

05

## Формирование оборванных субграниц в упругом поле планарного мезодефекта

© Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев

Нижегородский филиал Института машиноведения  
имени А.А. Благонравова РАН, Нижний Новгород  
E-mail: sarafanov@sinn.ru, pevn@uic.nnov.ru

В окончательной редакции 9 октября 2008 г.

На основе энергетического анализа в рамках дисклинационной модели показано, что планарный мезодефект может инициировать формирование полосы переориентации подобно диполю частичных дисклинаций. Процесс формирования полосы исследован в рамках метода компьютерного моделирования. Показано, что полоса переориентации в упругом поле планарного мезодефекта представляет собой систему оборванных субграниц и имеет кинетическую природу возникновения.

PACS: 62.20.Fc, 61.72.Lk

Экспериментально установлено, что большие пластические деформации приводят к фрагментации кристаллических материалов и формированию микро- и субмикрорекристаллических структур. Установлено [1,2], что в поликристаллах первопричиной этого феномена являются мощные упругие напряжения, источники которых (пластические несовершенности, трактуемые как мезодефекты) возникают на межкристаллитных границах вследствие накопления в них решеточных дислокаций. Дислокации, попавшие на границу, можно формально разделить на дислокации, имеющие тангенциальную составляющую вектора Бюргерса, создающие планарные мезодефекты типа плоского скопления, и дислокации с нормальной составляющей вектора Бюргерса, которые приводят к дополнительной разориентировке границы и вносят вклад в мощность стыковых дисклинаций, возникающих вследствие рассогласования пластических разворотов на изломах и стыках зерен [1].

Указанные мезодефекты, наряду с дисклинационным диполем, который возникает при пластической деформации на двойном изломе границы зерна [3], являются своеобразными „строительными“ блоками

процесса фрагментации. Так, элементарный акт фрагментации в упругом поле стыковой дисклинации заключается в образовании дислокационной стенки некоторой длины (оборванной субграницы) [1,4,5], а в поле дисклинационного диполя — в образовании пары оборванных дислокационных границ разного знака, т.е. формировании полосы переориентации [1, 3].

В настоящей работе рассмотрена возможность формирования полосы переориентации в упругом поле планарного мезодефекта, представляющего собой плоское скопление эквидистантно расположенных дислокаций.

Для дальнейшего анализа необходимо знать упругие поля от рассматриваемого планарного мезодефекта, который, как известно [6], является частным случаем дислокаций Сомилианы.

Рассмотрим симметрично расположенный относительно начала координат мезодефект, состоящий из расположенных вдоль оси  $Oy$  краевых дислокаций и имеющий длину  $L$ . Тогда, согласно [6], для компонент тензора напряжений мезодефекта имеем

$$\sigma_{xx} = D\Omega x \left[ \frac{y+a}{x^2+(y+a)^2} - \frac{y-a}{x^2+(y-a)^2} \right], \quad (1)$$

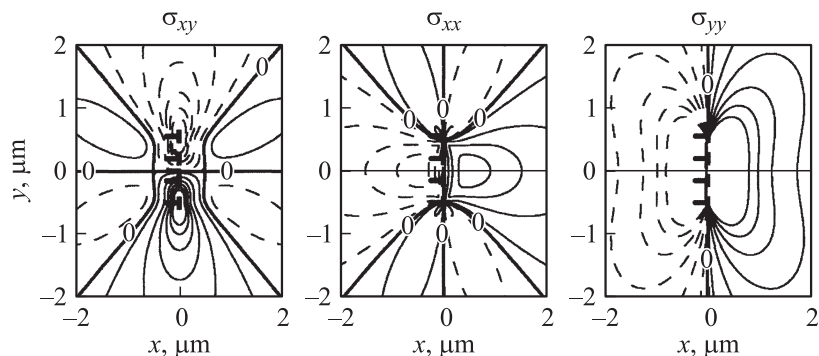
$$\sigma_{yy} = 2D\Omega \left[ \arctg\left(\frac{y+a}{x}\right) - \arctg\left(\frac{y-a}{x}\right) \right] - \sigma_{xx}, \quad (2)$$

$$\sigma_{xy} = D\Omega \left[ \frac{x^2}{x^2+(y-a)^2} - \frac{x^2}{x^2+(y+a)^2} - \frac{1}{2} \ln \frac{x^2+(y+a)^2}{x^2+(y-a)^2} \right], \quad (3)$$

где  $a = L/2$ ,  $\Omega = b/h$  — мощность планарного мезодефекта,  $b$  — модуль вектора Бюргерса,  $h$  — расстояние между дислокациями в плоском скоплении,  $D = G/2\pi(1-\nu)$ ,  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона.

Изолинии компонент этого тензора напряжений для области  $(4 \times 4) \mu\text{m}$  при длине мезодефекта  $2a = 1 \mu\text{m}$  и его мощности  $\Omega = 0.01$  показаны на рис. 1.

Рассматриваемый мезодефект создает большие упругие сдвиговые напряжения, которые могут релаксировать в процессе аккомодационной пластической деформации соседнего зерна либо за счет образования полосы сдвига (при наличии благоприятно расположенных плоскостей скольжения), либо посредством возникновения полосы переориентации.



**Рис. 1.** Поля напряжений от планарного мезодефекта согласно выражениям (1)–(3).

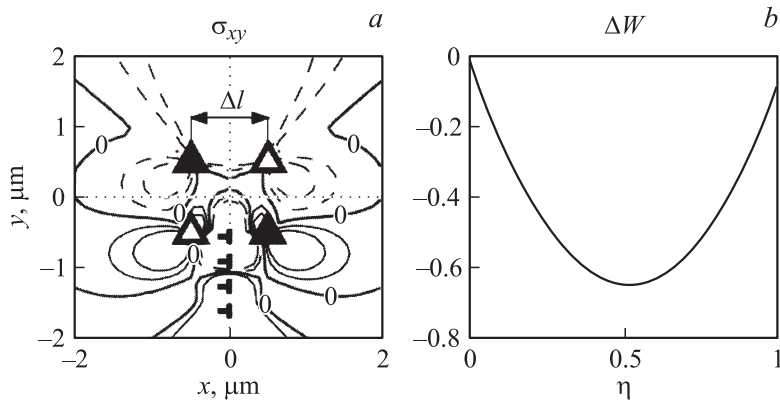
Для последнего случая проведем анализ такой возможности, используя сначала подход теории дисклинаций [3].

Формирование полосы переориентации длины  $l$  и ширины  $\Delta l$  с разориентировкой субграниц  $\theta$  в упругом поле планарного мезодефекта будем рассматривать как формирование симметричного квадрупольа „ $\mp\omega - \pm\omega$ “, частичных клиновых дисклинаций мощности  $\omega = \theta$ , имеющего продольное плечо  $l$  и поперечное —  $\Delta l$  (рис. 2, *a*). (Отметим, что образование квадрупольа клиновых дисклинаций в упругом поле локализованного сдвига рассматривалось в работе [7] в аспекте прохождения сдвига через нанозерно).

Численный анализ изменения упругой энергии системы при добавлении к планарному мезодефекту квадрупольа частичных дисклинаций показал, что энергия системы при определенных параметрах квадрупольа понижается, т.е. становится выгодным процесс формирования полосы переориентации. При этом существует оптимальная величина разориентировки

$$\omega \approx \Omega \frac{L}{2\Delta l}, \quad (4)$$

формируемой полосы при значении варьируемого параметра  $\eta = \omega\Delta l/\Omega L \approx 0.5$  (рис. 2, *b*). Заметим, что ширина полосы  $\Delta l$ , как и ее разориентировка  $\omega$ , здесь являются подстраиваемыми величинами,



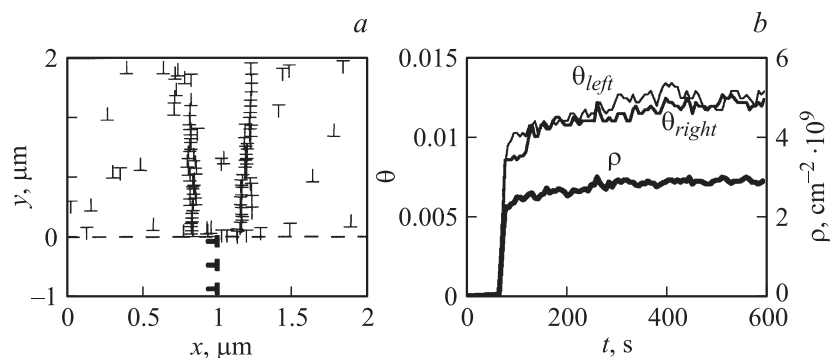
**Рис. 2.** Структура поля напряжений  $\sigma_{xy}$  в виде линий равного уровня (а) для системы — „планарный мезодефект + дисклинационный квадруполь“ и зависимость изменения упругой энергии системы (в единицах  $D\Omega^2 a^2$ ) от значения параметра  $\eta = \omega\Delta l/\Omega L$  (b) при варьировании плеча  $\Delta l$  и заданных величинах  $L = l = 1 \mu\text{m}$ ,  $\Omega = 0.01$ ,  $\omega = 0.005$ .

контролируемыми суммарным вектором Бюргера  $B = \Omega L$  планарного мезодефекта ( $\omega\Delta l = B/2$ ).

Проведенный анализ позволяет энергетически обосновать возможность формирования полосы переориентации в окрестности рассматриваемого мезодефекта, но не дает ответа на то, как происходит эволюция дислокационного ансамбля, приводящая к образованию субграниц. Поэтому дальнейшее рассмотрение было направлено на исследование кинетики этого процесса с использованием метода компьютерного моделирования [4,5].

Моделирование проводилось в области, в дальнейшем называемой зерном ( $d \times d$ ), где  $d = 2 \mu\text{m}$ . Планарный мезодефект располагался так, как это показано на рис. 3, а. Его длина задавалась равной  $L = 1 \mu\text{m}$ , а его мощность  $\Omega = 0.01$ .

Моделирование проводилось для двух случаев. В первом случае процессы генерации и аннигиляции дислокаций отсутствовали. В начальный момент времени дислокации в зерне были распределены равномерно с плотностью  $\rho_0 = 2.5 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ . Затем включалось слабое внешнее поле напряжений  $\sigma_{xy}^e = 0.001D$  и поле напряжений мезодефек-



**Рис. 3.** Дислокационная структура, сформированная в заключительный момент времени (а) в упругом внешнем поле  $\sigma_{xy}^e = 0.001D$  и поле напряжений планарного мезодефекта мощности  $\Omega = 0.01$ , и изменение величины разориентировок субграниц  $\theta$  и плотности дислокаций  $\sigma$  от времени (b).

та  $\sigma_{xy}^{(m)}$ , после чего часть дислокаций под действием суммарного поля  $\sigma_{xy} = \sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^{(m)}$  ушла на внешние границы зерна, плотность дислокаций уменьшилась, а оставшиеся в зерне дислокации приняли равновесную конфигурацию в виде сформированных дислокационных границ разного знака, располагающихся по отношению друг к другу под некоторым углом, т.е. полоса переориентации в этом случае не возникла.

Во втором случае принималась во внимание кинетика дислокаций. Размножение дислокаций в объеме зерна характеризовалось некоторой скоростью  $\dot{N}$  зарождения в плоскости скольжения пар дислокаций противоположного знака, находящихся друг от друга на расстоянии  $x_c = Db/\sigma_c$  (здесь  $\sigma_c$  — пороговое напряжение срабатывания источника типа Франка–Рида [8], ниже которого дислокации генерируемой пары аннигилируют). Координаты дислокационной пары генерировались в исследуемой области случайным образом по закону равномерного распределения. Процесс аннигиляции дислокаций характеризовался радиусом их захвата  $x_a = Db/4\sigma_e$  [8], а сток учитывался как исчезновение дислокаций при достижении ими внешних границ зерна. Эволюция дислокационного ансамбля исследовалась при следующих параметрах:  $\sigma_c = 3 \cdot 10^{-3}L$ ,  $\sigma_e = \sigma_{xy}^e = 10^{-3}D$ ,  $\dot{N} = \dot{N}_+ = \dot{N}_- = 0.1 \text{ s}^{-1}$ ,  $N(0) = 2$  (где  $\dot{N}_+$  и  $\dot{N}_-$  — скорость генерации дислокаций с положи-

тельным и отрицательным направлением вектора Бюргера,  $N(0)$  — начальное число дислокаций). В момент времени  $t_1 = 75$  s включалось упругое поле планарного мезодефекта. Время моделирования составляло  $t \sim 600$  s.

Сформированная дислокационная структура и изменение ее характеристик во времени показаны на рис. 3. В начальный период времени ( $0 < t < t_1$ ), когда действовало лишь слабое внешнее поле  $\sigma_{xy}^e = \sigma_c/3$ , пластическая деформация в зерне отсутствовала. Все генерируемые дислокации аннигилировали в теле зерна. В момент включения поля мезодефекта ( $t = t_1$ ) начался процесс размножения дислокаций (рис. 3, *b*) и формирования субграниц противоположного знака (рис. 3, *a*). Субграницы до момента установления в зерне стационарного состояния ( $t_s \sim 200$  s) имели характер сгущений, а в стационарном состоянии приняли вид оборванной ( $l \sim 2 \mu\text{m}$ ) полосы переориентации, т.е. системы параллельных оборванных субграниц в дипольной конфигурации (рис. 3, *a*). При этом средняя по длине  $l$  разориентировка субграниц оказалась приблизительно равной  $\theta \approx 0.012$  (рис. 3, *b*), расстояние между субграницами  $\Delta l \approx 0.4 \mu\text{m}$ .

Выше в рамках дисклинационной модели была получена оценка для разориентировки субграниц, возникающих в поле напряжений планарного мезодефекта,  $\theta = \Omega L/2\Delta l$ . Если подставить в эту формулу полученное при моделировании значение ширины полосы переориентации  $\Delta l \approx 0.4 \mu\text{m}$  и заданные параметры мезодефекта ( $\Omega = 0.01$ ,  $L = 1 \mu\text{m}$ ), то получим величину

$$\theta = \frac{\Omega L}{2\Delta l} = 0.0125, \quad (5)$$

близкую к значению  $\theta = 0.012$  разориентировки дислокационных границ, полученных при моделировании (рис. 3, *b*).

Таким образом, проведенный анализ указывает на возможность формирования полосы переориентации в упругом поле планарного мезодефекта в условиях развитой кинетики дислокационного ансамбля, что представляется достаточно важным при рассмотрении механизмов фрагментации материала.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 08-02-97041 р\_поволжье\_а) и INTAS (проект № 05-1000008-8120).

## Список литературы

- [1] *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [2] *Rubin V.V.* // Problems of materials science. 2003. N 1(33). P. 9–28.
- [3] *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.
- [4] *Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. В. 9. С. 87–94.
- [5] *Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н.* // Вопросы материаловедения. 2007. № 1(49). С. 5–19.
- [6] *Pertsev N.A., Romanov A.E.* // Mechanics of Composite Materials. 1984. V. 19. N 5. P. 565–570.
- [7] *Калесникова А.Л., Овидько И.А., Романов А.Е.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. В. 15. С. 26–33.
- [8] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с. (*Hirth J.G., Lothe J.* Theory of dislocations. McGraw-Hill, New York, 1970).