

05

Механизм образования зародышей новых зерен при релаксации латентной энергии стыковых дисклинаций в ходе пластической деформации

© Т.С. Орлова, А.Е. Романов, А.А. Назаров,
Н.А. Еникеев, И.В. Александров, Р.З. Валиев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

E-mail: aer@mail.ioffe.ru

Уфимский государственный авиационный технический университет

E-mail: AANazarov@mail.rb.ru

Поступило в Редакцию 25 июля 2005 г.

Рассмотрена модель формирования зародыша нового зерна на одной из границ пробного зерна при релаксации латентной энергии стыковых дисклинаций, возникающих в ходе пластической деформации. Показана энергетическая выгодность такого зародышеобразования. Получены зависимости равновесного размера зародыша нового зерна и его равновесной разориентации от формы зародыша.

В настоящее время надежно установлено, что большие и интенсивные пластические деформации приводят к фрагментации зерен в кристаллических твердых телах [1] и формированию нано- и субмикроструктур [2]. Особенно перспективным для измельчения зерен представляется использование метода равноканального углового прессования (РКУП) [3], при котором удается получить материалы с размером зерен вплоть до 100 nm при сохранении внешней формы образцов [2,4]. Достижение нанокристаллической структуры в твердых телах важно для практики, поскольку физико-механические свойства наноматериалов демонстрируют измененные и во многих случаях улучшенные характеристики [2,4,5].

В настоящем сообщении предлагается дисклинационная модель образования зародышей новых зерен при интенсивной пластической деформации. Рассматриваемая модель раскрывает энергетическую выгодность появления новых, более мелких зерен в теле поликри-

сталлического материала, подверженного неоднородной пластической деформации.

В ходе пластической деформации различные зерна деформируются неодинаково, что приводит к накоплению дефектов (дислокаций) на границах зерен. Эти дислокации, ответственные за поддержание сплошности материала (т.е. выполнение условий совместности деформации), являются мощными источниками внутренних механических напряжений и латентной энергии пластической деформации. Как было впервые показано в работах В.В. Рыбина с соавторами [6,7], захваченные границами зерен дислокации скольжения формируют сеть эквивалентных дисклинационных дефектов, расположенных в тройных стыках зерен. В результате запасенная в материале (латентная) упругая энергия может быть ассоциирована с мезодефектами — со стыковыми дисклинациями. В последующем в ходе различных релаксационных процессов латентная энергия уменьшается, обеспечивая возможность структурных перестроек поликристаллического материала [1]. Наиболее важным, с точки зрения формирования нанокристаллической структуры, механизмом является перераспределение сдвига в зернах, в результате которого возникают новые границы разориентации. В последнее время эти представления были привлечены для анализа энергетических условий измельчения зеренной структуры и достижения в конечном итоге нанокристаллической структуры [8,9].

Рассмотрим пробное зерно с прямоугольным сечением (для упрощения рассматривается плоская задача, рис. 1). Из-за неоднородности пластической деформации в стыках пробного зерна образуются клиновые дисклинации, в общем случае имеющие различные мощности ω , $-g\omega$, $k\omega$, $-q\omega$. Пусть ω будет максимальной из рассматриваемых мощностей, т.е. $0 \leq g, q, k \leq 1$. Зарождение нового зерна и его развитие происходят путем возникновения полосы разориентации в местах возможных концентраторов напряжений на границе рассматриваемого зерна и последующего распространения этой полосы вовнутрь зерна. Рассмотрим зародыш нового зерна также в виде прямоугольника с размерами $2l$ и $2d$ соответственно. Аналогично исходному зерну данный зародыш может быть описан как новый дисклинационный квадруполь с плечами $2l$ и $2d$ и мощностью $\pm\omega_x$.

О возможности измельчения зерен при образовании подобных зародышей можно судить по энергетической выгоды формирую-

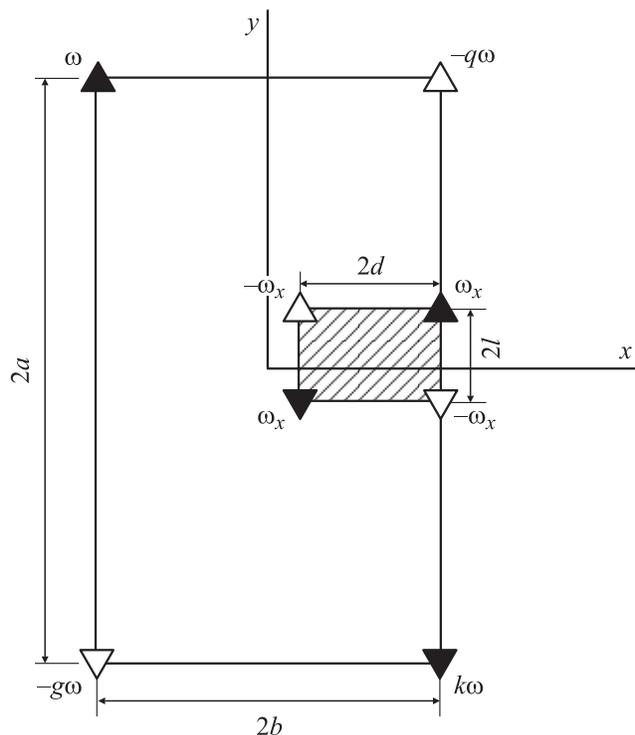


Рис. 1. Схема формирования зародыша нового зерна на одной из границ исходного пробного зерна. q, g, k — параметры, характеризующие асимметрию квадрупольной дисклинационной конфигурации исходного зерна.

щейся новой дисклинационной конфигурации, т.е. путем сравнения энергии системы до и после разделения зерна. Если предложенный процесс будет приводить к уменьшению энергии рассмотренной системы (пробного зерна или сформировавшейся группы зерен), то он может осуществляться в результате пластической деформации поликристалла.

Разность энергий зерна ΔE до и после появления зародыша складывается из следующих составляющих: (1) энергии вновь образовавшегося квадруполья; (2) энергии взаимодействия последнего с дисклинациями

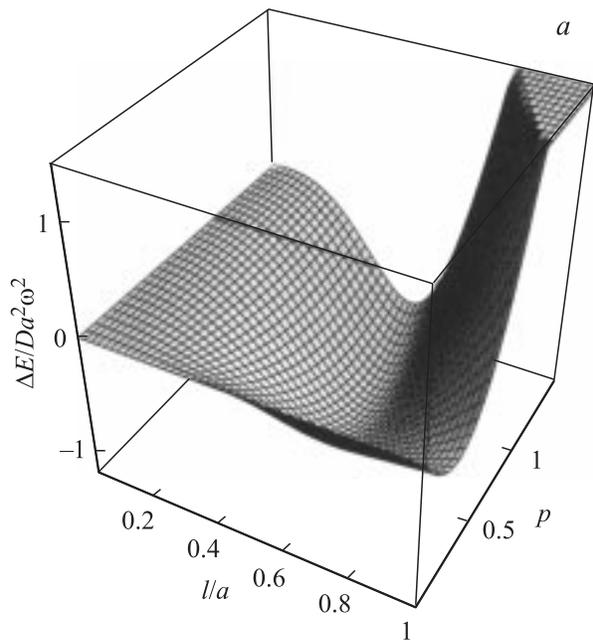


Рис. 2. Изменение энергии пробного зерна при его делении за счет формирования зародыша нового зерна у одной из его границ. $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона. *a* — общая зависимость ΔE от размера этого зародыша l/a и параметра $p = \frac{\omega_x}{\omega}$ для $b = a = 1 \mu\text{m}$, $d/l = 2$, $q = 0.1$, $g = k = 1$; *b* — частный случай зависимости ΔE от размера зародыша l/a для различных значений параметра $p = \frac{\omega_x}{\omega}$. $b = a = 1 \mu\text{m}$, $d/l = 2$, $q = 0.1$, $g = k = 1$.

в вершинах исходного рассматриваемого зерна, подвергающегося делению; (3) суммарной поверхностной энергии образовавшихся границ разориентации. Составляющие 1–3 разности энергий ΔE до и после разделения зерна определялись аналогично [9]. Будем считать, что зарождение нового зерна может происходить, когда хотя бы одна из дисклиний в вершинах рассматриваемого исходного зерна достигнет критической мощности, равной $\Omega_c = 1^\circ$. Выбранный таким образом критерий релаксации дисклинационных напряжений находится

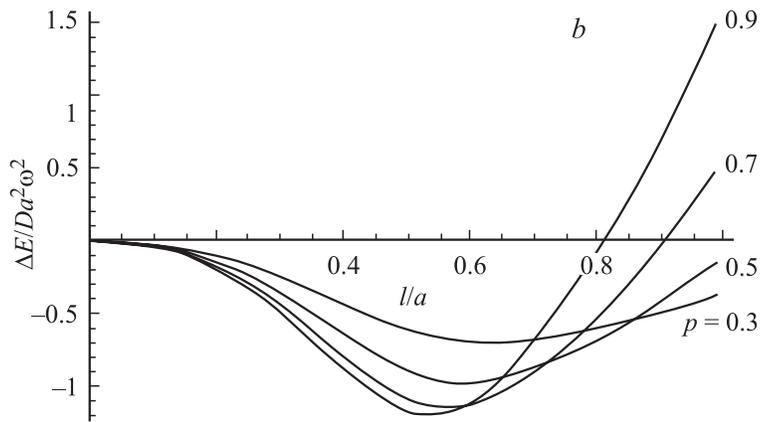


Рис. 2 (продолжение).

в соответствии с теоретическими оценками и экспериментальными результатами, полученными ранее в [1,10]. Поскольку в нашей модели ω является максимальной мощностью в исходной несимметричной квадрупольной конфигурации, то формирование зародыша нового зерна будет происходить при $\omega = 1^\circ$.

На рис. 2 показана зависимость разности энергий зерна до и после образования зародыша от размера l зародыша нового зерна и его относительной разориентации $p = \omega_x/\omega$. Очевидно, что формирование зародыша нового зерна энергетически выгодно. При этом может одновременно достигаться минимум энергии сразу по двум параметрам p и l , т.е. может формироваться зародыш равновесного размера l_{eq} и равновесной мощности p_{eq} .

Введем параметр, характеризующий суммарную симметрию исходного дисклинационного квадруполья, расположенного в вершинах рассматриваемого зерна, определенный как $\lambda = 1 + g + q + k$ (рис. 1). Анализ зависимости ΔE от параметра симметрии λ показывает, что при увеличении степени симметрии исходного квадруполья выигрыш в энергии при расщеплении зерна (появлении зародыша) увеличивается, т.е. легче будут делиться зерна, у которых мощности дисклинаций в его вершинах различаются незначительно. При этом как выигрыш в энергии, так и размер равновесного зародыша зависят не только

от величины параметра λ , но и от соотношения мощностей g , k , q отдельных дисклинаций, расположенных в вершинах рассматриваемого зерна.

Анализ зависимости ΔE от параметров p и l показывает, что в случае зарождения полосы разориентации на большей стороне рассматриваемого зерна (т.е. в случае $a \geq b$) возможно формирование зародыша, имеющего равновесные значения одновременно двух параметров: размера зародыша нового зерна и угла его разориентации относительно исходного зерна, в то время как в случае $a < b$ равновесные значения этих параметров не могут быть одновременно достигнуты для принятых значений параметров модели.

Для $a \geq b$ рассмотрим влияние формы зародыша нового зерна на равновесные значения p_{eq} и l_{eq} , а также на соответствующий им выигрыш в энергии ΔE_{\min} . Рис. 3 показывает зависимости равновесного размера формирующегося зародыша нового зерна, его равновесной разориентации и выигрыша в энергии при таком делении зерна от формы этого зародыша, т.е. от соотношения его сторон d/l на примере исходного равноосного зерна с размерами $a = b = 1 \mu\text{m}$. Следует отметить, что равновесный зародыш одновременно по двум параметрам p и l может формироваться только для случая $d/l \geq 1$, тогда как для $d/l < 1$ равновесные значения этих параметров не могут быть одновременно получены в рамках рассматриваемой модели.

Видно, что выигрыш в энергии при формировании нового зерна максимальный, когда его форма подобна форме пробного зерна, т.е. при $d/l \approx b/a = 1$. Данное свойство остается справедливым для любых значений a и b , удовлетворяющих условию $b \leq a$.

Представляется интересным сравнить изменение энергии пробного зерна для двух случаев: формирование зародыша происходит на длинной ($a \geq b$) или короткой стороне ($a < b$) пробного зерна. Оказывается, разница в выигрыше энергии для этих двух случаев незначительна. Анализ зависимости ΔE от исходного размера зерна показывает, что данная модель предсказывает возможность деления зерен при любом размере исходного зерна. Однако выигрыш в энергии ΔE уменьшается по мере измельчения исходной структуры, так как при этом возрастает относительная роль энергии вновь образующихся границ. Отметим, что в рассмотренной нами модели вклад работы внешних напряжений в энергетический баланс при появлении зародыша нового зерна не учитывается. Однако при последующем развитии зародыша

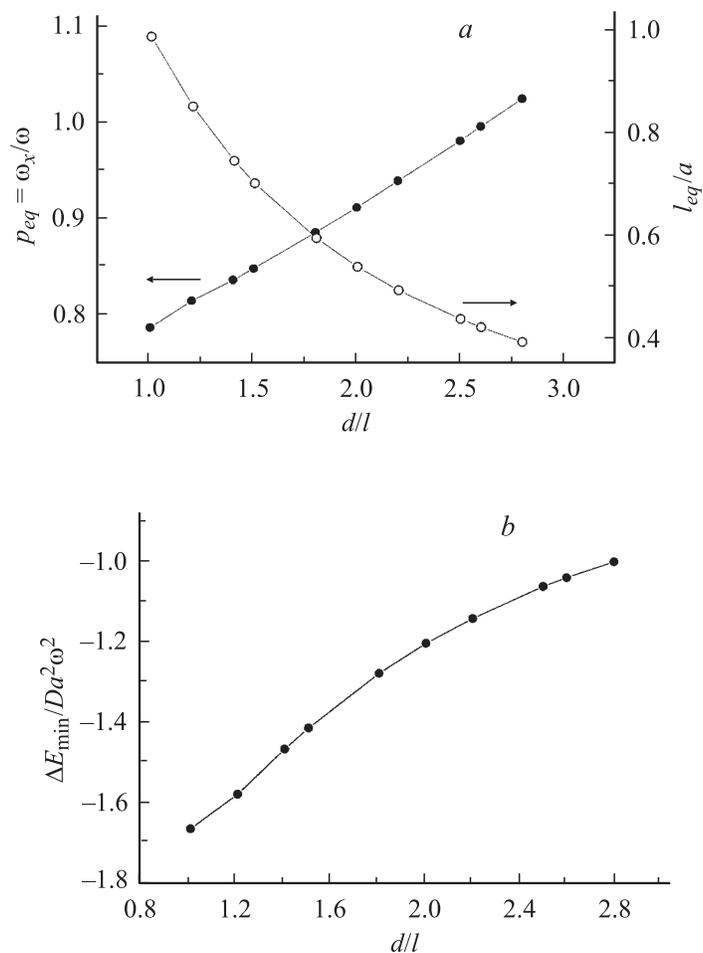


Рис. 3. Равновесные характеристики зародыша нового зерна: *a* — зависимости равновесного размера формирующегося зародыша нового зерна и его равновесной разориентации от формы этого зародыша, т.е. от соотношения его сторон; *b* — зависимость разностной энергии ΔE_{min} между нерасщепленным зерном и зерном со сформировавшимся зародышем, равновесным по размеру и разориентации, от формы зародыша. $a = b = 1 \mu\text{m}$, $g = k = 1$, $q = 0.1$.

и соответствующем росте границ деформационного происхождения вклад внешних напряжений может быть учтен. Это может быть сделано в рамках модели развития полос переориентации, рассмотренной в [11].

Таким образом, предложена модель формирования зародыша нового зерна на одной из границ рассматриваемого пробного зерна в результате релаксации запасенной энергии пластической деформации. Показано, что зарождение нового зерна внутри пробного зерна является энергетически выгодным для любого размера исходного зерна, хотя выигрыш в энергии от такого деления зерна уменьшается в процессе измельчения поликристаллической структуры. Выигрыш в энергии зависит от исходной дисклинационной конфигурации, формирующейся в вершинах пробного зерна при пластической деформации. Оказалось, что этот выигрыш максимален для случая симметричной исходной квадрупольной конфигурации. Показано, что формирование зародыша равновесного размера и с равновесной разориентировкой возможно только в случае его зарождения на длинной стороне исходного зерна, т.е. для $a \geq b$. В этом случае выигрыш в энергии при формировании нового зерна максимален, когда его форма подобна форме пробного зерна, т.е. для $d/l \approx b/a$.

Список литературы

- [1] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. С. 224.
- [2] Валиев Р.З., Александров И.В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. М: Логос, 2000. С. 272.
- [3] Сегал В.М., Резников В.И., Копылов В.И., Павлик Д.А. Процессы пластического структурообразования металлов. Минск: Навука і тэхніка, 1994. С. 232.
- [4] Валиев Р.З. // Металлы. 2004. № 1. С. 15–22.
- [5] Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. // Prog. Mater. Sci. 2000. V. 45. С. 103–189.
- [6] Рыбин В.В., Зисман А.А., Золоторевский Н.Ю. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 1. С. 181–186.
- [7] Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. // Acta Metall. Mater. 1993. V. 41. P. 2211–2217.

- [8] *Romanov A.E., Orlova T.S., Enikeev N.A., Nazarov A.A., Alexandrov I.V., Valiev R.Z.* // *Ultrafine Grained Materials III* / Ed. Y.T. Zhu, T.G. Langdon, R.Z. Valiev, S.L. Semiatin, D.H. Shin, T.C. Lowe. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society). 2004. P. 211–216.
- [9] *Орлова Т.С., Назаров А.А., Еникеев Н.А., Александров И.В., Валиев Р.З., Романов А.Е.* // *ФТТ*. 2005. Т. 47. В. 5. С. 820–826.
- [10] *Рыбин В.В.* // *Вопросы материаловедения*. 2002. Т. 29. № 1. С. 11–17.
- [11] *Gutkin M.Yu., Mikaelyan K.N., Romanov A.E., Klimanek P.* // *Phys. Stat. Sol. (a)*. 2002. V. 193. N 1. P. 35–52.