

Вплив розміру зерна в полікристалічних матеріалах на механізми пластичної деформації та границю плинності

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

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України
03142, Київ, Україна, вул. Кржижановського, 3

*E-mail: kmborysovska@ukr.net

З використанням методу клітинкових автоматів розглянуто вплив розміру зерна на фізичну границю плинності полікристала. Досліджено три механізми пластичної деформації: ініціація пластичного плину від зерна до зерна шляхом дислокаційних скупчень, виникнення пластичного плину в зернах незалежно одне від одного під дією зовнішньої напруги і міжзеренне проковзування. Показано, що якщо розміри зерен великі ($d > 200$ нм), пластична деформація поширюється від зерна до зерна шляхом ініціації дислокаційних скупчень. У випадку середніх розмірів зерна (20 нм $< d < 200$ нм) пластична деформація виникає в окремих зернах. І тому основний вплив на пластичну деформацію в цьому разі надає зовнішня напруга. З подальшим зменшенням зерна ($d < 20$ нм) основним механізмом деформації, яка формує границю плинності, є бездислокаційне міжзеренне проковзування.

Ключові слова: границя плинності, розмір зерна, закон Холла—Петча.

Вступ

Отримані в останні роки численні експериментальні дані для полікристалів про залежність границі плинності від розміру зерна свідчать про те, що ця залежність має складний характер і не описується законом Холла—Петча на всьому інтервалі розмірів зерен. Як показують експерименти, за великих зерен в широкому інтервалі температур і швидкостей деформації дійсно виконується закон Холла—Петча — границя плинності пропорційна кореню з розміру зерна: $\sigma_s \approx d^{-1/2}$, однак зі зменшенням розмірів зерна показник ступеня змінюється від $n = -1/2$ до -1 , а за наддрібних зерен навіть стає позитивним.

Детальні огляди моделей, що пояснюють відхилення від закону Холла—Петча, можна знайти в роботах [1, 2]. Їх можна розділити на дві групи: моделі першої розглядають нанокристалічні матеріали як композити, що складаються з внутрізеренної і зернограничної фаз [2—6], а моделі другої базуються на механізмах деформації, в яких визначальну роль грають дефекти, як носії пластичної деформації [5—8]. В разі зменшення розміру зерна дефектів стає менше і відбувається зміна механізму пластичної деформації. Зокрема, слід відзначити роботу Панді і Масумура [8], в якій основним механізмом передачі пластичної деформації є притиснуті до границі зерна дислокаційні скупчення. Але в разі малих зерен кількість дислокацій невелика, тому є необхідною додаткова зовнішня напруга, щоб активізувати джерело дислокацій в сусідньому зерні.

Оскільки, чим менше в скупченні дислокацій, тим більшу напругу потрібно докласти для досягнення необхідної деформації. Границя

плинності зростає зі зменшенням зерна і можна показати, що цей механізм приводить до закону Холла—Петча. Однак, коли кількість дислокацій зменшується до однієї, ця залежність виходить на насичення. В роботі [8] в припущенні, що дислокаційні джерела легко активізуються прикладеною зовнішньою напругою, для границі плинності отримано залежність для розміру зерна $\sim d^{-1}$. Таким чином, за великих зерен справедливим є закон Холла—Петча, однак зі зменшенням розміру зерна показник ступеня змінюється до -1 .

Мета даної роботи — за допомогою комп'ютерного моделювання пояснити залежність границі плинності від розміру зерна.

Алгоритм розрахунку

Згідно з Дударєвим, границі плинності це не просто напруга, з досягненням якої пластична деформація складає 0,2%. Приблизно в цей момент пластична деформація проходить від одного краю зразка до іншого [9].

Нами був обраний метод клітинкових автоматів на площині. Клітинкові автомати досить універсальний метод і його використовують для моделювання фізичних явищ, що спостерігаються в різних галузях науки: від ядерної фізики до теоретичної біології [10—13]. Його широке застосування обумовлене тим, що цей метод дозволяє моделювати поведінку досить великих і складних систем, виявляючи особливості взаємодії сусідніх елементів, які впливають на загальну поведінку системи.

Сутність методу клітинкових автоматів [13] полягає в тому, що середовище, яке моделюється, розбите на області — клітинки-автомати, котрі можуть перебувати в скінченному числі станів. Для кожної клітинки визначено околицю — множину комірок, які впливають на її стан (рис. 1). На кожній ітерації з використанням правил переходу, а також стану комірок, що належать околиці даного осередку, і зовнішніх параметрів визначається новий стан для кожної комірки. Залежно від числа ітерацій, початкових і граничних умов спостерігається еволюція системи — змінюється кількість клітинок-автоматів, що знаходяться в тому чи іншому стані.

У нашому випадку клітинки-автомати моделювали зерна, які перебувають в одному з двох станів — непластичному або пластичному. Випадковим чином були задані діаметр і кут нахилу площин легкого ковзання для кожного зерна. Потім перевіряли, які зерна перейшли в пластичний стан за даної напруги (рис. 2). Зерно переходить в пластичний стан, якщо діюче на нього напруження більше за напруження σ_s , яке викликає пластичний плин в зерні.



Рис. 1. Околиця та її вплив на модельне зерно.

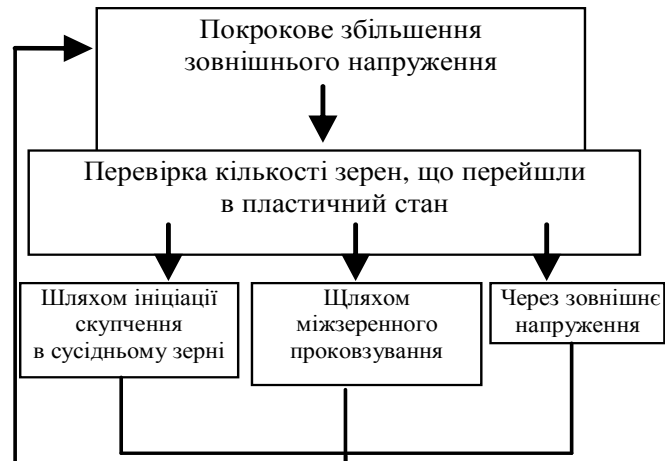


Рис. 2. Схема розрахунку методом клітинкових автоматів.

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Нами промодельовано три механізми пластичної деформації: ініціація пластичного плину від зерна до зерна дислокаційними скупченнями, виникнення пластичного плину під дією зовнішньої напруги і бездислокаційне проковзування. Напруження на площині легкого ковзання є сумою зовнішньої напруги:

$$\sigma_{12} = -\sigma_{v12} \cos \Theta_{v1} \sin \Psi_v, \quad (1)$$

де σ_{v12} — зовнішня напруга; $\cos \Theta_{v1} \sin \Psi_v$ — фактор Шмідта; та напруги від скупчень в сусідніх зернах. Напруга від скупчення в сусідньому зерні в разі, якщо воно близьке до ініційованого джерела, розраховувалася за формулою [14]

$$\sigma_z = -\sigma_{v12} Gg \left(-\xi [5(\eta-1)^2 + 3\xi^2] \cos \frac{\varphi}{2} - 2[(\eta+1)(\eta-1)^3 + (2\eta-1)(\eta-1)\xi^2 + \xi^4] \sin \frac{\varphi}{2} \right) \cos(\Theta) \sin(\Psi). \quad (2)$$

$$Gg = \frac{[(\eta^2 + \xi^2 - 1)^2 + 4\xi^2]^{1/4}}{[(\eta+1)^2 + \xi^2]^{1/2} [(\eta-1)^2 + \xi^2]^{1/2}}; \quad \varphi = \arctg \left(\frac{2\xi}{\xi^2 + \eta^2 - 1} \right);$$

$$\eta = \frac{2x}{d} + \frac{d}{2}, \quad \xi = \frac{2y}{d},$$

де x — ширина границі, тобто відстань від голови скупчення до джерела нового скупчення в сусідньому зерні; y — ордината дислокаційного джерела.

У разі, якщо скупчення сусіднього зерна знаходиться на відстані, яку можна порівняти з розміром зерна,

$$\sigma_z = -\sigma_{v12} \cos(\Theta_j) \sin(\Psi_j) \frac{d_j}{2d_i}, \quad (3)$$

де d_i — розмір зерна, в якому розраховується напруга, а d_j — розмір зерна, від якого розраховується напруга.

Таким чином, в разі дислокаційного механізму пластичної деформації напруга, що викликає пластичний плин, має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma_z = & -\sigma_{n12} [\cos(\Theta_{n1}) \sin(\Psi_v) + Gg(-\xi[5(\eta-1)^2 + 3\xi^2] \cos \frac{\varphi}{2} - \\ & - 2[(\eta+1)(\eta-1)^3 + (2\eta-1)(\eta-1)\xi^2 + \xi^4] \sin \frac{\varphi}{2}) \cos(\Theta) \sin(\Psi) + \\ & + \sum_j \cos(\Theta_j) \sin(\Psi_j) \frac{dj}{2di}]. \end{aligned} \quad (4)$$

У випадку великих зерен основний внесок у вираз (4) дає (2), а з їх зменшенням визначальним стає (1).

З подальшим зменшенням зерна виникнення дислокацій все більше ускладнюється і зерна починають обертатися і проковзувати без їх допомоги. В такому випадку, оскільки зерно обертається як ціле, ротаційну моду визначає не напруга, а сила, що рухає зерно. Як відомо, сила пропорційна масі, яка, в свою чергу, пропорційна об'єму $\sim d^3$. Встановлення точного значення сили, яка необхідна для обертання кожного зерна, вельми проблематично. В даній роботі силу, необхідну для руху зерна, визначали з виразу

$$F_i = F_{tr} + d_i^3 [f_{min} + R_i], \quad (5)$$

де F_{tr} — сила тертя; d — розмір зерна; $f_{min} = (F_{min} - F_{tr}) / d^3$ (F_{min} — мінімальна сила, що необхідна для руху зерна); R_i — випадкова величина, що лежить в діапазоні $[0, (F_{max} - d^3 f_{min})]$. Під час руху зерна ця сила повинна дорівнювати діючій на зерно зовнішній силі:

$$F_i = \sigma_v / d_i^2, \quad (6)$$

де σ_v — поточна зовнішня напруга. Таким чином, умова для руху зерна має такий вигляд:

$$F_{tr} d^2 + d_i^5 [f_{min} + R_i] = \sigma_v. \quad (7)$$

В роботі покроково збільшували зовнішню напругу і перевіряли, для яких зерен виконуються умови (4) або (7). У разі, якщо виконувалося (4), вважалося, що зерно обернулося або проковзнуло і значення R_i для нього, як і для його найближчих сусідів, змінювалося. Вважалося, що границю плинності досягнуто [9], якщо в будь-якому перетині всі зерна від краю до краю перетину або проковзнули, або знаходяться в пластичному стані. Параметри моделі бралися для молібдену технічної чистоти: $G = 23$ ГПа, $b = 0,3$ нм, напруга старту пластичної деформації в зерні приймалася як сума плинності монокристалу та доданка, пов'язаного з крайовими ефектами: $\sigma_{st} = \sigma_0 + Gb/d \approx 30 + 6,9/d_i$ (МПа); $x = 7$ нм, $F_{tr} = 0,5$ МПа, $f_{min} = 0,1$ МПа, $R_i = 0,45$ МПа, число зерен в перетині — 50, крок по напрузі — 0,1 МПа.

Як показало моделювання, для великих зерен ($d \geq 250$ нм) основним механізмом пластичної деформації є ініціація дислокаційних скупчень від зерна до зерна (рис. 3, крива 1). У цьому випадку число ітерацій становить ~ 100 , оскільки після ініціації двох-трьох зерен інші дуже швидко втягуються в процес пластичної деформації через велику напругу від дислокаційних скупчень. Для середніх розмірів зерен ($20 \text{ нм} \leq d \leq 250 \text{ нм}$) основним механізмом пластичної деформації є виникнення поодиноких

дислокацій під дією зовнішньої напруги (рис. 3, крива 2), а число ітерацій сильно залежить від кроку по зовнішній напрузі. У нашому випадку воно лежало в межах 4000—98 000. Для розмірів зерен менше 20 нм основним механізмом пластичної деформації є бездислокаційне проковзування (рис. 3, крива 3), число ітерацій — від 2500 до 80 000.

Таким чином, для великих зерен пластична деформація поширюється в зразку в основному шляхом ініціації дислокаційних скупчень від зерна до зерна, що приводить до класичного закону Холла—Петча ($n = -1/2$) (рис. 4, крива 1). Зі зменшенням зерна потужність дислокаційних скупчень зменшується і відбувається зміна механізму пластичної деформації, естафета зникає і зерна починають переходити в пластичний стан незалежно одне від одного.

Цей процес, на нашу думку, викликаний виникненням ротаційної моди, в цьому випадку зерна починають обертатися (проковзувати) практично незалежно одне від одного і передача пластичного плинину від зерна до зерна порушується. Хоча дислокації ще існують в зернах такого розміру, але в процесі деформації їм відведена допоміжна роль, оскільки в даному випадку вони є не основними носіями деформації, а своєрідним мастилом і допомагають деформуватися зерну так, щоб проковзнути або повернутися за умови мінімальних напружень (рис. 2, крива 3). Таким

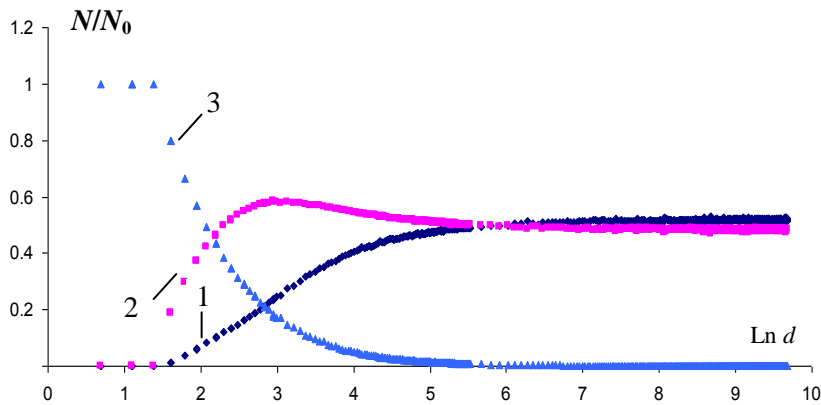


Рис. 3. Відносне число зерен, які перейшли в пластичний стан під дією різних механізмів деформації: 1 — ініціація пластичного плинину від зерна до зерна; 2 — зовнішня напруга; 3 — бездислокаційне обертання.

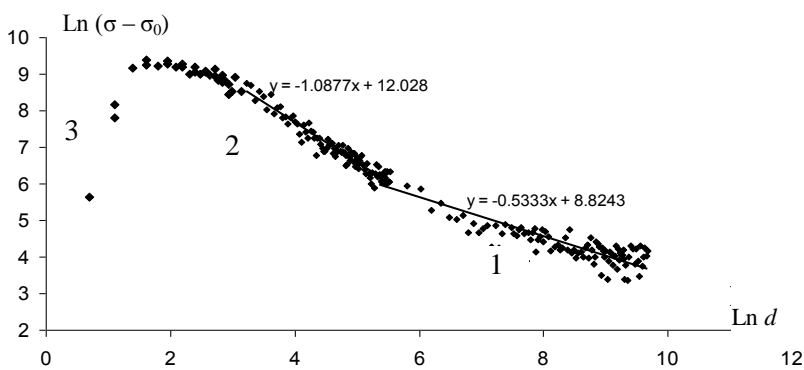


Рис. 4. Залежність логарифма границі плинності від логарифма розміру зерна: 1 — ініціація пластичного плинину від зерна до зерна; 2 — зовнішня напруга; 3 — бездислокаційне обертання.

чином, класичний закон Холла—Петча порушується ($n \approx -1$) (рис. 2, крива 2): $y = -1,0877x + 12,028$.

Для бездислокаційного проковзування має місце зростання границі плинності від розміру зерна, що за малих розмірів зерна спостерігається експериментально [15—17].

Висновки

Таким чином, залежність границі плинності від розміру зерна визначають всі три механізми пластичної деформації. У випадку великих зерен матеріал деформується шляхом утворення смуги Людерса: поширення пластичного плину відбувається шляхом ініціації дислокаційних скупчень від зерна до зерна, що приводить до класичного закону Холла—Петча ($n \sim -1/2$). Для середніх розмірів зерен порядку 20—250 нм дислокаційні скупчення перестають бути основним механізмом пластичної деформації, оскільки в них вже мало дислокацій (1—5) і тому потрібна більш висока зовнішня напруга, в цьому випадку $n \sim -1$. У випадку малих розмірів зерна близько 20 нм виникнення дислокацій стає неможливим і зерна починають проковзувати без їх допомоги. В цьому випадку, оскільки напруга, за якої відбувається проковзування, збільшується з розміром зерна (розмір зерна більше, тому проковзнути зерну важче), n стає позитивним в даному інтервалі розмірів зерен.

Список літератури

1. Гудкин М.Ю., Овидько И.А. Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов. *Успехи механики*. 2003. № 1. С. 68—125.
2. Li J.C.M., Chou Y.T. The role of dislocation in the flow stress grain size relationships. *Met. Trans.* 1970. Vol. 1, No. 5. P. 1145—1159.
3. Kocks U.F. The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation. *Met. Trans.* 1970. Vol. 1, No. 5. 1121 p.
4. Kim H.S. A composite model for mechanical properties of nanocrystalline materials. *Scr. Mater.* 1990. Vol. 39, No. 8. 1057 p.
5. Gryaznov V.G., Gutkin M.Y., Romanov A.E., Trysov L.I. On the yield stress of nanocrystals. *J. Mater. Sci.* 1993. Vol. 28, No. 16. 4359 p.
6. Cersley J.E., Ning J., Milligan W.W., Hackney S.A., Aifantis E.C. A simple, mixed-based model for the grain size dependence of strength in nanophase metals. *Nanostruct. Mater.* 1995. Vol. 5. P. 441—448.
7. Louat N. Alloys, strong at room and elevated temperatures from powder-metallurgy. *Acta Met.* 1985. Vol. 33, No. 1. P. 59—69.
8. Evans A.G., Hirth J.P. Deformation of nanoscale cermets. *Scr. Met. Mater.* 1992. Vol. 26, No. 11. P. 1675—1680.
9. Pande C.S., Masumura R.A. *Processing and Properties of Nanocrystalline Materials* / Eds. C. Suryanarayana, J. Singh, F.H. Froes. Warrendale, PA. TMS, 1996. 387 p.
10. Хоофт Герард. *The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics*. Springer Int. Publishing Springer, 2016. ISBN 978-3-319-41285-6, 978-3-319-41284-9.
11. Дударев Е.Ф. *Микропластическая деформация и предел текучести поликристаллов*. Томск: Изд-во Томского ун-та, 1988. 256 с.
12. Deutsch A. and Dormann S. Biological applications. *Cellular Automaton Modeling of Biological Pattern Formation*. Springer Science + Business Media, 2017. ISBN 978-1-4899-7980-3.
13. Hoekstra A.G., Kroc J., Sloot P. *Simulating Complex Systems by Cellular Automata*. Springer, 2010. ISBN 978-3-642-12202-6.
14. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations*. John Wiley, N. Y., 1982.
15. Андриевский Р.А., Глезер А.М. Размерные эффекты в нанокристаллических материалах. II. Механические и физические свойства. *Физика металлов и металловедение*. 2000. Т. 89, № 1. С. 91—112.
16. Gleiter H. Nanostructured materials. *Progress in Mater. Sci.* 1989. Vol. 33. P. 223—315.
17. Gleiter H. Materials with ultrafine microstructures: retrospectives and perspectives. *Nanostruct. Mater.* 1992. Vol. 1. P. 1—19.

References

1. Hudkyn M.Iu., Ovydko Y.A. Predel tekuchesty y plastycheskaia deformatsiya nanokrystallycheskykh materialov [Yield stress and plastic deformation of nanocrystalline materials]. *Uspekhy mekhaniky*. 2003. No. 1. P. 68—125 [in Russian].
2. Li J.C.M., Chou Y.T. The role of dislocation in the flow stress grain size relationships. *Met. Trans.* 1970. Vol. 1, No. 5 P. 1145—1159.
3. Kocks U.F. The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation. *Met. Trans.* 1970. Vol. 1, No. 5. 1121 p.
4. Kim H.S. A composite model for mechanical properties of nanocrystalline materials. *Scr. Mater.* 1990. Vol. 39, No. 8. 1057 p.
5. Gryaznov V.G., Gutkin M.Y., Romanov A.E., Trysov L.I. On the yield stress of nanocrystals. *J. Mater. Sci.* 1993. Vol. 28, No. 16. 4359 p.
6. Cersley J.E., Ning J., Milligan W.W., Hackney S.A., Aifantis E.C. A simple, mixed-based model for the grain size dependence of strength in nanophase metals. *Nanostruct. Mater.* 1995. Vol. 5. P. 441—448.
7. Louat N. Alloys, strong at room and elevated temperatures from powder-metallurgy. *Acta Met.* 1985. Vol. 33, No. 1. P. 59—69.
8. Evans A.G., Hirth J.P. Deformation of nanoscale cermets. *Scr. Met. Mater.* 1992. Vol. 26, No. 11. P. 1675—1680.
9. Pande C.S., Masumura R.A. *Processing and properties of nanocrystalline materials* / Eds. C. Suryanarayana, J. Singh, F.H. Froes. Warrendale, PA. TMS, 1996. 387 p.
10. Khoofit Herard. *The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics*. Springer Int. Publishing Springer, 2016. ISBN 978-3-319-41285-6, 978-3-319-41284-9.
11. Dudarev E.F. *Mykroplastycheskaia deformatsiya y predel tekuchesty polykrystallov* [Microplastic deformation and yield stress of polycrystals]. Tomsk: Yzd-vo Tomskoho un-ta, 1988. 256 p. [in Russian].
12. Andreas Deutsch and Sabine Dormann. Biological applications. *Cellula Automaton Modeling of Biological Pattern Formation*. Springer Science + Business Media, 2017. ISBN 978-1-4899-7980-3.
13. Hoekstra A.G., Kroc J., Sloot P. *Simulating Complex Systems by Cellular Automata*. Springer, 2010. ISBN 978-3-642-12202-6.
14. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations*. John Wiley, N. Y., 1982.
15. Andryevskiy R.A., Hlezer A.M. Razmernye efekty v nanokrystallycheskykh materialakh. II. Mekhanycheskiye y fizycheskiye svoistva [Dimensional effects in nanocrystalline materials. II. Mechanical and physical properties]. *Fyzyka metallov y metallovedenye*. 2000. Vol. 89, No. 1. P. 91—112 [in Russian].
16. Gleiter H. Nanostructured materials. *Progress in Mater. Sci.* 1989. Vol. 33. P. 223—315.
17. Gleiter H. Materials with ultrafine microstructures: retrospectives and perspectives. *Nanostruct. Mater.* 1992. Vol. 1. P. 1—19.

Influence of grain size on mechanisms of plastic deformation and yield stress

K. M. Borysovska, Yu. M. Podrezov, S. O. Firstov

In this work, use cellular automata method considers the effect of grain size on the physical yield strength of a polycrystalline materials, that is a stress at which plastic deformation affects the entire cross section of a sample from one edge to another. Three mechanisms of plastic deformation are considered: the initiation of plastic flow from grain to grain by dislocation pile-ups, the occurrence of plastic flow in grains independently from each other under the influence of external stress by dislocations, and intergranular slippage. Using computer simulation, it was shown that at large grain sizes ($d > 200$ nm), plastic deformation propagates from grain to grain by initiating dislocations pile-ups, since in this case pile-ups are quite powerful and have a large effect on neighboring grains. At average grain sizes (20 nm $< d < 200$ nm), plastic deformation occurs in the grains independently of each other, and therefore, the external strain exerts a major influence on plastic deformation. And with a further decrease in grain ($d < 20$ nm). The main mechanism of deformation, which forms the yield strength, is dislocation-free intergranular slippage, since grains of this size have sufficiently large image stresses that prevent large dislocation pile-ups from appearing, and the mass and volume of grains are quite small so that the grain could turn or slip under such external stresses.

Keywords: yield point, grain size, Hall—Petch law.