

01;05

## Формирование полосы переориентации в упругом поле дисклинационного диполя

© Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев, Ю.В. Свирина

Нижегородский филиал Института машиноведения им. А.А. Благонравова РАН,  
603024 Нижний Новгород, Россия  
e-mail: sarafanov@sinn.ru, pevn@uic.nnov.ru, svirina@phys.unn.ru

(Поступило в Редакцию 27 мая 2008 г.)

В рамках кинетического подхода проведено рассмотрение и компьютерное моделирование формирования полосы переориентации в поле упругих напряжений дисклинационного диполя: заданного на границе зерна и наведенного пластической деформацией на изломе межкристаллитной границы в бикристалле. Выявлено хорошее соответствие результатов компьютерного моделирования с результатами, полученными ранее в континуальном приближении. Показано, что дислокационная структура полосы переориентации, формирующаяся в процессе аккомодационного скольжения, представляет собой динамическое стационарное образование и имеет кинетическую природу возникновения.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Bb

### Введение

Известно, что большие пластические деформации приводят к фрагментации кристаллических материалов. Деформационное измельчение (фрагментация) структуры материалов заключается в разбиении исходных зерен поликристаллов на более мелкие разориентированные области, разделенные малоугловыми и среднеугловыми границами. Фрагментация представляет собой фундаментальное явление и наблюдается в кристаллических материалах с различным типом кристаллической решетки при самых различных схемах и режимах пластической деформации [1–3]. Экспериментальные и теоретические исследования феномена фрагментации позволили заключить [1,2], что в поликристаллах его первопричиной являются мощные упругие напряжения, источники которых (пластические несовместности, трактуемые как мезодефекты) возникают на межзеренных границах в процессе пластической деформации.

Типичным зародышем фрагментации является дисклинационный диполь, возникающий при пластической деформации на двойном изломе границы зерна. Для этой системы существует тенденция понижения упругой энергии путем достройки диполя выходящими в тело одного из зерен оборванными дислокационными границами разного знака, т.е. путем формирования полосы переориентации. Впервые теоретическое описание такого процесса в рамках дисклинационного подхода (как движение диполя частичных дисклинаций) было сделано в работах [4,5]. Однако эти результаты не дают ответа: как в окрестности дисклинационного диполя динамически образуются субграницы, и почему они, будучи оборванными, являются устойчивыми.

В связи с этим в работе [6] на основе континуального рассмотрения было показано, что дисклинации расположенные в границе зерна диполя своими дальнедействующими полями напряжений возмущают ламинарный

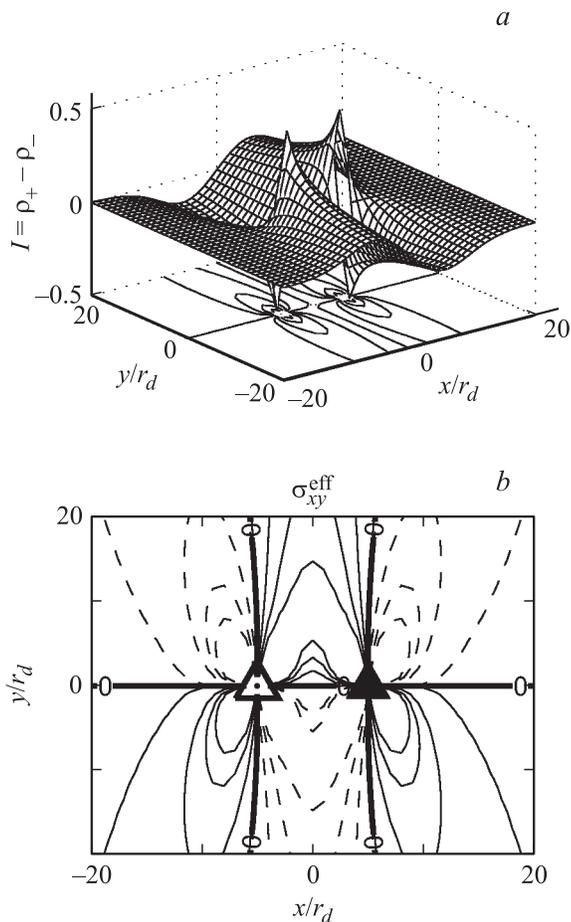
поток решеточных дислокаций, вызывая расслоение их однородного распределения и образуя в прилегающем объеме зерна области избыточной плотности дислокаций  $I = \rho_+ - \rho_-$ , согласно выражению

$$I(x, y) = \frac{\omega}{\pi b r_d} \operatorname{sh}(y/r_d) [K_0 r_- / r_d - K_0(r_+ / r_d)], \quad (1)$$

где  $\omega$  — мощность дисклинаций, образующих диполь,  $2a$  — плечо дисклинационного диполя,  $r_d$  — радиус экранирования упругого поля дефектов,  $K_0(r)$  — функция Макдональда нулевого порядка, ось  $Ox$  характеризует направление скольжения дислокаций,  $Oy$  — направление их переползания,  $r_+ = \sqrt{y^2 + (x+a)^2}$ ,  $r_- = \sqrt{y^2 + (x-a)^2}$ . Соответствующий график зависимости  $I = I(x, y)$  показан на рис. 1.

Оказалось, что такое перераспределение дислокаций в упругом поле дислокаций, во-первых, способно существенно понизить общую упругую энергию системы. Во-вторых, геометрия формирующихся областей дислокационного заряда такова, что его максимумы и минимумы располагаются вдоль линии нулевого уровня сдвиговой компоненты тензора эффективного поля напряжений дислокационно-дисклинационной системы. Важно то, что эти линии располагаются почти перпендикулярно действующей системе скольжения дислокаций независимо (в условиях применимости кинетического описания) от величины приложенной нагрузки. Этот результат объясняется тем, что области экстремальной плотности дислокационного заряда являются сугубо динамическими образованиями и формируются в условиях кинетики, но не статики.

Эти выводы сделаны на основе континуального рассмотрения эволюции непрерывно распределенного дислокационного ансамбля в упругом поле дисклинаций. Вместе с тем континуальное рассмотрение, несмотря на строгость получаемых решений, не может дать ответ на ряд вопросов, касающихся структурных механизмов



**Рис. 1.** Распределение нормированной избыточной плотности дислокаций  $I(x, y)$  для области  $[40r_a \times 40r_d]$  в поле дисклинационного диполя (a) и изолинии компоненты  $\sigma_{xy}^{eff}$  тензора напряжений экранированного дислокационным ансамблем упругого поля в той же области (b).

формирования дислокационных образований типа обрванных субграниц. Поэтому представляет интерес рассмотреть процессы образования дислокационных структур этого типа в рамках альтернативного дискретного подхода. В качестве такого дискретного подхода в настоящей главе выбран метод компьютерного моделирования динамики дислокационного ансамбля.

### Компьютерная модель динамики дислокационного ансамбля

В предлагаемой ниже компьютерной модели используется подход, применяемый в методе молекулярной динамики, в котором в качестве частиц рассматриваются решеточные дислокации. Модель динамики дислокационного ансамбля строится для плоского кристалла. При ее построении учитываются те же физические процессы, что и при континуальном рассмотрении, приведенном в [6]. Таким образом, модель является самосогласован-

ной и отражает кинетические процессы, происходящие при эволюции дислокационного ансамбля.

Важным моментом построения модели является то обстоятельство, что, как было показано ранее [7], размер упруго-пластической области несущественно влияет на конечные результаты, так как имеет место эффект внутреннего экранирования упругого поля. Поскольку этот эффект сказывается на масштабах  $d \approx r_d \approx r = \rho^{-1/2} \approx 0.1-0.2 \mu\text{m}$  (при  $\rho = 5 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ), то исследование динамики дислокационного ансамбля в окрестности дисклинации (и других мезодефектов) будем проводить внутри двумерной прямоугольной области упруго-изотропной среды, имеющей размеры  $(d \times d)$ , где  $d = 2-4 \mu\text{m}$ , и существенно превышающие  $r_d$ . В дальнейшем исследуемую область будем называть зерном.

Каждая дислокация характеризовалась вектором Бюргера  $b^{(s)}$ , параллельным оси  $Ox$ , координатами  $(x^{(s)}, y^{(s)})$  и скоростями  $(v_x^{(s)}, v_y^{(s)})$ , где  $s = 1, \dots, N$ ,  $N$  — число дислокаций.

Вклад инерционных слагаемых в уравнение движения дислокации предполагался малым по сравнению со слагаемыми, обусловленными динамическим трением. При этом уравнение движения для  $k$ -компоненты скорости дислокации  $s$  в квазивязком приближении имеет вид

$$v_k^{(s)} = \frac{dx_k^{(s)}}{dt} = M_{ki} e_{ijm} l_j b_n^{(s)} (\sigma_{mn}^{ext} + \sigma_{mn}^{int}), \quad (2)$$

где  $\sigma_{mn}^{ext}$  — тензор напряжений, обусловленный внешним по отношению к рассматриваемой системе дефектов полем;  $\sigma_{mn}^{int}$  — тензор внутренних напряжений, определяемый как суммарное упругое поле, действующее на рассматриваемую дислокацию со стороны других дефектов;  $M_{ki}$  — тензор подвижности, имеющий отличные от нуля диагональные компоненты, которые определяют подвижность дислокации при ее скольжении и переползании;  $e_{ijm}$  — единичный антисимметричный тензор,  $l_j$  — единичный вектор, касательный к линии дислокации.

Ниже рассматривается случай, когда процесс деформации контролируется консервативным движением (скольжением) дислокаций. В модели предполагается, что пластическая деформация в зерне начинается при достижении в одной из выбранных систем скольжения критического сдвигового напряжения  $\sigma_c$ . Поскольку упругое поле напряжений  $\hat{\sigma} = \{\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}\}$  в исследуемой области существенно неоднородно (определяется в каждый момент времени как сумма полей напряжений всех дефектов), то деформация зарождается локально, а затем распространяется на соседние области зерна.

Возникновение очагов пластической деформации рассматривается в модели как процесс пороговой генерации дислокаций. Размножение дислокаций в объеме зерна характеризовалось некоторой скоростью  $\dot{N}$  зарождения в плоскостях скольжения пар дислокаций противоположного знака, находящихся друг от друга на расстоянии  $x_c = Dn/\sigma_c$  (здесь  $\sigma_c$  — пороговое напряжение

срабатывания источника типа Франка–Рида [8], ниже которого дислокации генерируемой пары аннигилируют,  $D = \frac{G}{2\pi(1-\nu)}$ ,  $G$  — модуль Юнга,  $\nu$  — коэффициент Пуассона). Координаты дислокационной пары генерировались в исследуемой области случайным образом по закону равномерного распределения.

В модели учтены процессы рекомбинации. Процесс аннигиляции движущихся навстречу друг другу дислокаций противоположного знака характеризовался сечением захвата  $S_a = \pi x_a y_a / 4$ , где  $x_a = 0.9x_c$  — большая ось эллипса по  $x$ ,  $y_a = 0.1x_c$  — малая по  $y$ .

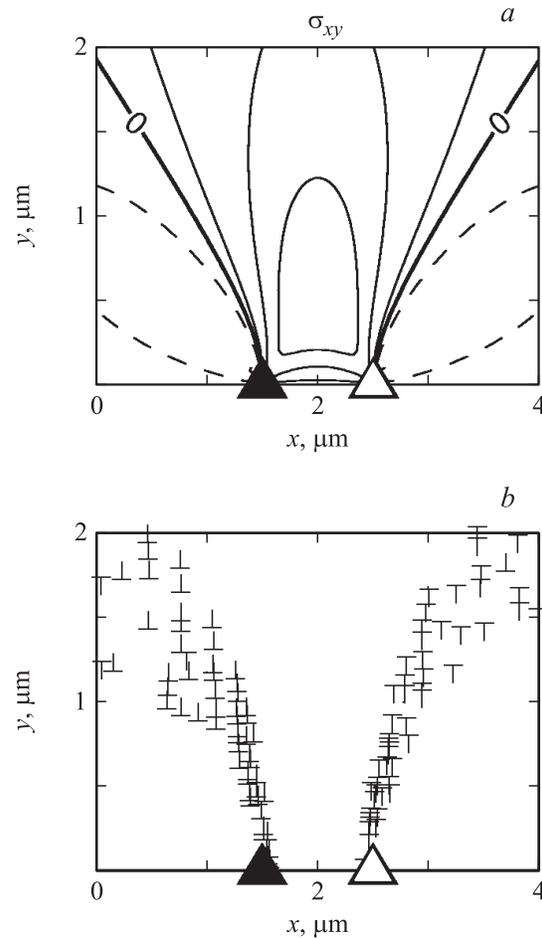
При выбранных параметрах модели в отсутствие дисклинации и внешней нагрузки размножения дислокаций не происходит — дислокации, возникая, сразу же и аннигилируют вследствие взаимного притяжения. Таким образом, в модели предусмотрен самосогласованный порог генерации, зависящий от распределения упругого поля в теле зерна.

### Моделирование процесса образования полосы переориентации в упругом поле дисклинационного диполя

Как указывалось выше, экспериментальные исследования показывают [1,9], что путем достройки диполя дислокационными границами разного знака образуется незавершенная полоса переориентации, представляющая собой две оборванные субграницы, расположенные почти параллельно друг другу.

Проблема теоретического описания механизма образования такой полосы переориентации в рамках дисклинационного подхода заключается в том, что в состоянии статистического равновесия дислокации разных знаков в поле сдвиговых напряжений  $\sigma_{xy}$  дисклинационного диполя выстраиваются в границы не параллельно, а под некоторым углом (рис. 2). Это связано с тем, что линии нулевого уровня поля напряжений диполя  $\sigma_{xy}$ , вдоль которых стремятся выстроиться дислокационные границы, расходятся в отсутствие внешнего поля под прямым углом (рис. 2, *a*). На рис. 2, *b* показана равновесная дислокационная структура, сформированная после включения упругого поля дисклинационного диполя мощности  $\omega = 0.02$ . В начальный момент времени дислокации разных знаков в зерне были распределены квазиравномерно с плотностью  $\rho = 2.5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ . После включения упругого поля дисклинационного диполя часть дислокаций ушла на свободные поверхности, плотность дислокаций уменьшилась, а оставшиеся в зерне дислокации приняли равновесную конфигурацию. Аналогичные результаты получаются при формировании равновесной дислокационной структуры в слабом внешнем поле ( $\sigma_e \ll D\omega/2$ ).

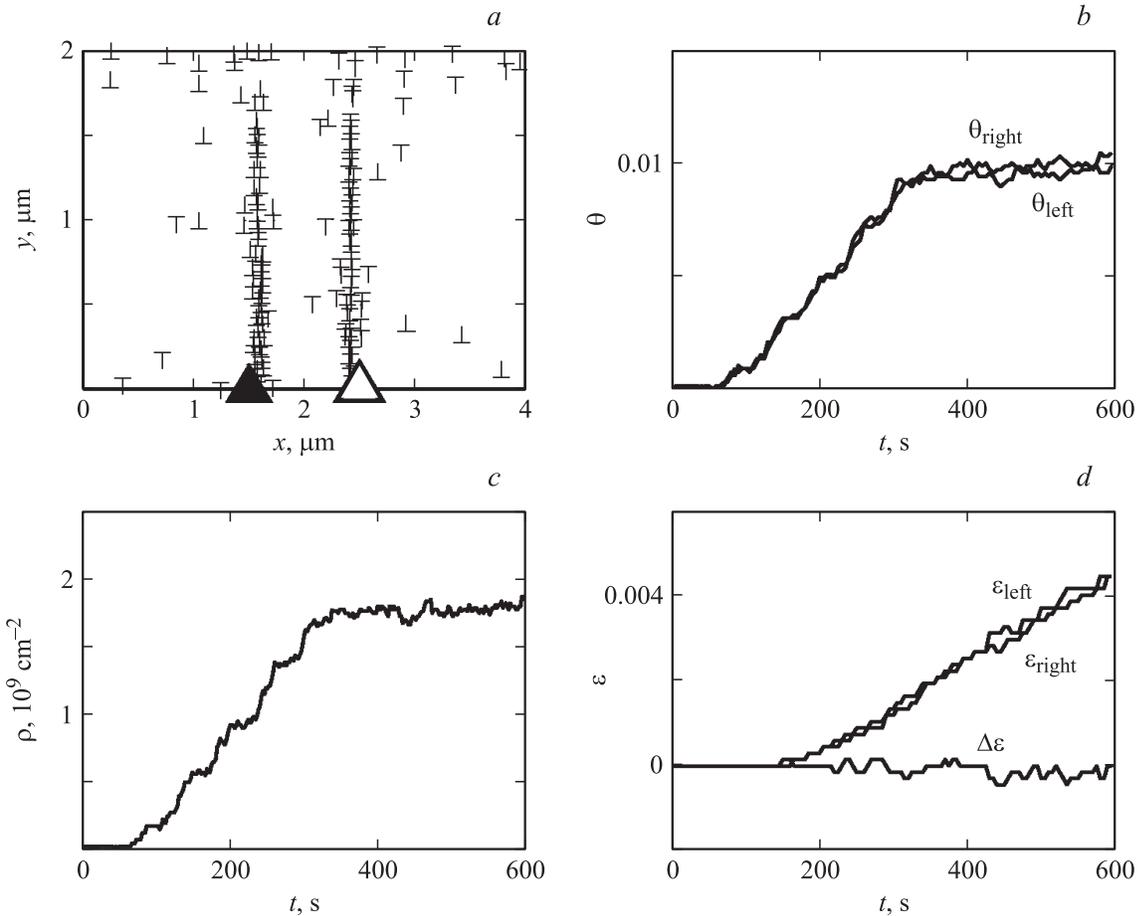
Противоречие с экспериментальными данными устраняется, если учесть кинетический аспект этого явления, т.е. процесс формирования субграниц в виде оборванных полос переориентации рассматривать не в равно-



**Рис. 2.** Линии равного уровня (а) сдвиговой компоненты  $\sigma_{xy}$  тензора напряжений диполя частичных дисклинаций мощности  $\omega = 0.02$  и равновесная дислокационная структура (б), сформированная после включения упругого поля дисклинационного диполя.

весных, статических условиях, а в условиях развитой кинетики дислокационного ансамбля. В этом случае нулевые изолинии компоненты  $\sigma_{xy}^{\text{eff}}$  тензора напряжений экранированного дислокационным ансамблем упругого поля располагаются уже почти параллельно (рис. 1, *b*). В данном разделе этот эффект рассматривается в рамках компьютерного моделирования.

Рассмотрим эволюцию дислокационного ансамбля (рис. 3) в поле дисклинационного диполя (двух противоположных знаков дисклинаций мощности  $\omega$ , расположенных на расстоянии  $2a = 1 \mu\text{м}$ ) внутри двумерной прямоугольной области ( $d \times d$ ), при значениях параметров  $d = 2 \mu\text{м}$ ,  $\sigma_c = 3 \cdot 10^{-3} D$  и величине внешних напряжений  $\sigma_e = \frac{1}{3} \sigma_c$ . Предполагается, что сначала в течение  $t_p = 300 \text{ с}$  мощность дисклинаций  $\omega(t)$  линейно нарастает со временем со скоростью  $\dot{\omega} = (2/3) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$  от нуля до значения  $\omega_{\text{max}} = 0.02$ . Далее в течение еще  $t = 300 \text{ с}$  выбран режим, когда значение  $\omega$  остается постоянным ( $\omega = \omega_{\text{max}}$ ).



**Рис. 3.** Результаты моделирования процесса формирования дислокационной структуры и ее временные характеристики: *a* — дислокационная структура, сформированная в виде дипольной системы оборванных субграниц (незавершенной полосы переориентации) во внешнем поле  $\sigma_{xy}^e = 0.001D$  и упругом поле дисклинационного диполя мощности  $\omega = 0.02$ ; *b* — изменение разориентировок субграниц от времени; *c* — изменение плотности дислокаций в теле зерна от времени; *d* — изменение величины деформации на границах от времени.

По мере увеличения мощности дисклинаций в начальный период времени ( $0 < t < t_1 \approx 60 \text{ s}$ ) какая-либо деформация в зерне отсутствует. Все генерируемые дислокации аннигилируют в теле зерна. При  $t > t_1$  под воздействием нарастающего упругого поля дисклинаций начинается процесс размножения дислокаций (рис. 3, *c*), которые захватываются этим полем, порождая субграницы (рис. 3, *a, b*).

С момента времени  $t = t_2 \approx 200 \text{ s}$  начинается относительно однородная деформация. Дислокации начинают достигать внешних границ зерна, а деформация левой и правой половин зерна становятся одинаковыми  $\varepsilon_{right} \approx \varepsilon_{left}$  (рис. 3, *d*).

В интервале времени  $t_1 < t < t_p \approx 500 \text{ s}$  средняя плотность  $\rho(t)$  дислокаций в зерне нарастает пропорционально увеличению мощности дисклинаций (рис. 3, *c*). Также линейно нарастает разориентировка субграниц  $\theta$

$$\theta(t) = \frac{1}{2}(\omega(t) - \omega(t_y)). \quad (3)$$

При  $t > t_p = 300 \text{ s}$  после того, как прекращается увеличение мощности дисклинаций, прекращается рост разориентировок субграниц и плотности дислокаций в зерне (рис. 3, *b, c*). В итоге формируется система параллельных субграниц противоположного знака, имеющих разориентировку  $\theta \approx \omega/2$  (рис. 3, *a*).

Отличим рассматриваемого примера от проанализированного в [10,11] случая формирования субграницы в поле отдельной дисклинации является то, что разориентировка формирующихся субграниц в упругом поле дисклинационного диполя не сказывается на величине пластической деформации зерна (рис. 3, *b, d*). В момент времени  $t = t_p \sim 300 \text{ s}$  разориентировка субграниц перестает нарастать, в то время как величина деформации продолжает нарастать с прежней скоростью. Это говорит о том, что изменение величины деформации контролируется внешним полем напряжений  $\sigma_e$ .

Таким образом, в условиях кинетики (процессов рождения, аннигиляции и стока дислокаций) под действием упругого поля дисклинационного диполя формирует-

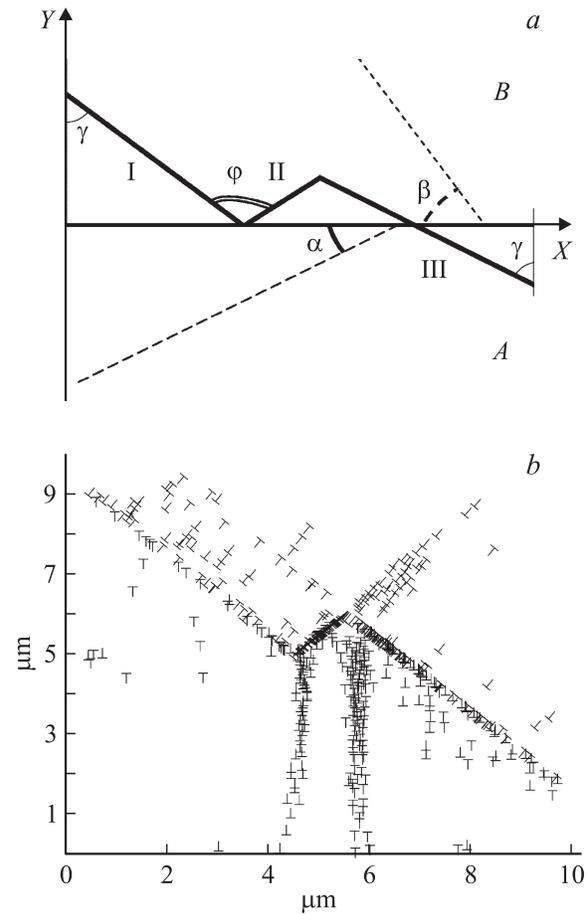
ся система параллельных субграниц противоположного знака, имеющих разориентировку  $\theta \approx \omega/2$ . Субграницы выстраиваются перпендикулярно действующей системе скольжения дислокаций на расстоянии друг от друга, равном плечу диполя.

### Формирование полосы переориентации вблизи двойного излома границы зерна

Выше рассматривалось формирование полосы переориентации в случае, когда дисклинационный диполь искусственно помещался на плоскую границу. В рамках изложенного выше кинетического подхода исследуем теперь условия возникновения полосы переориентации вблизи дисклинационного диполя, формирующегося непосредственно в процессе пластической деформации на двойном изломе межкристаллитной границы в бикристалле.

Исследуемая геометрия бикристалла размером  $10 \times 10 \mu\text{m}$  представлена на рис. 4, *a*. Для простоты предполагалось, что перемещение дислокаций происходит в одной плоскости скольжения: в нижнем зерне вдоль направления под углом  $\alpha$  к оси растяжения  $OX$ , в верхнем зерне — под углом  $\beta$ . При моделировании угол  $\alpha$  был выбран равным нулю, так что в плоскостях скольжения нижнего зерна сдвиговая компонента внешнего напряжения отсутствовала и движение дислокаций осуществлялось только под действием внутренних напряжений. Величина внешнего напряжения изменялась по мере деформации бикристалла таким образом, чтобы обеспечить постоянную скорость деформации  $\dot{\epsilon} \sim 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ .

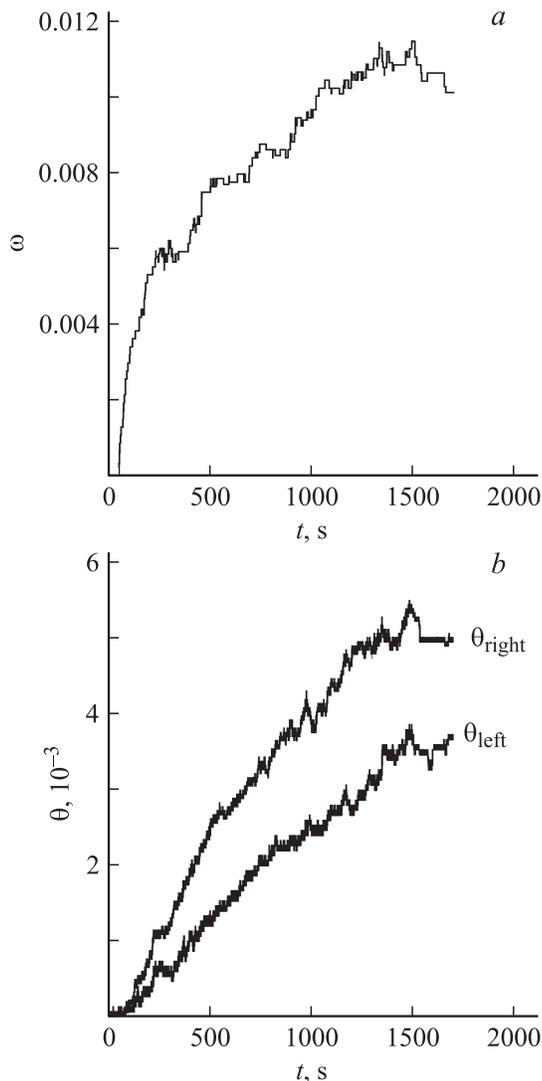
Попадающие на двойной излом границы (рис. 4, *a*) при пластической деформации из верхнего зерна решеточные дислокации формируют на нем мезодефекты, которые при произвольных углах  $\beta$  и  $\varphi$  можно описать как суперпозицию дисклинационного диполя и равномерно распределенного сдвига, образованного тангенциальными компонентами вектора Бюргера решеточных дислокаций. Образование мезодефектов в процессе деформации вызывает в нижнем зерне аккомодационную пластическую деформацию и формирование дислокационной структуры в виде оборванных субграниц. Более подробно исследован случай, когда двойной излом межкристаллитной границы представляет собой ступеньку ( $\varphi = 90^\circ$ ), а угол  $\beta = 45^\circ$ . Для этого случая дислокационная структура, сформированная после деформации и последующей разгрузки, имеет вид, представленный на рис. 4, *b*. Нагружение бикристалла проводилось в течение времени  $t = 1.5 \cdot 10^3 \text{ s}$ , после чего внешняя нагрузка снималась и сформировавшаяся к этому моменту структура релаксировала в течение  $\sim 200 \text{ s}$ . Средняя величина пластической деформации верхнего зерна составила при этом  $\epsilon \sim 11\%$ . Соответствующие указанному режиму нагружения зависимости мощности дисклинационного диполя и разориентировок сформированных в нижнем



**Рис. 4.** Результаты моделирования процесса формирования полосы переориентации на межкристаллитной границе бикристалла при пластической деформации: *a* — схема модельного бикристалла (пунктир — плоскости скольжения в верхнем и нижнем зернах); *b* — дислокационная структура, сформированная при пластической деформации и последующей разгрузке.

зерне оборванных субграниц от времени представлены на рис. 5, *a, b*.

Из представленных данных видно, что при выбранной геометрии скольжения мощность возникающего на межкристаллитной границе дисклинационного диполя, несмотря на довольно значительную величину деформации верхнего зерна ( $\epsilon \sim 11\%$ ), относительно невелика ( $\omega \sim 0.01$ ) вследствие локального упрочнения зерна вблизи двойного излома. Сформированные субграницы располагаются в среднем параллельно друг другу. Из рис. 5 также видно, что величины разориентировок образующихся субграниц отличаются друг от друга, в отличие от рассмотренного в предыдущем разделе случая (см. рис. 3). По-видимому, это связано с влиянием на эволюцию дислокационной структуры упругих полей напряжений от систем дислокаций, накапливающихся на межкристаллитной границе в процессе аккомодационного скольжения в нижнем зерне.



**Рис. 5.** Временные характеристики формирующейся при пластической деформации дислокационной структуры: *a* — изменение мощности дисклинационного диполя, образующегося на межкристаллитной границе бикристалла; *b* — изменение величины разориентировок формирующихся в нижнем зерне субграниц, образующих полосу переориентации.

Дальнейшее моделирование при варьировании параметров модели показало, что формирование полосы переориентации наблюдается в узком интервале значений  $\beta \sim 35, 45^\circ$ . Ширина полосы переориентации  $l$  прямо пропорционально зависит от длины плеча диполя  $L$  ( $L$  — длина участка II, см. рис. 4, *a*):  $l \approx L \sin(\varphi - \gamma)$ . Между тем существует некоторое минимальное пороговое значение его длины ( $L \sim 1 \mu\text{m}$ ), ниже которого формирование полосы переориентации не просходит. С уменьшением угла наклона „ступеньки“ ( $\varphi > 90^\circ$ ) разориентировки субграниц уменьшаются и при некотором критическом значении  $\varphi \sim 125^\circ$  полоса переориентации не формируется.

## Выводы

1. Проведено моделирование кинетики дислокационного ансамбля и процессов формирования субграниц в упругом поле заданного и наведенного (на межкристаллитной границе бикристалла) пластической деформацией дисклинационного диполя. Показано, что дисклинационный диполь своими упругими полями генерирует поток дислокаций, из которых формирует области избыточной дислокационной плотности разного знака. Эти области разориентации в ходе пластической деформации постепенно перестраиваются посредством скольжения дислокаций в параллельно расположенные субграницы, находящиеся в дипольной конфигурации, т.е. образуют полосу переориентации.

2. Полоса переориентации представляет собой динамическую дислокационную структуру, устойчивую к снятию нагрузки. Оборванные субграницы, образующие полосу переориентации, располагаются вдоль линий, которые проходят через дисклинации перпендикулярно действующей системе скольжения. Средняя разориентировка субграниц оказывается примерно равной половине мощности дисклинаций, образующих диполь.

3. Результаты моделирования кинетики формирования полосы переориентации в рамках дискретного подхода хорошо согласуются с результатами, полученными в континуальном приближении. Образование областей разориентации приводит к снижению упругой энергии системы за счет эффекта экранировки полей напряжений дисклинаций ансамблем дислокаций. Дислокационные границы формируются вдоль линий нулевого уровня сдвиговой компоненты экранированного поля напряжений.

4. Объяснить возникновение полосы переориентации как на континуальном, так и дискретном уровнях описания становится возможным, если учесть кинетический аспект явления, т.е. процесс формирования субграниц рассматривать не в равновесных условиях, а в условиях кинетики дислокационного ансамбля.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 08-02-97041) и ИНТАС (проект № 05-10000008-8120).

## Список литературы

- [1] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [2] Rybin V.V. // Problems of Material Sci. 2003. N 1(33). P. 9–28.
- [3] Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. // Acta Met. Mater. 1993. Vol. 41. P. 2211–2217.
- [4] Владимиров В.И., Романов А.Е. // ФТТ. 1978. Т. 20. Вып. 10. С. 3114–3116.
- [5] Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.
- [6] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. // ФТТ. 2007. Т. 4. Вып. 10. С. 1780–1786.

- [7] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. Вып. 18. С. 35–43.
- [8] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
- [9] Рыбин В.В. // Вопросы материаловедения. 2002. Вып. 1 (29). С. 11–33.
- [10] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 9. С. 87–94.
- [11] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. // Вопросы материаловедения. 2007. Вып. 1(49). С. 5–19.