

Моделювання явища крихкопластичного переходу методом дислокаційної динаміки

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

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

*E-mail: yupodrezov@ukr.net

Методом дислокаційної динаміки промодельовано вплив температури та швидкості деформації на в'язкокрихкий перехід в полікристалічному молібдені. З результатів розрахунків випливає, що зі збільшенням температури випробувань розмір пластичної зони зростає більше ніж на порядок. Зі зменшенням швидкості навантаження аномальне підвищення тріщиностійкості зміщується до менших розмірів зерна. Цей ефект суттєво менший, ніж вплив температури. Зміна параметрів моделі не впливає на загальний механізм в'язкокрихкого переходу, який зумовлений особливостями взаємодії дислокацій пластичної зони з границями зерен у полікристалічному молібдені.

Ключові слова: крихкопластичний перехід, дислокаційне скупчення, дислокаційна динаміка.

Вступ

Явище крихкопластичного переходу (КПП) впливає на можливості експлуатації малопластичних матеріалів і тому дослідження його механізмів є важливою складовою сучасної теорії міцності. Моделі, що описують це явище, можна умовно поділити на три групи: феноменологічні, які порівнюють значення руйнуючої напруги та границі плинності (приклад — модель Іоффе) [1—3]; механічні, які розглядають співвідношення між розмірами пластичної зони та зразка [4—6] або між розмірами пластичної зони та структурного елемента у випадку полікристалів [7, 8], і фізичні, де КПП в монокристалах асоціюється зі зміною механізму зародження та руху дислокацій, а у випадку полікристалів також враховується взаємодія дислокацій з границями зерен [9—13].

В останні роки з'явилися нові моделі, які базуються на методі дислокаційної динаміки (ДД). В рамках цих моделей створюються комп'ютерні програми, які імітують рух дислокацій в пластичній зоні та дозволяють розраховувати вплив дислокаційного ансамблю на розподіл напруги в голові тріщини в усьому діапазоні навантаження до моменту руйнування. На даний момент опубліковано декілька статей [14—16], де розглядається вплив розміру зерна на КПП. Використані в них комп'ютерні програми ґрунтуються на схожому загальному алгоритмі, але мають певні відмінності моделювання руху дислокацій та урахування взаємодії дислокацій з границями, зокрема сили зображення в них знаходяться числовими методами, що обмежує можливості розрахунків.

В нашій попередній роботі [17] методом ДД проведено розрахунки, які на якісному та кількісному рівнях підтвердили експериментально встановлений факт підвищення тріщиностійкості молібдену в області розмірів зерен, співставних з розміром пластичної зони. Ефект в'язкокрихкого переходу, крім чутливості до розміру зерна, має чутливість до температури та швидкості навантаження. Тому здатність розробленої моделі прогнозувати таку чутливість може слугувати критерієм її працездатності.

Метою роботи є дослідження методом ДД швидкісної та температурної чутливості в'язкокрихкого переходу в чистому молібдені.

В роботах [17—19] нами розглянуто фізичні принципи створення комп'ютерних моделей дислокаційної динаміки та описано алгоритми комп'ютерних програм, які дозволяють аналізувати поведінку дислокацій в пластичній зоні. Метод ДД дозволяє аналізувати вплив як фізичних характеристик матеріалу, таких як вектор Бюргерса та модуль зсуву, так і зовнішніх факторів — температури та швидкості навантаження — на в'язкокрихкий перехід в малопластичних металевих матеріалах.

В основу комп'ютерного моделювання методом ДД покладено модель Райса та Томпсона [20], згідно з якою, силовий рельєф біля вершини тріщини створюється трьома силами: зовнішнім навантаженням; силою зображення, що діє на дислокації з боку вільних поверхонь; та силою опору з боку кристалічної ґратки. Перша сила змінюється з відстанню від голови тріщини за законом

$$\sigma_{xx} = \frac{K}{\sqrt{2\pi x}}, \quad (1)$$

де K — коефіцієнт інтенсивності напруги; x — відстань від вершини, а сила зображення, яка діє на саму дислокацію,

$$\sigma_m = -\frac{Gb}{4\pi x}, \quad (2)$$

де G — модуль зсуву; b — вектор Бюргерса. Сила тертя ґратки приймається незмінною. Суперпозиція цих сил схематично представлена на рис. 1.

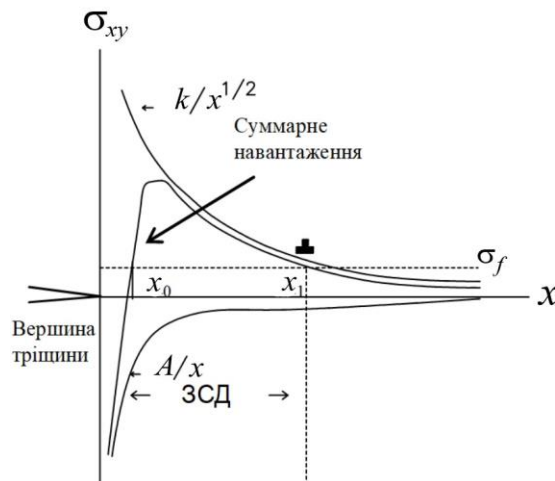


Рис. 1. Розподіл напруг біля голови тріщини.

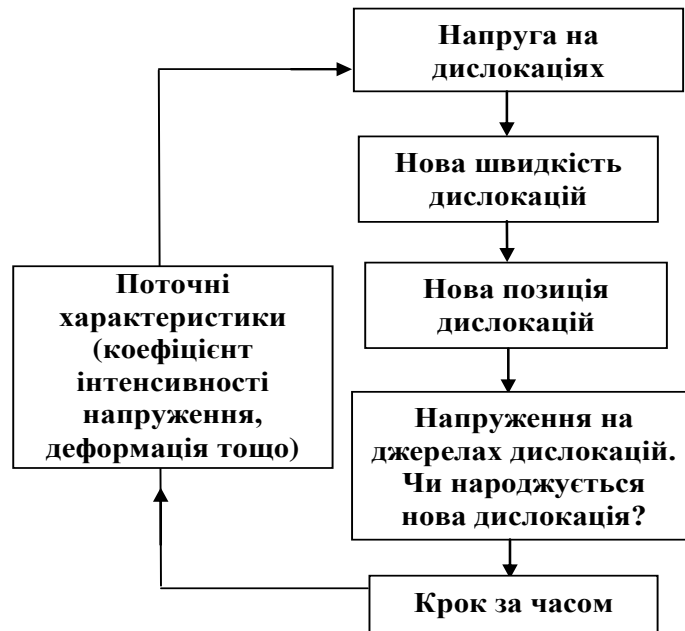


Рис. 2. Блок-методу схема дислокаційної динаміки.

На відстані $x < x_0$ дислокації притягуються до тріщини, на відстані $x_0 < x < x_1$ — відштовхуються від тріщини, а за умови $x > x_1$ гальмуються силами тертя ґратки. Емісія дислокацій з голови тріщини не відбувається доти, доки відстань r_0 не стане більшою за радіус ядра дислокації. З досягненням необхідного навантаження дислокації виходять з вершини тріщини та переміщуються у потенційному полі на відстань $x > x_0$, створюючи у вершині зону, вільну від дислокацій.

Якщо поблизу вершини тріщини знаходиться ансамбль дислокацій, процес ускладнюється, оскільки до згаданих трьох сил додаються напруги інших дислокацій ансамблю та їх сил зображення. Дислокації, що вийшли з вершини, згруповуються в скупчення. Щільність дислокацій у скупченні зменшується по мірі віддалення від голови тріщини. Такі скупчення спостерігаються з навантаженням зразка з тріщиною “*in situ*” в колонні мікроскопа.

Час в моделях 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 метод дислокаційної динаміки можна дізнатися з наших попередніх робіт [17—19] та з монографій [21—24] з цієї проблематики.

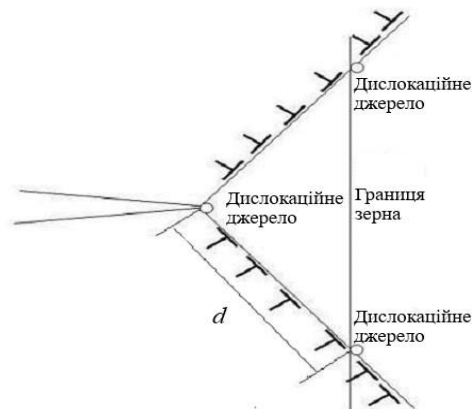


Рис. 3. Пластична зона біля вершини тріщини.

У запропонованій моделі одинадцять джерел дислокації: десять на границі зерна та одне біля вершини тріщини (рис. 3). Коли напруження на джерелі дислокацій перевищувало початкове напруження (напруження тертя ґратки), то з нього випускалися дислокації: дві, якщо джерело знаходилося поблизу вершини тріщини, і одна, якщо воно знаходилося поблизу границі зерна.

Тріщина піддається навантаженню за чистою модою I, яка відповідає коефіцієнту інтенсивності напруження K_I . Тому напруження, що діє на дислокації від вершини тріщини, обчислюється, згідно з роботою [6], наступним чином:

$$\begin{aligned}\sigma_{11} &= \sigma_v \sqrt{\frac{a}{2\pi r}} (\cos(\theta/2)(1 - \sin(\theta/2)\sin(3\theta/2)) , \\ \sigma_{22} &= \sigma_v \sqrt{\frac{a}{2\pi r}} (\cos(\theta/2)(1 + \sin(\theta/2)\sin(3\theta/2)), \\ \sigma_{12} &= \sigma_v \sqrt{\frac{a}{2\pi r}} \cos(\theta/2)\sin(\theta/2)\cos(3\theta/2),\end{aligned}\quad (3)$$

де σ_v — зовнішнє напруження; θ — кут між площиною ковзання дислокації та віссю x .

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

Швидкості дислокацій розраховувалися за формулою [25]

$$v = A_{12}\sigma_{12}, \quad (4)$$

де $A = \frac{2bD_s}{kT} \exp(-F_k/kT) = 2,6 \cdot 10^{-10} \text{ м/Па} \cdot \text{с}$; D_s — коефіцієнт

самодифузії; k — константа Больцмана; T — температура; F_k — енергія зародження дислокаційного перегину; σ_{12} — напруження, що діє на дислокацію. Потім нові переміщення кожної дислокації розраховувалися як добуток швидкості та часового кроку. Часовий крок обраний таким чином, щоб дислокація, на яку діє максимальне напруження, пройшла відстань $30b$ за цей час.

Поточне значення коефіцієнта інтенсивності напруження K_{in} обчислювали за наступною формулою для кожного значення зовнішнього напруження, яке зростало з постійною швидкістю [20]:

$$K_{in} = \sigma_v \sqrt{2\pi a} - \frac{3Gb}{2(1-\nu)\sqrt{2\pi}} \sum_n \frac{\cos(\theta/2)\sin(\theta)}{\sqrt{r}}, \quad (5)$$

де сумування відбувається по всіх дислокаціях у зерні, що містить вершину тріщини; a — напівдовжина тріщини; ν — коефіцієнт Пуассона; r — відстань від кінця тріщини до дислокації. Оскільки фрактографія полікристалу молібдену показує, що кінчик тріщини залишається гострим, затуплення тріщини не враховувалося.

З використанням цієї моделі проаналізовано розподіл дислокацій в чистому молібдені біля голови тріщини та зміни в розподілі дислокацій біля вершини тріщини залежно від часу [17] та відстані [18]. Отримані результати

прогнозують поведінку дислокацій біля вершини тріщини і добре узгоджуються з *in-situ* дослідженнями в трансмісійному мікроскопі [26].

Комп'ютерні розрахунки дозволяють прогнозувати вплив екранування дислокаційного ансамблю на поточне значення коефіцієнта інтенсивності напруження. Саме ця можливість була нами використана в подальшому для прогнозування тріщиностійкості полікристалічного молібдену в діапазоні температур в'язкокрихкого переходу.

Для цього в комп'ютерну програму додавали умову: коли коефіцієнт інтенсивності напруження K_{in} перевищував K_{1c} для крихкого матеріалу, вважалось, що матеріал зруйнувався. Розрахункове значення критичного коефіцієнта інтенсивності K_{crit} визначали за формулою [21]

$$K_{crit} = \sigma_v \sqrt{2\pi a}, \quad (6)$$

де σ_v — значення зовнішнього напруження в момент руйнування.

Комп'ютерний розрахунок з використанням рівнянь (5) та (6) дозволяє визначити критичне значення K_{crit} , яке відповідає розрахунковій тріщиностійкості K_{1c} з урахуванням впливу дислокацій, що формують пластичну зону.

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 [18, 19].

У випадку великих розмірів зерен щільність дислокацій поступово зменшується з відстанню від голови тріщини, тому екрануюча дія дислокацій мала і збільшення тріщиностійкості незначне. За меншого розміру зерна формується скупчення біля границі і під дією скупчення спрацьовують джерела Франка—Ріда в сусідніх зернах і в них утворюється дислокаційний *pile-up*. Саме під його дією в пластичній зоні першого зерна відбувається перерозподіл дислокацій, які переміщуються до голови тріщини і значно підвищують тріщиностійкість.

Встановлені закономірності взаємодії пластичної зони з границями зерен в області в'язкокрихкого переходу є загальними і повинні зберігатись зі зміною умов експерименту. Але оскільки зовнішні чинники, такі як температура та швидкість навантаження, можуть впливати на формування пластичної зони, умови реалізації КПП будуть досягнуті для інших розмірів зерен, які можуть бути визначені з комп'ютерного розрахунку.

Для випадку полікристалічного молібдену в розрахунковому експерименті використовувались наступні параметри моделі: $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $G = 140$ ГПа, $K_{1c} = 2$ МПа·м^{1/2}, розмір дислокаційного джерела $50b$, $a = 2$ мм.

Оскільки температура випробувань впливає на напруження опору з боку кристалічної ґратки, в моделі враховувалась термічна компонента напруження плинину. Для чистого монокристалу молібдену відповідні значення взяті з даних робіт [27, 28], також враховувалось, що між границею плинину та напруженням зсуву існує зв'язок $\tau_{кр} = \sigma_{0,2}/2$ [29, 30]. За температури 77 К це напруження складає 200 МПа, за температур 173 та 293 К — 100 та 20 МПа.

Вплив температури на критичне напруження зсуву та розмір пластичної зони

T, K	$\tau_{кр}(T)$	$L, \mu m$
77	199,7	11,2
173	37,1	158
293	20,7	237

Розрахунковий експеримент показав, що напруга тертя ґратки найбільш суттєво впливає на розподіл дислокацій поблизу вершини тріщини і розмір пластичної зони. У таблиці наведено результати розрахунків впливу температури на розмір пластичної зони, з яких слідує, що зі зміною температури випробувань від рідкого азоту до кімнатної температури розмір пластичної зони зростає більше ніж на порядок. Тобто зі зменшенням опору руху дислокацій з боку кристалічної ґратки розмір пластичної зони збільшується і дислокаційне скупчення стає співрозмірним з розміром зерна.

Згідно з висновками нашої попередньої роботи [17], співвідношення між розмірами пластичної зони та зерна є визначальним фактором, який відповідає за в'язкокрихкий перехід в молібдені. Проведені модельні розрахунки підтверджують, що з підвищенням температури випробувань в'язкокрихкий перехід, який асоціюється з аномальним збільшенням тріщиностійкості, відбувається зі значним зменшенням розміру зерна, це добре узгоджується з експериментальними даними (рис. 4).

В модельному експерименті швидкість навантаження визначалася на кожному кроці як лінійна функція часу:

$$\sigma_{n+1}(t) = \sigma_n(t) + \Delta\sigma \cdot t_n. \quad (7)$$

Нами було розглянуто три значення $\Delta\sigma$, які відрізнялися одне від одного на декілька порядків (рис. 5). Моделювання показало, що зміна швидкості навантаження впливає на параметри пластичної зони, оскільки її кінцевий розмір обмежений моментом досягнення критичної руйнуючої напруги. За результатами розрахунків (рис. 5), зі зменшенням швидкості навантаження аномальне підвищення тріщиностійкості зміщується до менших розмірів зерна. Зазначимо, що цей ефект суттєво менший, ніж вплив температури.

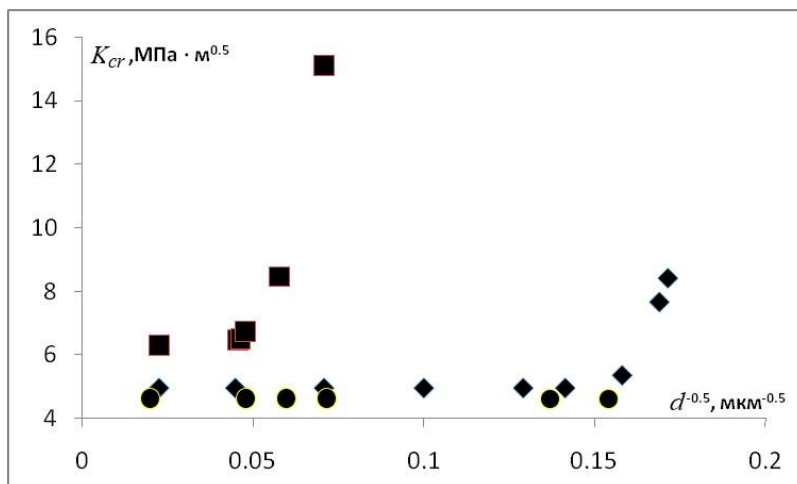


Рис. 4. Залежність тріщиностійкості від розміру зерна за різних температур (K): ■ — 293; ♦ — 173; ● — 77.

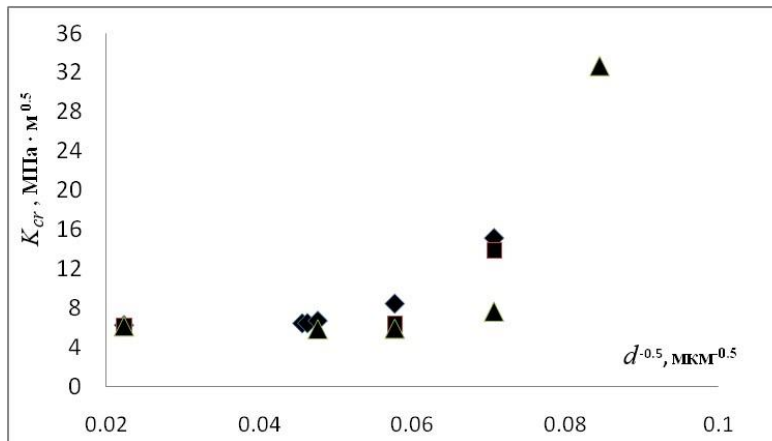


Рис. 5. Залежність тріщиностійкості від розміру зерен за різної швидкості навантаження (МПа·с⁻¹): ♦ — 100; ■ — 5000; ▲ — 10 000.

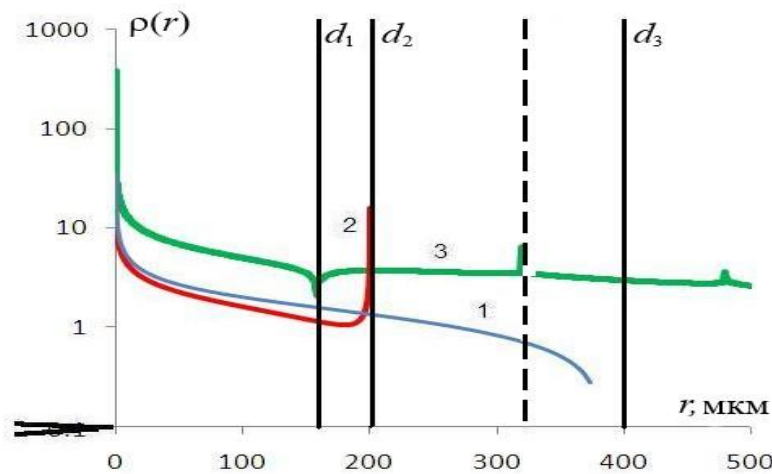


Рис. 6. Обчислена щільність дислокацій у пластичній зоні як функція відстані від вершини тріщини r для великого d_3 , середнього d_2 та малого d_1 розмірів зерна в полікристалі молібдену. Пунктиром позначена друга границя зерна.

Результати комп'ютерного моделювання показали, що зміна параметрів моделі суттєво впливає на критичні значення розміру зерна, за яких відбувається в'язкокрихий перехід в полікристалічному молібдені. Розрахована в межах цієї моделі температурна та швидкісна чутливість КПП добре узгоджується з експериментом [19]. Слід зазначити, що з варіюванням зовнішніх параметрів змінюються лише кількісні показники КПП, тоді як фізичний механізм залишається незмінним. Визначальну роль відіграє взаємодія дислокацій пластичної зони з границями зерен полікристала. Цей механізм описаний нами в попередній роботі та схематично представлений на рис. 6. Незалежно від швидкості навантаження та температури випробувань можна виділити три характерні діапазони розмірів зерен.

Для великих розмірів зерна d_3 (рис. б) в'язкість руйнування не залежить від розміру зерна, оскільки розмір пластичної зони залишається меншим за розмір зерна, хоча існування пластичної зони поблизу вершини тріщини практично не впливає на тріщиностійкість.

Для розміру зерен від d_3 до d_2 поблизу границі утворюється дислокаційне скупчення та зернограничні джерела починають працювати у сусідньому зерні, однак до моменту руйнування виділяють невелику кількість дислокацій. Це може приводити до слабого підвищення тріщиностійкості.

Для малого розміру зерен d_1 , коли пластична зона охоплює декілька зерен, в'язкість руйнування починає швидко зростати. У цьому випадку кількість дислокацій у сусідніх з тріщиною зернах різко зростає. Їх взаємодія з дислокаційним скупченням в першому зерні призводить до переміщення дислокацій ближче до вершини тріщини. Відбувається її екранування і, як наслідок, спостерігається стрімке зростання тріщиностійкості.

Висновки

Методом дислокаційної динаміки промодельована поведінка дислокацій в пластичній зоні біля вершини тріщини за різних умов навантаження. Проаналізовано вплив температури та швидкості навантаження на тріщиностійкість та КПП в полікрystalах молібдену з різним розміром зерна.

Результати моделювання показали сильну залежність КПП від температури, що зумовлено різкою зміною розміру пластичної зони з температурою. Зі зниженням температури умови екранування дислокаціями вершини тріщини виконуються за менших розмірів зерна. Різке зростання тріщиностійкості спостерігається в більш дрібнозернистих станах.

За розрахунками, зміна швидкості навантаження впливає на параметри пластичної зони, оскільки її кінцевий розмір обмежений моментом досягнення критичної руйнуючої напруги. На відміну від температури, швидкість навантаження відносно слабо впливає на крихкопластичний перехід.

Розрахункові значення механічних характеристик добре узгоджуються з результатами експериментів. Створена комп'ютерна програма дозволяє прогнозувати структурну, температурну та швидкісну чутливість граничних механічних характеристик ОЦК металів в області температур крихкопластичного переходу.

Зазначимо, що в запропонованій моделі використовується сингулярна складова поля напружень і не враховується регулярна складова. Це може бути причиною певного завищення прогнозованої величини в'язкості руйнування. Крім того, крихкопластичний перехід може супроводжуватись зміною механізму розповсюдження тріщини з появою стадії повільного зростання. Ці питання планується врахувати в подальшому удосконаленні програми.

Список літератури

1. Іоффе А.Ф., Левицка М.А. Прочность и упругость естественной каменной соли. Сб. работ по прикладной физике. Москва, 1925. С. 5—12.
2. Іоффе А.Ф. Физика кристаллов. Москва: ГИЗ, 1973.

3. Ioffe A. The Physics of Crystals. — N.Y. Lnd, McGraw Hill, 1928.
4. Nazarov A.A., Romanov A.E., Valiev R.Z. On the structure, stress fields and energy of non-equilibrium grain boundaries. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993. No. 41. P. 1033—1040. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(93\)90152-I](https://doi.org/10.1016/0956-7151(93)90152-I)
5. Разрушение. Т. 1. Микроскопические и макроскопические основы механики разрушения / Под ред. Г. Либовица. Москва: Мир, 1973. 620 с.
6. Knott J.F. Fundamentals of fracture mechanics. Gruppo Italiano Frattura, 1973. 274 с.
7. Клевцов Г.В. Пластические зоны и диагностика разрушения металлических материалов. Москва: МИСИС, 1999. 112 с.
8. Thesis A., George C.H. Tang. Fatigue crack growth of ultra fine grained aluminium. *School of Materials Science & Engineering*, University of New South Wales, 2012. 187 p. <https://doi.org/10.26190/unsworks/15943>
9. Котречко С.А., Мешков Ю.Я., Шиян А.В. Механическая стабильность — универсальная мера сопротивления переходу в хрупкое состояние металла. *Успехи физики металлов*. 2009. Т. 10, № 2. С. 207—228. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/98095>
10. Котречко С.А., Мешков Ю.Я., Шиян А.В. Пластичность и хладостойкость конструкционных сталей. *Проблемы прочности*. 2010. № 1. С. 112—119. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/111650>
11. Котречко С.А., Мешков Ю.Я. Концепция механической стабильности конструкционных сталей. *Проблемы прочности*. 2009. № 2. С. 55—78. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/48380>
12. Kotrechko S.O. Effect of long-term service on the tensile properties and capability of pipeline steel 17GS to resist cleavage fracture. *Int. J. of Pressure Vessels and Piping*. 2004. Vol. 81, No. 4. P. 337—344. <https://doi.org/10.1016/j.ijpvp.2004.02.015>
13. Kotrechko S.A., Meshkov Yu., Mettus G.S. To viscous and brittle states of polycrystalline metals. *Metallofizika*. 1990. Vol. 12.6. P. 3—13.
14. Fan Z. The grain size dependence of ductile fracture toughness of polycrystalline metals and alloys. *Mater. Sci. Eng. A*. 1995. Vol. 191. P. 73—83. [https://doi.org/10.1016/0921-5093\(94\)09621-3](https://doi.org/10.1016/0921-5093(94)09621-3)
15. Noronha S.J., Farkas D. Dislocation pinning effects on fracture behavior: Atomistic and dislocation dynamics simulations. *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66(13). P. 132103. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.132103>
16. Zeng X.H., Hartmaier A. Modeling size effects on fracture toughness by dislocation dynamics. *Acta Mater*. 2010. Vol. 58, No. 1. P. 301—310. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.09.005>
17. Борисовська К.М., Марченко Н.М., Подрезов Ю.М., Фірстов С.О. Моделювання взаємодії дислокацій пластичної зони з границею зерна в області температур крихко-пластичного переходу в молібдені. *Успіхи матеріалознавства*. 2021. Вип. 3. С. 66—76. <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.066>
18. Борисовская Е.М. Моделирование поведения дислокационного ансамбля вблизи вершины трещины при постоянной нагрузке. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. 2012. Вып. 18. С. 112—119.
19. Даниленко М.І., Подрезов Ю.М., Борисовська К.М., Коряк О.С., Фірстов С.О. Використання методу дислокаційної динаміки для аналізу структурної чутливості тріщиностійкості ОЦК металів, схильних до квазікрихкого руйнування. *Електронна микроскопия и прочность материалов*. 2014. Вып. 20. С. 31—42.
20. Borysovska K. Influence of the dislocation structure on the crack tip in highly deformed iron. *Mater. Sci.* — Wroclaw, 2005. Vol. 23. P. 521—528.
21. Rice J.R., Thomson R. Ductile versus brittle behaviour of crystals. *The Philosophical Magazine: A. J. of Theoretical Experimental and Applied Physics*. 1974. Vol. 29(1). P. 73—97. <https://doi.org/10.1080/14786437408213555>
22. Messerschmidt U. Dislocation dynamics during plastic deformation. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. 502 p.
23. Amodeo R.J., Ghoniem N.M. Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics. *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 41 (10). P. 6958. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.6958>
24. Sills R.B., Kuykendall W.P., Aghaei A., Cai W. Fundamentals of dislocation dynamics simulations. *Multiscale materials modeling for nanomechanics*. 2016. Vol. Springer Series in Mater. Sci. P. 53—87. https://doi.org/10.1007/978-3-319-33480-6_2
25. Hirth J.P., Lothe J. Theory of dislocations. New York: Wiley, 1982.
26. Ohr S.M. An electron microscope study of crack tip deformation and its impact on the dislocation theory of fracture. *Mater. Sci. Eng.* 1985. Vol. 72(1). P. 1—35. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(85\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0025-5416(85)90064-3)

27. Minnert C., Durst K. Thermally activated dislocation mechanism in Mo studied by indentation, compression and impact testing. *J. Mater. Res.* 2021. Vol. 36(12). P. 2397—2407. <https://doi.org/10.1557/s43578-021-00126-4>
28. Seeger A., Hollang L. The flow-stress asymmetry of ultra-pure molybdenum single crystals. *Mater. Trans.* 2000. Vol. JIM 41(1). P. 141—151.
29. Трефилов В.И., Мильман Ю.В., Фирстов С.А. Физические основы прочности тугоплавких металлов. Киев: Наук. думка, 1975. 293 с.
30. Мильман Ю.В., Трефилов В.И. О физической природе температурной зависимости предела текучести. Механизм разрушения металлов. Киев: Наук. думка, 1966. 59 с.

References

1. Ioffe, A., Levytska, M. (1925). Strength and elasticity of natural rock salt. Collection of papers on applied physics. Moscow, pp. 5—12 [in Russian].
2. Ioffe, A. (1929). The Physics of Crystals. Leningrad, 192 p. [in Russian].
3. Ioffe, A. (1928). The Physics of Crystals. N. Y. Lnd, McGraw Hill.
4. Nazarov, A. A., Romanov, A. E., Valiev, R. Z. (1993). On the structure, stress fields and energy of non-equilibrium grain boundaries. *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 41, pp. 1033—1040. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(93\)90152-I](https://doi.org/10.1016/0956-7151(93)90152-I)
5. Destruction, T. I. (1973). Microscopic and Macroscopic Foundations of the Mechanics of Destruction / Red. G. Libovits. Moscow: Mir, 620 p. [in Russian].
6. Knott, J. F. (1973). Fundamentals of Fracture Mechanics. Gruppo Italiano Frattura, 274 p.
7. Klevtsov, G. (1999). Plastic Zones and Diagnostics of Destruction Metal Materials. Moscow: MICIC, 112 p.[in Russian].
8. Tang George, C. H. (2012). Fatigue Crack Growth of Ultra Fine Grained Aluminium. School of Materials Science & Engineering, University of New South Wales, 187 p.
9. Kotrechko, S., Meshkov, Yu., Shyyan, A. (2009). Mechanical stability is a universal measure of resistance to the transition to a brittle state of a metal. *Uspihy Fiziki Metallov*, Vol. 10, No. 2, pp. 207—228 [in Russian]. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/98095>
10. Kotrechko, S., Meshkov, Yu., Shyyan, A. (2010). Plasticity and cold resistance of structural steels. *Problemy Prochnosti*, Vol. 1, pp. 112—119 [in Russian]. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/111650>
11. Kotrechko, S., Meshkov, Yu. (2009). The concept of mechanical stability of structural steels. *Problemy Prochnosti* [in Russian]. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/48380>
12. Kotrechko, S. O. (2004). Effect of long-term service on the tensile properties and capability of pipeline steel 17GS to resist cleavage fracture. *Int. J. of Pressure Vessels and Piping*, Vol. 81, No. 4, pp. 337—344. <https://doi.org/10.1016/j.ijpvp.2004.02.015>
13. Kotrechko, S. O., Meshkov, Yu., Mettus, G. S. (1990). To viscous and brittle states of polycrystalline metals. *Metallofizika*, Vol. 12, pp. 3—13.
14. Fan, Z. (1995). The grain size dependence of ductile fracture toughness of polycrystalline metals and alloys. *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 191, pp. 73—83. [https://doi.org/10.1016/0921-5093\(94\)09621-3](https://doi.org/10.1016/0921-5093(94)09621-3)
15. Noronha, S. J., Farkas, D. (2002). Dislocation pinning effects on fracture behavior: Atomistic and dislocation dynamics simulations. *Phys. Rev. B*, Vol. 66(13), pp. 132103. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.132103>
16. Zeng, X. H., Hartmaier, A. (2010). Modeling size effects on fracture toughness by dislocation dynamics. *Acta Mater.*, Vol. 58, No. 1, pp. 301—310. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.09.005>
17. Borysovska, K. M., Marchenko, N. M., Podrezov, Yu. N., Firstov, S. O. (2021). Simulation of the interaction of plastic zone dislocations with the grain boundary at brittle-plastic transition temperatures in molybdenum. *Uspihy Materialoznavstva*, Vyp. 3, pp. 66—76 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.066>
18. Borysovska, K. M. (2012). The modelling of the behavior of dislocation ensemble near the crack tip in the case of constant stress. *Electronnaya Mikroskopiya i Prochnost Materialov*, Vyp. 18, pp. 112—119 [in Russian].
19. Danilenko, N. I., Podrezov, Yu. N., Borysovska, K. M., Koryak, O., Firstov, S. O. (2014). Use of the method of dislocation dynamics for the analysis of the structural sensitivity of fracture toughness of BCC metals tend to quasigroups destruction. *Electronnaya Mikroskopiya i Prochnost Materialov*, Vyp. 20, pp. 31—42 [in Ukrainian].

20. Borysovska, K. (2005). Influence of the dislocation structure on the crack tip in highly deformed iron. *Mater. Sci.*, Wrocław, Vol. 23, pp. 521—528.
21. Rice, J. R., & Thomson, R. (1974). Ductile versus brittle behaviour of crystals. *The Philosophical Magazine: J. of Theoretical Experimental and Applied Physics*, Vol. 29(1), pp. 73—97. <https://doi.org/10.1080/14786437408213555>
22. Messerschmidt, U. (2010). *Dislocation dynamics during plastic deformation*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 502 p.
23. Amodeo, R. J., & Ghoniem, N. M. (1990). Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics. *Phys. Rev. B*, Vol. 41 (10), pp. 6958. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.6958>
24. Sills, R. B., Kuykendall, W. P., Aghaei, A., & Cai, W. (2016). Fundamentals of dislocation dynamics simulations. *Multiscale Materials Modeling for Nanomechanics*, Vol. Springer Series in Mater. Sci., pp. 53—87. https://doi.org/10.1007/978-3-319-33480-6_2
25. Hirth, J. P., & Lothe, J. (1982). *Theory of dislocations*. New York: Wiley.
26. Ohr, S. M. (1985). An electron microscope study of crack tip deformation and its impact on the dislocation theory of fracture. *Mater. Sci. Eng.*, Vol. 72 (1), pp. 1—35. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(85\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0025-5416(85)90064-3)
27. Minnert, C., & Durst, K. (2021). Thermally activated dislocation mechanism in Mo studied by indentation, compression and impact testing. *J. Mater. Res.*, Vol. 36 (12), pp. 2397—2407. <https://doi.org/10.1557/s43578-021-00126-4>
28. Seeger, A., Hollang, L. (2000). The flow-stress asymmetry of ultra-pure molybdenum single crystals. *Mater. Trans.*, Vol. JIM, 41 (1), pp. 141—151.
29. Trefilov, V., Milman, Yu., Firstov, S. (1975). *Physical Foundations of the Strength of Refractory Metals*. Kyev: Nauk. dumka, 293 p. [in Russian].
30. Milman, Yu., Trefilov, V. (1966). On the physical nature of temperature yield strength dependence. *Mechanism of Destruction of Metals*. Kyiv: Nauk. dumka, p. 59 [in Russian].

Modeling of the phenomenon of brittle-plastic transition by the method of dislocation dynamics

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

I. M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NAS of Ukraine, Kyiv

*E-mail: yupodrezov@ukr.net

Computer modeling by the DD method is based on the Rice and Thompson model, according to which the force relief near the crack tip is created by three forces: an external load, an image force acting on dislocations from the free surfaces, and a resistance force from the crystal lattice. The interaction between dislocations in the plastic zone is calculated step by step. At each step, the stress is calculated for all dislocations in the ensemble and the velocities and corresponding new positions are calculated. Computer calculations make it possible to predict the impact of dislocation ensemble shielding on the current value of the stress intensity factor. The calculated value of crack resistance was determined under the condition of reaching the critical value of the stress intensity coefficient of the brittle material at the crack head. The effect of temperature and strain rate on the viscous-brittle transition in polycrystalline molybdenum was modeled using the dislocation dynamics method. From the results of the calculations, it follows that when the test temperature changes, the size of the plastic zone increases by more than an order of magnitude. As the loading rate decreases, the abnormal increase in crack resistance shifts to smaller grain sizes. This effect is significantly smaller than the effect of temperature. Changing the parameters of the model does not change the general mechanism of the viscous-brittle transition, which is associated with the peculiarities of the interaction of dislocations in the plastic zone with grain boundaries in polycrystalline molybdenum. Regardless of the speed of loading and the temperature of the tests, three characteristic ranges of grain sizes can be distinguished: With large grains, the fracture toughness remains unchanged because the size of the plastic zone is much smaller than the grain size. With the average grain size, a dislocation cluster is formed near the boundary, grain boundary sources begin to work in the neighboring grain, forming a small number of dislocations there, which contributes to a slight increase in crack resistance. With a small grain size, the fracture toughness begins to increase rapidly, since the plastic zone covers several grains. The dislocation cluster moves to the top of the crack and screens its propagation.

Keywords: phenomenon of brittle-plastic transition, dislocation clustering, dislocation dynamics.