DOI: 10.18411/vntr2023-171-2

УДК 548.4, 539.372

# АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ДИФФУЗИОННОГО ЗАРОЖДЕНИЯ ПОР В ОКРЕСТНОСТИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ГРАНИЦЫ, ФОРМИРУЮЩЕЙСЯ В ПОЛЕ КЛИНОВОЙ ДИСКЛИНАЦИИ

**© Юлия Вячеславовна Свирина, Александр Сергеевич Пупынин, Владимир Николаевич Перевезенцев**

*Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук» (ИПМ РАН), Нижний Новгород, Россия*

j.svirina@mail.ru

***Аннотация.*** *Исследованы условия зарождения пор вблизи оборванных дислокационных границ, формирующихся при пластической деформации в упругом поле стыковых дисклинаций. Показано, что в границах, сформированных в поле отрицательных дисклинаций переползание дислокаций под действием осмотических сил, обусловленных избытком деформационных вакансий, приводит к сжатию границы и росту локальных растягивающих напряжений в ее окрестности. Проанализировано влияние полей напряжений, возникающих вблизи оборванных дислокационных границ и степени пересыщения материала неравновесными вакансиями деформационного происхождения на частоту диффузионного зарождения пор. Показано, что наиболее выражен эффект зарождения пор в интервале температур 0.4-0.5 температуры плавления.*

***Ключевые слова:*** *поры, оборванные дислокационные границы, стыковые дисклинации, неравновесные вакансии.*

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИПФ РАН на выполнение фундаментальных научных исследований по теме № 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).*

# ANALYSIS OF THE POSSIBILITIES FOR DIFFUSION CAVITIES NUCLEATION IN THE VICINITY OF A DISLOCATION BOUNDARY FORMED IN THE FIELD OF A WEDGE DISCLINATION

**© J.V. Svirina, A.S. Pupynin, V.N. Perevezentsev**

*Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Science – Branch of Federal Research Center « A.V. Gaponov-Grekhov Institute of Applied Physics of the Russian Academy of Sciences», Nizhny Novgorod, Russian Federation*

j.svirina@mail.ru

***Abstract.*** *The conditions for cavities nucleation near broken dislocation boundaries formed during plastic deformation in the elastic field of junction disclinations have been investigated. It is shown that in boundaries formed in the field of negative disclinations, the climb of dislocations under the influence of osmotic forces caused by an excess of deformation vacancies leads to contraction of the*

*boundary and an increase in local tensile stresses in its vicinity. The influence of stress fields arising near broken dislocation boundaries and the degree of supersaturation of the material with nonequilibrium vacancies of deformation origin on the rate of cavities nucleation is analyzed. It has been shown that the effect of pore nucleation is most pronounced in the temperature range 0.4-0.5 melting point.*

***Keywords:*** *cavities, broken dislocation boundaries, junction disclinations, nonequilibrium vacancies.*

***Acknowledgements.*** *The work was carried out within the state task for fundamental scientific research on the topic no. 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).*

Вязкому разрушению материала предшествует процесс зарождения микротрещин и пор с последующим их ростом и слиянием в макротрещины. В последние годы появилось значительное число исследований, указывающих, что местами зарождения субмикронных пор могут служить оборванные дислокационные границы деформационного происхождения, формирующиеся на стадии фрагментации материала [1-7]. Такие границы образуются преимущественно вблизи стыков и изломов межзеренных границ, содержащих линейные мезодефекты ротационного типа - стыковые дисклинации, появление которых связано с неравномерным протеканием пластической деформации по ансамблю зерен поликристалла [8-11]. По мере увеличения деформации оборванные дислокационные границы распространяются в тело зерен, постепенно разбивая их на взаимно разориентированные области (фрагменты). Теоретические исследования механизмов и закономерностей формирования оборванных границ вблизи ротационных мезодефектов показали, что при достаточно низких температурах, когда неконсервативным движением (переползанием) краевых дислокаций в процессе формирования оборванных границ можно пренебречь, средняя разориентировка границы оказывается близка к половине мощности породившей её дисклинации [12,13]. Однако при повышенных температурах переползание дислокаций приводит к перераспределению плотности вектора Бюргерса дислокаций в оборванной границе, а, следовательно, и изменению упругого поля напряжений в ее окрестности. При определенных условиях этот процесс может приводить к увеличению полей растягивающих напряжений вблизи границы [14]. Это обстоятельство в совокупности с высокой концентрацией деформационных вакансий, характерной для материалов на стадии фрагментации, может создавать благоприятные условия для зарождения пор. В литературе имеется множество экспериментальных данных о том, что на поздних стадиях фрагментации материала субмикронные поры располагаются преимущественно вблизи места обрыва одной или нескольких дислокационных границ со средними углами разориентировки порядка трёх-пяти градусов [2,3,6]. В работе [2] сделано предположение о диффузионной природе образования этих пор в результате стока в них неравновесных деформационных вакансий [15], однако механизм их зарождения до конца не ясен. Целью настоящей работы является анализ условий зарождения пор вблизи оборванных границ деформационного происхождения путем объединения неравновесных деформационных вакансий.

Рассмотрим оборванную дислокационную границу, сформированную в упругом поле клиновой дисклинации мощности $\omega$ (рис. 1). Согласно результатам компьютерного моделирования [13] такую границу можно в первом приближении представить в виде стенки дислокаций, которая зависимости от знака стыковой дисклинации может состоять либо из положительных либо из отрицательных дислокаций. В общем случае распределение

дислокаций в таких границах неоднородно, а их линейная плотность уменьшается с расстоянием от дисклинации. Особый интерес представляет случай, когда граница сформирована в упругом поле отрицательной дисклинации и, следовательно, состоит из дислокаций с отрицательным вектором Бюргерса, так как при этом в ее окрестности возникают поля растягивающих напряжений, которые могут стимулировать зарождение трещин или пор. Рассмотрим этот случай подробно. Проанализируем распределение дислокаций в оборванной границе с учетом возможности их переползания при стоке на них неравновесных вакансий.

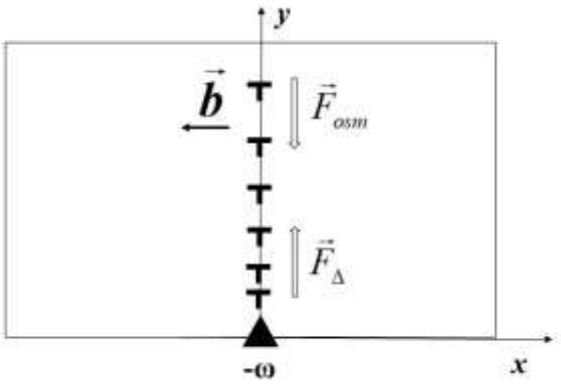



**Рис.1.** Схематическое изображение оборванной дислокационной границы, сформированной в упругом поле клиновой дисклинации.

Сила, приходящаяся на единицу длины iй дислокации, расположенной в окрестности дисклинации в точке с координатами $(0,y)$, способная вызвать ее переползание, в системе координат, показанной на Рис.1, имеет вид:

$$F_y = \sigma_{xx}^{\Sigma} b = \left(\sigma_{xx}^{\Delta} + \sigma_{xx}^{disl} + \sigma_{xx}^{osm} + \sigma_{xx}^{ext}\right) b\,, \tag{1}$$

где: $\sigma_{xx}^{\Delta}$ - напряжение от дисклинации, $\sigma_{xx}^{disl}$ - суммарное напряжение, создаваемое остальными дислокациями границы, $\sigma_{xx}^{osm}$ - осмотическая сила, $\sigma_{xx}^{ext}$ - внешнее напряжение, $b$ – величина проекции вектора Бюргерса дислокации на ось Ох. Величина $\sigma_{xx}^{\Delta}$ имеет вид [16]:

$$\sigma_{xx}^{\Delta} = D\omega\left(\ln\frac{y}{R} + 1\right), \tag{2}$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $R$ - радиус экранирования упругого поля дисклинации, $D = \dfrac{G}{2\pi(1-\nu)}$, $G$ - модуль сдвига, $\nu$ - коэффициент Пуассона. Напряжение от системы дислокаций $\sigma_{xx}^{disl} = \sum_{j\neq i}\sigma_{xx}^{j}\left(0,y_j\right)$, где $\sigma_{xx}^{j}$ - поле от дислокации с координатами $\left(0,y_j\right)$, создаваемое в точке с координатами $(x,y)$ [17]. Величина $\sigma_{xx}^{osm}$ имеет вид [17]:

$$\sigma_{xx}^{osm} = \frac{kT}{\Omega}\ln(1+S) \tag{3}$$

Здесь $k$ - постоянная Больцмана, $T$ - температура, $\Omega$ - атомный объем, $S = \frac{C_{vd}}{C_0}$ - пересыщение, $C_0$ - термодинамически равновесная концентрация вакансий, $C_{vd}$ - концентрация деформационных вакансий. Со стороны дисклинации на каждую из дислокаций границы действуют силы отталкивания, в то время как осмотическая сила действует в противоположную сторону (Рис.1). При достаточно большой величине осмотической силы переползание дислокаций, будет приводить к сжатию оборванной границы и увеличению в ней плотности вектора Бюргерса и величины ее средней разориентировки. Величина осмотической силы является функцией температуры и пересыщения. В свою очередь величина пересыщения $S$ зависит от температуры, скорости деформации и величины внешнего напряжения и, согласно моделям [18,19] имеет вид:

$$S = \chi\left(\frac{\dot{\varepsilon}b^2}{D_s}\right)\left(\frac{G}{\sigma^{ext}}\right), \tag{4}$$

где $\dot{\varepsilon}$ - скорость деформации, $D_s$ - коэффициент объемной самодиффузии, $\chi$ - численный коэффициент. Из выражений (3) и (4) следует, что с понижением температуры концентрация деформационных вакансий растёт, а вместе с ней увеличивается и осмотическая сила. Однако при температурах, меньших $0.4T_m$ ($T_m$ - температура плавления), влияние осмотической силы несущественно из-за низкой подвижности вакансий, вследствие чего переползанием дислокаций можно пренебречь. С другой стороны, повышение температуры приводит к уменьшению концентрации неравновесных вакансий и уменьшению осмотической силы. При $T > 0.5T_m$ ею можно пренебречь по сравнению с остальными слагаемыми в формуле (1). Таким образом, сжатие границы под действием осмотической силы проявляется лишь в узком интервале температур $T \approx (0.4 \div 0.5)T_m$. Для нахождения равновесной конфигурации оборванной дислокационной границы применялся метод динамики дискретных дислокаций [20,14]. Для рассматриваемого случая уравнение движения дислокаций имеет вид

$$V_c = M_c F_y, \tag{5}$$

где $V_c$ - скорость переползания, $M_c$ - подвижность дислокаций. Исходная конфигурация границы задавалась в виде равномерного распределения краевых дислокаций с плотностью вектора Бюргерса $\rho_0(y) = \omega/2$. Равновесная конфигурации оборванной границы определялась в соответствии со следующей итерационной процедурой. На каждой итерации выполнялись: расчет сил, действующих на каждую дислокацию границы; определение скорости дислокаций; перемещение дислокаций, для которых путь, пройденный дислокацией за итерацию больше или равен межплоскостному расстоянию $a$, на новые позиции. Дислокации, не отвечающие этому условию, считались неподвижными. Равновесие достигалось, когда все дислокации становились неподвижными. Для рассчитанной таким образом равновесной конфигурации границы определялись поля упругих напряжений. Далее рассчитывались суммарные поля напряжений и области отрицательных давлений $P$, создаваемые границей и дисклинацией. Для оценки возможности зарождения пор в зонах

максимальных растягивающих напряжений проводился анализ изменения энергии системы при объединении n неравновесных вакансий в кластер.

Энергия образования кластера из $n$ вакансий с радиусом $r_c = \left(3n\Omega/4\pi\right)^{1/3}$, нормированная на величину энергии тепловых колебаний при температуре плавления $kT_m$ при заданном пересыщении материала деформационными вакансиями $S$ имеет вид:

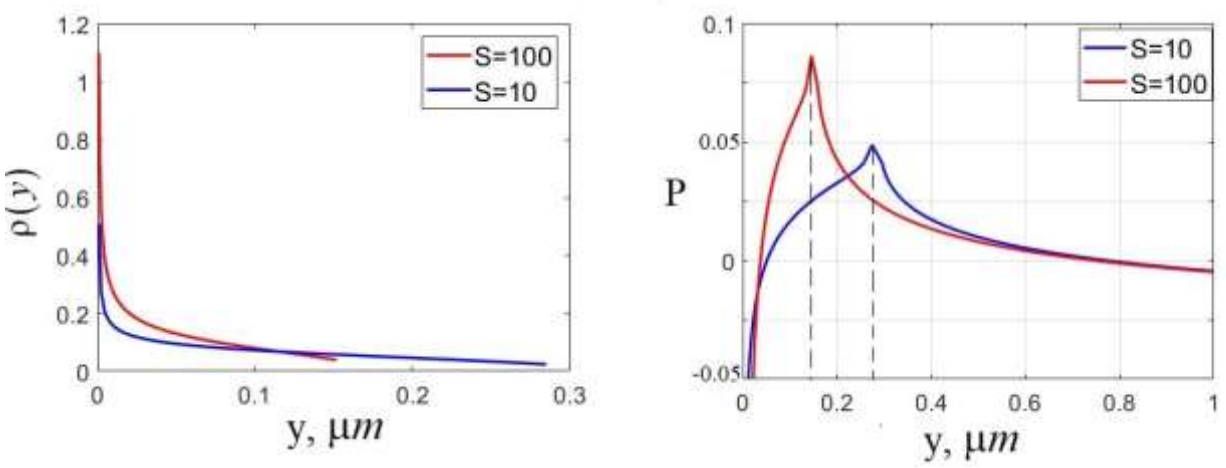
$$\Delta\tilde{F} = -n\tilde{\mu}_v + 4\pi\alpha_S\left(\frac{3n}{4\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\xi\left(n\right) \tag{6}$$

Здесь $\tilde{\mu}_v = \frac{T}{T_m}ln\left(S+1\right)+\alpha_G P$ – химический потенциал вакансии, нормированный на $kT_m$, $\alpha_G = G\Omega/kT_m$, $P$ – приведённая величина давления в единицах модуля сдвига $G$, $\alpha_S = \gamma_{S0}b^2/kT_m = \alpha_G/16$, $\gamma_{S0} \approx Gb/16$ – удельная энергия плоской свободной поверхности, $\xi\left(n\right) = 1-0.8/\left(n+2\right)$ – функция, учитывающая зависимость удельной поверхностной энергии кластера от числа содержащихся в нем вакансий. Число вакансий $n_c$ в зародыше критического размера определялось из условия $\left.\frac{d\Delta\tilde{F}}{dn}\right|_{n=n_c} = 0$:

$$4\pi\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3}\alpha_s\left[0.8\left(\frac{n_c^{1/3}}{n_c+2}\right)^2+\frac{2}{3}\frac{\xi\left(n_c\right)}{n_c^{1/3}}\right] = \tilde{\mu}_v. \tag{7}$$

Численные расчеты проводились при следующих значениях параметров: размер расчетной области $1\mu m \times 1\mu m$, длина исходной дислокационной границы $0.5\mu m$, $\omega = 0.04$, $T = 0.4T_m$, $\sigma^{ext} = 10^{-3}G$, $b = 2.5\cdot10^{-8}\ cm$, $M_c = 10^{-6}Pa^{-1}s^{-1}$ при двух значениях скоростей пластической деформации: $\dot{\varepsilon} = 2\cdot10^{-2}s^{-1}$ и $\dot{\varepsilon} = 2\cdot10^{-3}s^{-1}$. Величины пересыщений $S=100$ и $S=10$, соответствующие приведенным выше скоростям деформации, рассчитывались из соотношения (4) при $D_s = D_0e^{-\frac{Q}{kT}}$, где $Q = 18kT_m$, $D_0 = 10^{-2}\ cm^2s^{-1}$, $\chi = 10^{-4}$. Распределение плотности вектора Бюргерса дислокационной границы $\rho\left(y\right)$ определялось с использованием выражения $\rho\left(y\right) = \frac{b}{y_{i+1}-y_i}$, где $y = \frac{y_{i+1}-y_i}{2}$, $y_i$ и $y_{i+1}$ - координаты соседних дислокаций. На Рис. 2. представлены интерполяционные кривые распределений плотности вектора Бюргерса, полученные для пересыщений $S=100$ и $S=10$. Как видно из Рис.2а, осмотическая сила вызывает перераспределение дислокаций и уменьшение длины границы с исходного значения $0.5\mu m$ до значений $0.15\mu m$ при $S=100$ и $\approx 0.28\mu m$ при $S=10$. Это приводит к существенному росту средних значений плотности вектора Бюргерса и разориентировки границы.

На Рис.2б приведены распределения суммарного поля отрицательного давления, создаваемого отрицательной дисклинацией и дислокациями оборванной границы в плоскости залегания оборванной границы. Максимальные отрицательные давления возникают на конце оборванной дислокационной границы (Рис. 2б).




а) б)

**Рис. 2.** Распределение плотности вектора Бюргерса вдоль оборванной границы (а) и суммарного поля гидростатического давления, создаваемого дисклинацией и дислокациями оборванной границы (б).

Оценим величину энергии образования зародыша поры $\Delta\tilde{F}_c$ в окрестности вершины оборванной границы. Проведем данную оценку при следующих характерных значениях параметров, входящих в выражения (6) и (7): $\alpha_G \approx 50$, $\gamma_{s0} \approx Gb/16$, $T_1 = 0.4T_m$, $T_2 = 0.5T_m$, $S_1 = 10$, $S_2 = 10^2$, $P = 8 \cdot 10^{-2}$. На Рис. 3 представлены зависимости энергии образования вакансионного кластера $\Delta\tilde{F}$ от числа вакансий $n$ при различных значениях величин $T$ и $S$. Нетрудно видеть, что величины энергии образования зародышевых пор критического размера, и число содержащихся в них вакансий $n_c$, соответствующие максимумам на кривых $\Delta\tilde{F}(n)$, при выбранных значениях параметров лежат в диапазонах $10 \div 15kT_m$, и $5 \div 10$ вакансий, соответственно.Скорость образования зародышей пор $J_n$ с учетом исчерпания количества центров зарождения, согласно [21], имеет вид:

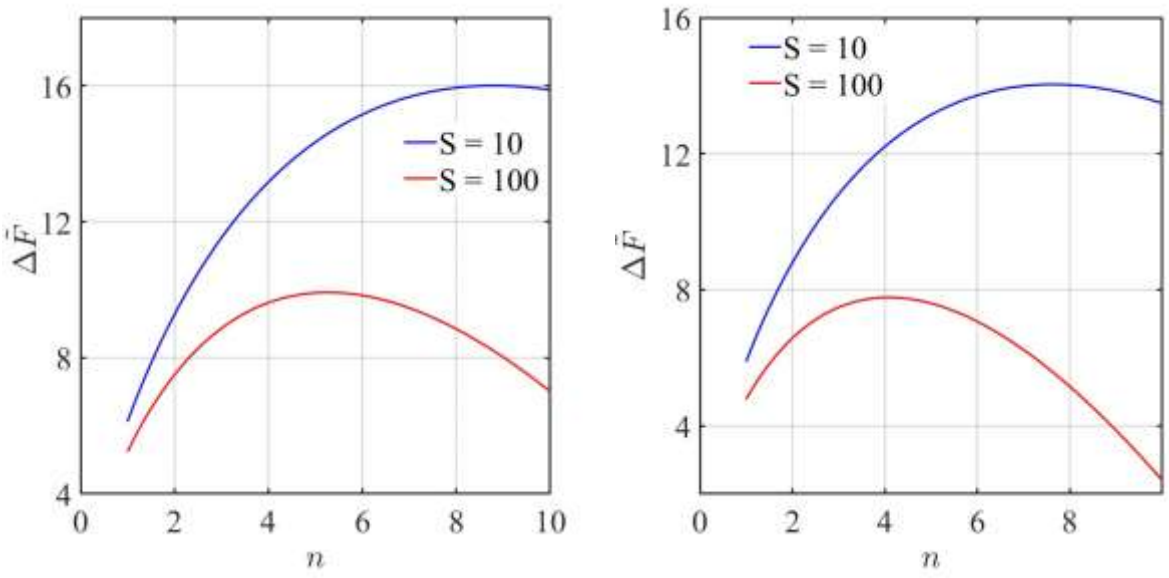
$$J_n = Z(N_c - N)\exp\left(-\frac{\Delta\tilde{F}(n_c)}{kT}\right), \quad (9)$$

где $Z = \sqrt{-\frac{1}{2\pi kT}\frac{\partial^2\Delta\tilde{F}}{\partial n^2}\Big|_{n=n_c}}$ – множитель Зельдовича [22], $N_c$ – концентрация центров зарождения, $N$ – текущее значение концентрации пор. Величину $N_c$ можно оценить, исходя из известной из эксперимента величины доли малоугловых границ зерен $f_l$ в поликристалле с размером зерна $d$ [23,24]:

$$N_c = \frac{9}{8}\frac{f_l}{1-f_l}\frac{1}{r_c d^2}. \quad (10)$$

Зависимость $J_0 = J_n(N = 0, S)$ при различных значениях температуры представлен на рис. 4 (кривая 1 - $T = T_1$, кривая 2 - $T = T_2$). Число пор $N$, возникающих в объеме фрагмента $0.3\mu m \times 0.3\mu m \times 0.3\mu m$ при деформации $\varepsilon$, можно оценить как произведение скорости

зарождения $J_0$ на время $\Delta t = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\dot{\varepsilon}}$, где $\varepsilon_0 \sim 0.2$ – характерная величина деформации при которой начинается образование оборванных границ и фрагментация материала [8]. Оценка $N$ при $\varepsilon \sim 1 \div 1.5$, $T = 0.5T_m$, $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}\ s^{-1}$ дает величину порядка 10 пор.




а) б)

**Рис. 3.** Зависимость энергии образования вакансионного кластера $\Delta\tilde{F}$ от $n$ при различных значениях температуры и степени пересыщения вакансиями деформационного происхождения: а) $T_1 = 0.4T_m$, б) $T_2 = 0.5T_m$.

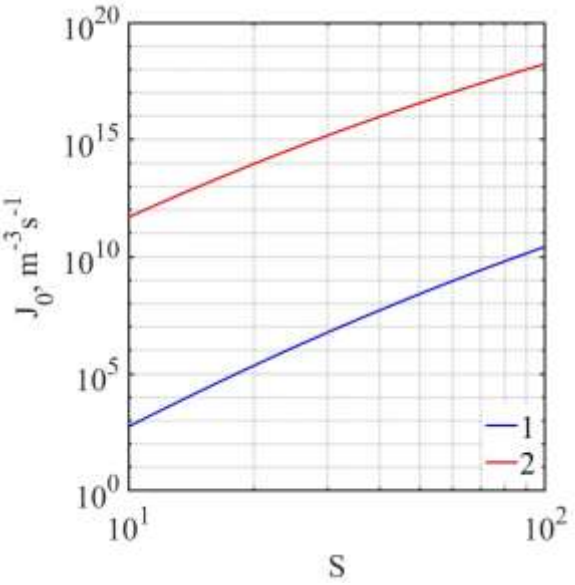



**Рис. 4.** Зависимость скорости зарождения в начальный момент времени $J_0 = J_n(N = 0, S)$ от степени пересыщения вакансиями деформационного происхождения при различных температурах: кривая 1 - $T = 0.4T_m$, кривая 2 - $T = 0.5T_m$.

Полученные результаты показывают, что неравновесные деформационные вакансии могут существенно влиять на характеристики оборванных дислокационных границ, формирующихся при пластической деформации вблизи отрицательных стыковых дисклинаций. Сток неравновесных вакансий на дислокации приводит к сжатию таких границ и, как следствие, к росту растягивающих напряжений в объеме зерна. Этот эффект наиболее ярко выражен в интервале температур $0.4-0.5T_m$. Рост отрицательных давлений в месте обрыва границы создает благоприятные условия для диффузионного зарождения нанопор.

## Список литературы

26. Noell, P.J., Sills, R.B., Benzerga, A.A., Boyce, B.L., Void Nucleation During Ductile Rupture of Metals: A Review, Progress in Materials Science (2023), 101085
27. Philip J. Noell, Julian E.C. Sabisch, Douglas L. Medlin, Brad L. Boyce, Nanoscale conditions for ductile void nucleation in copper: Vacancy condensation and the growth-limited microstructural state, Acta Materialia, Volume 184, 2020, P. 211-224
28. Philip Noell, Jay Carroll, Khalid Hattar, Blythe Clark, Brad Boyce, Do voids nucleate at grain boundaries during ductile rupture?, Acta Materialia, Volume 137 (2017), P. 103-114
29. Marc A Meyers, Sirirat Traiviratana, VA Lubarda, David J Benson, and Eduardo M Bringa. The role of dislocations in the growth of nanosized voids in ductile failure of metals. Jom, 61(2), 2009. 35-41
30. Hojun Lim, Philip J. Noell, Jay D. Carroll, Crystallographic orientation dependent fracture behavior in tantalum single crystals, Scripta Materialia, Volume 191, 2021, P. 76-80
31. Philip J Noell, Ryan B Sills, and Brad L. Boyce. Suppression of ductile rupture in aluminum via dynamic recrystallization. Metallurgical and Materials Transactions A, 2019.
32. Osamu Furukimi, Chatcharit Kiattisaksri, Yuji Takeda, Masatoshi Aramaki, Satoshi Oue, Shinji Munetoh, Masaki Tanaka, Void nucleation behavior of single-crystal high-purity iron specimens subjected to tensile deformation, Materials Science and Engineering: A, Volume 701, 2017, P. 221-225.
33. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. - М.: Металлургия, 1986. - 224с.
34. Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotorevsky N.Yu.. Junction disclinations in plastically deformed crystals. Acta Met.Mater.. 41 (7), 2211 (1993)
35. Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Application of disclination concept to solid structures. Progress in Materials Science. 2009. Vol. 54. P. 740−769.
36. Rybin V.V. Regularities of mesostructures development in metals in the course of plastic deformation, Problems of material science. 2003. V. 33. N 1. P. 9-28.
37. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. The screening of mesodefects stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation // Rev. Adv. Mater. Sci. 2012. V. 30. P. 14-34.
38. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F., Svirina J.V. Computer simulation of the dislocation ensemble kinetics in the elastic fields of mesodefects and fragmentation processes during plastic deformation. Mater.Phys. and Mech. 2014. V. 21. P. 78-98.
39. Свирина Ю.В. Перевезенцев В.Н. Анализ влияния переползания дислокаций на формирование оборванной субграницы в упругом поле клиновой дисклинации// Деформация и разрушение материалов. –2015. – № 10. – С. 10-13.

40. Schafler E., Steiner G., Korznikova E., Kerber M., Zehetbauer M.J. Mater. Sci. Eng. A. 2005. V. 410-411. P. 169–173.
41. Romanov A.E. and Vladimirov V.I., Disclinations in crystalline solids, in F.R.N. Nabarro ed. "Dislocations in solids", North-Holland, Amsterdam, (1992), vol. 9, pp. 191-402.
42. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. - М.: Атомиздат, 1972. – 599 с.
43. K. Detemple, O. Kanert, J. Th. M. De Hosson, and K. L. Murty, In situ nuclear magnetic resonance investigation of deformation-generated vacancies in aluminum, Phys. Rev. B 52, 125 (1995)
44. H. Mecking and Y.Estrin, The effect of vacancy generation on plastic deformation, Scr. Metall. Vol. 14, pp. 815-819, 1980
45. Van der Giessen E and Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model Modelling Simul.Mater. Sci. Eng. 3 (1995) 689–735
46. Raj R., Ashby M.F. Intergranular fracture at elevated temperature. Acta Metall. 1975. Vol. 23. Iss. 6. P. 653–666.
47. Slezov V. V. Kinetics of first order phase transitions. – John Wiley & Sons, 2009. – 415 pp.
48. Kaiser H. F. Estimation of inter-granular surfaces and volumes in metals. Metals and Alloys. – 1938. – Т. 9. – С. 23-26.
49. Классен-Неклюдова М. В., Конторова Т. А. Природа межкристаллических прослоек// УФН. – 1939. - Т. 22, № 4. - С. 395–426.

*Дата поступления: 29 ноября 2023 г.*