

Критическая плотность дислокаций при их перестройке в полигонизационные стенки

К. М. Борисовская*, Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов

Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины
03142, Киев, Украина, ул. Кржижановского, 3
*E-mail: kmborysovska@ukr.net

Показано, что выстраивание хаотически распределенных дислокаций в полигонизационные стенки происходит из-за отсутствия симметрии собственных напряжений дислокаций. Поэтому в кристалле при деформировании появляются области, где напряжения понижены или повышены по сравнению со средним значением. Начало процесса формирования ячеек зависит как от напряжения трения решетки, так и от дислокационной плотности. Перестройка структуры начинается при достижении критической плотности дислокаций.

Ключевые слова: полигонизация, хаос, эволюция дислокационной структуры.

Понимание эволюции дислокационной структуры в процессе деформации является ключевым для прогнозирования механических свойств металлов. Эта задача, по словам Котрелла [1], хотя и является первоочередной, но решена она будет самой последней из-за своей сложности и многоуровневости.

Как известно, процесс деформации материала проходит в несколько стадий [2, 3]: формирование pile-up, дислокационных клубков, ячеек и границ зерен. Образование ячеистой структуры является одной из самых важных стадий, поскольку в процессе эволюции определяет будущий размер зерна, который оказывает огромное влияние на деформационные и прочностные свойства деформируемого металла [4].

Существует достаточно большое количество работ, посвященных данному вопросу [5—9]. Ханер в работе [5] рассмотрел процесс формирования дислокационных ячеек, положив в основу уравнения для броуновского движения Ланжевина, и с учетом вероятностных процессов получил модифицированное уравнение Фоккера—Планка для функции дислокационной плотности. В этой работе силы, действующие на дислокации, являются случайными, как при броуновском движении, что служит плохим приближением, поскольку напряжения от дислокаций — дальнедействующие ($\sim 1/r$, где r — расстояние до дислокации), поэтому их нельзя считать случайными.

Согласно Хольту [6], формирование ячеек вызвано локальным изменением дислокационной плотности при деформации. Таким образом, флуктуация дислокационной плотности является “затравкой” к формированию будущих ячеек. Однако в работе Хольта не показана связь собственных напряжений дислокаций с флуктуацией их плотности.

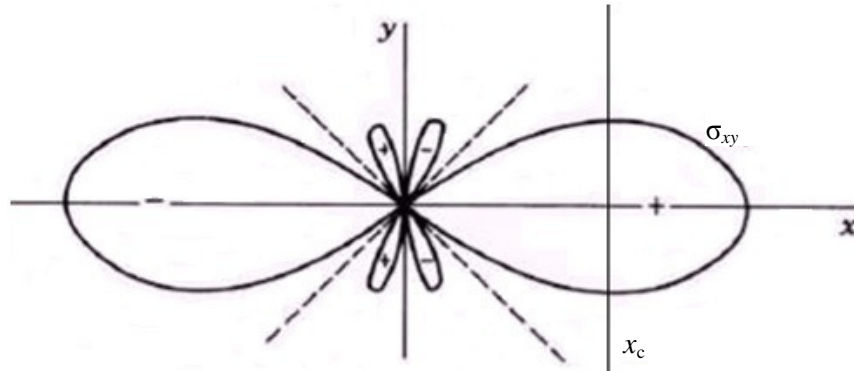


Рис. 1. Эквипотенциальные линии касательного напряжения краевой дислокации [10].

В работе [7] рассмотрены энергетические критерии формирования дислокационных ячеек и показано, что наблюдаемые размеры ячеек и их длины обусловлены минимальной общей энергией деформации для фиксированного положения дислокации.

Если основываться на силовом критерии образования ячеек, то, прежде всего, следует учитывать анизотропию собственных напряжений дислокаций. Согласно Хирту и Лоту [10], эквипотенциальные линии напряжений дислокаций имеют сильную зависимость от угла (рис. 1).

Как видно на рис. 1, по линии абсцисс существует неустойчивый максимум по напряжению x_c . То есть если среднее расстояние между краевыми дислокациями становится менее x_c , то дислокации начнут сгруппировываться в стенки. Поскольку касательное напряжение дислокации определяется выражением [10]

$$\sigma_{12} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (1)$$

где G — модуль сдвига; b — вектор Бюргерса; x и y — абсцисса и ордината соответственно. Данное напряжение на максимуме должно быть больше напряжения трения σ_{tr} то есть в точке максимума должно соблюдаться следующее равенство:

$$\sigma_{tr} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (2)$$

Согласно [3], среднее расстояние r ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$) между дислокациями обратно пропорционально корню квадратному из их плотности:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} = \frac{1}{\sqrt{\rho}}. \quad (3)$$

Решая численно уравнение (2) относительно σ_{tr} , получаем следующее выражение для предельной плотности дислокаций ρ_c , начиная с которой должна наблюдаться перестройка из хаотической структуры в дислокационные стенки:

$$\rho_c = 0,58 \frac{4\pi^2(1-\nu)^2\sigma_{tr}^2}{(Gb)^2}. \quad (4)$$

С учетом изложенного нами проведено моделирование поведения ансамбля краевых дислокаций одного знака методом дислокационной

динамики. Этот метод детально описан нами в предыдущих работах [11—16]. Его суть состоит в том, что в каждый момент времени, которое увеличивается дискретно, рассчитываются напряжения, действующие на каждую дислокацию из ансамбля, их скорости, а затем перемещения.

В данной работе в модельном кристалле размером $1000b$ (b — вектор Бюргерса) краевые дислокации одного знака размещались случайным образом с помощью генератора случайных чисел. В процессе моделирования случайно расположенные дислокации (рис. 2, *a*) под действием собственных напряжений перестраивались из хаотического ансамбля в дислокационные стенки. При моделировании в качестве модельного материала использовали железо (модуль сдвига — 84 ГПа, коэффициент Пуассона — 0,29, $b = 0,314$ нм), напряжение трения — 20 МПа. Шаг по времени выбирали из условия, что дислокация с максимальной скоростью проходила расстояние $2b$. В зависимости от того, какое напряжение больше — напряжение, вызывающее скольжение или переползание, дислокация могла или скользить вдоль плоскости легкого скольжения или переползнуть. Скорость дислокации линейно зависела от напряжения, действующего на дислокацию [10].

Как показали результаты моделирования, процесс выстраивания дислокаций в стенки зависит как от плотности дислокаций, так и от напряжения трения решетки. Дислокации двигаются, пока напряжения, действующие на них, не становятся меньше напряжения трения σ_{tr} . Если σ_{tr} велико, перестройки структуры не наблюдается. Если напряжение

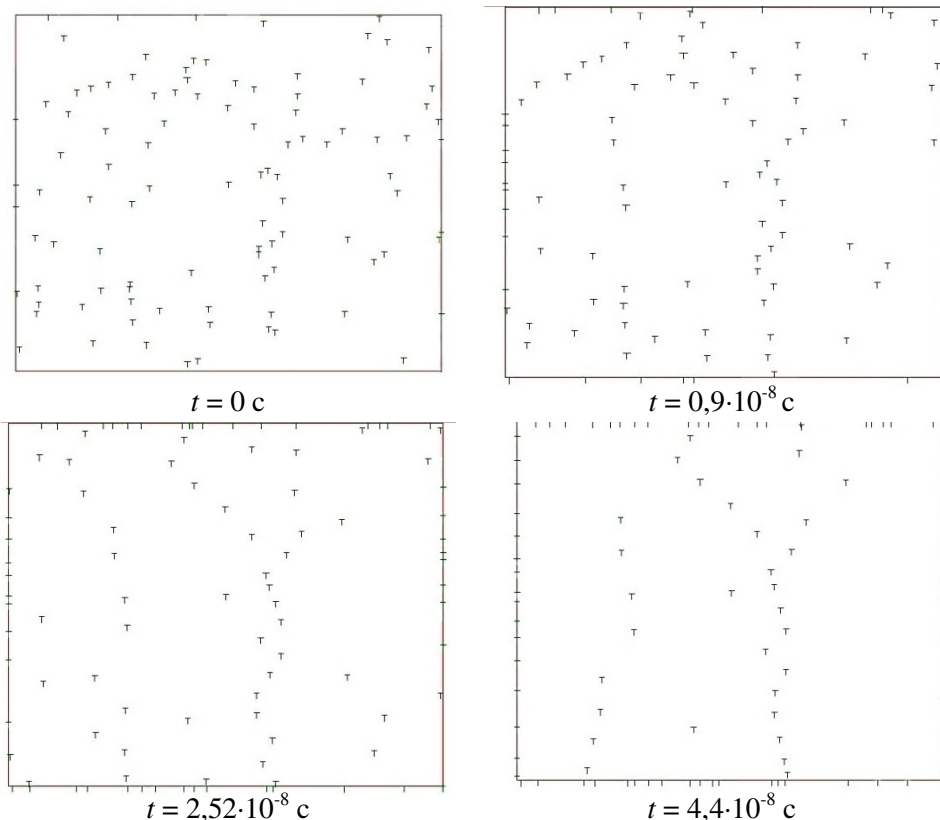


Рис. 2. Эволюция дислокационного ансамбля под действием собственных напряжений.

взаимодействия между дислокациями больше напряжения трения, то хаотическая структура постепенно перестраивается в полигонизационные стенки (рис. 2).

Очевидно, как и в модели Хольта [6], из-за неравномерности распределения дислокаций возникают области, где склонность к образованию ячеек повышена. Эти области являются “затравками” будущих стенок, поскольку имеют большие напряжения [17]. Эта особенность структурных перестроек усложняет вычисление точной критической плотности, при которой начинается перестройка.

Таким образом, выстраивание хаотически распределенных дислокаций в полигонизационные стенки происходит из-за наличия анизотропии собственных напряжений дислокаций. Такое распределение напряжений приводит к тому, что в пластически деформируемом кристалле появляются области с пониженным и повышенным уровнями внутренних напряжений. Процесс упорядочения дислокационной структуры зависит от напряжения трения со стороны кристаллической решетки движущимся дислокациям (включая термоактивационные процессы, влияющие на эту величину) и от исходного распределения дислокационной плотности. Перестройка структуры начинается при достижении критической плотности дислокаций.

Список литературы

1. Котрелл А.Х. Теоретические аспекты процесса разрушения. *Атомный механизм разрушения*. М., 1963. С. 30–68.
2. Трефилов В.И., Моисеев В.Ф., Печковский Э.П. *Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов*. Киев. 1989. 256 с.
3. Трефилов В.И., Моисеев В.Ф., Печковский Э.П. Изменение ячеистой дислокационной структуры и упрочнение при пластической деформации ОЦК металлов. *Докл. АН УССР*. 1985. №. 11. С. 81–84.
4. Трефилов В.И., Мильман Ю.В., Фирстов С.А. *Физические основы прочности тугоплавких металлов*. Киев. 1975.
5. Nähner P. A theory of dislocation cell formation based on stochastic dislocation dynamics. *Acta Materialia*. 1996. Vol. 44, No. 6. P. 2345–2352.
6. Holt D.L. Dislocation cell formation in metals. *J. Appl. Phys.* 1970. Vol. 41, No. 8. P. 3197–3201.
7. Kuhlmann-Wilsdorf D., Van der Merwe J.H. Theory of dislocation cell sizes in deformed metals. *Mater. Sci. Engineering*. 1982. Vol. 55, No. 1. P. 79–83.
8. Prinz F., Argon A.S. Dislocation cell formation during plastic deformation of copper single crystals. *Phys. Stat. Solidi (a)*. 1980. Vol. 57, No. 2. P. 741–53.
9. Galindo-Nava E.I., Rivera-Díaz-del-Castillo P.E.J. A thermodynamic theory for dislocation cell formation and misorientation in metals. *Acta Mater.* 2012. Vol. 60, No. 11. P. 4370–4378.
10. Хирт Д., Лоте И. *Теория дислокаций*. М. : Атомиздат, 1972.
11. Borysovska K., Slunyayev V., Podrezov Y., Pakiela Z., Kurzydowski K. Influence of the dislocation structure on the crack tip in highly deformed iron. *Mater. Sci. Poland*. 2005. Vol. 23, No. 2. P. 521–528.
12. Raab G.I., Podrezov Y.M., Aleshin G.N. Dislocation structure evolution during plastic deformation of low-carbon steel. *Mater. Sci. Forum*. Trans Tech Publications, 2016. Vol. 870. P. 253–258.
13. Борисовская Е.М., Подрезов Ю.Н., Фирстов С.А. Динамика структурных перестроек с учетом процесса зарождения дислокаций. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. 2007. Вып. 14. С. 3–10.

14. Борисовская Е.М., Подрезов Ю.Н. Анализ условий аннигиляции дислокационных скоплений. *Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении*. К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. 2005. Вып. 7. С. 99–108.
15. Борисовская Е.М., Подрезов Ю.Н., Фирстов С.А. Компьютерное моделирование эстафетного механизма передачи пластического течения от зерна к зерну. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. 2017. Вып. 23. С. 10–15.
16. Борисовская Е.М., Подрезов Ю.Н., Фирстов С.А. Динамика дислокаций в поликристалле при наличии дисклинационной стенки. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. 2015. Вып. 21. С. 7.
17. Mughrabi H. Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals. *Acta Metallurgica*. 1983. Vol. 31, No. 9. P. 1367–1379.

Критична плотність дислокацій в процесі їх перебудови в полігонізаційні стінки

К. М. Борисовська, Ю. М. Подрезов, С. О. Фірстов

Показано, що перебудова хаотично розрізаних дислокацій у полігонізаційні стінки відбувається через відсутність симетрії власних напружень дислокацій. В процесі деформації в кристалі з'являються області, де значення напруги понижені або підвищені в порівнянні з середнім значенням. Початок процесу полігонізації залежить як від напруження тертя ґратки, так і від дислокаційної щільності. Перебудова структури починається лише тоді, коли досягаються критичні щільності дислокацій.

Ключові слова: полігонізація, хаос, еволюція дислокаційної структури.

Critical density of dislocations during their rearrangement into polygonization walls

K. M. Borisovskaya, Yu. N. Podrezov, S. A. Firstov

It is shown in the work that the arrangement of randomly distributed dislocations into polygonization walls occurs due to the absence of symmetry of the intrinsic stresses of dislocations. There is an unstable maximum of intrinsic stresses along the distance to the dislocation. When it is overcome, the tangential stress from the dislocation begins to fall when the probe dislocation becomes close, therefore, at a high dislocation density, forming of polygonization walls begins. In the crystal at the very early stages of deformation, regions appear where stresses are reduced or increased compared to the average value; therefore, some regions with an initially increased dislocation density can be “seeds” for the appearance of dislocation walls due to their higher stresses. It has also been shown by the method of dislocation dynamics for dislocations only with an edge orientation that the onset of the process of cell formation depends both on the friction stress of the lattice and on the initial dislocation density. The evolution of the dislocation ensemble continues until the stresses acting on the dislocations are equal to the friction stress. The restructuring of the structure begins only when the critical density of dislocations is reached. Unfortunately, due to the initial heterogeneity of the distribution of dislocations, it is difficult to calculate the critical dislocation density with sufficient high accuracy.

Keywords: polygonization, chaos, evolution of dislocation structure.