

## Динамика формирования малоугловых границ наклона в металлах и сплавах при высоких скоростях нагружения

© М.Ю. Гуткин<sup>1-3</sup>, Е.А. Ржавцев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем машиноведения РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет  
информационных технологий, механики и оптики, (Университет ИТМО)  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: m.y.gutkin@gmail.com, egor.rzhavtsev@gmail.com

(Поступила в Редакцию 19 мая 2015 г.)

Разработана компьютерная модель, в которой с помощью метода двумерной дискретной дислокационно-дисклинационной динамики наглядно демонстрируется процесс формирования малоугловых границ наклона и фрагментации исходных субзерен при ударном нагружении металлов и сплавов. Образование и эволюция таких границ происходит под действием внешнего напряжения и поля напряжений зернограницных дисклинаций, распределенных на границах субзерна. На примере алюминиевого сплава Д16 рассмотрены три случая формирования фрагментированной структуры в зависимости от начальной конфигурации дисклинационного ансамбля: для диполя, квадруполь и произвольного октуполя клиновых дисклинаций. Показано, что во всех этих случаях для образования устойчивой фрагментированной структуры потребовалось напряжение  $\sim 0.5$  GPa и время 10 ns. Основные результаты компьютерного моделирования (конечный вид фрагментированной структуры, характерный уровень приложенного напряжения и малое время фрагментации) хорошо согласуются с известными результатами экспериментов по ударному сжатию алюминиевого сплава Д16.

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и Университета ИТМО.

### 1. Введение

Изучение эволюции микроструктуры металлов и сплавов в процессе пластической деформации является одной из фундаментальных задач физики прочности и пластичности. Большое внимание при этом уделяется теоретическому описанию механизмов и закономерностей формирования различных неоднородных дислокационных структур при пластическом течении материалов. Это стало особенно актуальным сегодня, когда огромные усилия тратятся на решение проблемы получения поликристаллических металлов и сплавов с ультрамелким зерном, поскольку такие материалы отличаются уникальными прочностными свойствами (см., например, обзоры [1–6] и монографии [7–9]). Хотя в последние годы разработано много разных способов создания таких материалов [10], наиболее перспективными из них представляются методы измельчения зеренной структуры путем интенсивной пластической деформации. Основное преимущество этих методов заключается в возможности получения крупноразмерных образцов и заготовок, испытывающих большие пластические деформации без разрушения, что ведет к формированию в них однородной ультрамелкозернистой (УМЗ) или даже нанокристаллической (НК) структуры с преимущественно большеугловыми границами зерен [1].

Одним из методов интенсивной пластической деформации, ведущей к деформационному измельчению зерна, является ударное сжатие металлов и сплавов. Так, образование УМЗ- и НК-структуры в полосах сдвига наблюдалось при ударном сжатии образцов чистого титана и сплава Ti–6 wt.% Al–4 wt.% V [11–13], меди, тантала и сплава Al–Ni [14,15]. Недавно было показано, что при определенных условиях ударного нагружения УМЗ структура наблюдается также в полосах сдвига алюминиевого сплава Д16 [16,17].

Теоретическая модель формирования УМЗ-структуры в процессе динамической рекристаллизации при ударном нагружении материалов была предложена в работе [11]. Авторы разделили процесс динамической рекристаллизации на несколько основных этапов, ключевым из которых был этап фрагментации зерен. В соответствии с этой моделью по мере нарастания деформации на фронте ударной волны хаотично распределенные дислокации образуют удлиненные ячейки. Затем эти ячейки трансформируются в эллипсоидальные субзерна, которые впоследствии распадаются на более мелкие субзерна за счет образования малоугловых границ наклона, перпендикулярных уже существующим дислокационным стенкам. Процессы формирования эллипсоидальных субзерен и их распада на более мелкие и приблизительно равноосные субзерна являются типичным примером

фрагментации структуры деформируемого металла. Тем не менее сам процесс фрагментации не был детально рассмотрен в этой модели.

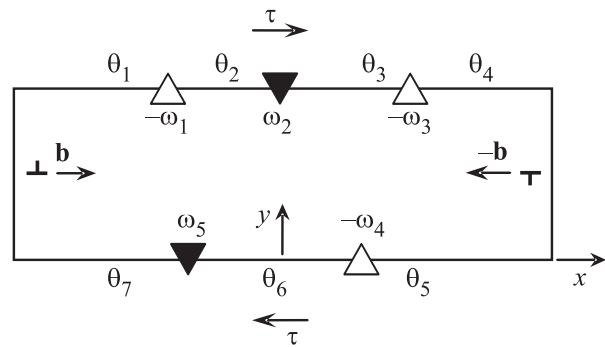
Несмотря на проведение многолетних исследований процесса фрагментации, начавшихся еще в середине 70-х годов прошлого века [18–21], полное и ясное физическое представление о нем еще не сформировано [22]. Большой прогресс в понимании был достигнут после введения понятия о частичных дисклинациях, которые рассматриваются в качестве основных носителей пластической деформации в металлических материалах на стадии фрагментации [23–27].

В последние годы эффективным методом теоретического исследования формирования частичных дисклинаций и фрагментации стал метод двумерной дискретной дислокационно-дисклинационной динамики (метод  $2D-D^4$ ), который описывает коллективное поведение краевых дислокаций, взаимодействующих с упругими полями частичных дисклинаций и, более того, формирующих эти дисклинации [26,28–35]. Метод  $2D-D^4$  — естественное обобщение хорошо известного метода двумерной дискретной дислокационной динамики [36–38] (см. также ссылки в обзоре [39]). Заметим, что до сих пор метод  $2D-D^4$  применялся в условиях квазистатического нагружения, когда процесс фрагментации развивается в течение сотен секунд [31–33]. В случае же динамических воздействий он занимает на порядки меньше времени. Например, длительность ударного импульса в экспериментах [16,17] составляла около 650 ns; следовательно, стадия фрагментации в развитии динамической рекристаллизации была еще короче.

Цель настоящей работы — компьютерное моделирование методом  $2D-D^4$  физических процессов формирования и эволюции фрагментированных структур в уже образованных субзернах, расположенных в полосах сдвига в металлах и сплавах при ударном нагружении. В рамках нашей упрощенной двумерной модели формирование фрагментированной структуры сводится к образованию малоугловых границ наклона и других дислокационных конфигураций, состоящих из прямолинейных краевых дислокаций и разделяющих ячейку моделирования на отдельные фрагменты.

## 2. Модель

Основная идея разработанной компьютерной модели ясна из рис. 1. Поскольку формирование удлиненных субзерен при динамическом сжатии происходит в сильно неравновесных условиях прохождения ударной волны, естественно предположить, что на границах таких субзерен имеются скачки угла разориентировки  $\theta_1, \dots, \theta_7$ . Это означает, что в данных местах имеются частичные дисклинации с мощностью  $-\omega_1 = \theta_2 - \theta_1$ ,  $\omega_2 = \theta_3 - \theta_2$  и т.д., образующие экранированные дисклинационные структуры — диполи, квадруполь и мультиполи. Можно

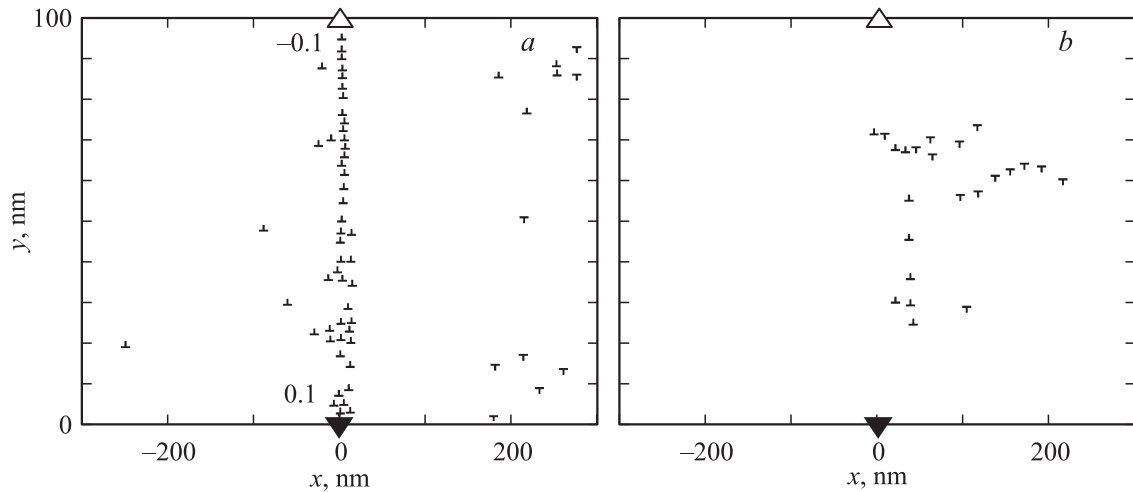


**Рис. 1.** Модель удлиненного субзерна с частичными клиновыми зернограницными дисклинациями (светлые и темные треугольники) в точках скачка угла разориентировки  $\theta$  и краевые дислокации, скользящие внутри субзерна под действием импульса напряжения  $\tau$ .

предположить далее, что упругие поля этих дисклинационных структур будут „захватывать“ скользящие мимо них дислокации, формируя новые устойчивые дислокационные конфигурации типа оборванных стенок, обладающих в свою очередь дисклинационным зарядом, понижающим общую энергию начальной дисклинационной структуры. Формированием подобных стенок можно объяснить процесс распада удлиненных субзерен на микроструктуру, т.е. фрагментацию.

Предположим, что источниками дислокаций являются в основном границы субзерен. Рассмотрим сначала простейшую конфигурацию зернограницных дисклинаций — двухосный диполь с плечом  $d$  и мощностью  $\omega$  (рис. 2). Пусть на большом удалении от этого диполя, на линии ( $x = -x_0$ ,  $0 < y < d$ ), соответствующей одной границе зерна, в момент времени  $t = 0$  под действием приложенного сдвигового напряжения  $\tau$  начинается генерация положительных краевых дислокаций с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}$ , направленными вдоль оси  $x$ . Одновременно начинается генерация отрицательных дислокаций на линии ( $x = x_0$ ,  $0 < y < d$ ), соответствующей противоположной границе. Распределение дислокаций вдоль оси  $y$  и моменты их появления задаются с помощью генератора случайных чисел, а плоскости  $y = \text{const}$  служат плоскостями скольжения дислокаций. Если в процессе моделирования расстояние между двумя дислокациями противоположных знаков становится меньше чем  $3a$  ( $a$  — параметр решетки), то считается, что дислокации аннигилируют.

Каждая дислокация в представленной модели находится под совместным действием сил, вызванных приложенным сдвиговым напряжением  $\tau$  и полями напряжений дисклинаций и других дислокаций. При этом предполагается, что дислокации могут перемещаться только в одной плоскости скольжения (вдоль оси  $x$ ), и в этом случае их движение определяется только проекциями этих сил на ось  $x$ .



**Рис. 2.** Устойчивые дислокационные структуры, сформировавшиеся за время 10 ns действия импульса приложенного напряжения  $\tau$ , равного 0.2 (a) и 0.7 GPa (b), в поле напряжений модельного двухосного диполя частичных клиновых дисклинаций. Числа рядом со значками клиновых дисклинаций — мощности дисклинаций (в радианах).

Уравнение движения  $i$ -й дислокации можно представить в виде [29]

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} + \beta \frac{dx_i}{dt} = F_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

где  $m$  — эффективная масса дислокации,  $x_i$  — ее координата,  $\beta$  — коэффициент динамического трения,  $F_i$  — суммарная сила, действующая на дислокацию,  $N$  — общее число дислокаций, генерированных за время проведения одного численного эксперимента. Первая производная  $dx_i/dt$  в уравнении (1) учитывает динамическое (вязкое) трение дислокации при ее скольжении в кристаллической решетке. Масса дислокации дана в стандартном приближении [40]:  $m = \rho b^2/2$ , где  $\rho$  — плотность материала,  $b$  — величина вектора Бюргера дислокации.

В случае двухосного дисклинационного диполя (рис. 2) суммарную силу, действующую на  $i$ -ю дислокацию, можно записать в следующем виде [29]:

$$F_i = b\tau + Db^2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{(x_i - x_k)[(x_i - x_k)^2 - (y_i - y_k)^2]}{[(x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2]^2} - Db\omega \left( \frac{x_i y_i}{x_i^2 + y_i^2} - \frac{x_i (y_i - d)}{x_i^2 + (y_i - d)^2} \right), \quad (2)$$

где  $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$ ,  $G$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $x_i$  и  $y_i$  — координаты  $i$ -й дислокации. Первое слагаемое в правой части формулы (2) определяет силу, обусловленную приложенным сдвиговым напряжением  $\tau$ , второе — суммарную силу упругого взаимодействия  $i$ -й дислокации со всеми остальными дислокациями, третье — силу ее упругого взаимодействия с дисклинационным диполем [24]. Заметим, что второе

слагаемое здесь взято в квазистатическом приближении (без учета влияния скорости скользящих дислокаций на их упругие поля). Как отмечено в работе [41], это приближение может оказаться некорректным для моделирования физических процессов, проходящих при очень высоких скоростях деформации ( $> 10^6 \text{ s}^{-1}$ ), когда не удастся правильно смоделировать динамику дислокаций в процессе ударного нагружения. В настоящей работе проведены тестовые расчеты, учитывающие временные зависимости полей напряжений дислокаций [41]. Эти расчеты показали, что замена квазистатических полей напряжений дислокаций на динамические в рассмотренных условиях, моделирующих динамическое сжатие алюминиевого сплава Д16 в экспериментах [16,17], не дает заметных изменений в результатах.

В настоящей модели имитировались условия ударного сжатия со скоростью ударной волны 320–340 m/s [16,17] и скоростью движения дислокаций  $v_i = \dot{x}_i < 0.2c_s$ , где  $c_s$  — скорость поперечной упругой волны (в алюминиевом сплаве Д16  $c_s = 3080 \text{ m/s}$  [16]). Предполагается, что при таких условиях можно пренебречь тепловыми и релятивистскими эффектами, характерными для быстро движущихся (при  $v_i > 0.5c_s$ ) дислокаций [42–44]. В то же время в модели учитывалось локальное повышение температуры в полосах сдвига, которое оценивалось как  $\Delta T \approx 268 \text{ K}$  [16] и использовалось для расчета локального коэффициента динамического трения  $\beta$ .

Исследование динамики дислокационного ансамбля проводилось внутри двумерной прямоугольной области (области моделирования — ОМ) упругоизотропной среды с размерами  $L \times 6L$ , которая служила моделью центральной части субзерна с размерами  $L \times 8L$ . В расчетах принималось, что  $L = 100 \text{ nm}$ . Такая удаленность границ ОМ от границ субзерна снижает влияние последних на формирование дислокационных структур в центральной

области субзерна. Учет такого влияния требует построения и анализа более сложной модели, что выходит за рамки настоящей работы. Значения параметров системы выбирались для алюминиевого сплава Д16 [16]:  $G = 27 \text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.33$ ,  $a = 4.05 \text{ \AA}$ ,  $b = a/2\langle 110 \rangle \approx 2.8 \text{ \AA}$ ,  $\rho = 2770 \text{ kg/m}^3$ ,  $m = 2.4 \cdot 10^{-16} \text{ kg/m}$ . Для оценки  $\beta$  использовалась следующая формула [42]:  $\beta \approx \beta_0 T/T_D$ , где  $\beta_0 = \beta(T = T_D)$  и  $T_D$  — температура Дебая. При  $\beta_0 \approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ ,  $T_D \approx 428 \text{ K}$  [40] и  $T = T_r + \Delta T \approx 568 \text{ K}$  было получено значение  $\beta \approx 6.6 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ .

Все расчеты проводились для общего количества  $N = 150$  дислокаций, 130 из которых генерировались на „правой“ и „левой“ границах субзерна (рис. 1), а 20 зарождались попарно в виде диполей на 10 источниках, случайно расположенных внутри ОМ. При этом „положительные“ дислокации начинали свое движение с левой границы  $x = -400 \text{ nm}$ , расположенной слева от левой границы ( $x = x_0 = -300 \text{ nm}$ ) ОМ, а „отрицательные“ — с правой границы субзерна  $x = 400 \text{ nm}$ , расположенной справа от правой границы ( $x = x_0 = 300 \text{ nm}$ ) ОМ. Вероятность появления каждой дислокации с определенной координатой по оси  $y$  в определенный момент времени  $t$  на линии  $x = -400 \text{ nm}$  или на линии  $x = 400 \text{ nm}$  соответствовала равномерному распределению. Аналогично определялись положение и момент срабатывания источников внутри ОМ. Заметим, что в общем случае число генерируемых положительных дислокаций не было равно числу отрицательных дислокаций, фиксировалось только их общее количество  $N$  за все время компьютерного эксперимента.

Вычисления проводились для разных значений  $\tau$  в пределах от 0 до 1 GPa. Длительность импульса  $\tau$  составляла 10 ns.

### 3. Результаты

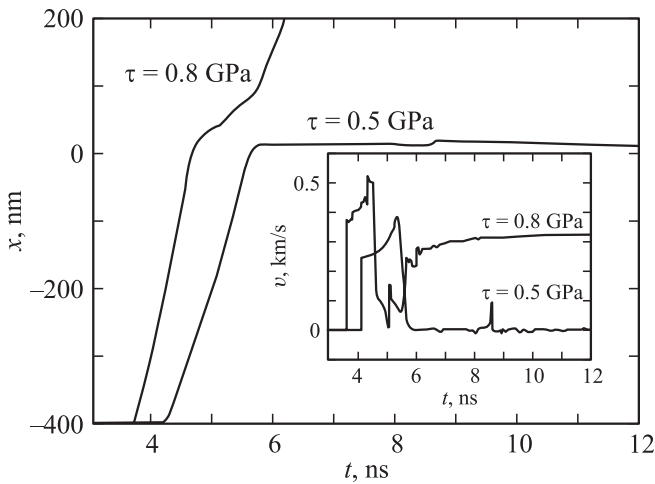
3.1. Двухосный дисклинационный диполь. Рассмотрим сначала случай двухосного дисклинационного диполя с мощностью  $\omega = 0.1 \text{ rad}$  и плечом  $d = 100 \text{ nm}$ , расположенного на линии  $x = 0$ . При относительно малом внешнем напряжении  $\tau = 0.2 \text{ GPa}$  основную роль в формировании дислокационных структур играет поле напряжений самого диполя. На рис. 2, а показано расположение дислокаций в поле ОМ через 10 ns после приложения напряжения. Большая часть положительных дислокаций, начинающих свое движение с левой границы субзерна, захватывается упругим полем дисклинационного диполя и выстраивается в стенку. В результате на линии, соединяющей дисклинации, формируется малоугловая граница наклона, с избытком компенсирующая мощность дисклинационного диполя. Действительно, в слое  $-20 \leq x \leq 20 \text{ nm}$  толщиной 40 nm легко насчитать 44 положительные дислокации (две нижние дислокации скрыты значком положительной дисклинации). Распределяя их равномерно по плечу диполя, получим период стенки  $h \approx 2.27 \text{ nm}$ , откуда эф-

фективный угол разориентировки малоугловой границы  $\omega_{\text{disl}} \approx b/h \approx 0.123 \text{ rad} \approx 7.1^\circ$ . Заметим, что несколько положительных дислокаций осталось в левой части ОМ, а четырем удалось приблизиться к его правой границе.

Всего в поле ОМ через 10 ns после начала нагружения оказалось 54 положительных и 8 отрицательных дислокаций (рис. 2, а). Такая диспропорция объясняется тем, что на начальном отрезке времени, пока не успела сформироваться плотная стенка положительных дислокаций, упругое поле дисклинационного диполя подавляло появление отрицательных дислокаций на правой границе ОМ. Действительно, сдвиговое напряжение на экранированном положительными дислокациями диполя в центральной части правой границы ОМ составляет  $\sigma_{xy}^\nabla(x = 300 \text{ nm}, y = 0) \approx -0.324D\omega \approx -0.208 \text{ GPa}$ , что по модулю больше действующего значения  $\tau = 0.2 \text{ GPa}$ . По мере формирования стенки положительных дислокаций внутри диполя запирающее напряжение  $\sigma_{xy}^\nabla(x = 300 \text{ nm}, y = 0)$  на правой границе ОМ уменьшалось, и на ней появлялись отрицательные дислокации. Часть из них аннигилировала с положительными дислокациями, а оставшиеся оказались в итоге хаотично распределены в полосе шириной  $\sim 120 \text{ nm}$  у правой границы ОМ (рис. 2, а).

Таким образом, в случае относительно малого внешнего напряжения  $\tau = 0.2 \text{ GPa}$  произошло разделение исходного субзерна на два равных по величине фрагмента (последнее объясняется симметричным положением дисклинационного диполя в центре субзерна). Средний угол разориентировки разделяющей эти фрагменты границы  $\omega_{\text{disl}} \approx 0.123 \text{ rad} \approx 7.1^\circ$ , что на 23% превышает мощность дисклинационного диполя  $\omega = 0.100 \text{ rad} \approx 5.7^\circ$ .

В случае относительно большого внешнего напряжения  $\tau = 0.7 \text{ GPa}$  дислокации набирают высокую скорость, и выбранной мощности дисклинационного диполя не хватает ни для эффективного закрепления положительных дислокаций на линии диполя, ни для предотвращения появления отрицательных дислокаций на правой границе ОМ. Сформировавшаяся в итоге за 10 ns дислокационная структура (рис. 2, б) состоит из 9 положительных и 14 отрицательных дислокаций, которые сосредоточены в центральной области правой половины ОМ. Остальные из 150 дислокаций, сгенерированных за это время, частично аннигилировали, частично ушли за границы ОМ, положительные — за правую, отрицательные — за левую. Интересно, что 6 положительных дислокаций образовали стенку длиной  $\sim 42 \text{ nm}$  с эффективным углом разориентировки  $\omega_{\text{disl}} \approx 0.033 \text{ rad} \approx 1.9^\circ$ , которая на  $\sim 33\%$  компенсирует мощность дисклинационного диполя на длине  $\sim 42\%$  его плеча. В свою очередь отрицательные дислокации сформировали два изогнутых в противофазе ряда из 6 и 7 дислокаций. Таким образом, слишком высокое внешнее напряжение не позволяет значительному количеству дислокаций сформировать устойчивую структуру,



**Рис. 3.** Временные зависимости координаты и скорости (на вставке) дислокации под номером  $i = 37$ , скользящей в упругом поле дисклинационного диполя с мощностью  $0.1 \text{ rad}$  под действием приложенных напряжений  $0.5$  и  $0.8 \text{ GPa}$ .

приводящую к фрагментации субзерна за отведенное малое время воздействия ( $10 \text{ ns}$ ). При еще большем напряжении  $\tau \geq 0.8 \text{ GPa}$  положительные дислокации уже не захватываются дисклинационным диполем. Притормозив в области максимума его упругих напряжений, они продолжают скользить к правой границе ОМ.

Для примера на рис. 3 приведены временные зависимости координаты и скорости (на вставке) дислокации под номером  $i = 37$  с координатами  $x = x(t)$  и  $y \approx 73 \text{ nm}$  для двух значений напряжения  $\tau$ . При  $\tau = 0.5 \text{ GPa}$ , меньшем некоторого критического напряжения  $\tau_c$  ( $\sim 0.75 \text{ GPa}$  для диполя), положение этой дислокации практически стабилизируется при  $t > 6 \text{ ns}$ . Это означает, что дислокация оказалась „захвачена“ диполем и приняла участие в формировании дислокационной стенки (эта дислокация обведена кружком на рис. 4, *c* и *d*). При  $\tau = 0.8 \text{ GPa}$  ( $> \tau_c$ ), начиная с момента времени  $t \approx 5.5 \text{ ns}$ , координата и скорость этой дислокации резко увеличиваются, а затем, при  $t \approx 10 \text{ ns}$ , ее скорость достигает насыщения  $\sim 0.32 \text{ km/s}$ . Дислокация не захватывается диполем и проходит сквозь него.

Таким образом, наиболее интересный результат дает среднее по величине сдвиговое напряжение  $\tau = 0.5 \text{ GPa}$ , при котором в ОМ за  $10 \text{ ns}$  формируется устойчивая дислокационная структура в виде четких границ фрагментов. На рис. 4 показаны основные стадии этого процесса.

На первой стадии ( $0 < t \leq 1 \text{ ns}$ ) в ОМ появляются первые дислокации разных знаков (рис. 4, *a*).

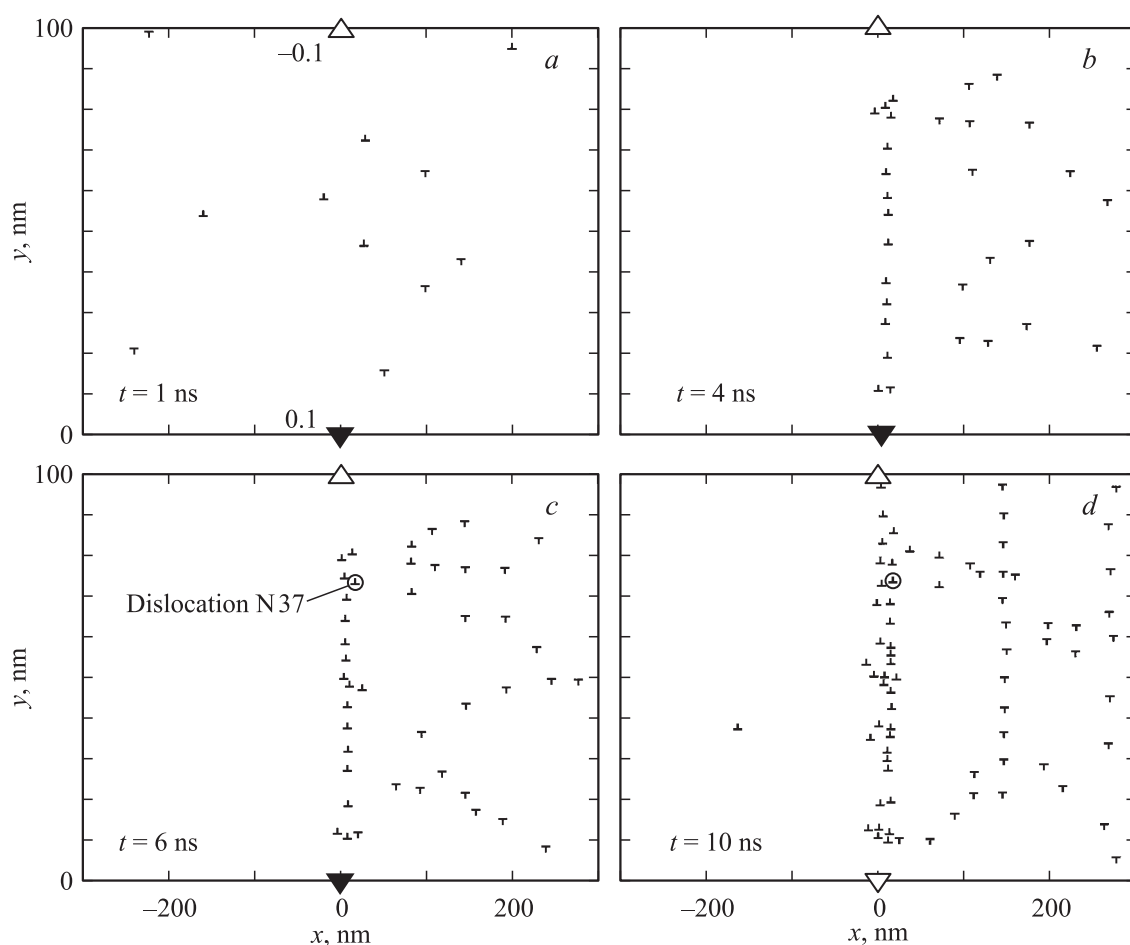
На второй стадии ( $1 < t \leq 4 \text{ ns}$ ) вдоль плеча дисклинационного диполя происходит формирование стенки положительных дислокаций (рис. 4, *b*). В этой стенке длиной  $\sim 64 \text{ nm}$  и толщиной  $\sim 20 \text{ nm}$  (в слое  $-5 \leq x \leq 15 \text{ nm}$ ) содержится 14 положительных дислокаций, распределенных со средним периодом

$h \approx 4.92 \text{ nm}$ . Соответственно эффективный угол разориентировки такой границы  $\omega_{\text{disl}} \approx 0.057 \text{ rad} \approx 3.3^\circ$ , т.е. она компенсирует  $\sim 57\%$  мощности дисклинационного диполя на длине  $\sim 64\%$  его плеча. Отрицательные дислокации при этом распределены более-менее случайным образом в правой части ОМ.

На третьей стадии ( $4 < t \leq 6 \text{ ns}$ ) наблюдается уплотнение стенки положительных дислокаций и первый этап формирования стенок отрицательных дислокаций (рис. 4, *c*). Стенка положительных дислокаций достигает теперь длины  $\sim 70 \text{ nm}$  и содержит 18 положительных дислокаций и одну отрицательную, т.е. 17 нескомпенсированных положительных дислокаций. При среднем периоде  $h \approx 4.38 \text{ nm}$  это дает угол разориентировки  $\omega_{\text{disl}} \approx 0.064 \text{ rad} \approx 3.7^\circ$ , так что такая граница компенсирует уже  $\sim 64\%$  мощности дисклинационного диполя на длине  $\sim 70\%$  его плеча. В левой половине ОМ в этот момент времени нет дислокаций, а в правой имеются стенка из трех положительных дислокаций (в области  $x \approx 84 \text{ nm}$ ,  $71 \leq y \leq 83 \text{ nm}$ ) и две разреженные стенки отрицательных дислокаций: одна из пяти (в области  $x \approx 140 \text{ nm}$ ,  $22 \leq y \leq 89 \text{ nm}$ ), другая из четырех (в области  $x \approx 190 \text{ nm}$ ,  $16 \leq y \leq 78 \text{ nm}$ ) дислокаций. Эффективные углы разориентировки двух последних стенок довольно малы: соответственно примерно  $1$  и  $0.8^\circ$ . Остальные 12 отрицательных дислокаций, которые наблюдаются в правой половине ОМ, пока не формируют четкой структуры, хотя группируются по намечающимся границам фрагментов.

На четвертой, заключительной стадии ( $6 < t \leq 10 \text{ ns}$ ) наблюдается дальнейшее удлинение и уплотнение стенки положительных дислокаций вдоль плеча дисклинационного диполя и формирование четкой фрагментированной структуры в правой части ОМ (рис. 4, *d*). Стенка положительных дислокаций, достигая длины  $\sim 88 \text{ nm}$  (верхняя дислокация частично закрыта значком дисклинации) и ширины  $\sim 30 \text{ nm}$ , содержит уже 36 дислокаций, распределенных с эффективным периодом  $h \approx 2.51 \text{ nm}$ , что дает угол разориентировки  $\omega_{\text{disl}} \approx 0.112 \text{ rad} \approx 6.4^\circ$ . Это означает, что она с превышением на  $12\%$  компенсирует мощность дисклинационного диполя на длине  $\sim 88\%$  его плеча. Поскольку об относительном уровне упругих напряжений двухосного дисклинационного диполя можно судить по произведению его мощности на длину его плеча  $\omega d$ , а об относительном уровне его упругой энергии — по квадрату этого произведения  $(\omega d)^2$  [24], сравним их с соответствующими величинами для дислокационной стенки  $\omega_{\text{disl}} d_{\text{disl}}$  и  $(\omega_{\text{disl}} d_{\text{disl}})^2$ , где  $d_{\text{disl}}$  — длина стенки. В нашем случае имеем  $\omega d = 10 \text{ nm}$  и  $\omega_{\text{disl}} d_{\text{disl}} \approx 9.9 \text{ nm}$ . Таким образом, сформировавшаяся за  $10 \text{ ns}$  стенка положительных дислокаций скомпенсировала примерно на  $99\%$  упругие поля и на  $98\%$  упругую энергию дисклинационного диполя.

В свою очередь отрицательные дислокации к моменту времени  $t = 10 \text{ ns}$  сформировали в правой части ОМ две стенки (рис. 4, *d*), одна из которых представляет собой подросшую и удлинившуюся стенку, появившуюся на



**Рис. 4.** Четыре основные стадии формирования дислокационных стенок вблизи диполя клиновых дисклинаций при  $\tau = 0.5$  GPa. *a* — появление первых дислокаций ( $t = 1$  ns), *b* — формирование стенки положительных дислокаций вдоль плеча диполя и накопление отрицательных дислокаций в правой части области моделирования ( $t = 4$  ns), *c* — уплотнение стенки положительных дислокаций и первый этап формирования стенок отрицательных дислокаций ( $t = 6$  ns), *d* — дальнейшее удлинение и уплотнение стенки положительных дислокаций вдоль плеча дисклинационного диполя и формирование четкой фрагментированной структуры в правой части области моделирования ( $t = 10$  ns).

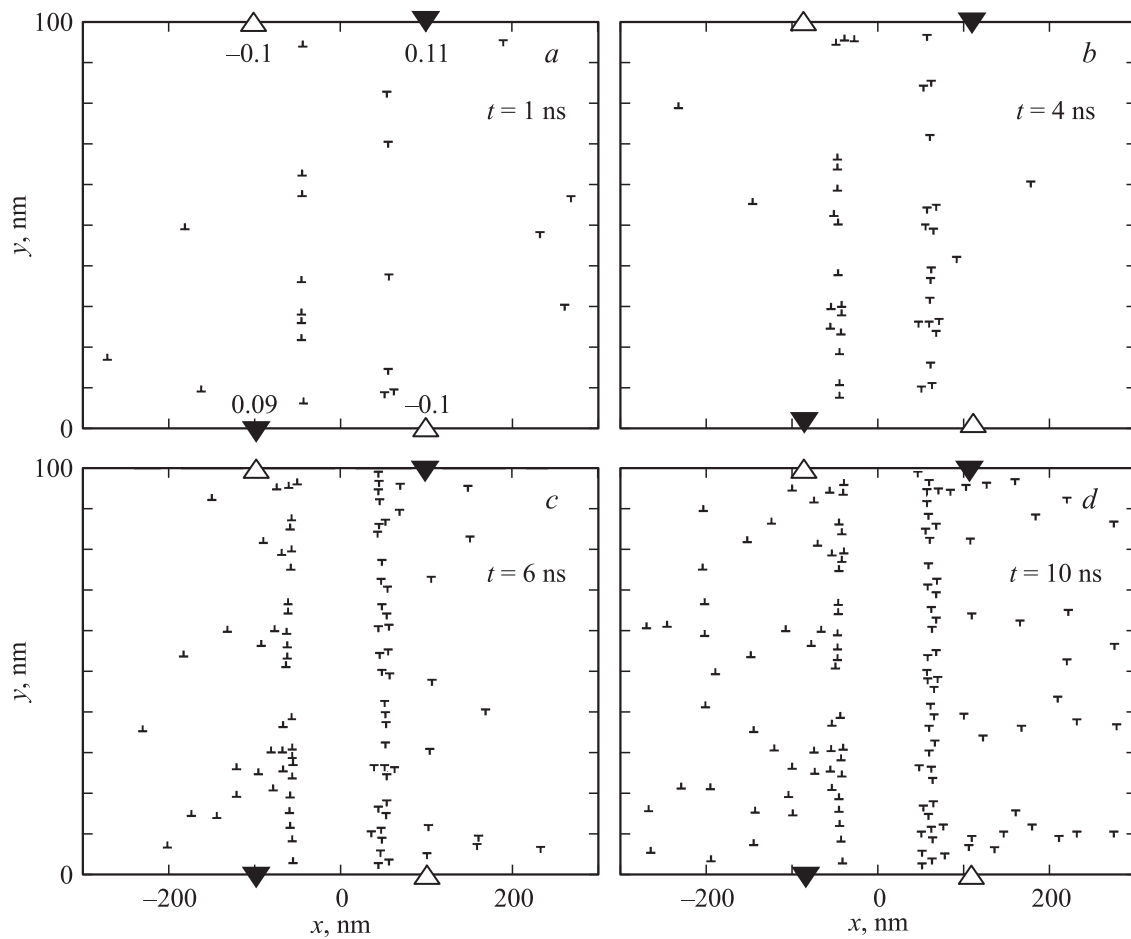
предыдущей стадии при  $t = 6$  ns (рис. 4, *c*), а другая — новую длинную стенку у самой границы ОМ. Первая состоит теперь из 12 дислокаций и занимает область  $x \approx 140$  nm,  $22 \leq y \leq 98$  nm, вторая — из 9 дислокаций в области  $x \approx 275$  nm,  $6 \leq y \leq 98$  nm. Соответственно средний угол разориентировки первой стенки составляет примерно  $2.3^\circ$ , второй — примерно  $1.4^\circ$ . Остальные 14 отрицательных и 2 положительные дислокации, расположенные в правой части ОМ, выстроены в виде перемычек между этими стенками, четко выделяя пять относительно крупных фрагментов.

Таким образом, в случае двухосного дисклинационного диполя и среднего по величине сдвигового напряжения  $\tau = 0.5$  GPa за 10 ns ОМ оказалась разделена на две равные части, первая из которых (левая) содержит одну случайную положительную дислокацию, а вторая (правая) разделилась в свою очередь на пять слабо разориентированных относительно друг друга фрагментов. Такая асимметрия объясняется тем, что дисклина-

ционный диполь в течение всего времени нагружения притягивал к себе и „захватывал“ положительные дислокации и отталкивал отрицательные. По мере формирования вдоль плеча дисклинационного диполя мощной стенки положительных дислокаций и соответствующего ослабления упругого поля дисклинационного диполя это отталкивание ослабевало. Это привело к насыщению правой части ОМ отрицательными дислокациями, которые тем не менее не смогли пройти через мощную стенку положительных дислокаций. Часть отрицательных дислокаций аннигилировала с положительными, а оставшиеся оказались „заперты“ в правой части ОМ и сформировали там устойчивую фрагментированную структуру.

3.2. Дисклинационный квадруполь. Рассмотрим более сложный модельный случай — квадруполь клиновых дисклинаций (рис. 5), расположенных в точках  $(x = \pm 100$  nm,  $y = 0)$  и  $(x = \pm 100$  nm,  $y = 100$  nm). Мощности этих дисклинаций указаны (в rad) на рис. 5, *a*.





**Рис. 5.** Четыре основные стадии формирования дислокационных стенок вблизи квадруполя клиновых дисклинаций при  $\tau = 0.5$  GPa. *a* — появление первых дислокаций и образование двух разреженных стенок из дислокаций противоположных знаков ( $t = 1$  ns), *b* — подрастание и уплотнение этих дислокационных стенок ( $t = 4$  ns), *c* — начало формирования новых дислокационных стенок по обе стороны от первых двух ( $t = 6$  ns), *d* — образование двух мощных центральных границ со свободным от дислокаций фрагментом между ними и нескольких более мелких фрагментов по обе стороны от них ( $t = 10$  ns).

Остальные параметры модели остались теми же, что в случае дисклинационного диполя (см. подраздел 3.1). Как и в том случае, наиболее интересные и устойчивые дислокационные структуры формируются при сдвиговом напряжении  $\tau = 0.5$  GPa. Здесь также можно выделить четыре основные стадии формирования фрагментированной структуры.

На первой стадии ( $0 < t \leq 1$  ns) в ОМ появляется примерно равное количество первых положительных и отрицательных дислокаций, из которых на линиях  $x \approx \pm 40$  nm начинают формироваться две дислокационные стенки противоположных знаков (рис. 5, *a*). Смещение этих стенок с линий  $x \approx \pm 100$  nm, соединяющих по вертикали положительные и отрицательные дисклинации, очевидно обусловлено взаимным притяжением стенок, которому способствует приложенное напряжение  $\tau$  и препятствуют напряжения от дисклинаций [45,46].

На второй стадии ( $1 < t \leq 4$  ns) происходит подрастание и уплотнение дислокационных стенок, которые начали формироваться на первой стадии (рис. 5, *b*). Средние

углы разориентировки левой и правой границ на этой стадии составляют соответственно  $\sim 2.9$  и  $\sim 3.1^\circ$ . В то же время в остальной части ОМ наблюдаются только четыре случайные дислокации.

На третьей стадии ( $4 < t \leq 6$  ns) продолжается насыщение двух центральных границ новыми дислокациями и начинается формирование новых дислокационных стенок по обе стороны от первых двух (рис. 5, *c*). Средние углы разориентировки основных левой и правой границ достигают теперь  $\sim 4.7$  и  $\sim 5.5^\circ$  соответственно (здесь и далее при подсчетах учитывалось количество дислокаций, которые попали в покрывающую стенку полосу шириной 20 nm).

На последней, четвертой стадии ( $6 < t \leq 10$  ns) завершается формирование двух мощных центральных границ со свободным от дислокаций фрагментом между ними, и по обе стороны от них образуется несколько более мелких фрагментов, границы которых декорированы дислокациями (рис. 5, *d*). Средний угол разориентировки левой центральной границы сохраняет значение  $\sim 4.7^\circ$ ,

средний угол разориентировки правой увеличивается до  $\sim 6.1^\circ$ . Большинство дислокаций, которые декорируют границы фрагментов, также выстроено в стенки: пять стенок слева от центральной левой границы и четыре стенки справа от центральной правой границы. Эти стенки имеют длину от 56 до 88 nm и содержат от 3 до 7 дислокаций, а их средний угол разориентировки составляет от  $0.6$  до  $1.2^\circ$ . Среднестатистическая стенка имеет длину  $\sim 77$  nm, средний угол разориентировки  $\sim 0.9^\circ$  и состоит из 5 дислокаций. Расстояние между стенками меняется от  $\sim 30$  до  $\sim 70$  nm. Вне этих стенок остается 5 дислокаций в левой и 7 дислокаций в правой части ОМ.

Таким образом, в случае дисклинационного квадрупольная конечная дислокационная структура ОМ представляет собой три крупных фрагмента, разделенных двумя мощными границами наклона противоположных знаков со средними углами разориентировки  $\sim 4.7^\circ$  и  $\sim 6.1^\circ$ . Центральный фрагмент с размерами примерно  $100 \times 100$  nm не содержит внутри дислокаций, а боковые фрагменты с размерами примерно  $250 \times 100$  nm содержат дислокации одного знака, образующие примерно 15 слабо разориентированных между собой мелких фрагментов. То, что центральный фрагмент свободен от дислокаций можно объяснить эффективным захватом положительных и отрицательных дислокаций дисклинационными диполями, составляющими квадруполь. Этот захват даже более эффективен, чем в предыдущем случае одного диполя, потому что в этой области суммарные значения сдвигового напряжения от двух диполей противоположных знаков намного выше, чем значения сдвигового напряжения от одного диполя.

Как и в случае отдельного дисклинационного диполя (см. подраздел 3.1), моделирование проводилось для разных значений приложенного напряжения  $\tau$ . При относительно малых значениях  $\tau$  ( $< 0.5$  GPa) дислокационные конфигурации были сильно размыты и не имели никакого сходства с типичными структурами, наблюдаемыми при фрагментации. При относительно больших значениях  $\tau$  ( $> 0.5$  GPa), как и в случае дисклинационного диполя, устойчивые дислокационные конфигурации не образовывались.

3.3. Дисклинационный октуполь. Рассмотрим еще одну самоэкранированную дисклинационную конфигурацию — произвольный октуполь (рис. 6), состоящий из четырех положительных и четырех отрицательных клиновых дисклинаций. Положение и мощность дисклинаций выбирались случайным образом с условием, чтобы дисклинации находились в ОМ и средняя величина их мощности составляла  $\langle |\omega| \rangle = 0.1$  rad. Наиболее устойчивая фрагментированная структура снова образовалась при  $\tau = 0.5$  GPa. В этом случае за время 10 ns сформировались четыре дислокационные стенки, которые разделили ОМ на пять фрагментов. Процесс их формирования снова проходил в четыре основные стадии.

На первой стадии ( $0 < t \leq 1$  ns) в ОМ появились первые дислокации. К моменту времени  $t = 1$  ns там было 12 положительных и 5 отрицательных дислокаций, причем из положительных начала формироваться первая дислокационная стенка на линии  $x \approx -70$  nm (рис. 6, a).

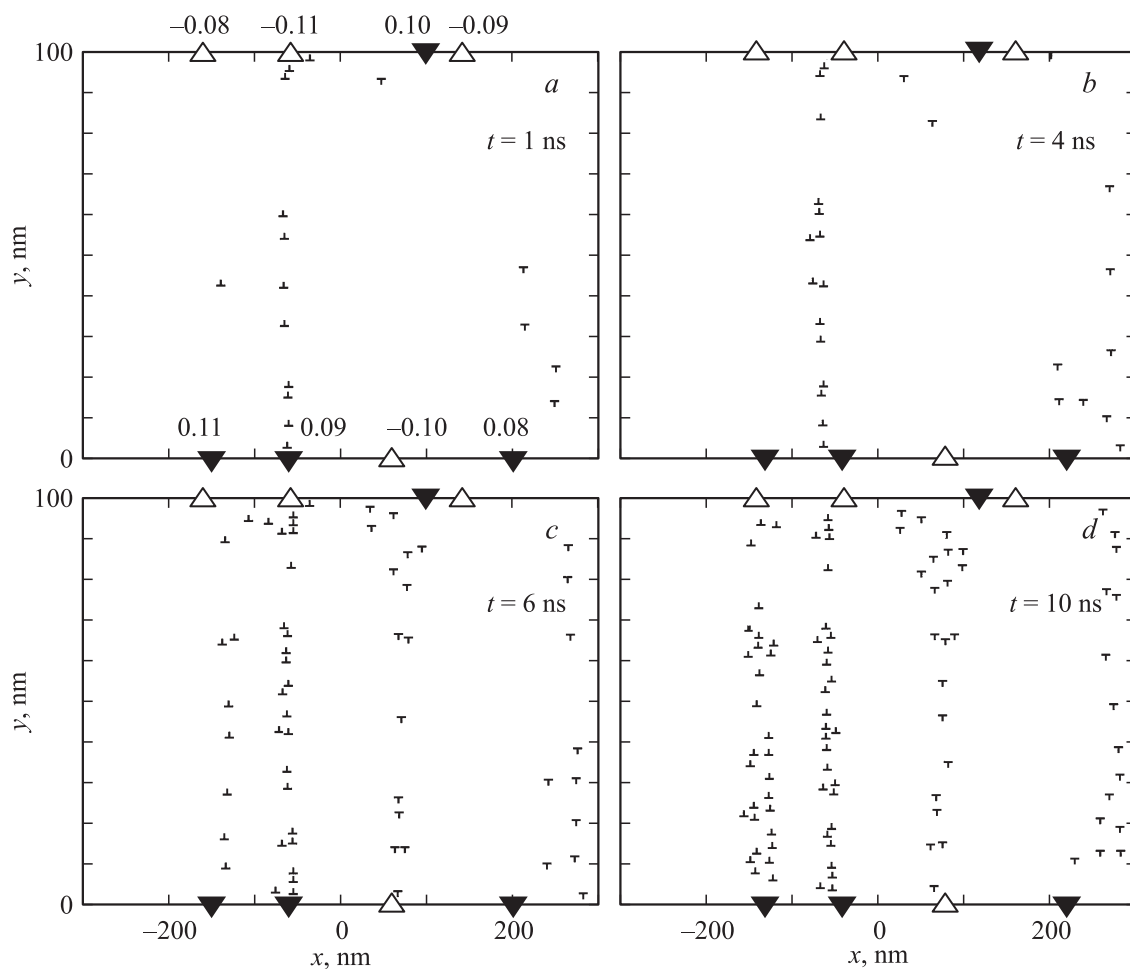
На второй стадии ( $1 < t \leq 4$  ns) происходило уплотнение и разрастание первой стенки и начиналось формирование второй (из отрицательных дислокаций, выстраивающихся по линии  $x \approx 270$  nm) (рис. 6, b). Всего в момент времени  $t = 4$  ns в ОМ наблюдалось 16 положительных и 10 отрицательных дислокаций.

На третьей стадии ( $4 < t \leq 6$  ns) продолжалось уплотнение и достраивание первых двух стенок на линиях  $x \approx -70$  и  $270$  nm и начиналось формирование еще двух стенок: на линии  $x \approx -130$  nm из положительных и на линии  $x \approx 80$  nm из отрицательных дислокаций (рис. 6, c). При  $t = 6$  ns дислокационный ансамбль в ОМ состоял из 34 положительных и 25 отрицательных дислокаций.

На четвертой, заключительной стадии ( $6 < t \leq 10$  ns) происходило дальнейшее уплотнение и достраивание всех четырех дислокационных стенок, появившихся на первых трех стадиях (рис. 6, d). Окончательная дислокационная структура в момент окончания импульса напряжения  $t = 10$  ns состояла из двух стенок положительных и двух стенок отрицательных дислокаций, занимающих примерно те же положения, в которых они начинали формироваться. Эти стенки состояли (слева направо) из 29, 28, 22 и 15 дислокаций (57 положительных и 37 отрицательных). Соответственно средние углы разориентировки составляли примерно  $4.7$ ,  $4.5$ ,  $3.5$  и  $2.4^\circ$ . Отметим, что нерегулярность расположения зернограничных дисклинаций в правой половине ОМ приводит к сильному размытию концевых участков двух правых дислокационных границ. Напротив, гораздо более регулярное расположение зернограничных дисклинаций в левой половине ОМ привело к образованию более четких левых границ. При этом для всех четырех границ характерна неоднородность плотности распределения формирующих их дислокаций.

Отметим, что в течение всех четырех стадий формирования дислокационных границ наблюдалось постоянное значительное превышение числа положительных дислокаций над числом отрицательных. Такая асимметрия связана с асимметричной структурой случайного дисклинационного октуполя. Левая его часть представляет собой по сути два двухосных одинаково ориентированных дисклинационных диполя, поля сдвиговых напряжений которых взаимно усиливаются у левой и правой границ ОМ. У левой границы это стимулирует поступление в ОМ положительных дислокаций, у правой границы препятствует поступлению в ОМ отрицательных дислокаций. Правая часть октуполя ближе по своей структуре к квадруполью, причем ориентированному таким образом, что его сдвиговые напряжения лишь незначительно компенсируют сдвиговые напряжения левых диполей у левой границы ОМ и, наоборот,





**Рис. 6.** Четыре основные стадии формирования дислокационных стенок вблизи произвольного октауполя клиновых дисклинаций при  $\tau = 0.5$  GPa. *a* — появление первых дислокаций разных знаков и начало формирования стенки положительных дислокаций ( $t = 1$  ns), *b* — уплотнение и разрастание первой стенки, начало формирования второй ( $t = 4$  ns), *c* — уплотнение и достраивание первых двух стенок, начало формирования новых стенок по обе стороны от первой ( $t = 6$  ns), *d* — окончательное уплотнение и достраивание всех четырех дислокационных стенок, появившихся на первых трех стадиях ( $t = 10$  ns).

усиливают их у правой границы ОМ. Таким образом, в целом поступление положительных дислокаций в ОМ стимулируется, а поступление отрицательных сдерживается заданным дисклинационным октауполем. Тем не менее это не помешало созданию фрагментированной структуры ОМ, которая в итоге представлена пятью фрагментами с размерами примерно от 30 до 190 nm вдоль оси  $x$ , разделенными малоугловыми границами наклона с углами разориентировки от  $2.4$  до  $4.7^\circ$ .

При других значениях внешнего напряжения конечная дислокационная конфигурация формируется аналогично случаю дисклинационного квадруполя (см. подраздел 3.2). Как показали расчеты, при  $\tau > \tau_c \approx 0.7$  GPa ни одна дислокация не была захвачена октауполем и никакой устойчивой дислокационной структуры при этом не сформировалось.

Поскольку в реальных условиях в полосе сдвига должно находиться большое количество исходных малоподвижных зернограницных клиновых дисклинаций,

скольжение сквозь такой дисклинационный ансамбль при некотором оптимальном сдвиговом напряжении массы краевых дислокаций должно сопровождаться множественным формированием малоугловых границ наклона. Предполагается, что за время действия импульса этого напряжения (в экспериментах [16,17] продолжительность такого импульса составляла 650 ns) произойдет дополнительное насыщение этих границ краевыми дислокациями и постепенная трансформация малоугловых дислокационных границ в большеугловые границы фрагментов, что будет означать завершение процесса фрагментации.

#### 4. Заключение

С помощью метода двумерной дискретной дислокационно-дисклинационной динамики (метода 2D-D<sup>4</sup>) проведено компьютерное моделирование формирования и эволюции фрагментированных структур в полосах

сдвига при ударном нагружении алюминиевого сплава Д16. Дислокационные структуры, сформировавшиеся в течение 10 ns под действием приложенного сдвигового напряжения 0.5 GPa в упругом поле исходных модельных конфигураций клиновых зернограничных дисклинаций (двухосного диполя, квадруполь и произвольного октуполя), визуально схожи со структурами, наблюдавшимися экспериментально в работах [16,17] после ударного нагружения образцов сплава Д16 при том же значении приложенного напряжения.

В наиболее реалистичной модели произвольного дисклинационного октуполя со средней величиной мощности дисклинаций  $\langle |\omega| \rangle = 0.1 \text{ rad} \approx 5.7^\circ$  итоговая дислокационная структура имела вид четырех устойчивых малоугловых границ наклона со средними углами разориентировки от 2.4 до 4.7°, разделившими прямоугольную область моделирования с размерами 600 × 100 nm на пять фрагментов размером от 30 до 190 nm вдоль большей стороны ОМ (вдоль направления скольжения дислокаций). Границы этих фрагментов имели неравновесную структуру с переменным углом разориентировки, что типично для границ деформационного происхождения. Образование такой структуры проходило в четыре основные стадии. На первой стадии ( $0 < t \leq 1 \text{ ns}$ ) в ОМ появлялись первые дислокации противоположных знаков и вдоль плеча одного из дисклинационных диполей начинала формироваться первая дислокационная стенка. На второй стадии ( $1 < t \leq 4 \text{ ns}$ ) продолжалось формирование этой стенки и начиналось образование стенки противоположного знака в другой части ОМ. На третьей стадии ( $4 < t \leq 6 \text{ ns}$ ) происходило уплотнение этих стенок и формирование двух новых стенок разных знаков. На последней, четвертой стадии ( $6 < t \leq 10 \text{ ns}$ ) завершалось образование всех четырех дислокационных стенок, которые сохраняли свою структуру и после прекращения действия приложенного напряжения. Таким образом, для выстраивания дислокаций в стенки и их закрепления оказалось достаточно 10 ns, что намного меньше длительности импульса сдвигового нагружения 650 ns в экспериментах [16,17].

Важно, что для формирования устойчивой фрагментированной структуры потребовалось напряжение  $\sim 0.5 \text{ GPa}$ , соответствующее уровню сдвиговых напряжений, которые достигались в экспериментах [16,17]. При меньшем напряжении дислокации формировали размытые конфигурации мультипольного типа, которые не имели никакого сходства с типичными структурами, наблюдаемыми при фрагментации. При большем напряжении устойчивые дислокационные конфигурации не образовывались.

В целом основные результаты компьютерного моделирования (конечный вид фрагментированной структуры, характерный уровень приложенного напряжения и малое время фрагментации) хорошо согласуются с результатами экспериментальных исследований по ударному сжатию алюминиевого сплава Д16 [16,17].

## Список литературы

- [1] R.Z. Valiev, R.K. Islamgaliev, I.V. Alexandrov. *Prog. Mater. Sci.* **45**, 103 (2000).
- [2] D.B. Witkin, E.J. Lavernia. *Prog. Mater. Sci.* **51**, 1 (2006).
- [3] R.Z. Valiev, T.G. Langdon. *Prog. Mater. Sci.* **51**, 881 (2006).
- [4] A.P. Zhilyaev, T.G. Langdon. *Prog. Mater. Sci.* **53**, 893 (2008).
- [5] Y. Estrin, A. Vinogradov. *Acta Mater.* **61**, 782 (2013).
- [6] I. Sabirov, M.Yu. Murashkin, R.Z. Valiev. *Mater. Sci. Eng. A* **560**, 1 (2013).
- [7] Я.Е. Бейгельзимер, В.Н. Варюхин, Д.В. Орлов, С.Г. Сынков. Винтовая экструзия — процесс накопления деформации. Фирма „ТЕАН“, Донецк (2003), 87 с.
- [8] Р.З. Валиев, И.В. Александров. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства. Академкнига, М. (2007). 398 с.
- [9] R.Z. Valiev, A.P. Zhilyaev, T.G. Langdon. *Bulk nanostructured materials: fundamentals and applications*. TMS-Wiley, Hoboken, N.J., (2014). 440 p.
- [10] T. Sakai, A. Belyakov, R. Kaibyshev, H. Miura, J.J. Jonas. *Prog. Mater. Sci.* **60**, 130 (2014).
- [11] H.A. Grebe, H.-R. Pak, M.A. Meyers. *Met. Trans. A* **16**, 761 (1985).
- [12] M.A. Meyers, H.-R. Pak. *Acta Met.* **34**, 2493 (1986).
- [13] M.A. Meyers, Y.-J. Chen, F.D.S. Marquis, D.S. Kim. *Met. Mater. Trans. A* **26**, 2493 (1995).
- [14] U.R. Andrade, M.A. Meyers, K.S. Vecchio, A.H. Chokshi. *Acta Met. Mater.* **42**, 3183 (1994).
- [15] V.F. Nesterenko, M.A. Meyers, J.C. LaSalvia, M.P. Bondar, Y.-J. Chen, Y.L. Lukyanov. *Mater. Sci. Eng. A* **229**, 23 (1997).
- [16] Ю.И. Мещеряков, А.К. Диваков, С.А. Атрошенко, Н.С. Намумова. Письма в ЖТФ **36**, 24, 17 (2010).
- [17] Ю.И. Мещеряков, А.К. Диваков, Н.И. Жигачева, Б.К. Барахтин. *Mater. Phys. Mech.* **11**, 23 (2011).
- [18] G. Langford, M. Cohen. *Met. Trans. A* **6**, 901 (1975).
- [19] В.И. Трефилов. Физические основы прочности тугоплавких металлов. Наук. думка, Киев (1975). 315 с.
- [20] А.Н. Вергазов, В.А. Лихачев, В.В. Рыбин. *ФММ* **42**, 1241 (1976).
- [21] А.С. Рубцов, В.В. Рыбин. *ФММ* **44**, 611 (1977).
- [22] Н.Ю. Золоторевский, В.В. Рыбин. Фрагментация и текстурообразование при деформации металлических материалов. Изд-во Политехн. ун-та, СПб. (2014). 208 с.
- [23] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М. (1986). 224 с.
- [24] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Наука, Л. (1986). 224 с.
- [25] P. Klimanek, V. Klemm, A.E. Romanov, M. Seefeldt. *Adv. Eng. Mater.* **3**, 877 (2001).
- [26] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, A.E. Romanov, P. Klimanek. *Phys. Status Solidi A* **193**, 35 (2002).
- [27] P. Klimanek, V. Klemm, M. Motylenko, A. Romanov. *Adv. Eng. Mater.* **6**, 861 (2004).
- [28] К.Н. Микаелян, М. Seefeldt, М.Ю. Гуткин, Р. Klimanek, А.Е. Романов. *ФТТ* **45**, 2002 (2003).
- [29] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. *Acta Mater.* **52**, 3793 (2004).
- [30] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. *ФТТ* **46**, 2053 (2004).
- [31] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Письма в ЖТФ **33**, 9, 87 (2007).

- [32] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Вопросы материаловедения **49**, 1, 5 (2007).
- [33] Г.Ф. Сарафанов. ФТТ **50**, 1793 (2008).
- [34] O. Dmitrieva, J.V. Svirina, E. Demir, D. Raabe. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 085 011 (2010).
- [35] Ю.В. Свирина, В.Н. Перевезенцев. ЖТФ **83**, 8, 140 (2013).
- [36] R.J. Amodeo, N.M. Ghoniem. Phys. Rev. B **41**, 6958 (1990).
- [37] R.J. Amodeo, N.M. Ghoniem. Phys. Rev. B **41**, 6968 (1990).
- [38] E. van der Giessen, A. Needleman. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **3**, 689 (1995).
- [39] S.S. Quek, Z. Wu, Y.W. Zhang, D.J. Srolovitz. Acta Mater. **75**, 92 (2014).
- [40] U.F. Kocks, A.S. Argon, M.F. Ashby. Prog. Mater. Sci. **19**, 73 (1975).
- [41] B. Gurrutxaga-Lerma, D.S. Balint, D. Dini, D.E. Eakins, A.P. Sutton, Proc. Roy. Soc. A **469**, 2013 0141 (2013).
- [42] J.Th.M. De Hosson, A. Roos, E.D. Metselaar. Phil. Mag. A **81**, 1099 (2001).
- [43] A. Roos, J.Th.M. De Hosson, E. Van der Giessen. Comp. Mater. Sci. **20**, 1 (2001).
- [44] A. Roos, J.Th.M. De Hosson, E. Van der Giessen. Comp. Mater. Sci. **20**, 19 (2001).
- [45] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, I.A. Ovid'ko. Scripta Mater. **58**, 850 (2008).
- [46] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько. ФТТ **50**, 1216 (2008).