

# Моделирование деформационного рельефа поверхности пластически деформируемого кристалла

© Г.А. Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: malygin.ga@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 9 ноября 2006 г.)

На основе развитой ранее модели образования ячеистой и фрагментированной дислокационных структур обсуждаются и моделируются соответствующие им деформационные рельефы поверхности кристалла. В случае ячеистой структуры рельеф имеет ступенчатый, платообразный характер, а в случае фрагментированной структуры — зубчатый характер. Результаты моделирования сопоставляются с имеющимися в литературе данными по исследованию поверхностных деформационных рельефов с помощью атомно-силового и туннельного микроскопов.

Работа выполнена в рамках проекта, поддержанного грантом РФФИ № 05-08-01216-а.

PACS: 62.20.Fe, 61.72.Cc, 61.72.Lk

Пластическая деформация кристаллов сопровождается образованием на их поверхности деформационного рельефа, отражающего процесс локализации деформации в кристалле на мезо-, микро- и наномасштабном уровнях. Поскольку локализация деформации является результатом неоднородного распределения дислокаций в кристалле, то поверхностный деформационный рельеф отражает характер этого распределения [1]. При больших степенях деформации в условиях множественного скольжения распределение дислокаций имеет достаточно сложный вид, как например при образовании ячеистых (ЯДС) [1–3] и фрагментированных (ФДС) [4,5] дислокационных структур в металлах. Специфические дислокационные структуры формируются также при деформации металлов и сплавов, облученных нейтронами [6] или подвергнутых механической усталости [7]. Обнаружение и исследование таких структур требует привлечения экспериментальных средств с пространственным разрешением на микронном и нанометрическом уровнях. В случае металлов таким средством является просвечивающая электронная микроскопия [1–7].

Соответственно для исследования деформационного рельефа на поверхности подвергнутых указанным воздействиям металлов необходимы экспериментальные методы аналогичного пространственного разрешения. Эффективным средством для этого служит в настоящее время атомно-силовой и туннельный микроскопы. Получаемые с их помощью поверхностные деформированные рельефы и профилограммы [8–13] несут важную информацию о процессе пластической деформации кристалла на соответствующем масштабном уровне. Качественный и количественный анализ этой информации требует разработки теории поверхностного деформационного рельефа, что и является целью настоящей работы.

Развитая далее модель поверхностного деформационного рельефа при образовании в пластически дефор-

мируемом кристалле ячеистой и фрагментированной дислокационных структур базируется на моделях этих структур, предложенных ранее в [14–16]. Указанные модели дают возможность рассчитать (промоделировать) рельеф поверхности кристалла (зерна в поликристалле) и выявить его характерные особенности при формировании в нем рассматриваемых дислокационных структур. Выяснение этих особенностей имеет важное значение при установлении их связи с дислокационной структурой внутри деформируемого кристалла и для идентификации реальных деформационных рельефов, получаемых с помощью атомно-силового или туннельного микроскопов.

## 1. Ячеистая дислокационная структура

ЯДС начинает формироваться в деформируемом кристалле в конце второй–начале третьей стадии кривой деформационного упрочнения металлов с ГЦК-решеткой и заканчивается в конце третьей стадии. При дальнейшем деформировании, т.е. при больших степенях пластической деформации, достигаемых, например, при прокатке или равноканальном угловом прессовании, в материале формируется ФДС (на четвертой и пятой стадии кривой деформационного упрочнения). Согласно [14,15], ячеистая структура является результатом процесса самоорганизации дислокаций в условиях множественного скольжения. Для ее возникновения необходимо выполнение определенного критерия, связывающего коэффициенты размножения, иммобилизации и аннигиляции дислокаций.

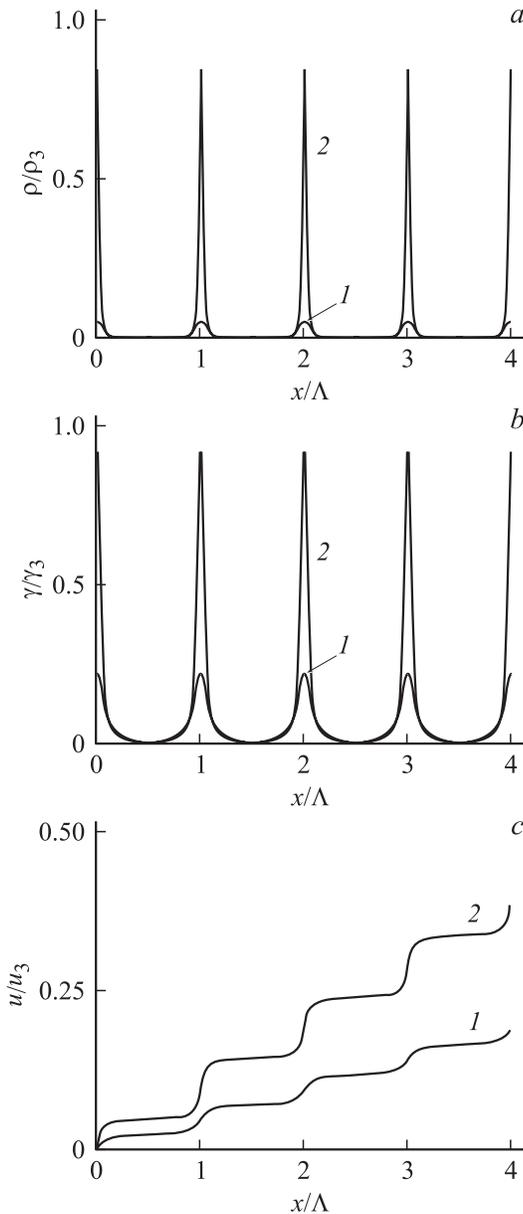
При действии трех некопланарных систем скольжения, ориентированных симметрично относительно приложенного к кристаллу напряжения, распределение плотности дислокаций в кристалле при величине пла-

стической деформации  $\varepsilon$  имеет вид [15]

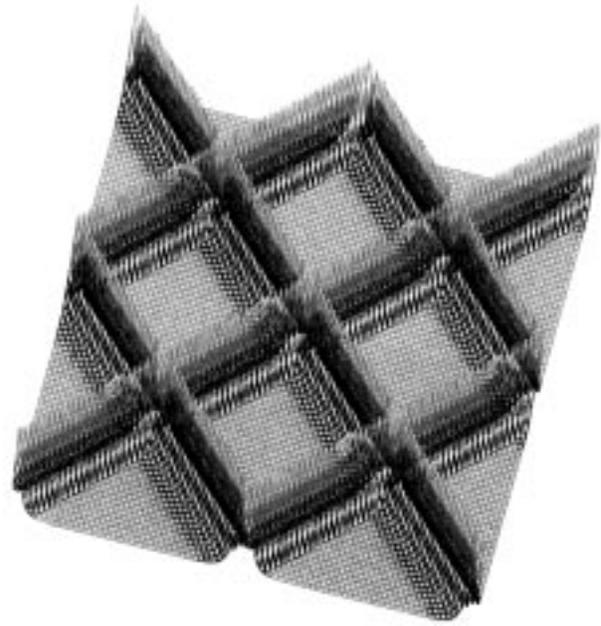
$$\rho(x, y, z, \varepsilon) = \frac{\rho_w(\varepsilon)}{\left[1 + (f(\varepsilon) - 1) \sin^2\left(\pi \frac{x \pm y \pm z}{\Lambda}\right)\right]^2}, \quad (1)$$

$$\rho_w(\varepsilon) = \rho_3 v^2(\varepsilon), \quad v(\varepsilon) = \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{2} m k_a \varepsilon\right)\right].$$

Здесь  $\rho_w$  — плотность дислокаций в стенках дислокационных ячеек,  $\rho_3$  — плотность дислокаций в стенках ячеек в конце третьей стадии кривой упрочнения,  $f(\varepsilon) = f_3 v(\varepsilon)$ ,  $f_3 = (\rho_3/\rho_c)^{1/2}$ ,  $\rho_c$  — плотность дислокаций внутри (в центре) ячеек,  $\Lambda$  — размер ячеек,



**Рис. 1.** Распределение плотности дислокаций (a), локальных деформаций (b) и смещений поверхности (c) согласно уравнениям (1)–(3) при образовании в кристалле ЯДС. Величина деформации  $\varepsilon = 0.1$  (1) и 1.0 (2).

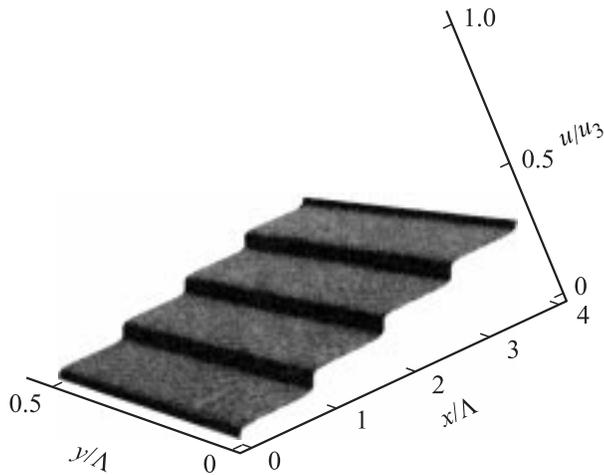


**Рис. 2.** Ячеистая дислокационная структура в аксонометрической проекции.

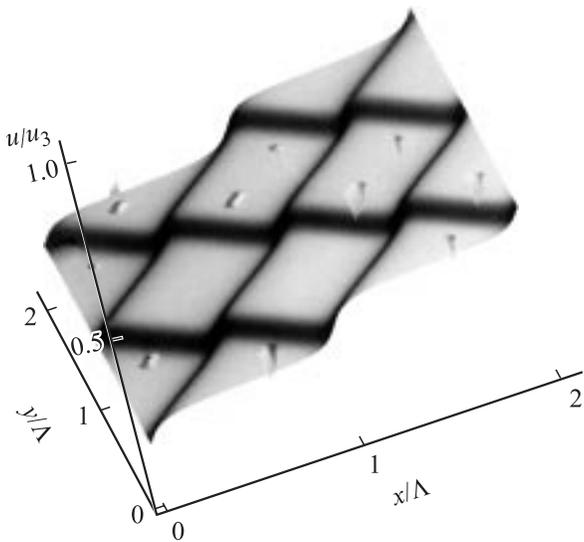
$k_a$  — коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций поперечным скольжением,  $m$  — ориентационный фактор Шмида (или Тейлора в случае поликристаллов). Рис. 1, a иллюстрирует, согласно (1), характер изменения плотности дислокаций в кристалле вдоль направления  $x$  при  $f_3 = 10^2$ ,  $k_a = 5$ ,  $m = 0.5$  и двух степенях деформации  $\varepsilon = 0.1$  и 1. На рис. 2 ЯДС ( $\varepsilon = 1$ ,  $z = 0$ ) показана в двумерной аксонометрической проекции.

## 2. Поверхностный деформационный рельеф при образовании ЯДС

Согласно электронно-микроскопическим исследованиям [1,2], границы дислокационных ячеек располагаются в металлах с ГЦК-решеткой вдоль плоскостей скольжения  $\langle 111 \rangle$ . Неоднородный характер распределения дислокаций приводит к локализации сдвиговой деформации  $\gamma(x, y, z, \varepsilon)$  на микроуровне, т.е. на уровне размеров ячеек  $\Lambda = 0.2\text{--}1\ \mu\text{m}$ . Для иллюстрации этого ограничимся компонентой деформации  $\gamma_{xz} = b\rho(x, y, z, \varepsilon)\lambda_z(x, y, z, \varepsilon)$ , где  $b$  — вектор Бюргерса,  $\lambda_z$  — длина свободного пробега дислокаций в плоскости  $xz$  в направлении  $z$ . Поскольку стенки ячеек состоят из дислокаций разных систем скольжения, длина пробега дислокаций через дислокационный лес в стенках ячеек определяется формулой  $\lambda_z = 1/\delta_f \rho^{1/2}$ , где  $\delta_f \approx 10^{-2}$ . Следовательно,  $\gamma_{xz} = \delta_f^{-1} b \rho^{1/2}$ , и для распределения сдвиговой деформации в ячеистой дисло-



**Рис. 3.** Поверхностный деформационный рельеф в направлении оси  $x$  при образовании в кристалле ЯДС.



**Рис. 4.** Общий вид деформационного рельефа поверхности кристалла при образовании в нем ЯДС.

кационной структуре получаем, согласно (1), выражение

$$\gamma_{xz}(x, y, z, \varepsilon) = \frac{\gamma_3 v(\varepsilon)}{1 + (f(\varepsilon) - 1) \sin^2\left(\pi \frac{x \pm y \pm z}{\Lambda}\right)}, \quad (2)$$

где  $\gamma_3 = \delta_f^{-1} b \rho_3^{1/2}$ . Рис. 1, *b* демонстрирует это распределение в направлении оси  $x$  при  $y = \Lambda/2$ ,  $z = 0$ . При  $b = 0.25 \text{ nm}$  и  $\rho_3 = 10^{14} \text{ m}^{-2}$  для характерной величины локальных пластических сдвигов получаем оценку  $\gamma_3 = 0.25$ .

Атомно-силовой и туннельные микроскопы при сканировании поверхности деформированного кристалла измеряют величину ее вертикального смещения  $u_z$  относительно некоторого выбранного уровня [8–13]. В рассматриваемом случае это смещение описывается выра-

жением

$$u_z(x, y, z, \varepsilon) = \int_0^x \gamma_{xz}(x, y, z, \varepsilon) dx = u_3 f_3^{-1/2} v(\varepsilon)^{1/2} \times \left\{ \frac{1}{\pi} \arctg \left[ f_3^{1/2} v(\varepsilon)^{1/2} \operatorname{tg} \left( \pi \frac{x \pm y \pm z}{\Lambda} \right) \right] + F(x) \right\}, \quad (3)$$

$$F(x) = \sum_{n=0}^N H \left[ \frac{x}{\Lambda} - \frac{1}{2} (2n + 1) \right],$$

где  $u_3 = \Lambda \gamma_3$ ,  $H(x)$  — ступенчатая функция Хевисайда. Рис. 1, *c* демонстрирует характер деформационного рельефа (3) при двух степенях деформации. Одномерный вариант этого рельефа показан на рис. 3 в аксонометрической проекции. Из рис. 1, *c* и 3 видно, что в местах выхода стенок ячеек на поверхность кристалла ( $z = 0$ ) на ней возникают ступеньки высотой  $h \approx 0.1u_3$ , где  $u_3 = \Lambda \gamma_3 \approx 125\text{--}250 \text{ nm}$  при  $\Lambda = 0.5\text{--}1 \mu\text{m}$ . Такие ступеньки зафиксированы в [8,11,12] при сканировании поверхности деформированных образцов  $\text{Cu}$  и  $\text{Al}$  в атомно-силовом и туннельном микроскопах. Двумерный вариант рельефа (3) в аксонометрической проекции приведен на рис. 4. Его особенностью являются локальные подъемы и опускания блоков кристалла в местах выхода границ ячеек на поверхность кристалла, придающие ей ступенчатый, платообразный характер. Мелкие фигуры на поверхности некоторых плато являются огрехами вычислительного процесса.

### 3. Фрагментированная дислокационная структура

В результате интенсивной пластической деформации (например, при прокатке [4] или равноканальном угловом прессовании [5]) в металлах образуется специфическая ФДС. Ее принципиальное отличие от ЯДС в том, что стенки ячеек состоят преимущественно из дислокаций одного знака. Вследствие этого кристаллические решетки в соседних дислокационных ячейках оказываются сильно кристаллографически разориентированными (на 10–60 угловых градусов [17]). В результате интенсивной деформации кристалл и зерна в поликристалле разбиваются на кристаллические фрагменты (субзерна) размером 100–300 nm.

Механизм возникновения ФДС является в настоящее время предметом дискуссии. Поскольку указанная дислокационная структура формируется при любой интенсивной пластической деформации независимо от ее вида и состояния исходного материала (моно- или поликристаллического), ее образование обусловлено внутренними причинами. Такой причиной, согласно [15,18], являются локальные градиенты пластической деформации (рис. 1, *b*), возникающие в деформируемом материале при образовании в нем ЯДС при средних степенях деформации.

Известно, что градиенты пластической деформации вызывают появление геометрически необходимых (ГН) дислокаций [19]. Согласно (2), их плотность  $\rho_{GN} = b^{-1} \partial \gamma_{xz} / \partial x$  в случае ЯДС (рис. 5, *a*) описывается выражением

$$\rho_{GN}(x, y, z, \varepsilon) = -\rho_4 \frac{v(\varepsilon) [f(\varepsilon) - 1] \sin\left(2\pi \frac{x \pm y \pm z}{\Lambda}\right)}{\left[1 + (f(\varepsilon) - 1) \sin^2\left(\pi \frac{x \pm y \pm z}{\Lambda}\right)\right]^2}, \quad (4)$$

где  $\rho_4 = (\pi/\delta_f \Lambda \rho_3^{1/2}) \rho_3 \approx 16\rho_3$  при  $\Lambda \rho_3^{1/2} \approx 20$  [16]. На рис. 5, *b* показано распределение ГН-дислокаций в ЯДС согласно уравнению (4) при  $f_3 = 40$  и  $\varepsilon = 1$ . В отличие от статистически случайных дислокаций (рис. 5, *a*) стенки дислокационных ячеек на рис. 5, *b* содержат пространственно разделенные субстенки из дислокаций разного знака. Плотность дислокаций в них значительно выше, чем в ячеистой структуре. Для оценки максимального значения плотности ГН-дислокаций в субстенке получаем соотношение

$$\rho_{GN}^{max} = -\rho_4 \frac{2v(\varepsilon)}{\text{tg}\left(2\pi \frac{x_{max}}{\Lambda}\right)} \approx \left(\frac{\Lambda}{\pi x_{max}}\right) \rho_4 v(\varepsilon), \quad (5)$$

где  $x_{max} \approx \Lambda/\sqrt{2\pi}(f(\varepsilon) - 1) \ll \Lambda$  — расстояние от центра стенки ячейки, на котором плотность ГН-дислокаций достигает максимума. Такие плотные дислокационные стенки (DDW [4]) возникают на начальном этапе образования ФДС. С ними связаны локальные разориентации решетки  $\omega = b\rho_{GN}\Lambda \approx K_3 b |\rho_{GN}|^{1/2}$ , где  $K_3 \approx 10^2$  [16]. При характерных значениях  $b = 0.25 \text{ nm}$ ,  $|\rho_{GN}| = 10^{14} - 10^{15} \text{ m}^{-2}$  получаем  $\omega \approx 10 - 45^\circ$ , т.е. значения углов разориентации, наблюдаемые на опыте [17].

#### 4. Поверхностный деформационный рельеф при образовании ФДС

Как показывает анализ [16] результатов [20], при больших пластических деформациях (четвертая и пятая стадии кривой деформационного упрочнения) напряжения течения  $\sigma$  подчиняются тому же закону, что и напряжения течения на второй и третьей стадиях:  $\sigma = \alpha \mu b \rho^{1/2}$ , где  $\alpha = 0.25 - 0.3$  — коэффициент взаимодействия дислокаций,  $\mu$  — модуль сдвига. Это означает, что в отличие от равновесных границ зерен дислокации в стенках фрагментов пространственно неупорядочены и выступают в качестве дискретных препятствий для движущихся дислокаций. По этой причине напряжения течения  $\sigma$  после интенсивной деформации описываются соотношением  $\sigma \sim \Lambda^{-1}$ , а не соотношением Холла-Петча  $\sigma \sim \Lambda^{-1/2}$  [16].

Принимая во внимание сказанное, можно полагать, что, как и в ЯДС (раздел 2), для локальной деформации в ФДС справедливо выражение  $\gamma_{GN} = b\rho_{GN}\lambda_{GN}$ , где

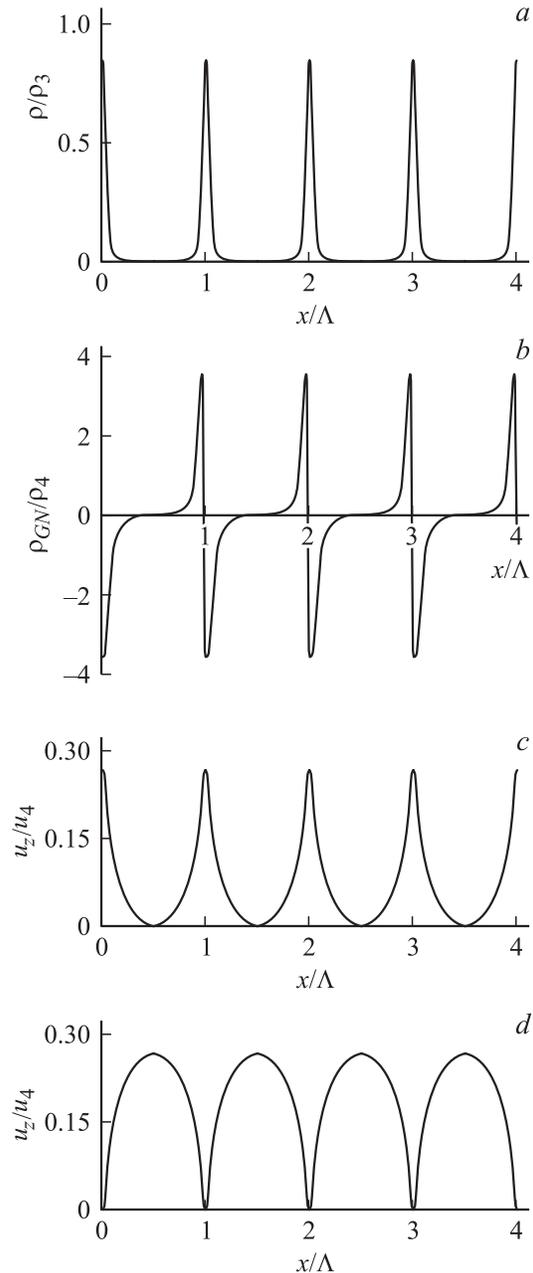


Рис. 5. Распределение плотности статистически случайных (*a*) и геометрически необходимых (*b*) дислокаций и характеры деформационных профилей поверхности (*c, d*) согласно уравнениям (1), (4) и (6) при образовании в кристалле ФДС.

$\lambda_{GN} = 1/\delta_f |\rho_{GN}|^{1/2}$ . Для поверхностного деформационного рельефа соответственно имеем соотношение

$$u_z(x, y, z, \varepsilon) = \int_{\Lambda/2}^x \gamma_{GN}(x, y, z, \varepsilon) dx. \quad (6)$$

Рис. 5, *c* и *d* демонстрируют, согласно (6), вид деформационного профиля в направлении оси  $x$  в координатах  $u_z/u_4 - x/\Lambda$ , где  $u_4 = \gamma_4 \Lambda$ ,  $\gamma_4 = \delta_f^{-1} b \rho_4^{1/2}$ . Деформационные профили на указанных рисунках различаются

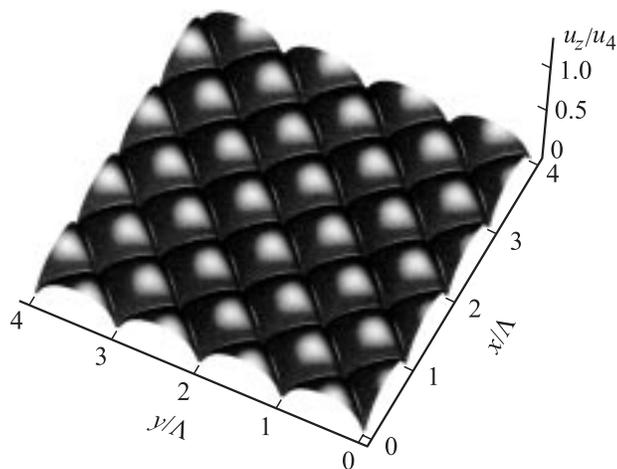


Рис. 6. Двумерный „интрузионный“ профиль поверхности в аксонометрической проекции.

знаком вектора Бюргерса. На рис. 5, *c* профиль имеет вид экструзий, а при противоположном знаке вектора Бюргерса (рис. 5, *d*) — вид интрузий материала в местах выхода дислокационных стенок на поверхность кристалла.

По сравнению со ступенчатым деформационным профилем при образовании ЯДС (рис. 1, *c*) деформационный профиль при возникновении ФДС имеет зубчатый характер. Это обстоятельство особенно заметно при представлении двумерного „интрузионного“ поверхностного профиля в аксонометрической проекции (рис. 6). Высота локальных неровностей поверхности (зубцов)  $h \approx 0.3u_4 \approx 0.3\Lambda\gamma_4$  при  $\Lambda \approx 0.5 \mu\text{m}$  и  $\gamma_4 \approx 1-2$  составляет 150–300 nm. Неровности такого масштаба наблюдались, например, при сканировании в туннельном микроскопе поверхности пластически деформированной поликристаллической меди [9].

## 5. Обсуждение результатов

Приведенные выше результаты теоретического расчета поверхностных деформационных рельефов при возникновении в кристалле ЯДС и ФДС показывают, что они имеют характерные отличия. На рис. 7, *a* и *b* показаны результаты моделирования профилограмм поверхности деформированного кристалла в случае образования в нем соответственно ЯДС и ФДС. Для ячеистой структуры характерна платообразность, ступенчатость рельефа, для фрагментированной структуры — его зубчатость. Такую зубчатость наблюдали в работе [10] при сканировании поверхности деформированного алюминиевого сплава и в [9] при сканировании поверхности деформированной поликристаллической меди.

Преимуществом сканирующей атомно-силовой и туннельной микроскопии является то, что кроме высокой разрешающей способности с их помощью можно наблюдать за изменением рельефа поверхности во време-

ни или со степенью деформации. Как показывают результаты [9,21,22], в процессе деформации поверхность кристалла „дышит“. Отдельные кристаллические блоки микро- и наноскопических размеров то приподнимаются над поверхностью, то опускаются, их размеры то увеличиваются, то уменьшаются. Такой динамический хаос является отражением динамических кооперативных дислокационных процессов, идущих внутри деформируемого кристалла [14].

В [16,23,24] показано, что формирование ЯДС и ФДС подчиняется законам самоподобия и скейлинга, согласно которым между параметрами каждой из структур сохраняются количественные соотношения и законы распределения, не зависящие от величины деформации. Аналогичные законы имеют место и в случае поверхностных деформационных ступенек. Статистическая обработка высоты ступенек  $h$  показывает [25,26], что они распределяются в соответствии с законом  $h^n \exp(-h/h_{av})$ , где  $n = 1-2$ . По такому же закону распределяются, например, размеры дислокационных ячеек и фрагментов,  $\Lambda^n \exp(-\Lambda/\Lambda_{av})$  [23], где  $h_{av}$  и  $\Lambda_{av}$  — средние по распределению высота ступенек и размер ячеек. Средние значения изменяются со временем или степенью деформации в зависимости от того, осуществля-

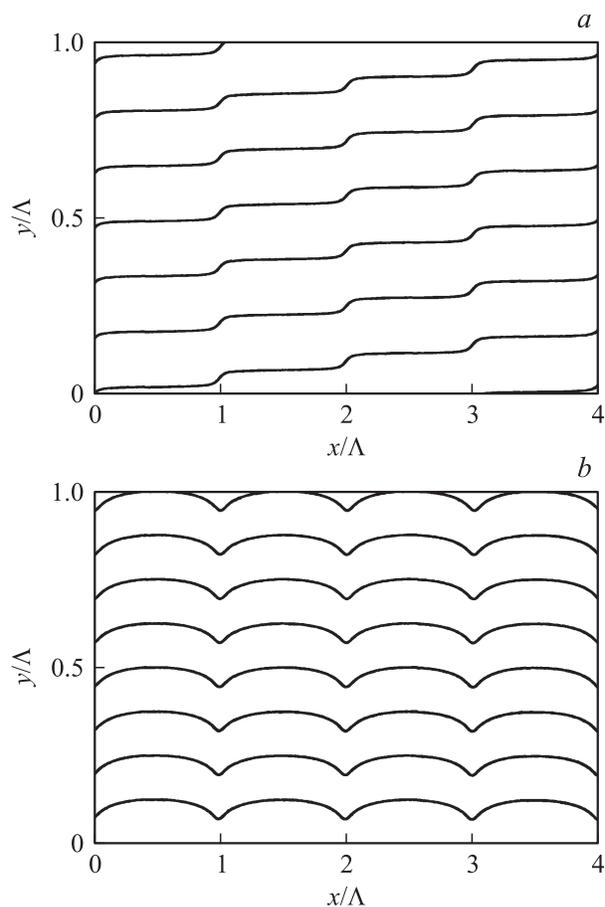


Рис. 7. Профилограммы поверхности кристалла при образовании в нем ЯДС (а) и ФДС (б).

ется ли деформация в условиях действия постоянного напряжения [25,26] или в условиях деформирования с постоянной скоростью [23,24]. Сказанное означает, что в результате больших пластических деформаций дислокационная структура в кристалле приобретает достаточно сложный вид и ее связь с оптической картиной линий скольжения на поверхности кристалла утрачивается [27]. Эта связь может быть установлена с помощью средств более высокого пространственного разрешения, какими являются атомно-силовой и туннельный микроскопы.

Приведенные выше расчеты поверхностных деформационных профилей основывались на моделях ЯДС и ФДС, описывающих эволюцию с деформацией  $\epsilon$  средней по дислокационному ансамблю плотности статистически случайных и ГН-дислокаций [14]. При этом предполагалось: 1) размер дислокационных ячеек не зависит от степени деформации; 2) стенки дислокационных ячеек лежат строго в плоскостях скольжения и 3) плоскости скольжения составляют прямой угол с поверхностью кристалла. Этими обстоятельствами объясняется идеализированный, упорядоченный характер полученных в работе деформационных рельефов. По этой причине их следует рассматривать в качестве первого приближения к реальным деформационным рельефам, обнаруживаемых при сканировании поверхности деформированного кристалла (зерна в поликристалле) с помощью атомно-силового или туннельного микроскопов.

## Список литературы

- [1] C.Y. Barlow, B. Bay, N. Hansen. *Phil. Mag. A* **51**, 253 (1985).
- [2] Y. Kawasaki, T. Takeuchi. *Scripta Metal.* **14**, 183 (1980).
- [3] T. Tabata, S. Imanaka, H. Fujita. *Acta Metal.* **26**, 405 (1978).
- [4] Q. Liu, X. Huang, D.J. Lloyd, N. Hansen. *Acta Mater.* **50**, 3789 (2002).
- [5] N. Krasilnikov, W. Lojkowsky, Z. Pakielka, R. Valiev. *Mater. Sci. Eng. A* **397**, 330 (2005).
- [6] Z. Yao, R. Schaublin, M. Victoria. *J. Nucl. Mater.* **307/311**, 374 (2002).
- [7] N. Jin. *Acta Mater.* **37**, 2055 (1989).
- [8] G. Welzel, J. Plessing, H. Neuhauser. *Phys. Stat. Sol. (a)* **166**, 791 (1998).
- [9] В.И. Веттегрень, В.Н. Светлов. *ФТТ* **46**, 1996 (2004).
- [10] П.В. Кузнецов, В.Е. Панин. *Физическая мезомеханика* **3**, 91 (2000).
- [11] D.E. Kramer, M.F. Savage, L.E. Levine. *Acta Mater.* **53**, 4655 (2005).
- [12] L.E. Levine, R. Thomson. *Mater. Sci. Eng. A* **400/401**, 202 (2005).
- [13] J. Man, K. Obtrlik, C. Blochwitz, J. Polak. *Acta Mater.* **50**, 3767 (2002).
- [14] Г.А. Малыгин. *УФН* **169**, 979 (1999).
- [15] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **43**, 822 (2001).
- [16] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **48**, 651 (2006).
- [17] В.В. Рыбин. *Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М.* (1986). 222 с.
- [18] D.A. Hughes, N. Hansen, D.J. Bammann. *Scripta Mater.* **48**, 147 (2003).

- [19] N. Fleck, G.M. Miller, M.F. Ashby, J.W. Hutchinson. *Acta Mater.* **45**, 5059 (1994).
- [20] J. Gubicza, N.Q. Chin, Z. Horita, T.G. Langdon. *Mater. Sci. Eng. A* **387/389**, 55 (2004).
- [21] J. Plessing, C. Achmus, H. Neuhauser, B. Schonfeld, G. Kostorz. *Z. Metallk.* **88**, 630 (1997).
- [22] В.И. Веттегрень, С.Ш. Рахимов, В.Н. Светлов. *ФТТ* **40**, 2180 (1998).
- [23] D.A. Hughes, Q. Liu, D.C. Chrzan, N. Hansen. *Acta Mater.* **45**, 105 (1997).
- [24] A. Godfrey, D.A. Hughes. *Scripta Mater.* **51**, 831 (2004).
- [25] В.И. Веттегрень, С.Ш. Рахимов, В.Н. Светлов. *ФТТ* **37**, 3635 (1995).
- [26] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **43**, 251 (2001).
- [27] A. Godfrey, D.J. Jensen, N. Hansen. *Acta Mater.* **46**, 823 (1998).