

07

Максимум предела текучести при квазистатической и высокоскоростной пластической деформации металлов

© И.Н. Бородин¹, А.Е. Майер², Ю.В. Петров^{1,3}, А.А. Груздков⁴

¹ Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Челябинский государственный университет,
Челябинск, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия

⁴ Санкт-Петербургский государственный технологический институт,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: elbor7@gmail.com

(Поступила в Редакцию 21 апреля 2014 г.)

В широком диапазоне скоростей деформации в рамках единого подхода анализируется зависимость предела текучести металлов от размера зерна и начальной плотности дислокаций. Показано, что величины барьерного напряжения и характерного времени пластической релаксации полностью определяют сдвиговую прочность металлов при любых скоростях деформации. Наличие альтернативных дислокационным механизмов пластической деформации ограничивает рост предела текучести при увеличении скорости деформации и приводит к появлению максимума зависимости предела текучести от размера зерна. Обнаружено, что при экстремально высоких скоростях деформации максимум предела текучести соответствует размеру зерен порядка нескольких сотен нанометров. Это объясняется эффектом „дислокационного голодания“ материала.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МД-286.2014.1 и РФФИ (проекты № 12-02-31375, 14-01-31454), а также грантов СПбГУ 6.38.243.2014 и 6.39.319.2014.

1. Введение

Предел текучести металла, будучи по определению макроскопической величиной, в то же время является отражением всего многообразия микроскопических процессов пластичности, характерных времен и масштабов, присущих данному материалу. При квазистатических испытаниях предел текучести обычно выбирается равным напряжению, при котором пластическая деформация достигает величины 0.2% [1]. Но при рассмотрении пластичности металлов с учетом их реальной внутренней структуры под пределом текучести часто понимается другая величина, равная полному сопротивлению движению дислокаций [2], т.е. напряжение, которое необходимо превысить для начала релаксации внутренних напряжений за счет их массового скольжения. Несмотря на то что отдельные акты пластичности происходят в материале и при значительно более низких напряжениях [2], во многих практически важных случаях эти два определения оказываются эквивалентными друг другу. Если в материале кроме скольжения дислокаций начинают действовать альтернативные механизмы пластической деформации, такие как зернограничное проскальзывание [3] или двойникование [4,5], то ситуация усложняется: новые носители пластической деформации имеют собственные барьерные напряжения, в результате чего предел текучести материала становится величиной, зависящей от нескольких параллельно идущих и слабо взаимодействующих между собой процессов. Это ограничивает рост предела текучести при увеличении

скорости деформации и должно приводить к немонотонной зависимости его величины от размера зерна материала [6–8]. Наличие максимума этой зависимости и влияние на его величину различных факторов, таких как скорость деформации или температура, остаются дискуссионными вопросами.

Критерий текучести Мизеса, до сих пор часто используемый и для описания динамических деформаций, приводит к значительным ошибкам в расчетах при описании пластического течения в области высоких скоростей деформации [9], так как не учитывает динамические особенности процесса пластичности. Альтернативным подходом является применение интегральных критериев пластичности [10–12], явно учитывающих наличие у материала характерных времен пластической релаксации — дополнительных характеристик материала, которые являются здесь чисто эмпирическими параметрами. Это позволяет достаточно точно анализировать поведение предела текучести материала в широком диапазоне скоростей деформации. Для учета влияния различных особенностей дефектной структуры, таких как плотность дислокаций [13,14], размер зерна материала [6,7], необходимо дальнейшее развитие данного подхода с физической интерпретацией используемых параметров — характерных времен пластической релаксации. Связь характерного времени пластической релаксации с процессами в ансамбле дислокаций рассматривалась, например, в [10,15], но при этом использовались эмпирические аппроксимации для скорости [10,15] и плотности дис-

локаций [15], которые сами содержат дополнительные подгрупповые параметры.

В настоящей работе делается попытка, опираясь на оригинальные теоретические подходы, с общих позиций описать зависимость предела текучести металлов от характеристик их дефектной структуры в широком диапазоне напряжений и скоростей деформации. Показывается наличие максимума на зависимости предела текучести от размера зерна материала, продемонстрирован сложный характер зависимости предела текучести от параметров нагружения как в квазистатических, так и в динамических условиях деформирования.

2. Модели для описания пластического течения металлов

Для описания упруговязкопластической деформации твердого тела можно воспользоваться моделью Фойгта или моделью очень вязкой жидкости Максвелла [16]. В модели Максвелла уравнение для изменения сдвиговых напряжений σ_τ записывается в виде

$$\frac{d\sigma_\tau}{dt} = 2G\dot{\epsilon} - \frac{\sigma_{\text{eff}}}{\tau} H(\sigma_{\text{eff}}), \quad (1)$$

где $\dot{\epsilon}$ — скорость деформации, G — модуль сдвига, τ — время релаксации напряжений (такое, что при много меньших временах материал при деформации ведет себя упруго, а при больших — вязкопластически), $\sigma_{\text{eff}} = \sigma_\tau - y_b$ — эффективное действующее напряжение, при положительном значении которого становится возможной релаксация сдвиговых напряжений, y_b — барьерное напряжение, отвечающее данному механизму пластичности, $H(x)$ — функция Хевисайда. Интегрирование уравнения (1) при постоянной скорости деформации $\dot{\epsilon} = \text{const}$ и начальном условии $\sigma_\tau(0) = y_b$ дает следующую зависимость напряжений от времени:

$$\sigma_\tau(t) = y_b + 2G\tau\dot{\epsilon}(1 - \exp(-t/\tau)). \quad (2)$$

При $\dot{\epsilon} = 0$ выполняется $\sigma(t) = y_b$; следовательно, барьерное напряжение y_b определяет предел текучести при квазистатической деформации. При $\dot{\epsilon} > 0$ для моментов $t \ll \tau$ второе слагаемое выражения (2) дает линейный рост напряжений по времени (упругий случай), который далее при $t \sim \tau$ замедляется за счет пластической релаксации, а при $t \gg \tau$ рост прекращается и это слагаемое стремится снизу к постоянному пределу $2G\tau\dot{\epsilon}$. Таким образом, при фиксированной скорости деформации максимальные сдвиговые напряжения, достигаемые в материале при $t \rightarrow \infty$, равны

$$\sigma_\tau^{\text{max}} = y_b + 2G\tau\dot{\epsilon}. \quad (3)$$

Эти напряжения задают величину его динамического предела текучести и складываются из двух частей: барьерного напряжения y_b и „динамической добавки“ $2G\tau\dot{\epsilon}$, причем последняя линейно зависит от скорости

деформации, характерного времени релаксации и упругих постоянных металла.

Подобный формализм используется в критерии текучести, предложенном в работах [10,11], где также было показано, что явное введение характерного времени релаксации позволяет определить предел текучести при произвольном законе нагружения материала и рассмотреть в рамках единой модели как быстрое, так и медленное нагружение. Для тела Фойгта зависимость напряжения от деформации имеет вид

$$\sigma = 2G\epsilon + \mu\dot{\epsilon}, \quad (4)$$

что можно также переписать в виде $\dot{\epsilon} + 2G\epsilon/\mu = \sigma/\mu$. Предполагается, что помимо упругих напряжений в динамическом режиме деформации существует некоторая вязкая добавка, пропорциональная скорости деформации. Умножив обе части уравнения (4) на $2G \exp(-t/\tau)$, получаем

$$2G \frac{d}{dt} \left(\epsilon \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right) = \frac{\sigma(t)}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad (5)$$

где введено характерное время $\tau = \mu/2G$. Интегрирование (5) по времени дает

$$2G\epsilon = \frac{1}{\tau} \int_0^t \sigma(s) \exp\left(-\frac{t-s}{\tau}\right) ds. \quad (6)$$

Левая часть этого уравнения представляет собой упругое напряжение, которое мы имели бы в квазистатике, если положить в (4) $\dot{\epsilon} = 0$.

Уравнение (6) можно интерпретировать в рамках концепции затухающей памяти („fading memory“) [17]: нагрузка, действовавшая ранее в моменты времени $s \ll t$, вносит в текущее состояние дефектной структуры значительно меньший вклад по сравнению с той, которая действовала недавно. Текущее значение напряжения следует заменить его „отрелаксированным“ значением, причем напряжения, действовавшие в материале в предыдущие моменты времени, входят в уравнение со все меньшими весовыми коэффициентами. В общем случае это приводит к неравенству в интегральной форме

$$\int_0^t \sigma(s) K(t-s) ds \leq \sigma_y^0, \quad (7)$$

где ядро интегрального оператора $K(t)$ — функция затухания памяти. Сравнивая (6) с (7) получаем, что модели Фойгта соответствует экспоненциальное затухание памяти

$$K(t) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad (8)$$

где, как и в (6), характерное время $\tau = \mu/2G$. В качестве более простого приближения к экспоненциальному закону (8) можно предложить ступенчатую функцию затухания

$$K(t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau}, & 0 \leq t \leq \tau, \\ 0, & t > \tau. \end{cases} \quad (9)$$

Уравнение (7) тогда дает интегральный критерий текучести металла в виде [10,11]

$$\frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t \left(\frac{\sigma(s)}{\sigma_y^0} \right)^\alpha ds \leq 1, \quad (10)$$

где $\sigma(s)$ — функция, задающая зависимость приложенных напряжений от времени, которые считаются равными нулю при $t < 0$ [11], τ — характерное время релаксации напряжений („инкубационное время“ [10,11]), σ_y^0 — предел текучести при квазистатическом нагружении [11], α — безразмерный параметр, описывающий чувствительность материала к уровню напряжений, обычно $\alpha \geq 1$ [11].

В том случае, когда релаксация напряжений обусловлена одновременным действием различных механизмов пластичности, целесообразно ввести в модель несколько характерных времен релаксации [12] или в более общем случае задать функцию, описывающую вклад процессов с различными характерными временами. Если для каждого из действующих механизмов пластичности справедлив экспоненциальный закон затухания памяти, то ядро оператора в общем случае имеет вид

$$K(t) = \int_0^{+\infty} \varphi(p) \exp(-pt) dp, \quad (11)$$

где $p = 1/\tau$ — частота, $\varphi(p)$ — весовая функция (спектральная плотность), которая должна удовлетворять условию нормировки

$$\int_0^{+\infty} \frac{\varphi(p)}{p} dp = 1. \quad (12)$$

Можно показать, что для ступенчатого затухания памяти справедлива формула

$$K(t) = \int_0^{\frac{1}{t}} \varphi(p) dp. \quad (13)$$

Критерию (10) с одним временем релаксации соответствует $\varphi(p) = \delta(\tau p - 1)/\tau$, где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. В том случае, когда можно выделить два основных процесса, определяющих релаксацию, критерий (10) преобразуется к виду [12]

$$\left(\frac{1}{y_b^1} - \frac{1}{y_b^2} \right) \frac{1}{\tau_1} \int_{t-\tau_1}^t \sigma(s) H(s) ds + \frac{1}{y_b^2} \frac{1}{\tau_2} \int_{t-\tau_2}^t \sigma(s) H(s) ds \leq 1, \quad (14)$$

где $H(t)$ — функция Хевисайда, y_b^1, y_b^2 — пороговые напряжения, а τ_1, τ_2 — характерные времена релаксации для каждого из процессов. Учет релаксации на

различных масштабных уровнях позволяет отказаться от использования параметра α в формуле (10) и использовать линейный интегральный оператор. Тогда критерий (10) соответствует модели Максвелла (2) с двумя группами определяющих параметров — наборами барьерных напряжений и характерных времен пластической релаксации.

С точки зрения упомянутых выше моделей упруговязкопластического тела нет никаких фундаментальных ограничений между сдвиговой прочностью при „квазистатической“ и „динамической“ деформации. Все определяется значениями параметров, отражающих внутреннее строение и дефектную подструктуру материала. Переход между „статическим“ и „динамическим“ режимами осуществляется согласно (3) при скоростях деформации $\dot{\epsilon}_{tr} \sim y_b/2G\tau \equiv y_b/\mu$, где коэффициент $\mu = 2G\tau$, характеризующий динамическую вязкость, зависит от упругих свойств и дефектной подструктуры металла. При различных концентрациях дефектов в материале эта скорость деформации может принимать практически любые значения. В качестве примера можно рассмотреть дислокационное скольжение, при котором скорость пластической деформации определяется соотношением Орована [6,9,14]

$$\dot{\epsilon}_{pl} = \sum_{\beta} \rho_D^{\beta} b V_D^{\beta}, \quad (15)$$

где ρ_D^{β} — скалярная плотность дислокаций, численно равная длине дислокационных линий в единице объема, b — вектор Бюргерса, V_D^{β} — модуль скорости дислокаций данной системы скольжения β . Согласно этому уравнению, при заданной скорости пластической деформации необходима вполне определенная плотность дислокаций $\rho_D^{(cr)} = \dot{\epsilon}_{pl}/bV_D^{\beta}$ для эффективной релаксации возникающих в материале сдвиговых напряжений (чтобы обеспечить $\dot{\epsilon}_{pl} \sim \dot{\epsilon}$). Скорость дислокаций не может превышать поперечной скорости звука в металле [18]. При меньшей, чем $\rho_D^{(cr)}$, плотности дислокаций их будет не хватать для обеспечения требуемой скорости пластической деформации, что приведет к резкому повышению предела текучести металла и проявлению его „динамических“ особенностей даже при малых скоростях деформации. Явление нехватки дислокаций хорошо известно в физике нанообъектов, где оно называется „дислокационным голоданием“ материала [19]. Как показано далее, характерное время пластической релаксации обратно пропорционально скорости дислокаций и неограниченно увеличивается при $\rho_D \rightarrow 0$. Следовательно, даже при малом значении барьерного сопротивления y_b в условиях квазистатической деформации предел текучести может увеличиваться вплоть до значений теоретической прочности на разрыв, что и наблюдается в чистых нитевидных монокристаллах. Переходная скорость деформации $\dot{\epsilon}_{tr}$, при которой становятся значимыми динамические эффекты, в этой постановке может быть сколь угодно мала. Подобное увеличение предела текучести

оказывается естественным для экстремально высоких скоростей деформации, когда обычные плотности дислокаций $\rho_D \sim 10^{12} \text{ м}^{-2}$ становятся уже недостаточными для обеспечения нужной скорости пластической деформации. В режиме дислокационного голодания время релаксации определяется скоростью генерации новых дефектов кристаллической решетки [20].

Вследствие наличия нескольких альтернативных мало взаимодействующих между собой [2,3] механизмов пластической деформации для каждого материала существует целый спектр параметров барьерного сопротивления и характерных времен пластической релаксации. Этот набор параметров приводит к появлению нескольких ветвей зависимости предела текучести от температуры, размера зерна и скорости деформации. Для металлов основными механизмами являются дислокационное скольжение, двойникование и проскальзывание зерен вдоль их границ. Рассмотрим более подробно оба введенных выше параметра и их зависимости от структурных переменных материала.

3. Физическая интерпретация параметров барьерного сопротивления и характерных времен пластической релаксации напряжений

3.1. Барьерное сопротивление движению дефектов. Наиболее известными классическими зависимостями предела текучести от размера зерна и плотности дислокаций являются закон упрочнения Тэйлора [2] и эмпирический закон Холла–Петча [1,2], ассоциирующийся с торможением дислокаций границами зерен. Они отражают величину барьерного напряжения, которую необходимо преодолеть для начала пластической деформации в квазистатических условиях нагружения. Сопротивление движению дислокаций в этом случае можно описать соотношением вида [2,18]

$$\hat{y}_b^D = y_b^{0(D)} + \alpha G b \sqrt{\rho_D} + k_{HR} d^{-1/2}. \quad (16)$$

Здесь $y_b^{0(D)}$ включает сопротивление скольжению дислокаций внутренними полями напряжений, создаваемыми атомами примесей и рельефом Пайерлса, α — постоянная Тэйлора, G — модуль сдвига материала, k_{HR} — постоянная Холла–Петча, d — средний размер зерна. Если в материале существенную объемную долю F занимают двойники [2,4,21], то эффективный пробег дислокаций уменьшается, и учет торможения дислокаций на границах двойников приводит к уточнению соотношения (16) в виде [18,21]:

$$\tilde{y}_b^D = \hat{y}_b^D + k_{TW} \Delta^{-1/2},$$

где Δ — среднее расстояние между двойниками, k_{TW} — постоянный коэффициент. Согласно [22], расстояние

между двойниками можно связать с их объемной долей: $\Delta = h(F^{-1} - 1)$, где h — ширина двойника, полагаемая постоянной величиной для данного материала. Соотношение для предела текучести тогда переписывается в виде

$$\tilde{y}_b^D = \hat{y}_b^D + k_{TW} / \sqrt{h(F^{-1} - 1)}. \quad (17)$$

Упрочнение вследствие торможения дислокаций границами зерен можно аналогичным образом выразить через их объемную долю. Объемная доля границ зерен связана с размером зерна d и шириной границы δ соотношением

$$\eta = 1 - \left(1 - \frac{\delta}{d}\right)^3. \quad (18)$$

Отсюда размер зерна материала составит $d = \delta / \sqrt[3]{(1 + \eta)} - 1$. Вводя объемную долю дислокаций в материале в виде $R = b^2 \rho_D$, получим для предела текучести соотношение

$$\tilde{y}_b^D = y_b^{0(D)} + \alpha G \sqrt{R} + \frac{k_{HR}}{\sqrt{\delta}} \sqrt{\sqrt[3]{(1 + \eta)} - 1} + \frac{k_{TW}}{\sqrt{h(F^{-1} - 1)}}. \quad (19)$$

При малых объемных долях выражение для сопротивления скольжению дислокаций с учетом всех слагаемых окончательно запишется в виде

$$\tilde{y}_b^D = y_b^{0(D)} + k_1 \frac{\sqrt{R}}{\sqrt{b}} + k_2 \frac{\sqrt{\eta}}{\sqrt{\delta}} + k_3 \frac{\sqrt{F}}{\sqrt{h}} \equiv y_b^{0(D)} + \sum_{i=1}^3 k_i \frac{\sqrt{\eta_i}}{\sqrt{r_i}}, \quad (20)$$

где постоянные $k_1 = \alpha G \sqrt{b}$, $k_2 = \sqrt{3} k_{HR}$, $k_3 = k_{TW} / \sqrt{2}$ имеют порядок $10^5 \text{ Па} \cdot \text{м}^{1/2}$; объемные доли переобозначены как $\eta_1 \equiv R$, $\eta_2 \equiv \eta$ и $\eta_3 \equiv F$. Вектор Бюргерса $r_1 \equiv b$, ширина границы зерна $r_2 \equiv \delta$ и ширина двойника $r_3 \equiv h$ являются фактически постоянными величинами для данного материала и относительно мало зависят от особенностей его деформации.

Объемные доли всех слагаемых уравнения (19) возрастают в процессе деформации, и сопротивление скольжению дислокаций в металлах монотонно увеличивается с увеличением плотности дефектов. Но это увеличение предела текучести имеет принципиальные физические ограничения. Поскольку теоретически возможная плотность дислокаций в материале не превышает значений 10^{18} м^{-2} , их объемная доля соответственно оказывается $R < 0.1$; доля границ зерен (18) в нанокристаллических металлах при минимальном размере зерна в 3–4 нм может достигать значений $\eta \sim 0.6$. Так как сама по себе решетка между границами двойников не представляет собой дефектной структуры, максимально возможную

объемную долю двойников можно оценить как условие $\Delta_{\min} \sim h$ или

$$F_{\max} = (\Delta_{\min} h^{-1} + 1)^{-1} < 0.5.$$

Другими (альтернативными дислокационному) механизмами пластической деформации металлов являются двойникование и зернограничное проскальзывание. Напряжение, необходимое для инициации двойникования, записывается аналогично закону Холла–Петча с несколько большим значением постоянной $k_T > k_{HP}$ [21]

$$\bar{y}_b^{tw} = y_b^{0(tw)} + k_T \frac{\sqrt{F}}{\sqrt{h}}, \quad (21)$$

где $y_b^{0(tw)} = K\sqrt{\gamma_{SF}/Gb}$ — барьерное напряжение для крупнозернистого материала, которое зависит от энергии дефекта упаковки γ_{SF} , $K \sim 6 \cdot 10^3$ Па — постоянный коэффициент. Для барьерного сопротивления зернограничному проскальзыванию в плотноупакованной структуре сферических зерен согласно [9] можно записать

$$\bar{y}_b^{(gb)} = 10^{-2} \frac{G}{1-\nu} \left(1 - \frac{\delta}{d}\right)^2 = y_G (1 + \eta)^{2/3}, \quad (22)$$

где ν — коэффициент Пуассона. Не зависящая от размера зерна часть выражения (22) $y_G = 10^{-2}G/(1-\nu)$ полностью определяется упругими свойствами кристаллической решетки металла. Величина y_G дает пороговое напряжения зернограничного проскальзывания при $d \gg \delta$. Коэффициент Пуассона мало отличается для разных металлов, поэтому можно заключить, что барьерное напряжение пропорционально модулю сдвига для данного металла. Для большинства металлов значения y_G лежат в пределах от 0.5 до 1 ГПа.

Таким образом, существуют естественные ограничения на величину барьерного напряжения, определяемые значениями объемных долей дефектов, сумма которых не может быть больше единицы. Но на практике предел текучести металлов не достигает даже теоретически возможных значений, даваемых формулами (19)–(22): при уменьшении зерен до размеров, меньших 20–30 нм, они становятся слишком маленькими, чтобы содержать внутри себя достаточное количество других дефектов, и доминирующим механизмом деформации становится зернограничное проскальзывание. Влияние размера зерна на дислокационную пластичность обсуждается в работах [6,7]. Согласно молекулярно-динамическим расчетам [23], для чистой и задвойникованной меди двойники фактически не оказывают влияния на „мелкозернистую“ ветвь кривой, которая полностью определяется механизмом зернограничного проскальзывания и зависит только от упругих модулей материала. При пересечении двух ветвей — дислокационного скольжения или двойникования и зернограничного проскальзывания — образуется максимум предела текучести на его зависимости от размера зерна материала [6–8]. Он соответствует

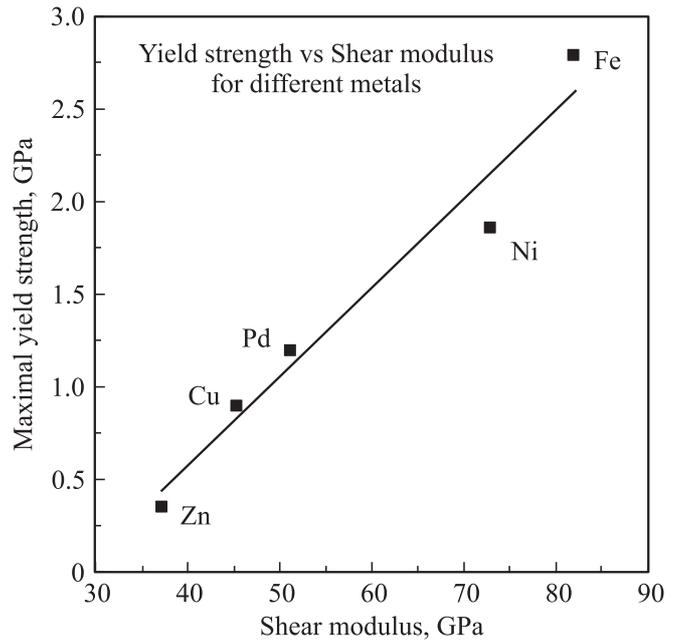


Рис. 1. Экспериментальные данные зависимости максимума предела текучести от значения модуля сдвига [1] при квазистатической деформации различных металлов. Максимум предела текучести определен согласно данным большого числа источников, приведенных в [7].

максимально достижимому для данного материала пределу текучести. Для большинства металлов значения размера зерна, соответствующего максимуму предела текучести, лежат в интервале от 8 до 20 нм. Положение этого максимума зависит от упругих свойств металла, наличия примесей или особенностей микроструктуры в виде двойников. Поскольку постоянная Тэйлора, коэффициент Холла–Петча и коэффициент y_G уравнения (22), определяющие максимум предела текучести для чистых металлов, пропорциональны модулю сдвига, следует ожидать, что значения максимума для разных металлов также должны быть пропорциональны этой величине. На рис. 1 представлены результаты интерполяции известных экспериментальных данных (см. [7]) для нескольких металлов. Видно, что предел текучести монотонно возрастает с увеличением модуля сдвига материала и не превышает величин порядка $G/50$ – $G/30$, что значительно меньше теоретической прочности на сдвиг, полагаемой обычно равной [1]. Линейная зависимость свидетельствует о том, что характеристический или относительный максимум предела текучести металла должен оставаться практически постоянной величиной, равной $\sigma_y^{\max}/G \sim 0.03$. Следовательно, одним уменьшением размера зерна, по-видимому, нельзя достичь идеально хрупкого разрушения чистого металла. Статистический предел текучести даже наиболее прочных чистых металлов не превышает 3 ГПа.

Гораздо сложнее по имеющимся экспериментальным данным выявить зависимости для размера зерна матери-

ала, при котором достигается этот максимум. Экспериментальные данные имеют большой разброс значений и для многих металлов явно недостаточны [7]. Многие авторы приводят совершенно разные интерполяции экспериментальных данных, соответствующие различным положениям этого максимума. В настоящее время можно лишь утверждать, что для многих металлов он лежит в интервале от 8 до 16 nm и для его точного определения необходимы дальнейшие экспериментальные исследования.

Многочисленные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что при средних плотностях дефектов, комнатной температуре и напряжениях, не превышающих сотен мегапаскалей, на практике „квазистатический“ режим деформации реализуется для скоростей деформации, не превосходящих $\dot{\epsilon}_{tr} \sim 10^3 \text{ s}^{-1}$. Предел текучести при этом полностью определяется величиной его барьерного сопротивления. В общем случае при квазистатическом режиме деформации барьерное напряжение определяется как минимум из всего спектра барьерных сопротивлений, соответствующих различным механизмам пластичности: $y_b = \min\{y_b^D, y_b^{tw}, y_b^{gb}, \dots\}$.

3.2. Характерные времена пластической релаксации напряжений. При скоростях пластической деформации, превышающих 10^3 s^{-1} , вид зависимости предела текучести от скорости деформации кардинально меняется [11]. С точки зрения теории это является прямым следствием того, что второе, „динамическое“ слагаемое в правой части уравнения (2) начинает значительно превышать первый стационарный член. Характерное время релаксации напряжений становится основным параметром, от которого зависит значение динамического предела текучести металла. При экстремально высоких скоростях деформации, превышающих 10^6 s^{-1} , основной вклад в предел текучести вносит эффект дислокационного голодания материала. Значительное повышение достигаемых в материале напряжений приводит к тому, что становится возможным проявление новых механизмов пластической деформации, таких как гомогенное зарождение дислокаций. Поскольку каждому типу дефектов соответствуют свои механизмы пластичности, с каждым из них связано свое характерное время релаксации.

Для оценки характерного времени релаксации, связанного с дислокационным скольжением, обратимся к уравнению (1). На временах, превышающих время разгона дислокаций (порядка 10^{-10} s), режим их движения можно считать установившимся, и $\dot{\sigma} = 0$. Тогда из (1) при условии высоких внешних напряжений, существенно превышающих барьерные напряжения $\sigma_\tau \gg y_b$, имеем

$$\sigma_\tau = 2G\tau\dot{\epsilon}. \quad (23)$$

В установившемся режиме пластического течения также должно выполняться равенство внешней и пластической деформаций: $\dot{\epsilon}_{pl} = \dot{\epsilon}$, где под $\dot{\epsilon}$ понимается скорость

внешней сдвиговой деформации, поэтому

$$\dot{\epsilon}_{pl} = \sigma_\tau / 2G\tau. \quad (24)$$

С другой стороны, в случае скольжения дислокаций связь сдвигового напряжения и скорости деформации задается соотношением Орована (15). Скорость дислокаций можно получить из уравнения для их динамики [9,14], где для установившегося течения инертным членом можно пренебречь

$$V_D = \frac{b\sigma_{eff}}{2B_f}, \quad (25)$$

где B_f — коэффициент фононного трения дислокаций. Соотношение (25) справедливо при скоростях движения дислокаций, много меньших поперечной скорости звука. Пренебрегая снова статическим пределом текучести по сравнению с действующими напряжениями, подставляя выражение (25) в соотношение Орована (15), ограничившись для простоты одной системой скольжения и сравнивая полученное выражение с (24), получаем для характерного времени релаксации напряжений при дислокационном скольжении следующее выражение:

$$\tau_D = \frac{B_f}{G\rho_D b^2} \sim \frac{B_f}{E_D}, \quad (26)$$

где E_D — полная упругая энергия дислокационных линий в единице объема, а $B_f = (v_D/2)\rho b^2$ [13] характеризует скорость рассеяния кинетической энергии дислокаций; $v_D \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$ — частота, близкая к дебаевской, обратная величина которой дает время рассеяния кинетической энергии движущейся дислокации. Видно, что время релаксации (26) обратно пропорционально плотности дислокаций и может изменяться в достаточно широких пределах. Для характерных значений параметров $B_f \sim 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $\rho_D^{cr} \sim 10^9 - 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, $b \sim 10^{-10} \text{ m}$, $G \sim 5 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$ в зависимости от плотности дислокаций получаем значения от 1 ns до 0.1 μs , причем при средних плотностях дислокаций порядка 10^{11} m^{-2} характерное время релаксации составляет порядка микросекунды. Плотность дислокаций меняется в процессе пластической деформации, поэтому, строго говоря, будет меняться и характерное время релаксации, но наибольшее значение в динамических задачах имеет время релаксации, соответствующее начальной плотности дефектов.

При уменьшении размера зерна до нескольких десятков нанометров и повышении скорости деформации становится возможным проскальзывание зерен вдоль их границ [23–25]. В работах [6,7] модель Максвелла была применена для описания зернограничного проскальзывания. В частности, из сравнения с данными молекулярно-динамического моделирования [25] было получено соотношение для характерного времени релаксации напряжений в виде

$$\tau_{gb} = \frac{dk_B T}{12Gb v_D V_s} \exp\left(\frac{U_s}{k_B T}\right), \quad (27)$$

где U_s , V_s — энергия активации и активационный объем процессов самодиффузии в границе зерна [25], k_B —

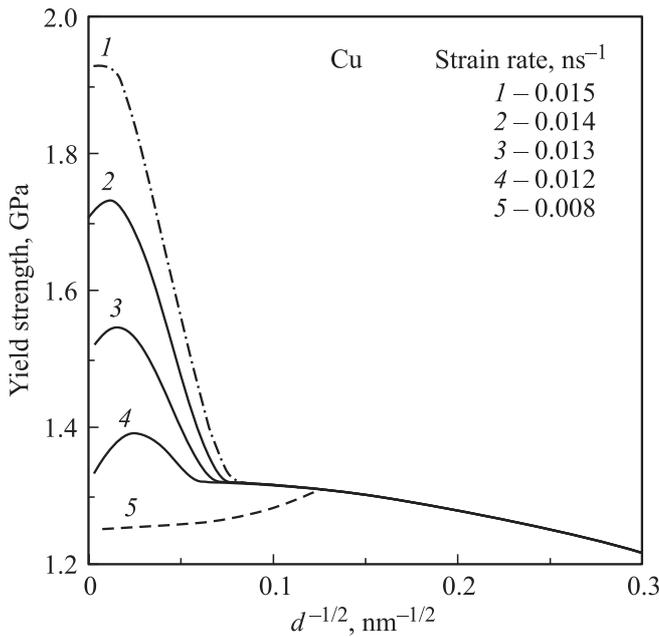


Рис. 2. Зависимость динамического предела текучести от размера зерна d меди при различных скоростях деформации в окрестности 10^7 s^{-1} . Начальная плотность дислокаций выбиралась равной 10^{12} m^{-2} .

постоянная Больцмана, $\nu_D \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$ — частота Дебая. Время релаксации (27) прямо пропорционально размеру зерна материала, и приближенная оценка $\tau_{gb} \sim 10^{-3}d$ задает для нанокристаллических металлов с диаметрами зерен $d \sim 10^{-7} - 10^{-8} \text{ m}$ диапазон времен релаксации $\tau_{gb} \sim 10^{-11} - 10^{-10} \text{ s}$.

Второе, „динамическое“ слагаемое уравнения (2) становится сопоставимо с первым при $10^{11} \tau \dot{\epsilon} \sim y_b$, что для значений $y_b < 1 \text{ GPa}$ дает оценки скорости деформации $\dot{\epsilon}_{tr} = y_b / 10^{11} \tau \sim 10^3 \text{ s}^{-1}$ для дислокационного скольжения (при $\rho_D = 10^{12} \text{ m}^{-2}$) и $\dot{\epsilon}_{tr} \sim 10^7 \text{ s}^{-1}$ для зернограничного проскальзывания при размере зерна $d = 10^{-8} \text{ m}$. Это означает, что при одной и той же скорости деформации для одних механизмов пластичности может реализовываться квазистатический режим, определяемый величиной соответствующего барьерного сопротивления, а для других могут уже быть существенными динамические факторы.

На рис. 2 и 3 представлены результаты расчетов зависимости динамического предела текучести от скорости деформации по моделям [7,14] в окрестности скоростей деформации 10^7 и 10^8 s^{-1} . Из рис. 2 видно, что при экстремально высоких скоростях деформации и умеренных плотностях дислокаций в материале „статический“ максимум [7] в области размеров зерен порядка 10–12 nm исчезает и зависимость имеет только один максимум (в области размеров зерен порядка нескольких сотен нанометров), соответствующий дислокационному голоданию материала. Величины плотности дислокаций не хватает для эффективной релаксации напряжений, ис-

точники Франка–Рида оказываются неспособными быстро увеличить количество дислокаций в металле. Для каждой скорости деформации существует некоторая „оптимальная“ начальная плотность дислокаций, при которой предел текучести минимален. Эта „оптимальная“ плотность увеличивается пропорционально скоро-

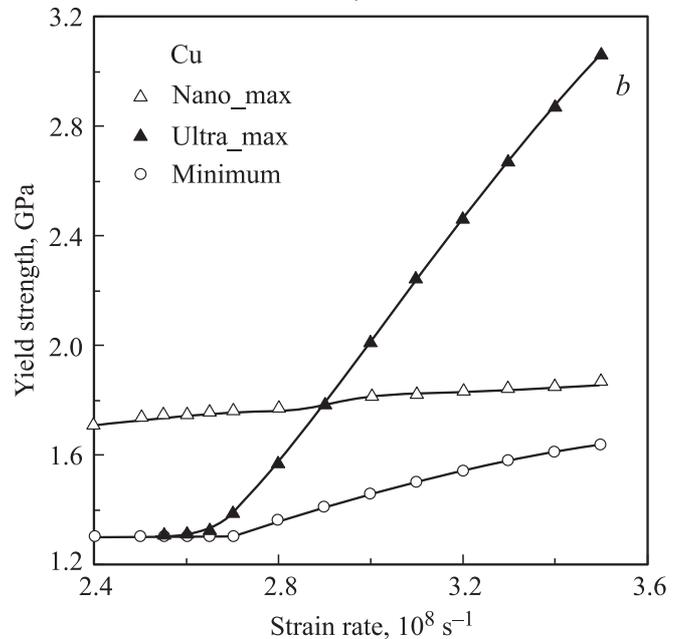
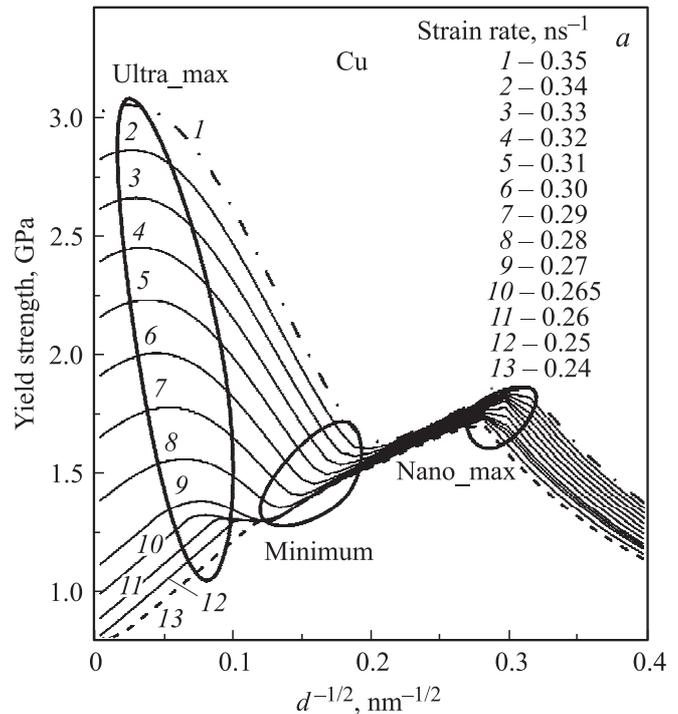


Рис. 3. Зависимость динамического предела текучести от размера зерна меди при различных скоростях деформации (a) и зависимость максимума предела текучести от скорости деформации меди (b) в окрестности скоростей деформации 10^8 s^{-1} . Условные обозначения максимумов и минимума на частях (a) и (b) совпадают. Начальная плотность дислокаций выбиралась равной 10^{12} m^{-2} .

сти деформации в соответствии с соотношением Орована (15). При увеличении скорости деформации до типичных для молекулярно-динамических расчетов значений $10^8 \text{ s}^{-1} - 10^9 \text{ s}^{-1}$ наклон кривой в области нанометровых размеров зерен изменяется и на зависимости предела текучести от размера зерна появляются минимум и второй локальный максимум, соответствующий случаю квазистатической деформации (рис. 3, а). На рис. 3, б представлены зависимости максимума динамического предела текучести от скорости деформации.

Зависимость максимума предела текучести нанокристаллических металлов от температуры была продемонстрирована в работе [6]. При скоростях деформации порядка 10^8 s^{-1} максимум предела текучести существенно увеличивается с уменьшением температуры и понижается при ее увеличении. Эта зависимость становится более слабой по мере уменьшения скорости деформации.

4. Физические механизмы ограничения роста динамического предела текучести

Из рис. 3 видно, что динамический предел текучести растет с увеличением скорости деформации. Вследствие дислокационного голодания материала при высоких скоростях деформации обычные дислокационные механизмы релаксации напряжений в материале становятся неэффективными, и предел текучести материала резко возрастает. Естественно предположить, что должны существовать физические механизмы, ограничивающие этот рост. Повышение плотности дислокаций и уменьшение характерного времени релаксации напряжений возможно только за счет активации дополнительных дислокационных источников, не реализующихся при малых сдвиговых напряжениях. Одним из таких механизмов является гомогенное зарождение дислокаций, когда дислокационные петли генерируются за счет локальных флуктуаций атомов прямо из идеальной кристаллической решетки [26]. Количество петель, зарождающихся в единице объема в единицу времени, может быть выражено, как [27]

$$J_{HD} = J_{HD}^0 \exp\left(-\frac{U_{HD} - \sigma_{\tau} V_{HD}}{kT}\right). \quad (28)$$

Здесь U_{HD} , V_{HD} — энергия активации и активационный объем, J_{HD}^0 — параметр, σ_{τ} — действующие в материале сдвиговые напряжения. Для меди параметры, найденные методами молекулярно-динамического моделирования [27], составили $V_{HD} = 2.7 \cdot 10^{-28} \text{ m}^3$, $U_{HD} = 4.67 \text{ eV}$, $J_{HD}^0 = 10^{14} \text{ s}^{-1}$. От числа генерируемых дислокаций можно перейти к их скалярной плотности, записав

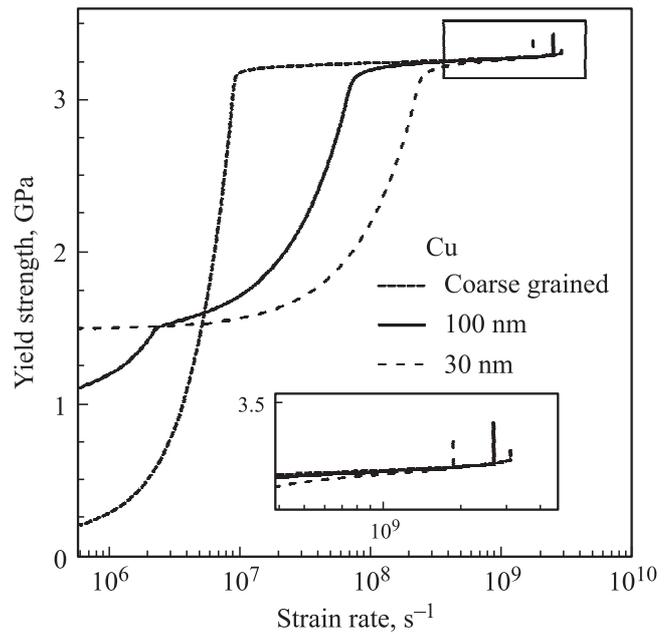


Рис. 4. Зависимость предела текучести от скорости деформации меди при различных размерах зерна материала.

уравнения

$$\frac{d\rho_D^G}{dt} = 2\pi c_t N, \quad \dot{N} = J_{HD} - \frac{N}{c_t \sqrt{\rho_D}}, \quad (29)$$

где учтено, что зародившиеся дислокационные петли расширяются со скоростью, близкой к поперечной скорости звука c_t , и что гомогенно зародившаяся дислокационная петля становится „обычной“ дислокацией, двигающейся с меньшей скоростью, когда ее размеры сопоставимы со средним расстоянием между дефектами. Выражения (29) могут быть добавлены в уравнение кинетики дислокаций [9,14] как дополнительный источник. Так как энергия активации данного механизма достаточно велика, он начинает быть эффективным только при сдвиговых напряжениях порядка $\sigma_{\tau} \sim U_{HD}/V_{HD} \sim 3 \text{ GPa}$.

Рассмотрим влияние механизмов гомогенного зарождения дислокаций и зернограничного проскальзывания на вид зависимости динамического предела текучести от скорости деформации. На рис. 4 представлены результаты моделирования одноосного растяжения малого объема меди с заданной скоростью деформации. Дислокационная пластичность описана в рамках модели [9,14], зернограничное проскальзывание — в рамках модели [6,7]. В крупнозернистом материале при скоростях деформации, превышающих 10^6 s^{-1} , предел текучести резко повышается, что является отражением эффекта дислокационного голодания. Но при напряжениях, превышающих 3.2 GPa, активируется гомогенное зарождение дислокаций, которое обеспечивает эффективную релаксацию сдвиговых напряжений до скоростей порядка 10^9 s^{-1} (рис. 4), после чего из-за ограничения

на скорость и максимальную плотность дислокаций их скольжение, согласно уравнению (15), уже в принципе не может обеспечить требуемую скорость релаксации напряжений. В наноматериале дислокационная активность существенно подавлена, и при скоростях деформации порядка и более 10^6 s^{-1} пластичность в значительной мере определяется механизмом зернограничного проскальзывания. При промежуточных размерах зерна — в ультрамелкозернистых металлах — зависимость имеет ступенчатый вид (рис. 4), первая ступенька отвечает смене доминирующего механизма пластической деформации с дислокационного скольжения на зернограничное проскальзывание. Расчеты с учетом двойникования [28] для меди также показывают, что на зависимости динамического предела текучести от скорости деформации возникает еще одно плато в области напряжений 10–13 GPa, связанное с началом интенсивного двойникования материала.

Таким образом, при высоких скоростях деформации наличие дефектов в металле оказывает двойное влияние на его прочностные характеристики. С одной стороны, большая плотность дефектов препятствует их свободному перемещению, что приводит к росту величин барьерного сопротивления \tilde{y}_b . С другой стороны, наличие различных видов дефектов обеспечивает увеличение числа механизмов пластичности, что ограничивает рост динамического предела текучести с повышением скорости деформации и приводит к ступенчатому виду его скоростной зависимости. Конкуренция двух тенденций приводит к тому, что существует некоторая „оптимальная“ для данной скорости деформации плотность дефектов, соответствующая минимальному значению динамического предела текучести материала.

5. Заключение

Предел текучести металлов, понимаемый как удвоенное максимально достижимое в материале сдвиговое напряжение, в общем случае не является параметром его структуры, а представляет собой динамическую характеристику, зависящую от особенностей процесса деформации и внешних условий. В случае малых скоростей деформации он переходит в обычную величину предела текучести — напряжение, при котором начинается необратимая пластическая деформация материала. Критическая скорость деформации, при которой происходит переход между „квазистатическим“ и „динамическим“ поведением, существенно зависит от дефектной подструктуры и может меняться в широких пределах. Ввиду существования нескольких альтернативных механизмов пластичности предел текучести определяется набором барьерных напряжений и характерных времен релаксации материала. Количество параметров, определяющих значение предела текучести, зависит от характеристик процесса деформации и повышается при увеличении скорости деформации. Отражением этого является ступен-

чатый вид зависимости предела текучести от скорости деформации при скоростях, превышающих 10^3 s^{-1} .

В квазистатических условиях деформации минимально возможное и максимально достижимое значения предела текучести полностью определяются объемными долями дефектов в материале, значениями их упругой энергии и его внутренними масштабными уровнями. В зависимости предела текучести от размера зерна выделяются две ветви, соответствующие крупнозернистым и нанокристаллическим металлам. Их пересечение определяет максимум предела текучести материала в случае квазистатической деформации. Теоретически достижимый предел текучести металла оказывается ограниченным максимально достижимыми объемными долями различных видов дефектов. В динамическом режиме деформации зависимость предела текучести от плотности дефектов имеет сложный немонотонный характер. Для данной скорости деформации существует некоторая „оптимальная“ объемная доля дефектов, обеспечивающая максимальную скорость релаксации напряжений и минимальное значение предела текучести металла. При экстремально высоких скоростях деформации $10^6–10^9 \text{ s}^{-1}$, достижимых экспериментально [29] и типичных для молекулярно-динамических расчетов, появляется новый максимум зависимости предела текучести от размера зерна материала, соответствующий размерам зерен порядка сотен нанометров и являющийся следствием дислокационного голодания материала.

Список литературы

- [1] М.А. Штремель. Прочность сплавов. Ч. 2. Деформация. МИСиС, М. (1997). 527 с.
- [2] М.А. Meyers, К.К. Chawla. Mechanical behavior of materials. Cambridge University Press, NY (2009). 856 p.
- [3] Г. Глейгер, Б. Чалмерс. Большеугловые границы зерен. Мир, М. (1975). 374 с.
- [4] J.W. Christian, S. Mahajan. Prog. Mater. Sci. **39**, 1 (1995).
- [5] М.А. Meyers. Dynamic behavior of materials. John Wiley & Sons, NY (1994). 448 p.
- [6] И.Н. Бородин, А.Е. Майер. ФТТ. **54**, 759 (2012).
- [7] E.N. Borodin, A.E. Mayer. Mater. Sci. Eng. A **532**, 245 (2012).
- [8] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. ФТТ **50**, 1984 (2008).
- [9] V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, A.P. Yalovets. Int. J. Plast. **27**, 1294 (2011).
- [10] А.А. Груздков, Ю.В. Петров, В.И. Смирнов. ФТТ **44**, 1987 (2002).
- [11] А.А. Gruzdkov, E.V. Sitnikova, N.F. Morozov, Y.V. Petrov. Math. Mech. Solid. **14**, 72 (2009).
- [12] A. Gruzdkov, Y. Petrov. J. Ningbo Univ. (NSSS) **25**, 78 (2012).
- [13] А.Е. Дудоров, А.Е. Майер. Вестн. Челяб. гос. ун-та. Физика **39**, 48 (2011).
- [14] А.Е. Mayer, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov, P.N. Mayer. Appl. Phys. J. **113**, 193 508 (2013).
- [15] L.A. Merzhiievsky, A.V. Tyagel'sky. J. de Phys. **49**, C3-457 (1988).

- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. Наука, М. (2003). 264 с.
- [17] Ю.Н. Роботнов. Элементы наследственной механики твердых тел. Наука, М. (1977). 383 с.
- [18] Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов / Под ред. М.А. Мейерса, Л.Е. Мурра. Металлургия, М. (1984). 512 с.
- [19] J.R. Greer, J.Th.M. De Hosson. Prog. Mater. Sci. **56**, 654 (2011).
- [20] R.W. Armstrong, F.J. Zerilli. J. Phys. D **43**, 492002 (2010).
- [21] M.A. Meyers, O.V. Hringler, V.A. Lubarda. Acta Mater. **49**, 4025 (2001).
- [22] S. Allain, J.-P. Chateau, O. Bouaziz. Mater. Sci. Eng. A. **387–389**, 143 (2004).
- [23] H.V. Swygenhoven, P.M. Derlet. Phys. Rev. B. **64**, 224105 (2001).
- [24] Д. Маклин. Границы зерен в металлах. Металлургиздат, М. (1960). 323 с.
- [25] H.V. Swygenhoven, A. Caro. Phys. Rev. B **58**, 11246 (1998).
- [26] J.P. Cui, Y.L. Hao, S.J. Li, M.L. Sui, D.X. Li, R. Yang. Phys. Rev. Lett. **102**, 045503 (2009).
- [27] Г.Э. Норман, А.В. Янилкин. ФТТ **53**, 1536 (2011).
- [28] И.Н. Бородин, С.А. Атрошенко, А.Е. Майер. ЖТФ **84**, 8, 59 (2014).
- [29] Y.M. Wang, E.M. Bringa, J.M. McNaney, M. Victoria, A. Caro, A.M. Hodge, R. Smith, B. Torralva, B.A. Remington, C.A. Schuh, H. Jamarani, M.A. Meyers. Appl. Phys. Lett. **88**, 061917 (2006).