

УДК 539.53: 548.4

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПОЛОС ПЕРЕОРИЕНТАЦИИ В КРИСТАЛЛАХ

© Георгий Федорович Сарафанов, Юрий Геннадьевич Шондин⁽¹⁾

ИПМ РАН, Нижний Новгород, Россия

⁽¹⁾ НГПУ им. К. Минина, Нижний Новгород, Россияgf.sarafanov@yandex.ru shondin@rambler.ru

Аннотация. В рамках кинетического подхода проведено рассмотрение и компьютерное моделирование формирования полосы переориентации в поле упругих напряжений дисклинационного диполя. Показано, что дислокационная структура полосы переориентации, формирующаяся в процессе аккомодационного скольжения, представляет собой динамическое стационарное образование и имеет кинетическую природу возникновения.

Ключевые слова: дислокационный ансамбль, дисклинационный диполь, полосы переориентации.

COMPUTER MODELING OF THE SHAPE AND DISTRIBUTION OF MISORIENTATION BAND IN CRYSTALS

© G.F. Sarafanov, Yu.G. Shodin⁽¹⁾

Institute of problems of mechanical engineering RAS, Nizhny Novgorod, Russia

⁽¹⁾ Kozma Minin Nizhny Novgorod State Pedagogical University, Nizhny Novgorod, Russiagf.sarafanov@yandex.ru shondin@rambler.ru

Abstract. The formation of a misorientation band in the elastic field of a disclination dipole is considered and simulated using a kinetic approach. The simulation results agree well with the results obtained earlier in a continuum approximation. The dislocation structure of the misorientation band that forms during accommodation slip is shown to be a dynamic steady-state structure, and its appearance has a kinetic nature.

Key words: dislocation ensemble, disclination dipole, misorientation band.

Введение

Многолетние исследования фрагментации [1-3] позволили заключить, что в поликристаллах его первопричиной являются мощные упругие напряжения, источники которых возникают на межзеренных границах и стыках. Именно вблизи стыков или морфологических особенностей исходных границ (ступеньки, уступы, изгибы) наблюдается зарождение новых границ, которые прорастают внутрь зерен и делят их на разориентированные между собой кристаллические элементы. Движущей силой этого процесса являются источники внутренних напряжений – пластические несовместности (первичные мезодефекты), которые накапливаются на границах из-за различия собственных пластических деформаций смежных зерен.

Мощность мезодефектов (стыковые дисклинации и примыкающие к ним планарные мезодефекты – плоские скопления эквидистантно расположенных скользящих дислокаций) постоянно увеличивается в процессе пластической деформации. Своими дальнедействующими полями напряжений они возмущают плотность потока решеточных дислокаций в объеме зерен, делают его неоднородным, вызывают коллективные эффекты в ансамбле дислокаций и в конце концов порождают в прилегающих объемах зерен вторичные мезодефекты ротационного типа – оборванные границы и полосы переориентации состоящие из субграниц противоположного знака [2, 4].

В работах [5-7] на основе кинетического континуального рассмотрения было показано, что дисклинация, расположенная в границе или внутри зерна, своими дальнедействующими полями нарушает однородное течение деформируемого зерна, и формирует в нем области дислокационного заряда. Оказалось, что такое перераспределение дислокаций в упругом поле дисклинации способно существенно понизить общую упругую энергию системы [6,7].

В настоящей работе обобщены результаты исследования поведения дислокационного ансамбля в полях первичных мезодефектов в рамках дискретного подхода на основе метода компьютерного моделирования [8-13]. Такой подход позволяет исследовать самосогласованную динамику дислокационного ансамбля как поведение ансамбля дискретных дефектов и выявить закономерности образования и роста ротационных дефектов в процессе пластической деформации.

1. Формирование полосы переориентации вблизи двойного излома границы зерна

В рамках кинетического подхода исследуем теперь условия возникновения полосы переориентации вблизи дисклинационного диполя, формирующегося непосредственно в процессе пластической деформации на двойном изломе межкристаллитной границы в бикристалле [8]. Рассмотрим случай, когда дисклинационный диполь образуется полосой скольжения (рис.1).

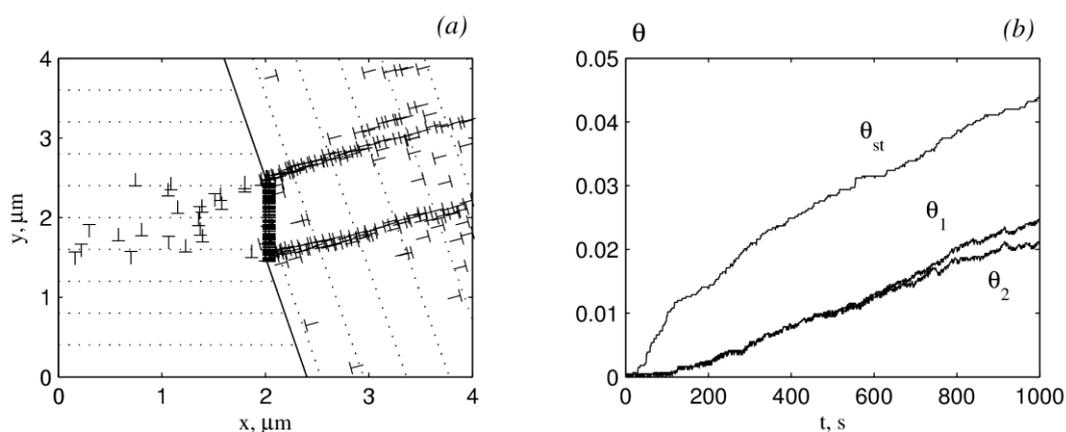


Рис. 1. Сформированная полоса переориентации от полосы скольжения (а) к моменту времени $t = 1000\text{н}$ и изменение разориентировок дислокационной стенки θ_{st} на изломе границы зерна и субграниц θ_1 и θ_2 полосы переориентации от времени (б).

Предполагается, что перемещение дислокаций в каждом из зерен бикристалла происходит в одной плоскости скольжения: в левом зерне вдоль $0x$, в правом зерне – под углом 105° к оси $0x$. При выбранном направлении оси растяжения и режиме нагрузки ее сдвиговая компонента в правом зерне равна нулю, так что в плоскостях скольжения зерна движение дислокаций

осуществляется только под действием внутренних напряжений. Исследуемая геометрия бикристалла имела размер $(d \times d)$, где $d = 4\mu\text{m}$.

Попадающие при пластической деформации на двойной излом границы из правого зерна решеточные дислокации (рис.1) формируют на нем дислокационную стенку – дисклинационный диполь. Образование мезодефекта в процессе деформации вызывает спустя некоторое время ($t \approx 100\text{c}$) в правом зерне аккомодационную пластическую деформацию и формирование дислокационной структуры в виде оборванных субграниц.

Из представленных данных видно, что при выбранной геометрии скольжения мощность ω частичных дисклинаций, возникающих на межкристаллитной границе и образующих дисклинационный диполь, значений порядка $\omega = \theta_{st} \approx 0,04$, в то время как разориентировки субграниц противоположного знака сформированной полосы переориентации порядка $\theta_{1,2} \approx 0,02$. Таким образом, и в данном случае выполняется универсальное соотношение формирования субграниц $\theta \approx \omega/2$.

2. Формирование дипольной системы субграниц в упругом поле планарного мезодефекта

Одним из характерных мезодефектов, который может вызывать процессы фрагментации, является планарный мезодефект типа плоского скопления дислокаций. Мезодефекты этого типа формируются на межкристаллитных границах при пластической деформации поликристалла [1,3]. В рамках континуального подхода показано [20], что планарный мезодефект может инициировать формирование полосы переориентации подобно диполю частичных дисклинаций. Рассмотрим этот вопрос с точки зрения моделирования. Моделирование проводилось в зерне $(d \times d)$, где $d = 2\mu\text{m}$. Мезодефект типа плоского скопления располагался так, как это показано на рис.2.

Длина скопления задана равной $L = 1\mu\text{m}$, его мощность – $\Omega = b/h = 0,02$ (h – расстояние между дислокациями в скоплении), а вектор Бюргерса – $B = \Omega L = 0,02\mu\text{m}$.

Исследование проводилось, когда в исследуемой области задаются процессы генерации и аннигиляции дислокаций, т.е. режим полноценной кинетики. Эволюция дислокационного

ансамбля исследовалась при следующих параметрах: $\Omega = 0,01$, $\sigma_c = 3 \cdot 10^{-3} D$, $\sigma_e = \frac{1}{3} \sigma_c$, $x_c = Db/\sigma_c = 0,1\mu\text{m}$, $x_a = 0,09\mu\text{m}$, $y_a = 0,01\mu\text{m}$, $\dot{N} = \dot{N}_+ = \dot{N}_- = 0,1 \text{ c}^{-1}$, $N(0) = 2$ (начальное число дислокаций). В момент времени $t_1 = 75\text{c}$ включалось упругое поле мезодефекта. Время моделирования составляло 600с.

Изменение дислокационной структуры и ее характеристик во времени показано на рис.2. В начальный период времени ($0 < t < t_1$), когда действовало лишь слабое внешнее поле $\sigma_{xy}^e = \sigma_e$, пластическая деформация в зерне отсутствовала. Все генерируемые дислокации аннигилировали в теле зерна. В момент времени $t \approx 100\text{c}$ начался процесс размножения дислокаций и формирование субграниц противоположного знака.

Субграницы до момента установления в зерне стационарного состояния ($t_s \approx 200\text{c}$) имели характер сгущений, а в стационарном состоянии приняли вид полосы переориентации, т.е. системы параллельных субграниц в дипольной конфигурации (рис.2а). При этом

разориентировка субграниц оказалась приблизительно равной $\theta \approx 0,012$ (рис.2b), а расстояние между субграницами $2a = 0,4\mu\text{m}$ (рис.2b).

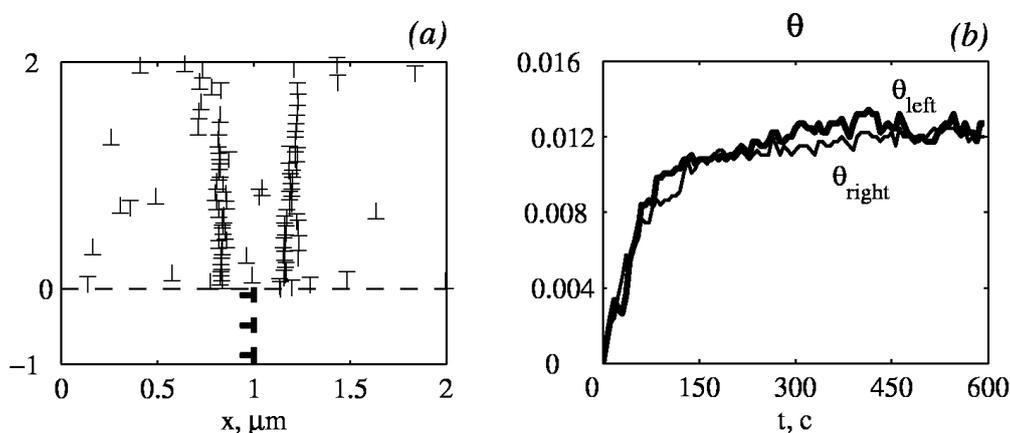


Рис.2. Эволюция дислокационной структуры и ее характеристик в упругом внешнем поле $\sigma_{xy}^e = 0,001D$ и поле напряжений плоского мезодефекта мощности $\Omega = 0.02$: (a) – дислокационная структура в виде полосы переориентации в момент времени $t = 600c$; (b) – изменение разориентировок θ субграниц от времени.

В работе [14] была получена оценка $\theta = \Omega L/4a$ для разориентировки дипольной системы субграниц, возникающих в процессе возможного акта фрагментации от плоского мезодефекта. Если подставить в эту формулу полученное при моделировании значение ширины полосы переориентации $2a \approx 0,4\mu\text{m}$ и заданные параметры мезодефекта ($\Omega = 0,02$, $L = 1\mu\text{m}$), то имеем

$$\theta = \frac{\Omega L}{4a} = 0.0125, \quad (1)$$

что близко к значению $\theta = 0,012$ разориентировки субграниц (рис. 2b).

Заметим, что обоснование соотношения (1) требует более систематических исследований. С другой стороны, сам факт формирования в условиях кинетики дислокационного ансамбля полосы переориентации от мезодефекта типа плоского скопления представляется достаточно важным.

Выводы

Формирующиеся на ранних стадиях фрагментации оборванные субграницы представляют собой динамические стационарные образования и имеет следующие особенности, выявленные при моделировании:

- Процесс формирования полос переориентации, представляющих систему параллельных субграниц эффективно проявляется при аккомодационной пластической деформации, происходящей во-первых, в упругом поле диполя клиновых дисклинаций и, во-вторых, при определенных условиях в упругом поле планарного мезодефекта.
- Полосы переориентации, как и отдельные оборванные субграницы, формируются в условиях развитой кинетики дислокаций и располагаются вдоль линий нулевого поля экранированного дислокационным ансамблем сдвиговой компоненты тензора эффективного упругого поля соответствующих мезодефектов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 15-42-02700).

Список литературы

1. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. -М.: Металлургия,1986. -224с.
2. Rybin V.V. Regularities of Mesostuctures Development in Metals in the Course of Plastic Deformation // Problems of material science. - 2003. - N1(33). - pp.9-28.
3. Рыбин В.В. Структурно-кинетические аспекты физики развитой пластической деформации// Изв. вузов Физика. -1991, 3. С.7-22.
4. Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. -Л.: Наука, 1986. -224с.
5. Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. Экранирование упругого поля дисклинаций дислокационным ансамблем //Физика твердого тела. - 2007, т.49. вып.10, с.1780-1786.
6. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. The screening of mesodeflects stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation// Rev. Adv. Mater. Sci. Vol.30. 2012. PP. 73-89.
7. Сарафанов Г.Ф., Шондин Ю.Г. Эффект экранирования дислокационным ансамблем упругого поля дисклинации, расположенной на границе двух полупространств// Физика твердого тела, 2012, том 54, вып. 11, с.122-126.
8. Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Основы кинетической теории формирования разориентированных структур при пластической деформации металлов. Монография. – Нижний Новгород: Изд-во «Литера», 2011. – 358с.
9. Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. Моделирование процессов зарождения и формирования оборванных субграниц // Вопросы материаловедения. - 2007, вып.1(49), с.5-19.
10. Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. Модель аккомодационного зарождения оборванной субграницы с границы зерна // Письма в ЖТФ. - 2007, т.33, вып.9, с.87-94.
11. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. Computer simulation of terminated sub-boundary formation in the disclination elastic field// Mater. Sci. Eng (a). - 2009, Vol. 503, N1-2, pp.137-140.
12. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. Computer simulation of dislocation boundaries formation in the elastic field of disclinations// Problems of material science. 2007. N4(52). С.252-259.
13. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. - М.: Атомиздат,1972. -599с.
14. Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. Эффекты самосогласованной динамики дислокаций в упругом поле планарного мезодефекта// Физика твердого тела. - 2009, т.51. вып.12, с.2309-2314.

Дата поступления статьи: 18 декабря 2016 года.