

05

## Локальная миграция границ зерен в поликристаллических материалах при пластической деформации

© А.Л. Колесникова, И.А. Овидько, А.А. Федоров

Институт проблем машиноведения РАН, С.-Петербург  
E-mail: ovidko@def.ipme.ru

Поступило в Редакцию 18 декабря 2002 г.  
В окончательной редакции 7 февраля 2003 г.

Предложена теоретическая модель, описывающая новый механизм локальной миграции границ зерен вблизи тройных стыков, стимулированной зернограничным скольжением. В рамках модели движущая сила для локальной миграции обусловлена взаимодействием между скользящими и структурными зернограничными дислокациями, ответственными соответственно за зернограничное скольжение и разориентировку границы.

Тройные стыки границ зерен (ГЗ) в поликристаллических материалах имеют структуру и свойства, отличные от структуры и свойств, примыкающих к ним ГЗ (например, [1–8]). В пластически деформируемых материалах тройные стыки являются источниками решеточных дислокаций [6,8], обеспечивают ускоренную диффузионную ползучесть [4,5], стимулируют зарождение микротрещин [2,3], а также препятствуют движению решеточных и зернограничных дислокаций [7,8]. В частности, поведение тройных стыков оказывают определяющее влияние на сверхпластические свойства поликристаллических материалов. Действительно, сверхпластическая деформация осуществляется преимущественно за счет зернограничного скольжения, т.е. движения зернограничных дислокаций, для которых тройные стыки являются препятствием [7,8]. Недавно экспериментально был обнаружен эффект локальной миграции ГЗ вблизи тройных стыков, которая стимулирована зернограничным скольжением и существенно его облегчает [9]. Этот эффект рассматривается в качестве одного из доминирующих при сверхпластичности поликристаллов [9,10] и локализации деформации в нанокристаллических материалах [7]. Согласно представлениям мо-

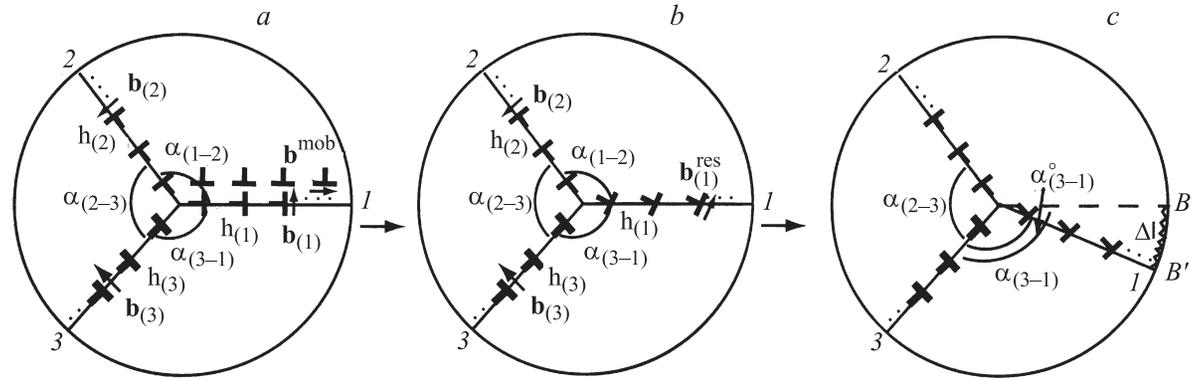
дели [9], движущей силой такой миграции является высвобождение упругой энергии при увеличении расстояний между скользящими зернограничными дислокациями в скоплениях, заторможенных вблизи тройных стыков. Однако модель [9] не учитывает влияния структурных зернограничных дислокаций (геометрически необходимых дислокаций, обеспечивающих разориентировку ГЗ) на локальную миграцию, в то время как роль таких дислокаций в процессах трансформации ГЗ нередко весьма существенна (например, [1,11–14]). Основная цель настоящей работы — построение теоретической модели локальной миграции ГЗ, стимулированной зернограничным скольжением, с учетом упругого взаимодействия между скользящими и неподвижными зернограничными дислокациями.

В рамках предлагаемой модели тройной стык ГЗ образован тремя радиально расположенными стенками структурных дислокаций (с векторами Бюргерса, перпендикулярными соответствующим плоскостям ГЗ) в бесконечном цилиндре радиуса  $R$  (см. рисунок, *a*). Каждая стенка состоит из  $N_i$  дислокаций, находящихся на расстоянии  $h_i$  друг от друга и имеющих векторы Бюргерса  $\mathbf{b}_{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) (здесь и далее индексы в круглых скобках обозначают номер стенки). Ближайшие к стыку дислокации удалены от него на расстояние  $h_{(i)}/2$  ( $i = 1, 2, 3$ ). Диэдральные углы между ГЗ  $\alpha_{(1-2)}$ ,  $\alpha_{(2-3)}$ ,  $\alpha_{(3-1)}$  (см. рисунок, *a*) в начальном состоянии полагаются одинаковыми и равными  $120^\circ$ . Для упрощения расчетов и анализа результатов тройной стык границ наклона полагается скомпенсированным, т.е.:  $\sum_{i=1}^3 \varphi_i = 0$ , где  $b_{(1)} = b_{(2)} = b$ ,  $b_{(3)} = 2b$ , и угол разориентации  $\varphi_{(i)} \approx b_{(i)}/h_{(i)} \leq 0.2$ . При этом дислокации в стенке 3 имеют противоположный дислокациям знак в стенках 1 и 2.

Упругая энергия системы дислокаций (см. рисунок, *a*), приходящаяся на единицу длины цилиндра, задается формулой [15]:

$$E^{el} = -\frac{1}{2} \int_{S_{cyl}/S_{core}} \beta_{kl}^* \sigma_{kl} dS', \quad (1)$$

где  $\beta_{kl}^*$  — общая пластическая дисторсия дислокаций,  $\sigma_{kl}$  — поле упругих напряжений дислокаций в системе, интегрирование ведется по площади поперечного сечения цилиндра  $S_{cyl}$  с обходом ядер дислокаций  $S_{core}$ .



Тройной стык границ зерен в цилиндре.  $\alpha_{(1-2)}$ ,  $\alpha_{(2-3)}$ ,  $\alpha_{(3-1)}$  — углы между границами зерен,  $h_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) — расстояние между структурными зернограницными дислокациями в  $i$ -й границе.  $a$  — скопление скользящих зернограницных дислокаций заторможено тройным стыком на границе 1;  $b$  — ансамбль скользящих и структурных зернограницных дислокаций эквивалентен ансамблю дислокаций с векторами Бюргера  $\mathbf{b}_1^{res}$ ;  $c$  — локальная миграция границы зерна 1.

Пластическая дисторсия отдельной дислокации определялась по известному соотношению Муры [15]:

$$\beta_{kl}^{*disl} = -b_l \delta_k(S). \quad (2)$$

Здесь  $b_l$  — вектор Бюргера дислокации,  $\delta_k(S)$  — дельта-функции Дирака на поверхности скачка смещений  $S$  [15].

Поле упругих напряжений  $\sigma_{kl}^{disl}$  краевой дислокации в цилиндре с осью  $Oz$  найдем с помощью функции напряжений  $\chi^{disl}$  из следующих соотношений:

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \chi^{disl}}{\partial^2 y}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \chi^{disl}}{\partial^2 x}, \quad \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \chi^{disl}}{\partial y \partial x}. \quad (3)$$

Для дислокации с вектором Бюргера  $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_x$ , расположенной на оси  $Ox$  в точке  $x_0$ , функция напряжений имеет вид (с точностью до линейного члена):

$$\begin{aligned} \chi^{disl}(\mathbf{b} = b\mathbf{e}_x) = & -\frac{Gby}{4\pi(1-\nu)} \\ & \times \left[ \frac{-(R^2 - x_0^2)(x_0^2(x^2 + y^2) + R^2(x^2 - 2xx_0 + y^2))}{R^2((R^2 - x_0x)^2 + x_0^2y^2)} \right. \\ & \left. + \ln \frac{R^2((x - x_0)^2 + y^2)}{(R^2 - x_0x)^2 + x_0^2y^2} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Для дислокации с вектором Бюргера  $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_y$ , расположенной на оси  $Ox$  в точке  $x_0$ , функция напряжений имеет вид (с точностью до линейного члена):

$$\begin{aligned} \chi^{disl}(\mathbf{b} = b\mathbf{e}_y) = & -\frac{Gb}{4\pi(1-\nu)} \\ & \times \left[ \frac{x_0(x^2 + y^2)}{R^2} - \frac{(R^2 - x^2 - y^2)((x_0^2 + R^2)x - x_0(R^2 + x^2 + y^2))}{(R^2 - x_0x)^2 + x_0^2y^2} \right. \\ & \left. + (x_0 - x) \ln \frac{R^2((x - x_0)^2 + y^2)}{(R^2 - x_0x)^2 + x_0^2y^2} \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь  $G$  — модуль сдвига, а  $\nu$  — коэффициент Пуассона. Отметим, что выражения (4), (5) были получены путем предельного перехода из функции напряжений для диполя клиновых дисклинаций [16], ориентированного либо вдоль оси  $Oy$ , либо вдоль оси  $Ox$ . С помощью выражений (3)–(5) находятся упругие напряжения дислокации с координатами  $(x_0, y_0)$  и вектором Бюргерса, произвольно ориентированным в плоскости поперечного сечения цилиндра  $xOy$ .

Рассмотрим процесс зернограничного скольжения, осуществляемого путем движения зернограничных дислокаций вдоль ГЗ 1, характеризующихся векторами Бюргерса  $\mathbf{b}^{mob}$ , параллельными плоскости границы 1. Поскольку тройной стык препятствует движению дислокаций, они останавливаются и формируют плоское скопление вблизи стыка (см. рисунок, *a*). Для анализа влияния таких дислокаций на поведение ГЗ 1 в первом приближении будем полагать, что такие дислокации встали строго в положения структурных дислокаций ГЗ 1. При этом суперпозиция полей напряжений всех дислокаций ГЗ 1 описывается как суперпозиция полей напряжений, создаваемых  $N_{(1)}$  дислокациями с векторами Бюргерса,  $\mathbf{b}_{(1)}^{res} = \mathbf{b}_{(1)} + \mathbf{b}^{mob}$ , находящимися в положениях структурных дислокаций (см. рисунок, *b*).

Упругая энергия модельной дислокационной конфигурации на ГЗ 1 минимизируется при перемещении границы в положение, в котором вектор  $\mathbf{b}_{(1)}^{res}$  перпендикулярен плоскости ГЗ. Однако необходимо учитывать упругое взаимодействие дислокаций ГЗ 1 со структурными дислокациями ГЗ 2 и 3, а также ограничение на перемещения ГЗ в реальных материалах. Последний фактор в рамках нашей модели описывается как закрепление точки  $B$  ГЗ 1 на свободной поверхности цилиндра и увеличение ее длины на величину  $\Delta l$  длины сегмента  $BB'$  цилиндра при миграции ГЗ 1, как показано на рисунке, *c*.

Для определения угла  $\alpha_{(3-1)}^{opt}$ , характеризующего локальную миграцию, рассчитаем упругую энергию системы дислокаций в цилиндре ( $E$ ) как функцию угла отклонения модифицированной стенки 1 ( $\alpha_{(3-1)}$ , см. рисунок, *b*) при начальном угле ( $\alpha_{(3-1)}^0$ ) и параметрах системы ( $N, h, \alpha_{(2-3)}$ ). Оптимальный угол  $\alpha_{(3-1)}^{opt}$  определяется из условия:

$$E(\alpha_{(3-1)}^{opt}) = \min\{E(\alpha_{(3-1)}) + \Delta E\}. \quad (6)$$

Здесь  $\Delta E = \gamma \Delta l$  (где  $\gamma$  — удельная поверхностная энергия ГЗ) — изменение энергии ГЗ, связанное с увеличением ее длины при локальной миграции.

Зависимость диэдрального угла  $\alpha_{(3-1)}^{opt}$ , характеризующего локальную миграцию границы зерна 1, от числа составляющих границу дислокаций  $N_{(1)}$ .

$N_{(1)}$	$\alpha_{(3-1)}^{opt}$ , grad	$\alpha_{(3-1)}^{wall}$ , grad
3	$120 \pm 1$	75
4	$112 \pm 1$	
5	$100 \pm 1$	
6	$95 \pm 1$	

С помощью формул (1)–(6) были рассчитаны значения диэдрального угла  $\alpha_{(3-1)}^{opt}$  между ГЗ 1 и 3 (см. таблицу) для следующих характеристических значений параметров: начальные углы между границами 1 и 2, 2 и 3, 3 и 1 соответственно равны  $\alpha_{(1-2)} = \alpha_{(2-3)} = \alpha_{(3-1)}^{\circ} = 120^{\circ}$ ; число дислокаций в неподвижных границах  $N_{(2)} = N_{(3)} = 3$ ; расстояния между дислокациями в неподвижных границах  $h_{(2)} = h_{(3)} = 5b$ ; величины векторов Бюргерса дислокаций в границах 1 и 2 и в скоплении  $b_{(1)} = b_{(2)} = b^{mob} = 0.1$  nm, величины векторов Бюргерса в границе 3  $b_{(3)} = 0.2$  nm; удельная поверхностная энергия (для алюминия)  $\gamma = 0.6$  J/m<sup>2</sup>,  $G = 26.5$  GPa. В таблице также приведены расчетные параметры задачи ( $N$ ,  $h$ ,  $b^{mob}$ ) и приведен угол отклонения  $\alpha_{(3-1)}^{wall}$ , при котором подвижная граница становится идеальной дислокационной стенкой.

При увеличении плотности дислокаций в ГЗ 1 упругая энергия системы дислокаций становится сравнимой по величине с поверхностной энергией. При этом проявляется тенденция границы 1 занять положение, в котором дислокации с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}_{(1)}^{es}$  образуют идеальную дислокационную стенку. Поворот границы зерна от своего начального положения  $\alpha_{(3-1)}^{\circ} - \alpha_{(3-1)}^{opt}$  составил  $\approx 20^{\circ}$  и  $\approx 25^{\circ}$  при числе дислокаций соответственно  $N_{(1)} = 5$  и  $N_{(1)} = 6$ . Эти величины угла поворота близки к величинам, наблюдаемым в эксперименте [9] на трикристаллах алюминия.

Таким образом, зернограничное скольжение стимулирует локальную миграцию ГЗ вблизи тройных стыков ГЗ. Движущей силой миграции является уменьшение упругой энергии ансамбля структурных зер-

нограничных дислокаций и скользящих зернограничных дислокаций, заторможенных вблизи тройных стыков.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 01-02-16853), Фонда Фольксвагена (Volkswagen Foundation project 05019225) и Отдела Морских Исследований США (Office of US Naval Research, grant N 00014-01-1-1020).

## Список литературы

- [1] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986.
- [2] Жуковский И.М., Рыбин В.В. // ФТТ. 1987. Т. 20. № 6. С. 1829–1835.
- [3] Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. // Philos. Mag. A 1994. V. 70. P. 561–575.
- [4] Fedorov A.A., Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. // Scr. Mater. 2002. V. 47. P. 51–55.
- [5] Рабухин В.В. // Поверхность. 1986. № 7. С. 126–130.
- [6] Owusu-Boahen K., King A.H. // Acta Mater. 2001. V. 49. P. 237–247.
- [7] Hahn H., Padmanabhan K.A. // Philos. Mag. 1997. B. 76. P. 559–571.
- [8] Fedorov A.A., Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. // Acta Mater. 2003. V. 51. P. 887–898.
- [9] Astanin V.V., Sisanbaev A.V., Pshenichnyuk A.I., Kaibyshev O.A. // Scr. Mater. 1997. V. 36. P. 117–122.
- [10] Kaibyshev O.A. // Mater. Sci. Forum. 1999. V. 304–206. P. 21–28.
- [11] Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. // Phys. Rev. B 2001. V. 63. P. 064515(1–9).
- [12] Bobylev S.V., Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. // Phys. Rev. B 2001. V. 64. P. 224507(1–10).
- [13] Рыбин В.В., Зисман А.А. // Проблемы прочности. 1985. Т. 3. С. 70.
- [14] Гуткин М.Ю., Овидько И.А., Скиба Н.В. // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. В. 10. С. 78–82.
- [15] Mura T. Micromechanics of defects in solids. Boston: Martinus Nijhoff, 1987. P. 587.
- [16] Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. С. 224.