07,12

Влияние размера зерен на устойчивость микро- и нанокристаллических металлов к локализации пластической деформации в виде шейки

© Г.А. Малыгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: malygin.ga@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 26 мая 2010 г.
В окончательной редакции 2 июня 2010 г.)

В рамках дислокационно-кинетического подхода теоретически обсуждается дилемма высокая прочность–низкий ресурс пластичности, касающаяся макролокализации пластической деформации в виде формирования на растягиваемом образце „шейки", приводящей к пластическому разрыву образца. На примере микро- и нанокристаллических металлов количественно продемонстрировано, что их низкий ресурс пластичности (малая величина равномерной деформации до начала образования „шейки") и квазиохрупчивание являются результатом сильного роста предела текучести при измельчении зерен и снижения коэффициента деформационного упрочнения вследствие аннигиляции дислокаций в границах и объеме зерен.

1. Введение

Создание высокопрочного состояния металлического материала сопровождается, как правило, снижением его пластичности. Под пластичностью в данном случае понимается запас пластической деформации до момента ее макролокализации в виде шейки и начала наступления пластического разрыва растягиваемого образца или изделия. Величина равномерной деформации до момента возникновения шейки ε_u является важнейшей характеристикой прочности материала и наряду с пределом текучести σ_y и условным пределом прочности σ_u включается во все справочники по механическим свойствам конструкционных материалов.

В последнее время проблема пластического разрушения материала в результате формирования шейки вновь привлекла к себе внимание в связи с созданием высокопрочных нанокристаллических (НК) [1–3] и наноструктурированных (например, методом равноканального углового прессования [4]) металлов и сплавов. Оказалось, что наноматериалы с размером зерен меньше $1\,\mu$m подчиняются общей закономерности и в условиях деформации растяжения разрушаются в результате образования шейки после $2-3\%$ деформации [5,6], что сильно ограничивает их практическое применение.

Эксперименты и их анализ [7–9] показывают, что величина равномерной деформации ε_u очень чувствительна к структурным факторам, вызывающим заметный рост предела текучести материала σ_y. В случае микро- и нанокристаллических материалов таким структурным фактором является размер зерен d, поскольку их измельчение вплоть до 10–15 nm сопровождается непрерывным ростом предела текучести [1–6] в соответствии с соотношением Холла–Петча (ХП) $\sigma_y = K_y d^{-1/2}$, где K_y — коэффициент ХП.

Локализация пластической деформации в виде шейки является результатом нарушения равновесия между напряжением течения σ и коэффициентом деформационного упрочнения $\theta = d\sigma/d\varepsilon$ растягиваемого образца и наступает при выполнении условия $d\sigma/d\varepsilon < \sigma$. При анализе экспериментальных результатов часто зависимость напряжения течения от величины пластической деформации ε аппроксимируют степенным законом $\sigma = \chi\varepsilon^n$, где χ — некоторый неопределенный „коэффициент деформационного упрочнения", $n \leq 1$. После подстановки этого напряжения в условие образования шейки получаем, что равномерная деформация $\varepsilon_u = n$ целиком определяется величиной показателя степени n. Но чем определяется сам этот показатель, остается неизвестным.

Очевидно, что такой чисто феноменологический подход к проблеме тесной связи вопросов прочности и пластичности, как это имеет место при шейкообразовании, не позволяет количественно установить влияние структурных факторов на величину равномерной деформации ε_u. Для этого необходим микроскопический подход, согласно которому напряжение течения кристаллического материала есть результат сопротивления материала перемещению в нем дислокаций, $\sigma = \sigma_0 + \sigma_d(\varepsilon)$. Здесь σ_0 — напряжение торможения дислокаций препятствиями недеформационного происхождения (примеси, преципитаты, радиационные дефекты, границы зерен), а $\sigma_d = m\alpha\mu b\rho^{1/2}$ — напряжение взаимодействия дислокаций друг с другом, определяющее уровень деформационного упрочнения материала, $\rho = \rho(\varepsilon)$ — зависящая от ε плотность дислокаций, α — коэффициент взаимодействия дислокаций, b — вектор Бюргерса, μ — модуль сдвига, m — ориентационный фактор (в случае поликристаллов — фактор Тейлора $m \approx 3$). От структурных факторов в приведенных соотношениях зависят как величина напряжения σ_0, так и напряжение $\sigma_d(\varepsilon)$, поскольку вид зависимости $\rho(\varepsilon)$ существенно определяется структурой материала [2].

Целью настоящей работы является на основе микроскопического дислокационно-кинетического подхода и критерия образования шейки $d\sigma/d\varepsilon < \sigma$ рассмотреть некоторые общие вопросы влияния структурных факторов, в особенности, размера зерен на величину равномерной деформации и прочность металлических материалов. Отдельные частные вопросы этого влияния в рамках дислокационно-кинетического подхода уже ранее рассматривались в [2,7–9].

2. Дилемма: высокая прочность–малый ресурс пластичности

В качестве простого, но достаточно общего случая возникновения дилеммы высокая прочность–низкий ресурс пластичности рассмотрим известное кинетическое уравнение для плотности дислокаций $d\rho/d\gamma = k_f\rho^{1/2} - k_a\rho$. Первый член в его правой части описывает процесс размножения дислокаций на дислокациях леса ($bk_f \approx 10^{-2}$). Он определяет основную (линейную) стадию кривой деформационного упрочнения (ДУ) металла с ГЦК-решеткой. Второй член в правой части этого уравнения определяет третью стадию ДУ, стадию динамического отдыха, вследствие аннигиляции винтовых компонент дислокационных петель механизмом поперечного скольжения ($k_a = 1-10$ — коэффициент аннигиляции [8,10], $\gamma = m\varepsilon$ — деформация сдвига).

Интегрируя приведенное выше кинетическое уравнение для плотности дислокаций, находим зависимость напряжения деформационного упрочнения материала σ_d от величины деформации ε, а также коэффициента деформационного упрочнения θ — от напряжения σ_d

$$\sigma_d(\varepsilon) = \sigma_m\left[1 - \exp(-1/2mk_a\varepsilon)\right], \tag{1}$$

$$\theta = \theta_2(1 - \sigma_d/\sigma_m), \tag{2}$$

здесь $\sigma_m = m\alpha(bk_f/k_a)\mu$ — напряжение в конце третьей стадии ДУ, $\theta_2 = (1/2)m^2\alpha(bk_f)\mu$ — коэффициент деформационного упрочнения на второй (линейной) стадии.

На рис. 1 показано графическое решение условия возникновения шейки $d\sigma/d\varepsilon < \sigma_0 + \sigma_d(\varepsilon)$ в приведенных координатах $\theta/\theta_2 - \sigma_d/\sigma_m$ и $\sigma/\theta_2 - \sigma_d/\sigma_m$. Кривая *1* на этом рисунке иллюстрирует зависимость коэффициента θ от величины напряжения σ_d согласно соотношению (2), а кривые *2–5* — зависимость напряжения течения $\sigma = \sigma_0 + \sigma_d$ от σ_d при разной величине начального сопротивления материала пластической деформации σ_0 при $k_a = 2$, $\theta_2/\sigma_m = (1/2)mk_a = 3$. Кружки отмечают места пересечения указанных зависимостей, соответствующие выполнению критерия шейкообразования. Они наглядно демонстрируют то, что чем больше начальное сопротивление материала пластической деформации σ_0,[1] тем при все меньшей величине напряжения $\sigma_d(\varepsilon)$, а следовательно, и величине деформации ε начинает формироваться шейка.

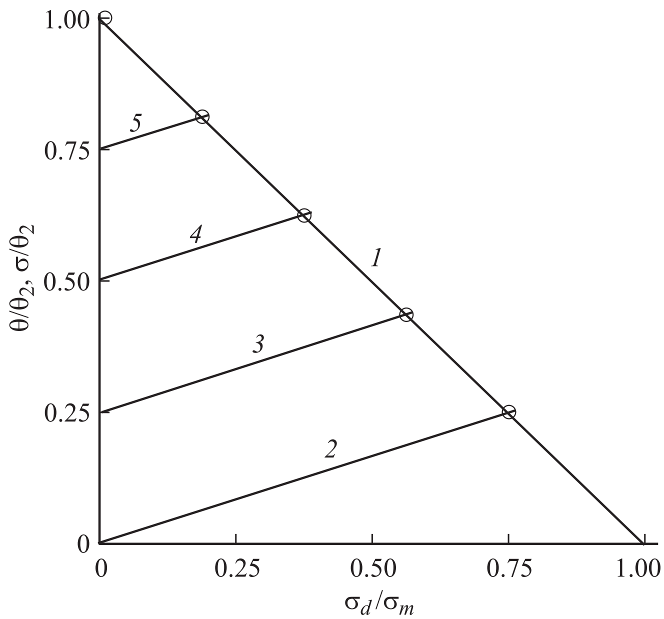

Рис. 1. Графическое решение условия шейкообразования $\theta(\varepsilon) = \sigma_0 + \sigma_d(\varepsilon)$ согласно соотношениям (1) и (2) (кривая *1*) при значениях приведенного напряжения $\sigma_0/\theta_2 = 0$ (*2*), 0.25 (*3*), 0.5 (*4*), 0.75 (*5*). Кружки соответствуют выполнению критерия шейкообразования.

Из приведенного на рис. 1 графического решения условия образования шейки следует, что запас пластичности материала (величина деформации ε_u) не зависит от того, чем обусловлен высокий уровень начального, при $\varepsilon = 0$, сопротивления материала пластической деформации σ_0. Это непосредственно видно из аналитического решения условия возникновения шейки. Принимая во внимание соотношения (1) и (2), получаем следующие зависимости деформации ε_u и предела прочности $\sigma_u = \sigma_0 + \sigma_d(\varepsilon_u)$ от напряжения σ_0:

$$\varepsilon_u = \frac{2}{mk_a}\ln\frac{1 + (1/2)mk_a}{1 + (1/2)mk_a(\sigma_0/\theta_2)}, \tag{3}$$

$$\sigma_u = \frac{\theta_2}{1 + (1/2)mk_a}\left[1 + (1/2)mk_a(\sigma_0/\theta_2)\right]. \tag{4}$$

Согласно им, существует критическое значение $\sigma_0 = \theta_2$, при котором величина равномерной деформации обращается в нуль, а условный предел прочности достигает предельного значения $\sigma_u = \sigma_0 = \theta_2 \approx (1-1.5)\cdot 10^{-2}\mu$ [9] независимо от того, чем обусловлено достижение критического значения σ_0.

В другом крайнем случае при $\sigma_0 = 0$ из соотношений (3) и (4) следует, что величина равномерной деформации и предел прочности контролируются только величиной коэффициента аннигиляции винтовых дислокаций k_a, т.е. исключительно механизмом динамическо-

[1] На практике начальное сопротивление пластической деформации часто определяют в виде условного предела текучести $\sigma_y = \sigma_{0.2}$, где $\sigma_{0.2}$ — напряжение, соответствующее величине пластической деформации $\varepsilon = 0.2\%$.

го отдыха

$$\varepsilon_u = \frac{2}{mk_a} \ln\bigl(1 + (1/2)mk_a\bigr), \tag{5}$$

$$\sigma_u = \frac{\theta_2}{1 + (1/2)mk_a}. \tag{6}$$

Из соотношений (5) и (6) видно, что чем больше коэффициент аннигиляции дислокаций, тем меньше оказываются эти важнейшие характеристики прочности. На коэффициент аннигиляции винтовых дислокаций существенное влияние оказыват величина энергии дефектов упаковки [7,10], а в случае металлов с ОЦК-решеткой — величина напряжения Пайерлса [8].

В качестве еще одного примера рассмотрим, как влияет размер зерен d на результаты графического и аналитического решения условия шейкообразования. Для этого учтем, что по мере измельчения зерен в соответствии с механизмом Ли [11] увеличивается доля дислокаций $\rho_0 = \beta_0/db$, генерируемых из границ зерен на начальной стадии деформации. Для напряжения течения в этом случае имеем соотношение [2]

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_0 \exp\Bigl(-\frac{1}{2}\, mk_a\varepsilon\Bigr) + \sigma_m\Bigl(1 - \exp\Bigl(-\frac{1}{2}\, mk_a\varepsilon\Bigr)\Bigr), \tag{7}$$

где $\sigma_0 = m\alpha\mu b\rho_0^{1/2}$, $\beta_0 \approx 10^{-3}–10^{-1}$ — параметр, зависящий от плотности источников дислокаций в границах зерен, σ_m — как и в уравнении (1), напряжение в конце третьей стадии ДУ. В результате вместо уравнений (1) и (2) получаем соотношения

$$\sigma_d(\varepsilon) = (\sigma_m - \sigma_0)[1 - \exp(-1/2mk_a\varepsilon)], \tag{8}$$

$$\theta = \theta_2(1 - \sigma_0/\sigma_m - \sigma_d/\sigma_m). \tag{9}$$

При $\sigma_0 = 0$ они переходят в уравнения (1) и (2).

На рис. 2 приведены результаты графического решения критерия образования шейки согласно соотношениям (8) и (9) в тех же относительных координатах, что и на рис. 1, при значении параметра $mk_a = 6$. Видно, что с уменьшением размера зерен и ростом напряжения $\sigma_0 = K_0 d^{-1/2}$, где $K_0 = m\alpha\mu(\beta_0 b)^{1/2}$, напряжение σ_d и деформация ε_u существенно уменьшаются в соответствии с соотношением ХП. В отличие от предыдущего примера величина предела прочности σ_u остается постоянной, не зависящей от напряжения σ_0. При аналитическом решении условия шейкообразования получаем в этом случае следующие выражения для деформации ε_u и напряжения σ_u:

$$\varepsilon_u = \frac{2}{mk_a}\Bigl[\ln\bigl(1 + (1/2)mk_a\bigr) + \ln\bigl(1 - (1/2)mk_a(\sigma_0/\theta_2)\bigr)\Bigr], \tag{10}$$

$$\sigma_u = \frac{\theta_2}{1 + (1/2)mk_a}. \tag{11}$$

Из соотношения (10) следует, что деформация ε_u обращается в нуль при напряжении $\sigma_0 = \sigma_u$, определяемом формулой (11). В качестве иллюстрации соответствия теории и эксперимента на рис. 3 приведены зависимости величины равномерной деформации ε_u от размера зерен d в Al 99.3% [6] и аустенитной стали [12]. Кривые *1* и *2* на этом рисунке иллюстрируют теоретические зависимости $\varepsilon_u(d)$ согласно соотношению (10), которое,

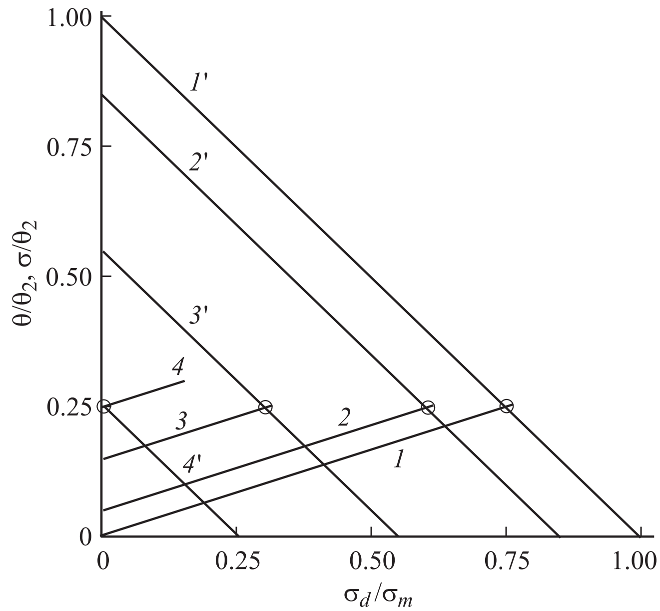

Рис. 2. Графическое решение условия шейкообразования согласно соотношениям (7)–(9) при значениях приведенного напряжения $\sigma_0/\sigma_m = 0$ (*1*), 0.05 (*2*), 0.15 (*3*), 0.25 (*4*). Кривые *1–4* — напряжение σ, *1′–4′* — коэффициент θ.

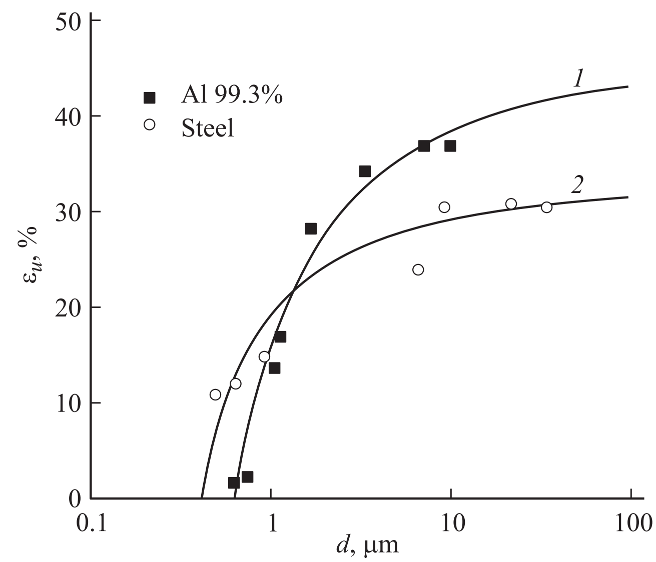

Рис. 3. Зависимость величины равномерной деформации ε_u от размера зерен в микрокристаллических образцах Al 99.3% [6] и аустенитной стали [12]. Кривые *1, 2* — расчет согласно уравнению (12).

Значения параметров при расчете кривых *1* и *2* на рис. 3 согласно формуле (12)

Параметр	Кривая *1*	Кривая *2*
β_0	$2.8 \cdot 10^{-2}$	$7 \cdot 10^{-3}$
k_a	2.0	4.0
d_a, μm	0.35	0.3
d_0, μm	0.6	0.4

используя приведенные выше обозначения, можно записать также в виде

$$\varepsilon_u = \frac{2}{mk_a}\left[\ln\bigl(1 + (1/2)mk_a\bigr) + \ln\bigl(1 - (d_a/d)^{1/2}\bigr)\right], \quad (12)$$

где $d_a = \beta_0(k_a/bk_f)^2 b$. Кривые построены согласно уравнению (12) при значениях параметров, указанных в таблице, где $d_0 = (1 + 2/mk_a)^2 d_a$ — критический размер зерен, когда деформация ε_u обращается в нуль.

3. Квазиохрупчивание нанокристаллических материалов

Приведенные в предыдущем резделе экспериментальные и теоретические результаты (рис. 2 и 3) относились к влиянию на величину равномерной деформации величины зерен в диапазоне от 1 до 10 μm. Как видно из приведенных на рис. 3 данных, уменьшение размера зерен ниже 1 μm приводит к пластическому разрыву растягиваемых образцов после 1–2% деформации, т. е. имеет место явление квазиохрупчивания пластичных во всех других отношениях материалов. Тенденция квазиохрупчивания сохраняется и усиливается и при переходе в нанодиапазон размеров зерен. На рис. 4, *a* приведены результаты обработки экспериментальных данных [13] для нанокристаллического цинка (рис. 4, *b*), иллюстрирующие это обстоятельство. Видно, что уменьшение размера зерен в НК-цинке с 238 до 23 nm сопровождается снижением величины равномерной деформации с 50% практически до нуля.

Определяющую роль в пластической деформации НК-металлов играют границы зерен, являющиеся источниками, барьерами и стоками для дислокаций. Согласно [2], эти процессы достаточно хорошо учитывает следующее уравнение для напряжения течения наноматериала:

$$\sigma(\varepsilon) = m\alpha\mu\left(\frac{b}{d}\right)^{1/2} \times \left[\beta_0 \exp(-mk_b\varepsilon) + \frac{\beta}{k_b}\left[1 - \exp(-mk_b\varepsilon)\right]\right]^{1/2}. \quad (13)$$

Здесь коэффициенты β_0 и $\beta = 1$ определяют эффективность границ зерен как источников и барьеров для дислокаций, параметр $k_b = (d_b/d)^2$ — скорость аннигиляции дислокаций в границах, $d_b = (4\eta_b D_{gb}/m\dot{\varepsilon})^{1/2}$ —

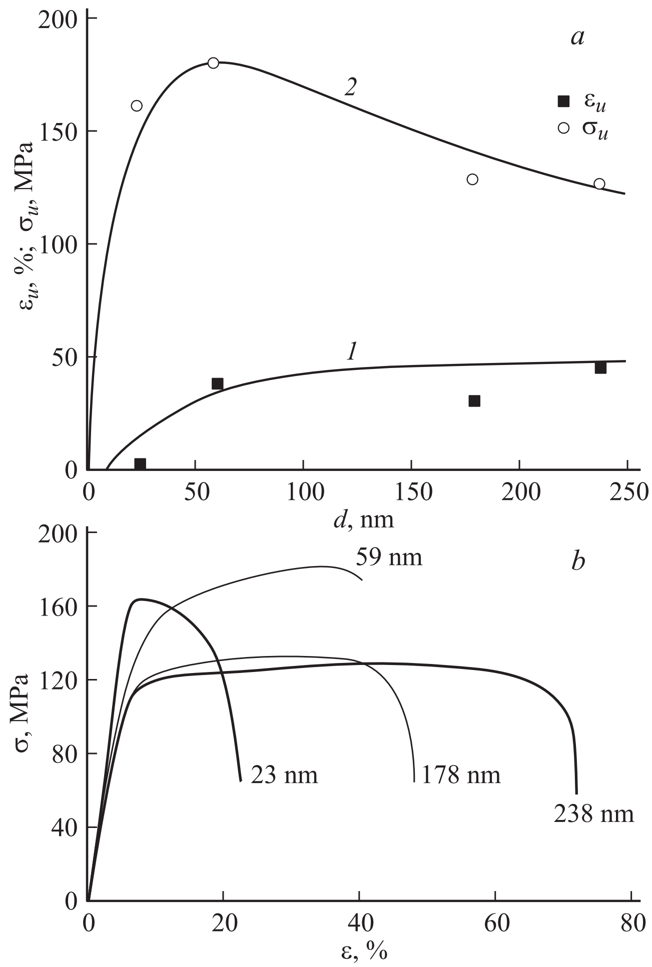

Рис. 4. Зависимость величины равномерной деформации ε_u и предела прочности σ_u нанокристаллического цинка от размера нанозерна (*a*) согласно данным [13] (числа около кривых — размер нанозерен) (*b*). Кривые *1* и *2* на части *a* — расчет деформации ε_u и напряжения σ_u согласно соотношениям (16) и (17).

характерный размер зерна, когда аннигиляция начинает влиять на напряжение течения, $D_{gb}(T)$ — коэффициент зернограничной диффузии, T — температура, $\dot{\varepsilon}$ — скорость деформации, $\eta_b \approx \mu b^3/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана.

На рис. 5 приведены результаты графического решения условия образования шейки для напряжения (13) в координатах $\sigma/\sigma_b - \sigma_d/\sigma_b$ и $\theta/\sigma_b - \sigma_d/\sigma_b$, где

$$\sigma_d(\varepsilon) = \sigma(\varepsilon) - \sigma_0, \quad \sigma_0 = \left(\frac{\beta_0}{\beta}\right)k_b^{1/4}\sigma_b,$$

$$\sigma_b = m\alpha\mu\left(\frac{\beta b}{d_b}\right)^{1/2}, \quad (14)$$

$$\theta = \frac{1}{2}m\left(\frac{\beta}{\beta_0}\right)\frac{\sigma_0^2}{\sigma_d + \sigma_0}\left[1 - \left(\frac{\beta}{\beta_0}\right)\left(\frac{\sigma_0}{\sigma_b}\right)^2\left(\frac{\sigma_d}{\sigma_b} + \frac{\sigma_0}{\sigma_b}\right)^2\right]. \quad (15)$$

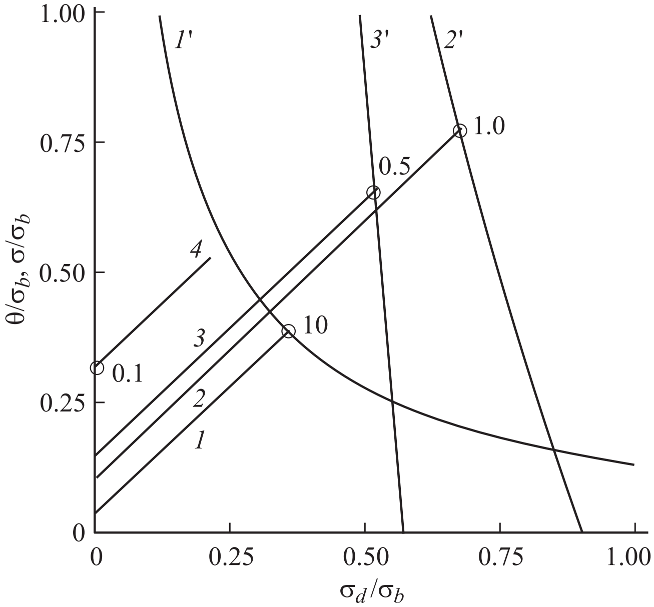

Рис. 5. Графическое решение условия шейкообразования согласно соотношениям и обозначениям (13)–(15) при различных значениях предела текучести $\sigma_0/\sigma_b = (\beta/\beta_0)(d_b/d)^{1/2}$. Прямые *1–4* — σ, *1′–3′* — θ. Числа около кружков — относительные размеры зерен d/d_b.

Числами около точек выполнения критерия шейкообразования (кружки) обозначены относительные значения размеров нанозерен d/d_b, определяющие согласно соотношениям (14) и обозначениям (13) безразмерную величину предела текучести $\sigma_0/\sigma_b = (\beta/\beta_0)(d_b/d)^{1/2}$. Видно, что с уменьшением их размера предел прочности σ_u вначале растет, но при $d/d_b < 1$ начинает снижаться из-за аннигиляции дислокаций в границах зерен. Это приводит к снижению величины равномерной деформации ε_u вплоть до нуля. Кривые *1* и *2* на рис. 4, *a* демонстрируют результаты аналитического решения критерия образования шейки для напряжения (13) при $\beta_0/\beta = 2 \cdot 10^{-2}$, $d_b = 50\,\text{nm}$, $\sigma_b = 230\,\text{MPa}$

$$\varepsilon_u = \frac{1}{mk_b}\Big[\ln\big(1 + (1/2)mk_b\big) + \ln\big(1 - (\beta_0/\beta)k_b\big)\Big], \quad (16)$$

$$\sigma_u = \sigma_b\left(\frac{mk_b^{1/2}}{2 + mk_b}\right)^{1/2}, \quad (17)$$

где $k_b = (d_b/d)^2$. Равномерная деформация обращается в нуль при критическом размере нанозерен

$$d_0 = \left(\frac{\beta_0/\beta}{1 - 2\beta_0/m\beta}\right)^{1/2} d_b \approx \left(\frac{\beta_0}{\beta}\right)^{1/2} d_b. \quad (18)$$

Из рис. 4, *a* видно, что имеется достаточно удовлетворительное соответствие теории и эксперимента.

Таким образом, проведенный с дислокационно-кинетических позиций анализ проблемы макролокализации деформации в виде шейки показывает, что известная дилемма высокая прочность–низкий ресурс пластичности имеет фундаментальный характер. Любые структурные факторы, повышающие предел текучести материала и понижающие его способность к деформационному упрочнению, способствуют пластическому разрушению материала на все более ранней стадии его пластической деформации растяжения. Присущий микро- и нанокристаллическим материалам низкий ресурс пластичности обусловлен сильным ростом у них предела текучести в соответствии с соотношением Холла–Петча и снижением коэффициента деформационного упрочнения вследствие аннигиляции дислокаций в объеме и границах зерен.

Список литературы

[1] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson. Progr. Mater. Sci. **51**, 427 (2006).
[2] Г.А. Малыгин. ФТТ **49**, 961 (2007).
[3] Р.А. Андриевский, А.М. Глезер. УФН **179**, 137 (2009).
[4] R.Z. Valiev, R.K. Islamgaliev, I.V. Alexandrov. Prog. Mater. Sci. **45** 103 (2000).
[5] Y. Wang, M. Chen, F. Zhou, E. Ma. Nature **419**, 912 (2002).
[6] N. Tsuji, Y. Ito, Y. Minamino. Scripta Mater. **47**, 893 (2002).
[7] Г.А. Малыгин. ФТТ **47**, 236 (2005).
[8] Г.А. Малыгин. ФТТ **47**, 870 (2005).
[9] Г.А. Малыгин. ФТТ **48**, 1622 (2006).
[10] Г.А. Малыгин. ФТТ **37**, 3 (1995).
[11] J.M.C. Li, T. Chou. Metal. Trans. **1**, 1143 (1970).
[12] Б. Моррисон, Р. Миллер. Сверхмелкое зерно в металлах. Металлургия, М. (1973). С. 181.
[13] X. Zhang, H. Wang, R.O. Scattergood, J. Narayan, C.C. Koch. Acta Mater. **50**, 3995 (2002).