

Моделювання взаємодії дислокацій пластичної зони з границею зерна в області температур крихко-пластичного переходу в молібдені

К. М. Борисовська, Н. М. Марченко, Ю. М. Подрезов*,
С. А. Фірстов

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

*E-mail: yupodrezov@ukr.net

Методом дислокаційної динаміки (2D) промодельовано формування пластичної зони біля вершини тріщини в полікристалічному молібдені та проаналізовано структурну чутливість тріщиностійкості за умов, що відповідають крихко-пластичному переходу. Моделювання підтвердило немонотонний характер залежності в'язкості руйнування від розміру зерна. Аномальна структурна чутливість тріщиностійкості є результатом дії двох факторів: перерозподілу дислокацій в пластичній зоні та значного наближення дислокацій до вершини тріщини. Ефект різко посилюється, коли під дією потужного скупчення в наступному зерні дислокації різко переміщуються до голови тріщини.

Ключові слова: дислокаційна динаміка, пластична зона, тріщиностійкість, молібден, розмір зерен, крихкопластичний перехід.

Вступ

Залежність між розміром зерна і в'язкістю руйнування K_{1c} або розміром зерна і температурою в'язкокрихкого переходу є неоднозначною. Деякі експериментальні результати свідчать про те, що зменшення розміру зерна призводить до збільшення в'язкості відповідно до

$$K_{1c} = K_0 + k_2 d^{-n}, \quad (1)$$

де k_2 — матеріальна константа; n — позитивний показник. Рівняння (1) підтверджується даними, повідомленими Curgy and Knott [1], Greenfield та Margolin [2] та Srinivas et al. [3, 4]. Однак результати Werner et al. [5] щодо впливу розміру зерна на в'язкість для α -латуні та α -заліза суперечать рівнянню (1). Для першого матеріалу він виявив, що в'язкість зменшується зі зменшенням розміру зерна, тоді як для останнього Вернер повідомив, що на міцність не впливають межі зерна [5]. Нарешті, Пачина і Мазур встановили, що в'язкість переходить через мінімум за конкретного розміру зерна [6].

Експерименти виявляють чутливість в'язкості руйнування до розміру зерна та температури. Дієвим інструментом для аналізу цих закономірностей є двовимірна дислокаційна динаміка (2D), яка використовується для аналізу механізму формування пластичної зони біля кінця тріщини. Границі зерна вводяться як перешкоди для дислокаційного руху. Зокрема, А. Хартмаєр зі співробітниками [7, 8] вивчали вплив границь зерна на міцність та крихкопластичний перехід у полікристалічному вольфрамі методом комп'ютерного моделювання. В цих роботах показано, що позитивний вплив границь зерен на механізми зародження дислокацій переважає негативні наслідки їх блокування границями.

В нашій попередній роботі [9] метод дислокаційної динаміки було використано для аналізу впливу розміру зерна на границю плинності. Було показано, що для розміру зерна більше за 0,5 мкм поширення пластичного плину відбувається за естафетним механізмом шляхом ініціації дислокаційних скупчень від зерна до зерна, це приводить до реалізації класичного закону Холла—Петча ($n \sim -1/2$). 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. У цьому разі показник $n \sim -1$. За малих розмірів зерна близько 20 нм виникнення дислокацій стає неможливим і зерна починають прослизати без їх допомоги. Така стадійність добре відома і результати наших розрахунків добре узгоджуються з експериментами.

У роботі [10] методом 2D досліджено поведінку дислокаційного ансамблю поблизу вершини тріщини за постійного навантаження. Було встановлено, що наявність дислокацій поблизу вершини тріщини приводить до зниження коефіцієнта інтенсивності напружень. До таких саме висновків дійшли Зенг та Хартмеер в роботі [7]. В ході дослідження впливу розміру зерна на крихкопластичний перехід в молібдені за кімнатної температури в роботі [11] нами експериментально виявлено, що залежність тріщиностійкості від розміру зерна стрибкоподібно збільшується за малих розмірів. На рис. 1, а наведено дані цієї роботи про структурну чутливість тріщиностійкості за температур 77 та 273 К. Випробування у рідкому азоті не виявили будь-яких аномалій, тоді як за кімнатної температури спостерігається дворазове підвищення тріщиностійкості саме для розміру зерна, який є співставним з розміром пластичної зони (рис. 1, б). Існуючі моделі не пояснюють це явище.

Тому задачею дослідження було моделювання пластичної зони біля вершини тріщини в полікристалічному молібдені методом дислокаційної динаміки (2D) та аналіз впливу границь зерен на дислокаційні скупчення за умов, що відповідають крихкопластичному переходу в молібдені.

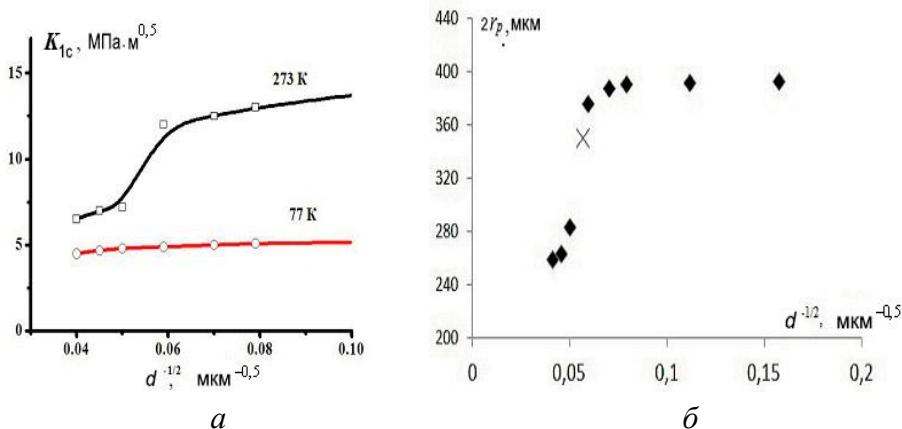


Рис. 1. Залежність в'язкості руйнування (а) та розміру пластичної зони (б) від розміру зерен низьколегованого молібдену [11].

Алгоритм розрахунків

Наші розрахунки з динаміки дислокацій (2D) базуються на класичній моделі Райса—Томпсона, яка описує поведінку дислокацій біля вершини тріщини [12]. Метод дислокаційної динаміки — це варіація проблеми багатьох тіл, яка розв’язується тільки за допомогою комп’ютерного моделювання. Час складається з дискретних кроків. На кожному кроці робиться розрахунок напруги для всіх дислокацій в ансамблі, потім обчислюються швидкості та відповідні нові положення (рис. 2). Детальніше про цей метод можна дізнатися з наших попередніх робіт [13—15] та монографій [16, 17] з цієї проблематики.

В моделі одинадцять джерел дислокації, десять — в границі зерна та одне — біля вершини тріщини (рис. 3). Якщо напруження на джерелі дислокації перевищувало початкове напруження (напруження тертя ґратки), то дві дислокації випускалися з джерела поблизу вершини тріщини і одна, якщо джерело дислокації знаходилося поблизу границі зерна. Тріщина піддається навантаженню за чистою модою I. Тому напруження, що впливають на дислокації від вершини тріщини, обчислюються згідно з роботою [18]:

$$\sigma_{11} = \sigma_v \sqrt{\frac{a}{2\pi r}} (\cos(\theta/2)(1 - \sin(\theta/2)\sin(3\theta/2)) \quad ,$$

$$\sigma_{22} = \sigma_v \sqrt{\frac{a}{2\pi r}} (\cos(\theta/2)(1 + \sin(\theta/2)\sin(3\theta/2)) \quad , \quad (2)$$

$$\sigma_{12} = \sigma_v \sqrt{\frac{a}{2\pi r}} \cos(\theta/2)\sin(\theta/2)\cos(3\theta/2) \quad ,$$

де σ_v — зовнішнє напруження; θ — кут між положенням дислокації на осі x .

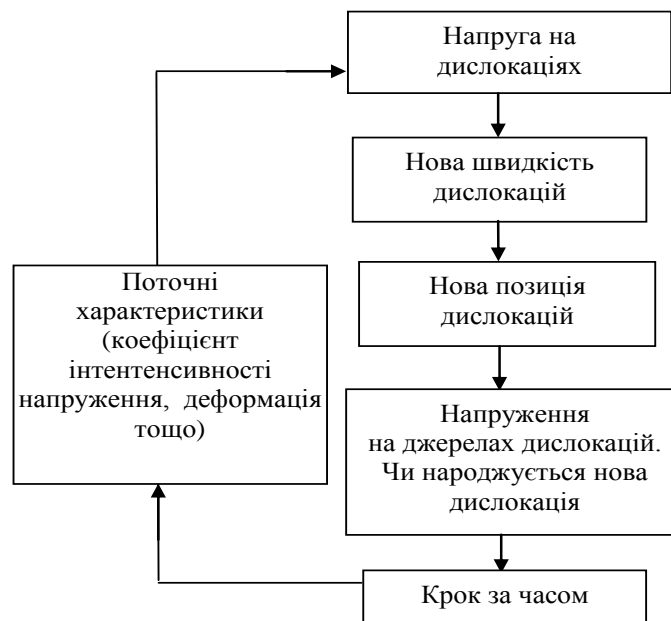


Рис. 2. Блок-схема методу дислокаційної динаміки.

Також в моделі враховано напруження, які діють на дислокацію з боку інших дислокацій та сили зображення.

Швидкості дислокацій розраховувалися згідно з формулою

$$v = A\sigma_{12}, \quad (3)$$

де $A = \frac{2bD_s}{kT} \exp(-F_k/kT) = 2,6 \cdot 10^{-10}$ м/Па·с; σ_{12} — напруження, що діє

на дислокацію; b — вектор Бюргерса; D_s — коефіцієнт самодифузії; k — константа Больцмана; T — температура. Часовий крок був обраний таким чином, щоб дислокація, на яку діє максимальне напруження, пройшла відстань $30b$ за цей час. Потім нові переміщення кожної дислокації були отримані зі швидкості та часового кроку. Результати фрактографії показують, що кінчик тріщини залишається гострим, тому затуплення тріщини не враховували.

Поточне значення коефіцієнта інтенсивності напруження K_{in} обчислювали за формулою [12] для кожного значення зовнішнього напруження σ_v , яке зростало з постійною швидкістю:

$$K_{in} = \sigma_v \sqrt{2\pi a} - \frac{3Gb}{2(1-\nu)\sqrt{2\pi}} \sum_n \frac{\cos(\theta/2)\sin(\theta)}{\sqrt{r}}, \quad (4)$$

де n — кількість дислокацій у зерні, що містить вершину тріщини; a — напівдовжина тріщини; G — модуль зсуву; ν — коефіцієнт Пуассона; r — відстань від вершини тріщини.

Коли коефіцієнт інтенсивності напруження K_{in} перевищував K_{1c} для крихкого матеріалу, вважалось, що матеріал зруйнувався. Розрахункове значення критичного коефіцієнта інтенсивності K_{out} визначали за формулою

$$K_{crit} = \sigma_v \sqrt{2\pi a}, \quad (5)$$

де σ_v — зовнішнє напруження в момент руйнування.

Комп'ютерний розрахунок з урахуванням рівнянь (4) та (5) дозволяє визначити критичне значення K_{out} , яке відповідає розрахунковій тріщиностійкості K_{1c} з урахуванням впливу дислокацій, що формують пластичну зону.

Матеріал досліджень — молибден: його тріщиностійкість в крихкому стані $K_{1c} = 2$ МПа·м^{0,5}, $G = 140$ ГПа, $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, напруга тертя ґратки 200 МПа для температури рідкого азоту та 20 МПа — для кімнатної температури, швидкість навантаження — 100 МПа/с.

Моделювання проводили для розмірів зерна 400 (d_1), 220 (d_2), 150 (d_3) та 100 мкм (d_4). Ці розміри, з одного боку, добре вкладаються в діапазон експериментальних значень (рис. 1), з іншого — охоплюють найбільш важливі випадки, що схематично представлені

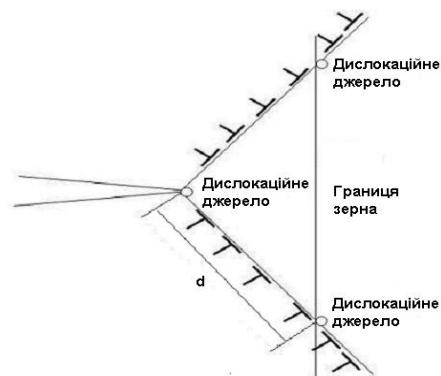


Рис. 3. Пластична зона біля вершини тріщини.

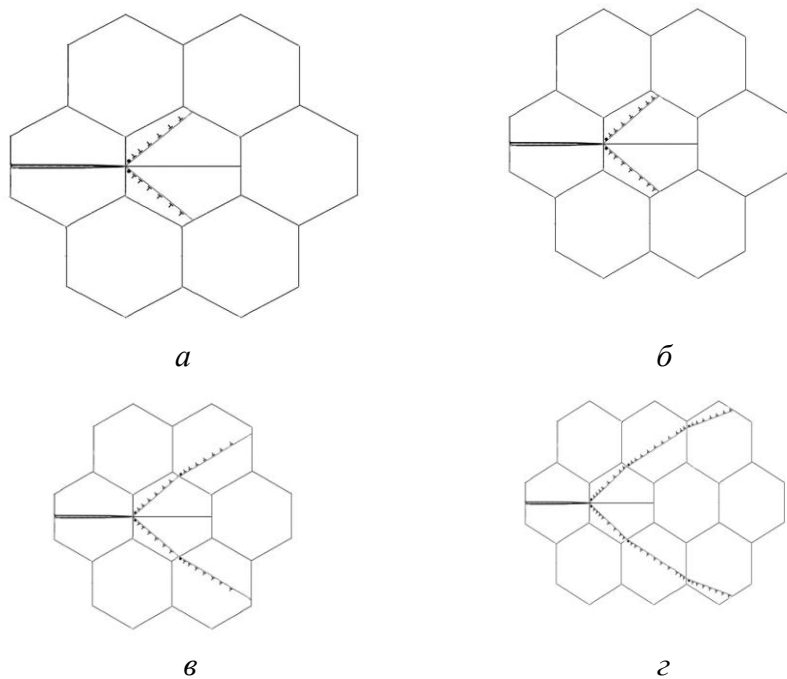


Рис. 4. Схеми, що демонструють розподіл дислокацій в пластичній зоні за різних розмірів зерен: *a* — якщо розмір зерна d_1 , скупчення не досягає границі; *б* — розмір зерна d_2 — дислокації досягли границі, але не подолали її, а створили біля неї pile-up; *в* — розмір зерна d_3 — дислокації перейшли у друге зерно і утворили там скупчення, але його потужність мала для спрацювання джерела в третьому зерні; *г* — розмір зерна d_4 — дислокації перейшли як у друге, так і у третє зерно.

на рис. 4, і демонструють взаємодію дислокаційного ансамблю з границями за різних розмірів $d_1 > d_2 > d_3 > d_4$.

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Результати моделювання підтверджують думку, що немонотонний характер залежності в'язкості руйнування від розміру зерна обумовлений особливостями взаємодії дислокацій, які формують пластичну зону з границями зерен. Розрахункові значення тріщиностійкості (рис. 5) добре узгоджуються з експериментальними даними, наведеними на рис. 1. Моделювання дозволяє визначити число дислокацій (рис. 6) та їх розподіл в пластичній зоні, що є важливим для розуміння механізму руйнування.

За температури рідкого азоту розрахована в'язкість руйнування складає $4,08 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$ і практично не залежить від розміру зерна, оскільки для всіх досліджених розмірів зерен (від 400 до 100 мкм) пластична зона не перевищує 10 мкм. Тому границі зерен не впливають на розподіл в ній дислокацій. Кількість імітованих дислокаційних пар становить 56.

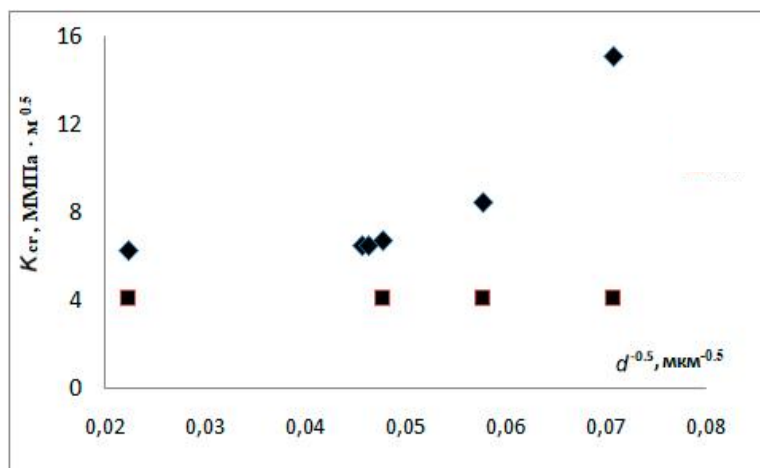


Рис. 5. Розрахункова залежність тріщиностійкості від розміру зерна за температур 77 (■) та 273 К (◆).

За кімнатної температури через зменшення напруги тертя ґратки з 200 до 20 МПа розмір пластичної зони стає співрозмірним з розміром зерна. Границі впливають на розподіл дислокацій в пластичній зоні і, як наслідок, на значення тріщиностійкості.

Для розміру зерна 400 мкм в'язкість руйнування залишалась малою — $6,3 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$, хоча дещо збільшувалась, ніж за температури 77 К, оскільки за менших значень напруги тертя ґратки (20 МПа) розмір пластичної зони зростає до 237 мкм, але залишається меншим за розмір зерна (рис. 4, а), а кількість дислокацій у пластичній зоні становить близько 400.

Якщо розмір зерен 220 мкм, кількість дислокацій в першому зерні також близько 400, але через менший розмір зерна біля границі утворюється скупчення (рис. 4, б), зернограничні джерела починають працювати, однак до моменту руйнування виділяють невелику кількість дислокацій (близько 30 пар) і тому в'язкість руйнування залишається практично незмінною.

Якщо розмір зерен 150 мкм, загальна кількість дислокацій у першому зерні становить 461, а у наступних — 256 пар (рис. 4, в). В'язкість руйнування починає швидко зростати до $8,5 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$, оскільки збільшується кількість дислокацій біля вершини тріщини.

З розміром зерен 100 мкм пластична зона охоплює декілька зерен (рис. 4, з), розмір пластичної зони — 507 мкм, загальна кількість дислокацій становить 1710 пар, у цьому випадку в'язкість руйнування сягає $15,3 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$ (рис. 4, з).

Залежність кількості дислокацій від розміру зерна, що наведена на рис. 6, добре узгоджується зі структурною залежністю тріщиностійкості (рис. 5). Формально різке збільшення тріщиностійкості, якщо розмір зерна малий, можна пояснити збільшенням кількості дислокацій в пластичній зоні. Але тлумачення фізичних причин цього явища потребує ретельного аналізу розподілу дислокацій в пластичній зоні і особливо біля вершини. Згідно з рівнянням (3), блокуюча дія дислокаціями концентрації напружень навколо тріщини буде тим більшою, чим ближче їх відстань r до вершини.

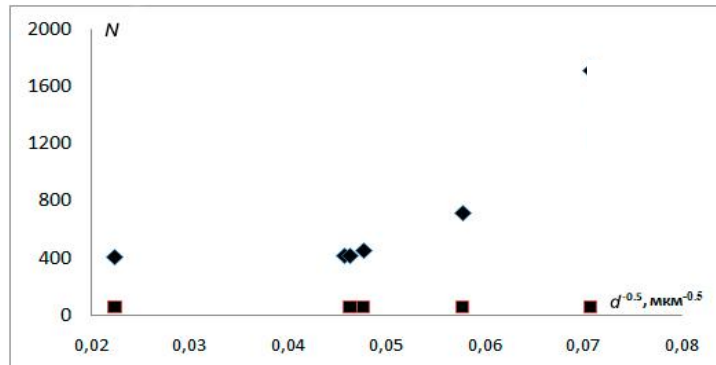


Рис. 6. Кількість дислокацій в пластичній зоні за температур 77 (■) та 273 К (◆).

Розроблена комп'ютерна програма дозволяє проаналізувати розподіл дислокацій в пластичній зоні та визначити локальну щільність ρ на різній відстані від вершини. Дислокаційна щільність ρ на відрізьку Δx розраховується як

$$\rho(r) = \frac{\Delta N}{\Delta x}, \quad (6)$$

де N — число дислокацій на цьому відрізьку. Ця формула добре працює в континуальних моделях, але у разі дискретних моделей її потрібно модифікувати:

$$\rho(r) = \frac{1}{\frac{\Delta x}{\Delta N}} = \frac{1}{x_s}, \quad (7)$$

де x_s — середня відстань між дислокаціями на відрізьку Δx . Переходячи від середньої відстані до відстані між дислокаціями, отримуємо

$$\rho(r) = \frac{1}{x_{n-1} - x_n}, \quad (8)$$

де x_n — координата n -й дислокації. На рис. 7, а проілюстровано зміну з відстанню до вершини тріщини загальної щільності дислокацій в пластичній зоні для різних розмірів зерна. Важливо, що загальна кількість дислокацій дорівнює площі під кривою зміни щільності від відстані. Тобто

$$\int_0^{r_c} \rho(r) dr = N, \quad (9)$$

де r_c — відстань до кінця пластичної зони (останньої дислокації).

Очевидно, що зі зменшенням розміру зерна змінюється не тільки кількість дислокацій, але і їх розподіл в пластичній зоні. Оскільки інформація про розподіл дислокацій безпосередньо біля вершини тріщини є важливою, аналогічні залежності були побудовані для малих відстаней (менше 1 мкм). Результати розрахунків наведені на рис. 7, б.

У випадку великих розмірів зерен d_1 щільність дислокацій $\rho(r)$ поступово зменшується з відстанню від 8,14 біля голови тріщини до 0,4 в кінці пластичної зони, мінімальна відстань до вершини складає 0,36 мкм (рис. 7, крива 1). Екрануюча дія дислокаціями голови тріщини мала і збільшення тріщиностійкості незначне. Якщо розмір зерна d_2 , формується

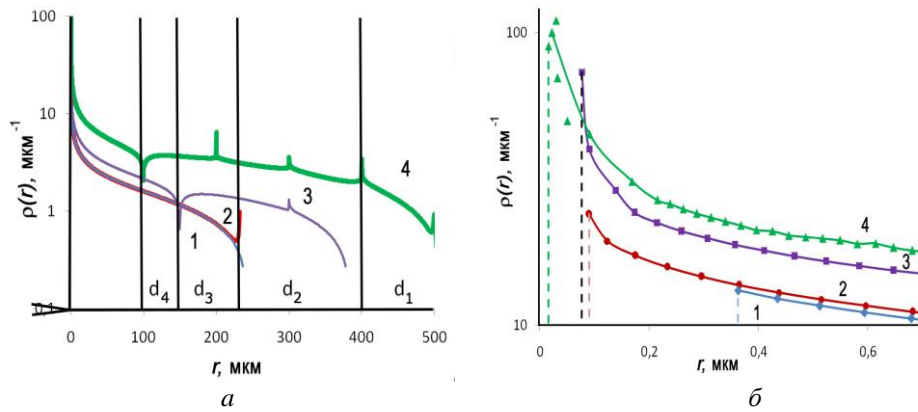


Рис. 7. Розподіл дислокацій в пластичній зоні за різних розмірів зерна.

скупчення біля границі. У цьому разі розподіл дислокацій в середині зерна залишається незмінним у порівнянні з великим зерном, але мінімальна відстань до тріщини зменшується до 0,09 мкм (рис. 7, крива 2). Значне скупчення дислокацій біля границі та поява кількох дислокацій біля вершини збільшуються лише на декілька відсотків. У випадку ще меншого розміру зерна d_3 під дією скупчення спрацьовує джерело Франка—Ріда в сусідньому зерні і в ньому формується дислокаційний pile-up. Саме під його дією в пластичній зоні першого зерна відбувається перерозподіл дислокацій. Щільність дислокацій в середині зерна збільшується приблизно в 1,2 рази. Проте, оскільки потужність скупчення невелика, переміщення дислокацій до вершини сприяє підвищенню лише тріщиностійкості приблизно на 20% (рис. 7, крива 3). Нарешті, у разі найменшого розміру зерна d_4 потужність скупчення, що формується в наступних зернах, значно зростає (рис. 7, крива 4). Це сприяє різкому переміщенню дислокації до голови тріщини, значному збільшенню кількості дислокацій біля вершини та зменшенню відстані пластичної зони до вершини тріщини. Це веде до блокування тріщини і значного підвищення тріщиностійкості (рис. 5).

Щоб встановити, який з двох факторів: зміна щільності дислокацій в пластичній зоні або значне наближення дислокацій до вершини, більше впливає на зростання тріщиностійкості, оцінимо підвищення щільності дислокацій в середині малого зерна d_4 у порівнянні з великим d_1 . З даних на рис. 7, а отримуємо, що на відстані 80 мкм дислокацій в малому зерні в 2,39 рази більше, на відстані 50 мкм — в 2,49 рази, 20 мкм — в 2,52 рази та 10 мкм — у 2,54 рази. Вплив від усіх дислокацій в пластичній зоні можна визначити, розрахувавши другий член в рівнянні (3) для малого та великого зерен. Відношення відповідних значень складає 3,09.

Таким чином, збільшення щільності дислокацій в пластичній зоні першого зерна відіграє визначальну роль в підвищенні тріщиностійкості. Сумарний внесок від переміщення дислокацій до вершини та від дислокацій в наступних зернах не перевищує 20% від загального значення тріщиностійкості. Проте саме перерозподіл дислокацій в пластичній зоні за наявності дислокаційного скупчення в сусідніх зернах впливає на зменшення концентрації напружень та затримку розповсюдження тріщин. Ця затримка дозволяє джерелу Франка—Ріда генерувати додаткові дислокації і збільшити потужність скупчення.

Висновки

Розрахунки, що виконані з використанням розробленої комп'ютерної програми, на якісному та кількісному рівнях підтверджують експериментально встановлений факт підвищення тріщиностійкості та структурної чутливості в'язкості руйнування молібдену в області розмірів зерен, співставних з розміром пластичної зони.

Аналіз розподілу дислокацій в пластичній зоні дозволяє дати фізичне тлумачення аномальної структурної чутливості тріщиностійкості в області крихкопластичного переходу. Цей ефект є результатом дії двох факторів: перерозподілу дислокацій в пластичній зоні та значного наближення дислокацій до вершини тріщини. Ефект різко посилюється, коли в наступному зерні утворюється потужне скупчення і під його дією дислокації різко переміщуються до голови тріщини.

Цитована література

1. Curry D.A. & Knott J.F. The relationship between fracture toughness and microstructure in the cleavage fracture of mild steel. *Met. Sci. J.* 1976. Vol. 10. P. 1—6.
2. Greenfield M.A. & Margolin H. The interrelationship of fracture toughness and microstructure in a Ti—5.25 Al—5.5 V—0.9 Fe—0.5 Cu alloy. *Metall. Trans.* 1971. Vol. 2. P. 841—847. <https://doi.org/10.1007/BF02662744>.
3. Srinivas M., Malakondaiah, G. & Rao P.R. Influence of polycrystal grain size on fracture toughness of and fatigue threshold in Armco iron. *Eng. Fract. Mech.* 1987. Vol. 28. P. 561—576. [https://doi.org/10.1016/0013-7944\(87\)90053-1](https://doi.org/10.1016/0013-7944(87)90053-1)
4. Srinivas M., Malakondaiah G., Armstrong R.W. & Rao P.R. Ductile fracture toughness of polycrystalline Armco iron of varying grain size. *Acta Metal. Mater.* 1991. Vol. 39. P. 807—816. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(91\)90280-E](https://doi.org/10.1016/0956-7151(91)90280-E)
5. Werner E. Der einfluß der korngroße, des legierungsgehaltes und einer kaltumformung auf die bruchzähigkeit. *Z. Metallkd.* 1988. Vol. 79. P. 585—590.
6. Pacyna J. & Mazur A. The influence of grain size upon the fracture toughness of hot-work tool steel. *Scand. J. Met.* 1983. Vol. 12. P. 22—28. <https://doi.org/10.1002/srin.198600828>
7. Zeng X.H., Hartmaier A. Modeling size effects on fracture toughness by dislocation dynamics. *Acta Mater.* 2010. Vol. 58 (1). P. 301—310. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.09.005>
8. Jens Reiser, Alexander Hartmaier. Elucidating the dual role of grain boundaries as dislocation sources and obstacles and its impact on toughness and brittle-to-ductile transition. *Scientific Reports.* 2020. Vol. 10. Article number: 2739. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-59405-5>
9. Борисовська К.М., Подрезов Ю.М., Фірстов С.О. Вплив розміру зерна в поліристалічних матеріалах на механізми пластичної деформації та границю плинності: *Успіхи матеріалознавства*. К.: ПІМ НАН України. 2020. Вип. 1. С. 26—32. <https://doi.org/10.15407/materials2020/01/026>
10. Борисовська К.М. Моделювання поведінки ансамблю дислокацій біля вершини тріщини у випадку постійного напруження. *Електронна мікроскопія і прочність матеріалів*. 2012. Вип. 18. С. 112—119.
11. Даниленко М.І., Коваль О.Ю., Борисовська К.М., Подрезов Ю.М., Фірстов С.О. Вплив розміру зерна на тріщиностійкість малолегованого сплаву молібдену. *Праці V Міжнар. конф. "Механіка руйнування матеріалів і міцність конструкцій"*, 23—27 червня 2014, м. Львів, Україна. С. 195—200.
12. Rice J.R., Thomson R. Ductile versus brittle behaviour of crystals. *Philjs. Mag.* 1974. Vol. 29. P. 73—80.
13. Borysovska K.M., Slyunyayev V., Podrezov Yu. Influence of the dislocation structure on the crack tip in highly deformed iron. *Materials Science-wroclaw*. 2005. 23 (2).
14. Борисовская Е.М., Подрезов Ю.Н., Фирстов С.А. Динамика структурных перестроек с учетом процесса зарождения дислокаций. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. 2007. Вип. 14. С. 3—11.

15. Борисовская Е.М., Подрезов Ю.Н. Анализ условий аннигиляции дислокационных скоплений. *Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении*. 2005. Вып. 7. С. 99—108.
16. Amodeo R.J., & Ghoniem N.M. Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics. *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 41 (10). P. 6958.
17. Messerschmidt U. Dislocation dynamics during plastic deformation. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. doi: 10.1007/978-3-642-03177-9
18. Hirth J. P. & Lothe J. Theory of dislocations. New York: Wiley, 1982.

References

1. Curry, D. A. & Knott, J. F. (1976). The relationship between fracture toughness and microstructure in the cleavage fracture of mild steel. *Met. Sci. J.*, Vol. 10, pp. 1—6. <https://doi.org/10.1179/030634576790431453>
2. Greenfield, M. A. & Margolin, H. (1971). The interrelationship of fracture toughness and microstructure in a Ti—5,25 Al—5,5 V—0,9 Fe—0,5 Cu alloy. *Metall. Trans.*, Vol. 2, pp. 841—847. <https://doi.org/10.1007/BF02662744>.
3. Srinivas, M., Malakondaiah, G. & Rao, P. R. (1987). Influence of polycrystal grain size on fracture toughness of and fatigue threshold in Armco iron. *Eng. Fract. Mech.*, Vol. 28, pp. 561—576. [https://doi.org/10.1016/0013-7944\(87\)90053-1](https://doi.org/10.1016/0013-7944(87)90053-1)
4. Srinivas, M., Malakondaiah, G., Armstrong, R. W. & Rao, P. R. (1991). Ductile fracture toughness of polycrystalline Armco iron of varying grain size. *Acta Metal. Mater.*, Vol. 39, pp. 807—816. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(91\)90280-E](https://doi.org/10.1016/0956-7151(91)90280-E)
5. Werner, E. (1988). Der einfluß der korngroße, des legierungsgehaltes und einer kaltumformung auf die bruchzähigkeit. *Z. Metallkd.*, Vol. 79, pp. 585—590. <https://doi.org/10.1515/ijmr-1988-790906>
6. Pacyna, J. & Mazur, A. (1983). The influence of grain size upon the fracture toughness of hot-work tool steel. *Scand. J. Met.*, Vol. 12, pp. 22—28. <https://doi.org/10.1002/srin.198600828>
7. Zeng, X. H., Hartmaier A. (2010). Modeling size effects on fracture toughness by dislocation dynamics. *Acta Materialia*, Vol. 58.1, pp. 301—310. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.09.005>
8. Reiser, Jens, Hartmaier, Alexander. (2020). Elucidating the dual role of grain boundaries as dislocation sources and obstacles and its impact on toughness and brittle-to-ductile transition. *Scientific Reports*, Vol. 10, Article number, 2739. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-59405-5>
9. Borysovska, K. M., Podrezov, Yu. M., Firstov, S. O. (2020). The influence of grain size in polycrystalline materials on the mechanisms of plastic deformation and yield strength. *Uspikhy materialoznavstva*. K.: IPM NAN Ukrainy, Vyp. 1, pp. 26—32 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2020/01/026>
10. Borysovska, K. M. (2012). The modelling of the behavior of dislocation ensemble near the crack tip in the case of constant stress. *Elektronnaya microscopiya y prochnost materyalov*, Vyp. 18, pp. 112—119 [in Ukrainian].
11. Danylenko, M. I., Koval, O. Iu, Borysovska, K. M., Podrezov, Yu. M. Firstov, S. O. (2014). The effect of grain size on the crack resistance of low-alloy molybdenum. *Pratsi V Mizhnarodnoi konf. "Mekhanika ruinuvannya materialiv i mitsnist konstruktii"*. 23—27 chervnia 2014, m. Lviv, Ukraina, S. 195—200 [in Ukrainian].
12. Rice, J. R., Thomson, R. Ductile versus brittle behaviour of crystals. (1974). *Philjs. Mag.*, Vol. 29, pp. 73—80. <https://doi.org/10.1080/14786437408213555>
13. Borysovska, K. M., Slyunyayev, V. N., Podrezov, Yu. N. (2005). Influence of the dislocation structure on the crack tip in highly deformed iron, Vol. 23 (2).
14. Borysovskaia, E. M., Podrezov, Yu. N., Fyrstov, S. A. (2007). Dynamics of structural rearrangements taking into account the process of nucleation of dislocations. *Elektronnaya microscopiya y prochnost materialov*, Vyp. 14, pp. 3—11 [in Russian].
15. Borysovskaia, E. M., Podrezov, Yu. N. (2005). Analiz uslovyi annyhylyatsyy dyslokatsyonnykh skopleniy. *Matematicheskiye modely y vychyslytelnyi eksperyment v materialovedenyy*. Kyev: IPM NANU, Vyp. 7, pp. 99—108 [in Russian].
16. Amodeo, R. J., & Ghoniem, N. M. (1990). Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics. *Phys. Rev. B*, Vol. 41 (10), p. 6958. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.6958>

17. Messerschmidt, U. (2010). Dislocation dynamics during plastic deformation. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-03177-9>
18. Hirth, J. P. & Lothe, J. (1982). Theory of dislocations. New York: Wiley.

Simulation of the interaction of plastic zone dislocations with the grain boundary at brittle-plastic transition temperatures in molybdenum

K. M. Borysovska, N. M. Marchenko, Yu. M. Podrezov*, S. O. Firstov

I. M. Frantzevich Institute for Problems of Materials Science NAS Ukraine

*E-mail: yupodrezov@ukr.net

The (DD) method was used to model the formation of the plastic zone of the top of the cracks in polycrystalline molybdenum. Special attention was paid to take into account the interaction of dislocations in the plastic zone with grain boundaries. Structural sensitivity of fracture toughness was analyzed under brittle-ductile condition. Simulations were performed for a range of grain sizes from 400 to 100 μm , at which a sudden increase in fracture toughness with a decrease of grain size was experimentally shown. We calculated the value of K_{Ic} taking into account the shielding action of dislocations. The position of all dislocations in the plastic zone at fracture moment was calculated. Based on these data, we obtained the dependences of dislocation density on the distance from the crack tip thereby confirming significant influence of the grain boundaries on plastic zone formation. At large grain sizes, when the plastic zone does not touch the boundary, the distribution of dislocations remained unchanged. As grains reduce their size to size of the plastic zone, they start forming a dislocation pile – up near the boundaries. Dislocations on plastic zone move slightly toward the crack tip, but the density of dislocations in the middle of the grain remains unchanged, and fracture toughness remains almost unchanged. Further reduction of the grain size leads to the Frank-Reed source activation on the grain boundary Forming dislocation pile-up of the neighbor grains. Its stress concentration acts on dislocations of the first grain and causes redistribution of plastic zone dislocations. If the reduction in grain size is not enough to form a strong pile-up, density of dislocations on plastic zone increases slightly and crack resistance increases a few percent. Further reduction of grains promotes strong pile-up, dislocations move to crack tip, and its density on plastic zone increases. Crack is shielded and fracture toughness increases sharply. The calculation showed that the fracture toughness jump is observed at grain sizes of 100–150 μm , in good agreement with the experiment.

Keywords: *dislocation dynamics simulation, molybdenum, fracture toughness, grain size, plastic zone, brittle-ductile transition.*