокаций, и упрочняющее действие сквозных границ зерен в двумерном поликристалле. Для расчета кривой деформации кинетическое уравнение преобразовано с использованием закона деформационного упрочнения Тейлора и получено аналитическое решение этого уравнения. На примере плоских образцов двумерных поликристаллов чистого алюминия (99,999 ат.%) показано, что результаты расчетов достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.

ВВЕДЕНИЕ

Широкое использование различных поликристаллических твердых тел в качестве конструкционных материалов обусловливает необходимость понимания физической природы их прочности и пластичности. Как известно, границы зерен являются не только барьерами для движения дислокаций, контролирующих механические свойства поликристаллов, но и эффективными источниками и стоками дислокаций и других радиационных дефектов, обеспечивающими повышенную радиационную стойкость [1–3]. Удачным модельным объектом для исследования являются двумерные поликристаллы. Они содержат только один слой зерен и имеют сквозные «вертикальные» границы зерен, т. е. все зерна являются «поверхностными» в том смысле, что они имеют выход на свободную поверхность образца. В двумерных поликристаллах существует возможность определения кристаллографической ориентации всех зерен и кристаллогеометрических параметров их границ. Из-за отсутствия стесненности «поверхностных» зерен в «вертикальном» направлении, перпендикулярном оси растяжения, специфически проявляются ротационные [4, 5] и другие эффекты [6, 7], связанные с пластической деформацией. Вместе с тем двумерные поликристаллы находят самостоятельное практическое применение в качестве поликристаллических пленок, фольг и пластин, которые эксплуатируются в условиях действия механических напряжений.

Для описания пластического течения кристаллического материала может быть использован дислокационно-кинетический подход. Он основан на уравнениях, описывающих эволюцию плотности дислокаций в материале с ростом степени пластической деформации. Такой подход позволяет получить зависимость напряжения течения от среднего размера зерен, поперечного размера образца, температуры, степени и скорости деформации [8–14].

1. ДИСЛОКАЦИОННО-КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПЛОСКИХ ОБРАЗЦОВ ДВУМЕРНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Настоящая работа посвящена исследованию пластической деформации в условиях одноосного растяжения при умеренных температурах плоских образцов двумерных поликристаллов чистых металлов с толщиной от ~ 50 мкм и более и со средним размером зерен от ~ 50 мкм и до макроскопических размеров (нано- и микроразмерные образцы с нано- и микрозеренной структурами исследованы в работах [12–14]). Под плоскими образцами здесь понимаются образцы прямоугольного сечения, размеры которых связаны соотношением $D \ll w < l$, где D – толщина образца (размер в «вертикальном» направлении), w и l – ширина и длина рабочей части соответственно (рис. 1). В таких образцах имеем отношение площади свободной поверхности к объему: $S_S/V \gg 1$ см$^{-1}$.

Кинетическое уравнение описывает эволюцию средней плотности дислокаций ρ в материале с ростом сдвиговой деформации γ. Оно должно содержать произведение $\rho(d\rho/d\gamma)$ и слагаемые, описывающие процессы накопления дислокаций в материале и уменьшения их плотности. Запишем дислокационно-кинетическое уравнение для плоских образцов двумерных поликристаллов, используя данные работ [8–14]. При этом должна быть учтена специфика исследуемых образцов. Она состоит в том, что в таких объектах большую роль играет свободная поверхность образца, которая является источником и стоком дислокаций. Кроме того, все границы зерен являются сквозными, что обусловливает особенности связанного с ними деформационного упрочнения.

Накопление дислокаций в трехмерном поликристалле, толщина D которого значительно превосходит средний размер зерен d, вследствие наличия границ зерен описывается членом $(\beta/bd)\rho$, где b – вектор Бюргерса; β – коэффициент, определяющий интенсивность накопления дислокаций в зернах в результате ограничения длины свободного пробега дислокаций размером зерна d.

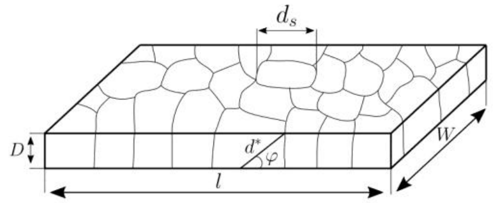


Рис. 1. Схема плоского образца двумерного поликристалла

Коэффициент β выражает относительную долю зерен, заключенных в объеме и не имеющих выхода на свободную поверхность образца. Однако в двумерном поликристалле все зерна являются «поверхностными», поэтому $\beta = 0$. Здесь упрочняющее действие оказывают сквозные «вертикальные» границы зерен, и нам необходимо его учесть.

Согласно [7] «вертикальные» границы «поверхностных» зерен создают препятствия для движения дислокаций только в тех областях зерен, которые примыкают к этим границам. Таким образом, в «поверхностном» зерне, объем которого равен V, имеется его часть с объемом V^*, в котором дислокации испытывают затруднение для движения, встречаясь с «вертикальными» границами зерен, в то время как в остальной части зерна объемом $V - V^*$ движущиеся дислокации таких препятствий не имеют. Относительную часть зерна, которая примыкает к «вертикальным» границам, определяет величина $p^* = V^*/V$. Тогда по аналогии с β/bd можем записать выражение p^*/bd^*, которое характеризует упрочняющее действие «вертикальных» границ зерен в двумерном поликристалле. Длина свободного пробега d^* дислокаций в «поверхностном» зерне до встречи с вертикальной границей (см. рис. 1) нуждается в определении.

Если принять, что «поверхностные» зерна имеют форму квадрата со стороной d_s на свободной «горизонтальной» поверхности и размер $d_t = D$ в поперечном («вертикальном») направлении, то в случае $d_s \le d_t$ имеем дело с зеренной структурой, которая при $d_s \ll d_t$ является «игольчатой». Для нее $p^* = 1$ и $d^* = d_s/\cos\varphi$, где φ – угол между плоскостью скольжения и осью растяжения (вдоль этой оси измеряется длина *l* рабочей части образца). Значит, в этом случае $p^*/bd^* = \cos\varphi/bd_s$. Для зеренной структуры с параметрами $d_s > d_t$, которая при $d_s \gg d_t$ является «блинной», получается $p^* = (d_t/d_s)/\mathrm{tg}\varphi$ и $d^* = d_t/\sin\varphi$, но выражение $p^*/bd^* = \cos\varphi/bd_s$ остается без изменений. Таким образом, в дислокационно-кинетическом уравнении зернограничное упрочнение в двумерном поликристалле описывается членом $(p^*/bd^*)\rho = (\cos\varphi/bd_s)\rho$.

Кроме рассмотренного выше зернограничного упрочнения, вклады в накопление дислокаций дают также работа поверхностных дислокационных источников с плотностью n_S и размножение дислокаций посредством механизма двойного поперечного скольжения винтовых дислокаций на дислокациях леса. В кинетическом уравнении они описываются слагаемыми $\left(\frac{S_S}{V}\right)\left(\frac{n_S}{b}\right)$ и $k_f\rho^{3/2}$ соответственно, где k_f – коэффициент, определяющий интенсивность размножения дислокаций на дислокациях леса ($k_f \approx 10^{-2}/b$). Следует отметить, что механизм размножения дислокаций на дислокациях леса характерен для так называемых обычных поликристаллических металлов с размерами зерен от ~ 10 мкм и более, но не работает в нанокристаллических материалах [12, 14]. Для образцов прямоугольного сечения отношение площади свободной поверхности к объему определяется выражением $S_S/V = 2(1/D + 1/w)$, которое для плоских образцов ($D \ll w$) преобразуется к виду $S_S/V = 2/D$ [13].

Выпадение дислокаций из процесса размножения вследствие их выхода из образца на его поверхность приводит к уменьшению средней плотности ρ. В кинетическом уравнении такой процесс учитывает член $-(\sin\varphi/bD)\rho$. Кроме того, плотность дислокаций в материале уменьшается из-за аннигиляции винтовых участков дислокационных петель, что учитывает слагаемое $-k_a\rho^2$, где k_a – коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций.

В итоге для плоских образцов двумерных поликристаллов чистых металлов с толщиной от ~ 50 мкм и более и со средним размером зерен от ~ 50 мкм и до макроскопических размеров в условиях одноосного растяжения с постоянной скоростью деформации $\dot{\varepsilon}$ при умеренных температурах (в отсутствие диффузионных механизмов аннигиляции дислокаций) дислокационно-кинетическое уравнение может быть записано в виде

$$\rho(d\rho/d\gamma) = (\cos\varphi/bd_s)\rho + (2/D)(n_S/b) + k_f\rho^{3/2} - (\sin\varphi/bD)\rho - k_a\rho^2. \quad (1)$$

2. ПЛАСТИЧЕСКОЕ ТЕЧЕНИЕ ПЛОСКИХ ОБРАЗЦОВ ДВУМЕРНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Зависимость напряжения σ от степени пластической деформации ε характеризует пластическое течение материала. Для получения кривых деформации $\sigma(\varepsilon)$ в случае одноосного растяжения плоских образцов двумерных поликристаллов преобразуем кинетическое уравнение (1) подобно тому, как это сделано в работах [8, 10, 14], воспользовавшись выражениями $\gamma = m\varepsilon$, $\sigma = m\tau$, где m – ориентационный фактор; τ – напряжение течения, которое определяется взаимодействием дислокаций друг с другом в соответствии с соотношением Тейлора [15]

$$\tau = \alpha\mu b\rho^{1/2}, \quad (2)$$

в котором α – постоянная взаимодействия дислокаций друг с другом; μ – модуль сдвига. Выполнив преобразования, получим

$$\sigma^3(d\sigma/d\varepsilon) = -mk_a(\sigma^4 + a_1\sigma^3 + a_2\sigma^2 + a_3)/2, \quad (3)$$

где

$$a_1 = -m\alpha\mu b k_f/k_a,$$
$$a_2 = -(\cos\varphi/bd_s - \sin\varphi/bD)(m\alpha\mu b)^2/k_a,$$
$$a_3 = -(2/D)(n_S/b)(m\alpha\mu b)^4/k_a.$$

Интегрируя (3), получаем зависимость деформирующего напряжения σ от степени пластической деформации ε в неявном виде:

$$-(2/mk_a)(A_1\ln|\sigma-\sigma_1| + A_2\ln|\sigma-\sigma_2| + (A_3/2)\ln|\sigma^2+\xi_1\sigma+\xi_2| + ((-\xi_1 A_3/2 + A_4)/\sqrt{\xi_2-(\xi_1/2)^2})\mathrm{arctg}((\sigma + \xi_1/2)/\sqrt{\xi_2-(\xi_1/2)^2})) + C = \varepsilon. \qquad (4)$$

Постоянная интегрирования C определяется из условия $\sigma(0) = 0$. Параметры в (4) имеют вид:

$$\sigma_{1,2} = \left(\frac{1}{2}\right)\left(\sqrt{\frac{a_1^2}{4} - a_2 + y_1} - \frac{a_1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a_1}{2} - \sqrt{\frac{a_1^2}{4} - a_2 + y_1}\right)^2 - 4\left(\frac{y_1}{2} - \sqrt{\frac{y_1^2}{4} - a_3}\right)}\right),$$

где

$$y_1 = \left(-q/2 + \sqrt{(p/3)^3 + (q/2)^2}\right)^{1/3} + \left(-q/2 - \sqrt{(p/3)^3 + (q/2)^2}\right)^{1/3} + a_2/3,$$

$$p = -a_2^2/3 - 4a_3,$$

$$q = -2(a_2/3)^3 + 8a_2a_3/3 - a_1^2 a_3.$$

Величины A_1, A_2, A_3, A_4 определяются как решение системы уравнений

$$A_1 + A_2 + A_3 = 1;$$

$$A_1(\xi_1 - \sigma_2) + A_2(\xi_1 - \sigma_1) - A_3(\sigma_1 + \sigma_2) + A_4 = 0;$$

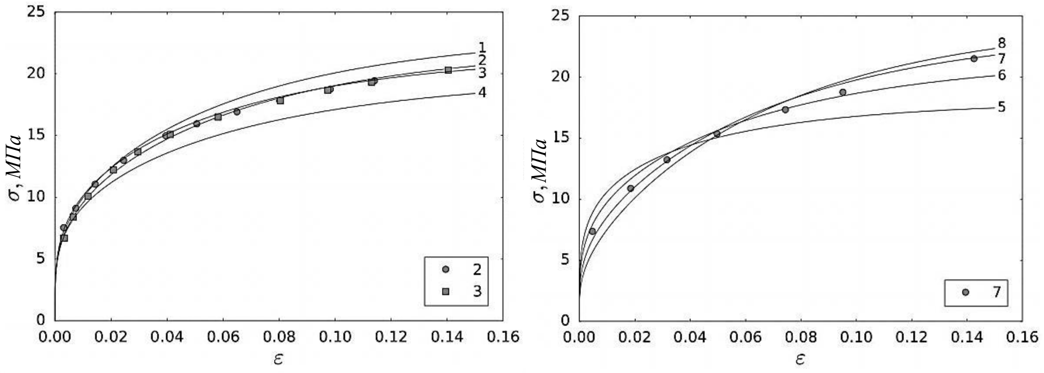
$$A_1(\xi_2 - \xi_1\sigma_2) + A_2(\xi_2 - \xi_1\sigma_1) + A_3\sigma_1\sigma_2 - A_4(\sigma_1 + \sigma_2) = 0;$$

$$-A_1\xi_2\sigma_2 - A_2\xi_2\sigma_1 + A_4\sigma_1\sigma_2 = 0,$$

в которой

$$\xi_1 = a_1/2 + \sqrt{(a_1/2)^2 - a_2 + y_1},\ \xi_2 = y_1/2 + \sqrt{(y_1/2)^2 - a_3}.$$

Далее в качестве примера приводятся кривые деформации $\sigma(\varepsilon)$ в случае одноосного растяжения плоских образцов двумерных поликристаллов чистого алюминия (99,999 ат.%). На рис. 2 линиями показаны зависимости $\sigma(\varepsilon)$, которые были рассчитаны в соответствии с (4) и «сшиты» с линейным участком, соответствующим упругой деформации, при значениях напряжения и деформации соответственно 0,07 МПа и 10^{-6} согласно данным [16]. Значения параметров, которые использовались при расчетах указанных кривых деформации по формуле (4), подобраны в соответствии с данными работ [7, 12, 13, 17] и представлены в таблице. Экспериментальные данные взяты из работы [7] и показаны на рис. 2 точками.



а *б*

Рис. 2. Кривые деформации плоских образцов двумерных поликристаллов чистого Al (99,999 ат.%) толщиной $D = 95$ мкм с различным средним размером зерен d_s: 1 – 120, 2 – 183, 3 – 205, 4 – 1000 мкм (а); со средним размером зерен $d_s = 379$ мкм и различной толщиной D: 5 – 50, 6 – 100, 7 – 266, 8 – 700 мкм (б)

Значения параметров плоских образцов двумерных поликристаллов чистого Al (99,999 ат.%), использованных при расчетах кривых деформации на рис. 2 в соответствии с данными [7, 12, 13, 17]

Номер кривой	D, мкм	w, мм	d_s, мкм	m	φ	μ, ГПа	b, нм	α	k_a	n_s, мкм$^{-2}$
1	95	4	120	2,60	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	1,00
2	95	4	183	2,65	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	0,85
3	97	4	205	2,52	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	1,50
4	95	4	1000	2,60	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	1,00
5	50	4	379	2,69	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	1,00
6	100	4	379	2,69	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	1,00
7	266	4	379	2,69	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	1,00
8	700	4	379	2,69	$\pi/4$	27	0,286	0,32	9,7	1,00

Деформационное упрочнение плоских образцов двумерных поликристаллов зависит согласно (1) и (4) как от среднего размера зерен d_s, так и от толщины D деформируемых образцов. Это ясно демонстрируют кривые деформации на рис. 2. Следует также отметить, что эти кривые ограничены степенью деформации $\sim 15\%$. При больших пластических деформациях необходимо учесть особенности формирования ячеистой и фрагментированной дислокационных структур и их вклад в деформационное упрочнение.

ВЫВОДЫ

В рамках дислокационно-кинетического подхода исследовано пластическое течение плоских образцов двумерных поликристаллов чистых металлов до стадии развитой пластической деформации. На основе имеющихся в литературе данных сформулировано кинетическое уравнение, описывающее эволюцию плотности дислокаций с ростом степени деформации плоского образца двумерного поликристалла с толщиной и средним размером зерен от ~ 50 мкм и до макроскопических значений в условиях одноосного растяжения с постоянной скоростью деформации при умеренных температурах. Для расчета кривой деформации дислокационно-кинетическое уравнение преобразовано с использованием закона деформационного упрочнения Тейлора и получено аналитическое решение этого уравнения. В качестве примера представлены кривые деформации плоских образцов двумерных поликристаллов чистого алюминия (99,999 ат.%), которые находятся в достаточно хорошем согласии с экспериментальными данными. Предложенная модель позволяет количественно описывать деформационное упрочнение плоских образцов двумерных поликристаллов в зависимости от среднего размера зерен и толщины деформируемых образцов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. V.N. Voyevodin, V.V. Bryk, A.S. Kalchenko, I.M. Neklyudov. Simulation technologies in modern radiation material science // *Problems of Atomic Science and Technology. Series "Radiation Damage Physics and Radiation Materials Science"*. 2014, N 4(92), p. 3-22.
2. A. Chauhan, D. Litvinov, J. Aktaa. High temperature tensile properties and fracture characteristics of bimodal 12Cr-ODS steel // *Journal of Nuclear Materials*. 2016, v. 468, p. 1-8.
3. G.A. Vetterick, J. Gruber, P.K. Suri, J.K. Baldwin, M.A. Kirk, P. Baldo, Y.Q. Wang, A. Misra, G.J. Tucker, M.L. Taheri. Achieving Radiation Tolerance through Non-Equilibrium Grain Boundary Structures // *Scientific reports*. 2017, v. 7(1), p. 12275.
4. Е.Е. Бадиян, А.Г. Тонкопряд, О.В. Шеховцов, Т.Р. Зетова, Р.В. Шуринов, С.В. Талах, А.В. Дергачова. Особенности структуры двумерных поликристаллов меди, полученных методом рекристаллизации, и характер ее изменения в процессе пластического деформирования // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники»*. 2016, №1(101), с. 88-91.
5. E.E. Badiyan, A.G. Tonkopryad, O.V. Shekhovtsov, R.V. Shurinov. Effects of temperature on the laws of plastic deformation and mechanical characteristics foils Al coated with titanium nitride // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных технологий и радиационное материаловедение»*. 2016, №2(102), с. 92-98.
6. S. Miyazaki, K. Shibata, H. Fujita. Effect of specimen thickness on mechanical properties of polycrystalline aggregates with various grain sizes // *Acta Metall*. 1979, v. 27, p. 855-862.
7. P.J. Janssen, T.H. de Keijser, M.G. Geers. An experimental assessment of grain size effects in the uniaxial straining of thin Al sheet with a few grains across the thickness // *Mater. Sci. Eng*. 2006, v. A 419, p. 238-248.
8. U.F. Kocks, H. Mecking. Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case // *Progr. Mater. Sci*. 2003, v. 48, p. 171-273.
9. О.А. Кайбышев, Р.З. Валиев. *Границы зерен и свойства металлов*. М.: «Металлургия», 1987, 214 с.
10. Г.А. Малыгин. Уравнение эволюции плотности дислокаций и первая стадия деформационного упрочнения кристаллов // *ФТТ*. 1993, т. 35, №5, с. 1328-1342.
11. Г.А. Малыгин. Деформационное упрочнение кристаллов. Размерный, ориентационный и поверхностный эффекты // *ФТТ*. 1993, т. 35, №6, с. 1698-1709.
12. Г.А. Малыгин. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов // *ФТТ*. 2007, т. 49, №6, с. 961-982.
13. Г.А. Малыгин. Размерные эффекты при пластической деформации микро- и нанокристаллов // *ФТТ*. 2010, т. 52, №1, с. 48-55.
14. Г.А. Малыгин. Влияние поперечного размера образцов с микро- и нанозеренной структурой на предел текучести и напряжение течения // *ФТТ*. 2012, т. 54, №3, с. 523-530.
15. G.I. Taylor. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I. Theoretical // *Proc. Roy. Soc. A*. 1934, v. 145, N 855, p. 362-387.
16. I.C. Noyan, J.B. Cohen. *Residual stress: measurement by diffraction and interpretation*. New York: "Springer-Verlag", 1987, p. 44-45.
17. Г.А. Малыгин. Аннигиляция винтовых дислокаций поперечным скольжением как механизм динамического отдыха // *ФТТ*. 1992, т. 34, №9, с. 2882-2892.

Статья поступила в редакцию 11.02.2019 г.

ДИСЛОКАЦІЙНА КІНЕТИКА ПРИ ПЛАСТИЧНІЙ ДЕФОРМАЦІЇ ДВОВИМІРНИХ ПОЛІКРИСТАЛІВ

Є.Ю. Бадіян, А.Г. Тонкопряд, Є.В. Фтьомов, О.В. Шеховцов

Дислокаційно-кінетичний підхід застосовано до дослідження пластичної течії плоских зразків двовимірних полікристалів чистих металів в умовах одноосного розтягу з постійною швидкістю деформації при помірних температурах. Сформульовано дислокаційно-кінетичне рівняння, в якому враховані роль вільної поверхні плоского зразка, яка є джерелом і стоком дислокацій, і зміцнююча дія наскрізних меж зерен у двовимірному полікристалі. Для розрахунку кривої деформації кінетичне рівняння перетворено з використанням закону деформаційного зміцнення Тейлора і отримано аналітичне рішення цього рівняння. На прикладі плоских зразків двовимірних полікристалів чистого алюмінію (99,999 ат.%) показано, що результати розрахунків досить добре узгоджуються з експериментальними даними.

DISLOCATION KINETICS DURING PLASTIC DEFORMATION OF TWO-DIMENSIONAL POLYCRYSTALS

E.E. Badiyan, A.G. Tonkopryad, Ye.V. Ftomov, O.V. Shekhovtsov

The dislocation-kinetic approach is applied to the study of plastic flow of plate specimens of two-dimensional polycrystals of high purity metals under uniaxial tension with a constant strain rate at moderate temperatures. A dislocation-kinetic equation is formulated. It takes into account the role of the free surface of a plate specimen, which is the source and sink of dislocations, and the strengthening effect of through grain boundaries in a two-dimensional polycrystal. To calculate tensile stress-strain curves, the kinetic equation was transformed using the Taylor strain hardening law and an analytical solution was obtained for this equation. Using the example of plate specimens of two-dimensional polycrystals of high purity aluminium (99.999 at.%) it was shown that the calculation results are in good agreement with experimental data.