

Кириков Сергей Владимирович

**РОЛЬ МЕЗОДЕФЕКТОВ ДЕФОРМАЦИОННОГО
ПРОИСХОЖДЕНИЯ В ПРОЦЕССАХ
СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ
ПОЛИКРИСТАЛЛОВ**

Специальность – 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород — 2022

Работа выполнена в Институте проблем машиностроения Российской академии наук – филиале федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук»

Научный руководитель:

Перевезенцев Владимир Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор.

Официальные оппоненты:

Назаров Айрат Ахметович, доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, лаборатория нелинейной физики и механики материалов, главный научный сотрудник, заместитель директора по научной работе.

Колобов Юрий Романович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук, главный научный сотрудник, и.о. заведующего лабораторией физико-химической инженерии композиционных материалов.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки **Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук**

Защита состоится «05» октября 2022 г. в 16:00 на заседании диссертационного совета 24.2.340.01 в Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского по адресу: 603022, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, корп. 3, ауд. 227 (конференц-зал). С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского и на сайте <https://diss.unn.ru/1286>.

Автореферат разослан «____» _____ 2022 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета
24.2.340.01 при ННГУ, к.ф.-м.н.

Марычев
Михаил Олегович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности.

Многие современные технологии получения высокопрочных конструкционных материалов основаны на применении больших пластических деформаций. К таким технологиям относятся различные виды обработки металлов давлением: прокатка, штамповка, ковка, волочение, прессование, экструзия, которые в настоящее время получили широкое распространение для изготовления заготовок и изделий различных форм и размеров. В ходе больших пластических деформаций структура обрабатываемых материалов существенно меняется, а вместе с ней меняются и физико-механические свойства материала.

При этом наиболее характерной структурной трансформацией поликристаллического материала является фрагментация зерен. Многолетние экспериментальные исследования показали, что формирование фрагментированной структуры начинается с зарождения в приграничных областях зерен оборванных дислокационных границ деформационного происхождения. По мере увеличения пластической деформации, оборванные границы ветвятся и постепенно разбивают исходные зёрна поликристалла на взаимно разориентированные области – фрагменты, размер которых постепенно уменьшается и достигает предельных значений порядка $0.2 - 0.3$ мкм.

Согласно современным представлениям, процессы структурообразования, происходящие в поликристаллах при больших пластических деформациях, тесно связаны с накоплением на границах и в стыках зерен несовместностей пластической деформации в виде ротационно-сдвиговых мезодефектов: стыковых дисклинаций и планарных мезодефектов. Мощные упругие поля от этих мезодефектов, возмущая ламинарные потоки дислокаций, создают условия для формирования областей с большой плотностью дислокационного заряда и их трансформации по мере дальнейшей деформации сначала в малоугловые, а затем и в большеугловые границы зёрен. На большеугловых границах зёрен деформационного происхождения вновь накапливаются несовместности пластической деформации, формирующие системы вторичных мезодефектов. Таким образом, по мере деформации и измельчения зёренной структуры материала мезодефекты занимают все большие объёмы исходных зерен, в то время как плотность дислокаций внутри фрагментов падает. Предельно высокая концен-

трация мезодефектов является характерной особенностью структуры сильно деформированных материалов.

Несовместности пластической деформации, формирующиеся по границам зерен, играют важную роль не только в структурообразовании, но и в разрушении поликристаллов. В случае сильно фрагментированных структур, когда концентрация мезодефектов предельно высока, их роль в процессах зарождения и накопления микропор и микротрещин становится определяющей. Исходя из вышесказанного, исследование закономерностей формирования мезодефектной структуры и её влияния на процессы зарождения и накопления микропор и микротрещин являются важными задачами физики прочности и пластичности.

Следует отметить, что приоритет в открытии и исследовании закономерностей протекания процессов структурообразования и разрушения материалов при больших пластических деформациях принадлежит отечественным ученым. Большой вклад в экспериментальное изучение фрагментированных структур внесли отечественные ученые: Рыбин В.В, Лихачёв В.А, Золоторевский Н.Ю., Колобов Ю.Р., Ценёв Н.К. и зарубежные ученые: Хансен Н., Пантелеон У. и др. Вклад в развитие технологий получения мелкозернистых материалов с применением методов больших пластических деформаций внесли Валиев Р.З, Мулюков Р.Р., Копылов В. И., Чувильдеев В.Н., Лэнгдон Т., Эстрин Ю.З., Виноградов А.Ю. и др. Математические модели мезодефектов были развиты в работах Эшелби Дж., Кренера Э., Романова А.Е., Владимирова В. И., Индебомы В.Л., Рыбина В.В., Перевезенцева В.Н., Зисмана А. А., Муры Т.. Процессы структурообразования и разрушения при больших пластических деформациях теоретически исследовались в работах Рыбина В.В, Перевезенцева В.Н., Сарафанова Г.Ф., Глезера А.М., Назарова А.А., Зисмана А.А., Овидько И.А., Гуткина М.Ю., Панина В.Е., Трусова П.В. и других ученых. Настоящая работа посвящена разработке теоретических моделей структурообразования на начальных стадиях фрагментации и моделей зарождения и накопления микротрещин в упругих полях мезодефектов в сильно-фрагментированных структурах.

Цели и задачи диссертационной работы. Целью диссертационной работы является теоретическое исследование мезодефектов, формирующихся в ходе пластической деформации поликристаллических материалов, и их роли в процессах структурообразования и разрушения. В соответствии с поставленной

целью определены основные задачи научного исследования:

1. Провести анализ ротационно-сдвиговых мезодефектов, которые формируются по границам зерен и фрагментов в ходе пластической деформации и разработать методы вычисления полей упругих напряжений от систем этих мезодефектов.
2. Исследовать механизмы накопления первичных мезодефектов на большеугловых границах зерен деформируемого поликристалла и механизмы их пластической аккомодации.
3. Методами компьютерного моделирования определить условия формирования и характеристики (морфологию) оборванных дислокационных границ, формирующихся в упругих полях ротационно-сдвиговых мезодефектов на начальных стадиях фрагментации.
4. Разработать адекватные физические модели зарождения микротрещин в полях упругих напряжений мезодефектов.
5. Определить взаимосвязь характеристик микротрещин с параметрами мезодефектной структуры деформированного поликристалла и условия, при которых возможно накопление стабильных трещин в очагах разрушения.

Научная новизна и результаты, выносимые на защиту. Представленные ниже основные результаты диссертационной работы являются новыми. На защиту выносятся следующие результаты:

1. Проведен систематический анализ ротационно-сдвиговых мезодефектов, образующихся на границах и в стыках зёрен при пластической деформации поликристаллов. Получены аналитические выражения, описывающие основные полевые и энергетические характеристики базовых мезодефектов. Разработаны методы расчёта упругих полей более сложных систем мезодефектов в двухмерной и трехмерной постановках задачи.
2. Исследованы механизмы накопления мезодефектов в условиях локализованной пластической деформации. Предложены модели формирования деформационной фасетки на большеугловой границе наклона при её взаимодей-

ствии с плоским скоплением решёточных дислокаций и полосой скольжения. Проведен численный анализ взаимосвязи параметров деформационных фасеток и мезодефектной структуры, формирующейся на ней, с кристаллогеометрией пластического течения.

3. В рамках 2D-модели дискретных дислокаций проведено моделирование процессов формирования оборванных дислокационных границ, результаты которого позволили объяснить особенности их морфологии на начальных стадиях фрагментации поликристаллических материалов.
4. Предложена модель аккомодационной пластической деформации и релаксации упругой энергии планарных сдвиговых мезодефектов, возникающих на границах зёрен в процессе пластической деформации поликристаллов.
5. Определены условия существования стабильных микротрещин, формирующихся в упругих полях систем ротационно-сдвиговых мезодефектов.
6. Предложена модель зарождения микротрещины путём атермического проскальзывания по границе зерна, которая содержит планарный сдвиговый мезодефект. Получены зависимости критического напряжения зарождения микротрещины от длины мезодефекта, его мощности и порогового напряжения атермического проскальзывания.
7. Рассмотрены механизмы блокировки распространяющихся под действием внешних и внутренних напряжений дислокационных трещин упругими полями ротационных и сдвиговых мезодефектов. Определены области существования устойчивых трещин в конфигурационном пространстве параметров системы мезодефектов.

Теоретическая и практическая значимость работы. Полученные в работе результаты важны для построения физической теории разрушения и разработки методов диагностики прочностного состояния поликристаллических металлов и сплавов, которые подверглись большому пластическим деформациям. Выявленные при исследовании качественные и количественные закономерности могут быть использованы при разработке статистических и многоуровневых моделей пластической деформации.

Методология и методы исследования. Рассматриваемые в диссертации модели структурообразования и разрушения поликристаллов базируются на экспериментально и теоретически обоснованных представлениях о физической природе фрагментации материалов при больших пластических деформациях. В рамках этих представлений ключевая роль в развитии процессов фрагментации и разрушения принадлежит ротационно-сдвиговым мезодефектам, формирующимся в процессе пластической деформации на границах и стыках зерен.

Для моделирования структурных перестроек при больших пластических деформациях использованы следующие методы компьютерного моделирования: метод динамики дискретных дислокаций, методы континуальной теории дислокаций, методы механики сплошной среды и механики разрушения, адаптированные к кристаллическим телам. Эти методы хорошо себя зарекомендовали при изучении различных процессов пластической деформации. Для анализа условий зарождения и стабилизации микротрещин на участках фрагментированной структуры применялись классические подходы микромеханики разрушения.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность результатов определяется строгостью используемого в работе математического аппарата теории дислокаций и сравнением результатов с экспериментальными данными. Компьютерные модели, разработанные в рамках исследования, были верифицированы путем их применения к задачам с известными решениями.

По тематике, связанной с диссертационной работой, опубликовано 22 работы. Среди них 11 статей – непосредственно по материалам диссертации в журналах, рекомендованных ВАК и входящих в международные базы цитирования WOS и Scopus. Основные результаты диссертационного исследования были представлены на 5 международных конференциях:

- 12-я Международная научно-техническая конференция «Современные металлические материалы и технологии», 3 – 7 июля 2017, Санкт-Петербург.
- 4-я Международная научно-техническая конференция, посвященная 80-летию ИМАШ РАН «Живучесть и конструкционное материаловедение ЖивКоМ», 4 – 6 декабря 2018, Москва.

- Международная научная конференция «Проблемы прочности, динамики и ресурса», 25 – 29 ноября 2019, Нижний Новгород.
- XXXI Международная инновационная конференция молодых ученых и студентов по проблемам машиноведения «МИКМУС – 2019», 4 – 7 декабря 2019, Москва.
- Международная инновационная конференция молодых учёных и студентов по современным проблемам машиноведения «МИКМУС-2021», 30 ноября – 2 декабря 2021, Москва.

Личный вклад автора. Разработка математических и компьютерных моделей, а также численные расчеты, представленные в диссертации, были проведены лично автором работы. Предметная постановка задач и формулировка физических моделей проводились вместе с научным руководителем профессором В. Н. Перевезенцевым. Некоторые работы выполнены в соавторстве с Ю. В. Свириной и А. С. Пупыниным, которые внесли вклад в тестирование и отладку численных алгоритмов, а также в оформление и перевод научных публикаций.

Структура и объём диссертации. Диссертационная работа изложена на 123 страницах печатного текста, состоит из введения, трех глав, основных выводов и списка цитируемой литературы, который содержит 126 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении к диссертации обоснована актуальность темы исследования и отмечен вклад отечественных и зарубежных ученых в развитие физики больших пластических деформаций. Далее сформулированы цели и задачи, которые решались в рамках диссертации, приведены положения, выносимые на защиту и представлены сведения об апробации работы и об основных публикациях. В конце введения дано описание структуры диссертации. В связи с разнонаправленностью задач, которые рассматривались в диссертации, в ней отсутствует отдельная глава, которая полностью посвящена обзору литературных источников. Вместо этого вначале каждой главы приводится краткий обзор литературы по соответствующей тематике.

Глава 1. Анализ ротационно–сдвиговых мезодефектов и методов расчёта их упругих полей и энергетических характеристик.

В главе проведен систематический анализ планарных источников упругих напряжений, формирующихся на границах и в стыках зерен в ходе пластической деформации поликристаллического материала в двухмерной (случай плоской деформации) и трехмерной постановках задачи. Предлагается моделировать сложные системы дислокаций, формирующихся на границах зерен поликристалла, с помощью базовых планарных мезодефектов. Основное преимущество такого подхода, по сравнению с подходами, имеющимися в литературе, заключается в относительной простоте описания таких источников напряжений и удобстве его использования для моделирования процессов структурообразования и разрушения.

В случае 2D приближения в качестве элементарных источников упругих напряжений были выбраны:

- планарный сдвиговый мезодефект, представляющий собой однородное континуальное распределение скользящих краевых дислокаций;
- планарный нормальный мезодефект, представляющий собой однородное континуальное распределение сидячих дислокаций.

Данные мезодефекты характеризуются длиной прямолинейного участка границы $2a$, на котором они располагаются и мощностью: $\mathbf{w}_\tau$ – для сдвигового мезодефекта и $\mathbf{w}_N$ – для нормального мезодефекта. Зная тензор плотности вектора Бюргерса $\mathbf{B}$ дислокаций ориентационного несоответствия, накопленных на данном участке границы в ходе пластической деформации, можно найти мощности соответствующих мезодефектов:

$$\mathbf{w}_\tau = (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{\tau}, \quad \mathbf{w}_N = (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{N}) \mathbf{N}, \quad (1)$$

где $\mathbf{N}$ – нормаль к границе, $\boldsymbol{\xi}$ – вектор, направленный вдоль линий дислокаций, $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{N} \times \boldsymbol{\xi}$ – единичный вектор, направленный вдоль участка границы (справедливо для правой системы координат). С точки зрения полей упругих напряжений, нормальный мезодефект эквивалентен диполю клиновых дисклиниаций. Суперпозиция планарных сдвигового и нормального мезодефектов дает комбинированный ротационно-сдвиговый мезодефект.

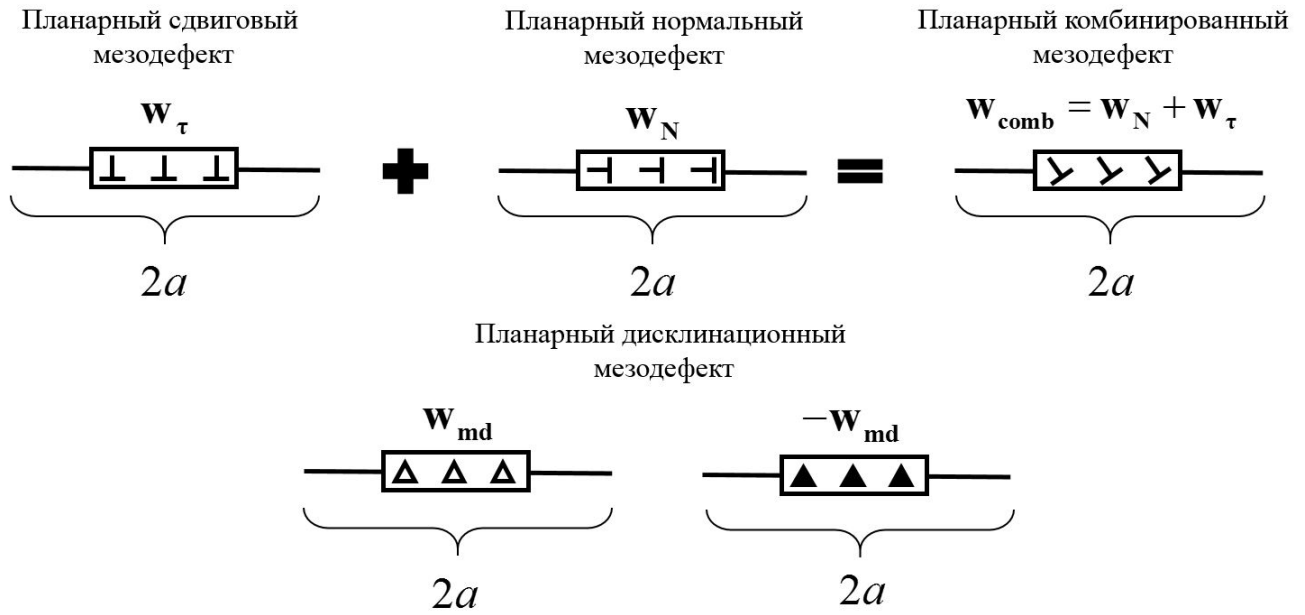


Рисунок 1 — Схематическое представление планарных мезодефектов, формирующихся на границах и в объеме зерен при пластической деформации в двумерной постановке задачи

Для характеристики дислокационной плотности в теле зерен в работе предлагается использовать систему планарных дисклинационных мезодефектов, каждый из которых представляет однородное континуальное распределение клиновидных дисклинаций. Полигональная область материала, которая содержит однородную плотность континуальных дислокаций, может быть представлена в виде системы планарных дисклинационных мезодефектов, расположенных вдоль граней полигона. Плотность вектора Бюргерса этих дислокаций ρ и мощность дисклинационного мезодефекта $\mathbf{w}_{\text{md}}^{(i)}$, расположенного на i -ой границе полигона с внешней нормалью $\mathbf{N}^{(i)}$, связаны соотношением:

$$\mathbf{w}_{\text{md}}^{(i)} = \rho \times \mathbf{N}^{(i)} \quad (2)$$

В результате, любую однородную дислокационную плотность, накопленную на прямолинейной границе или в объеме зерна, в двухмерной постановке задачи можно представить в виде суперпозиции рассмотренных выше мезодефектов. Обозначения вышеописанных мезодефектов приведены на рис. 1.

Для того чтобы ввести базовые мезодефекты в трехмерной постановке задачи был рассмотрен прямоугольный сегмент участка границы зерна, который характеризуется нормалью $\mathbf{N}$ и тангенциальными единичными векторами $\boldsymbol{\tau}$ и

ξ , направленными вдоль сторон сегмента. Показано, что любое однородное континуальное распределение дислокаций на таком сегменте можно представить в виде двух семейств континуально распределенных по сегменту дислокационных отрезков с плотностью вектора Бюргерса $\mathbf{w}_{\text{comb}}^{(\xi)}$ и $\mathbf{w}_{\text{comb}}^{(\tau)}$, соответственно (рис. 2).

В 3D приближении в качестве базовых мезодефектов были выбраны:

- планарный сдвиговый мезодефект, представляющий собой однородное континуальное распределение отрезков скользящих краевых дислокаций;
- планарный нормальный мезодефект, представляющий собой однородное континуальное распределение отрезков сидячих краевых дислокаций;
- планарный винтовой мезодефект, представляющий собой однородное континуальное распределение отрезков винтовых дислокаций.

Каждый из таких мезодефектов характеризуется длиной дислокационных отрезков l , длиной плеча $2a$ сегмента и плотностью вектора Бюргерса этих отрезков (мощностью мезодефекта) : $\mathbf{w}_{\tau}$ – мощность сдвигового мезодефекта, $\mathbf{w}_{\text{N}}$ – мощность нормального мезодефекта, $\mathbf{w}_{\xi}$ – мощность винтового мезодефекта. Суперпозиция таких мезодефектов дает комбинированный ротационно-сдвиговый мезодефект (рис. 3).

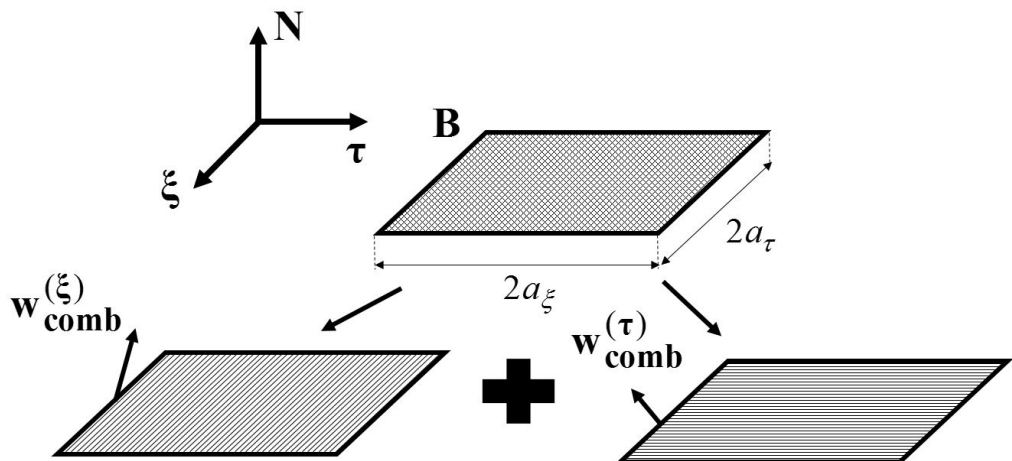


Рисунок 2 — Схема представления однородной дислокационной плотности на сегменте границы с помощью двух семейств дислокаций

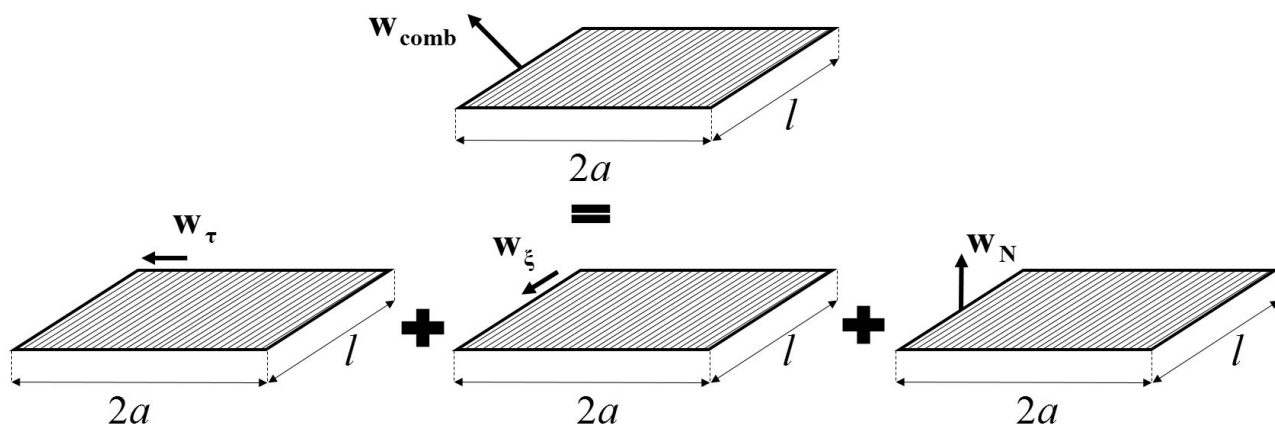


Рисунок 3 — Схематичные представления планарных мезодефектов, эквивалентных однородному распределению семейства дислокационных отрезков

В результате, любую однородную дислокационную плотность, накопленную на плоской границе в трехмерной постановке задачи, можно представить в виде суперпозиции двух комбинированных мезодефектов.

Из проведенного анализа следует, что плотность дислокаций ориентационного несоответствия, которые накапливаются на границах зерен поликристалла в ходе пластической деформации, можно аппроксимировать системой рассмотренных выше планарных мезодефектов, разбивая или покрывая область границ малыми сегментами (рис. 4).

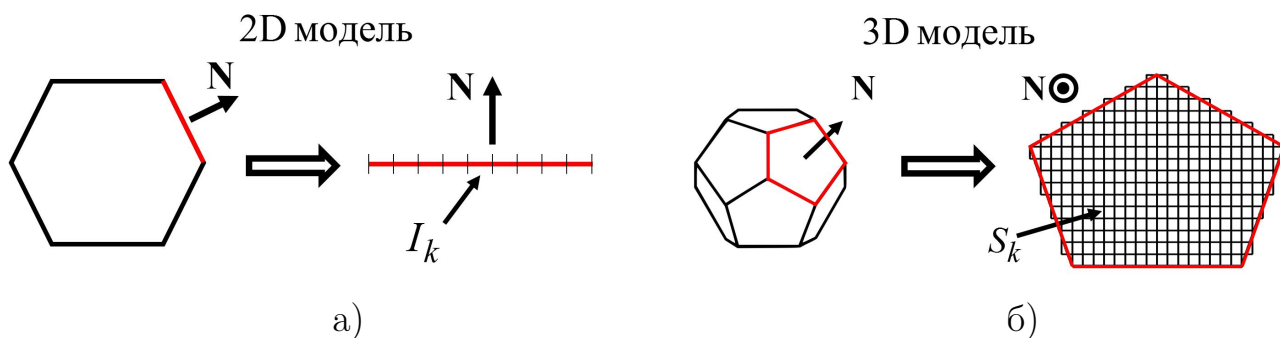


Рисунок 4 — Разбиение (покрытие) плоской грани зерна системой отрезков (брусьев) в а) 2D б) 3D постановках задачи

В общем случае количественное описание пространственного распределения дислокационной плотности, формирующейся на границах зерен в ходе пластической деформации, требует привлечения достаточно сложных методов компьютерного моделирования, что ограничивает область их применения относительно небольшими деформациями. Однако некоторые закономерности и

механизмы процессов, происходящих при больших пластических деформациях, таких как структурообразование, упрочнение, разрушение, можно понять, используя упрощенные конфигурации мезодефектов, например моделируя их однородными распределениями дислокаций, то есть базовыми мезодефектами.

Далее в главе приведены аналитические выражения для полей упругих напряжений от таких планарных мезодефектов в 2D и 3D постановках задачи. В конце главы приведены аналитические выражения для собственных упругих энергий и энергий взаимодействия рассмотренных выше мезодефектов, которые используются далее в диссертации при рассмотрении задач структурообразования и разрушения. Большинство из приведенных в диссертации аналитических выражений являются оригинальными.

Глава 2. Механизмы формирования мезодефектов на начальных стадиях пластического деформирования поликристаллов.

Известно, что на начальных стадиях фрагментации оборванные дислокационные границы как правило формируются вблизи вершин достаточно протяженных деформационных фасеток. В работе был проведен анализ характеристик деформационных фасеток и мезодефектов, формирующихся на них в случаях деформации, локализованной в полосе скольжения или плоскости решеточного скольжения. Проведен анализ взаимосвязи кристаллогеометрических параметров и дефектной структуры фасеток, образующихся на границе зерна в результате прохождения через нее полосы сдвига (рис. 5, а). Рассмотрены две модели образования фасеток: дискретная модель, в которой деформация в полосе осуществляется движением решеточных дислокаций в параллельных плоскостях скольжения и модель, в которой деформация рассматривается как движение континуально и однородно распределенных в полосе дислокаций. Получены аналитические зависимости длины и угла поворота фасетки, а также мощности ротационно-сдвиговых мезодефектов от ориентаций плоскостей скольжения решеточных дислокаций по обе стороны границы зерна, величины пластической деформации в полосе сдвига и ширины полосы.

Подробно проанализирован процесс формирования деформационной фасетки на границе зерна при ее взаимодействии с плоским скоплением решеточных дислокаций и проведён анализ характеристик ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на ней (рис. 5, б). Процесс прохождения пластиче-

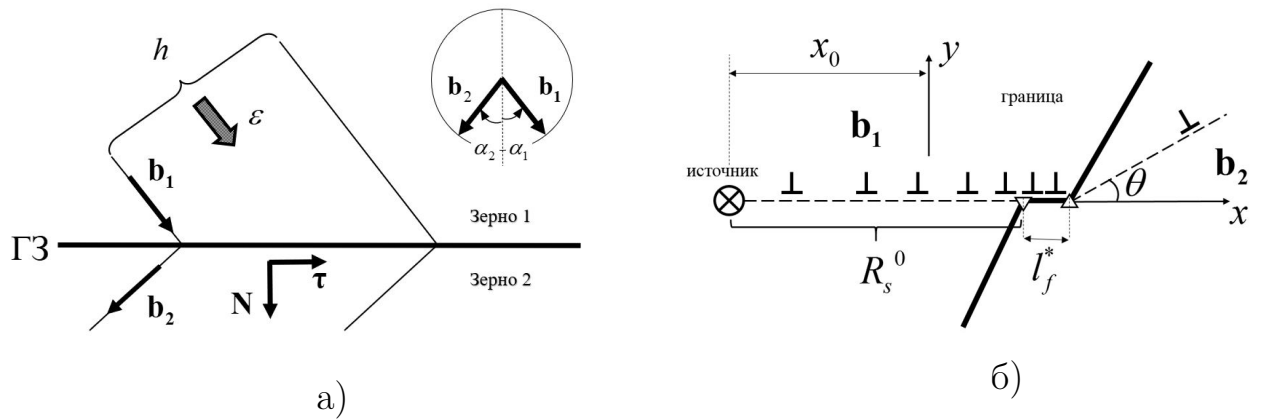


Рисунок 5 — Схематичное представление процесса прохождения через границу зерна а) полосы сдвига б) плоского скопления решеточных дислокаций

ского сдвига через границу зерна осуществляется при одновременном выполнении двух условий: энергетические затраты, необходимые для создания новых участков границы и формирования скользящей решёточной дислокации в плоскости скольжения второго зерна должны компенсироваться работой внешних напряжений; при выполнении первого условия должны обеспечиваться условия ухода сформированной решёточной дислокации во второе зерно. Показано, что появление деформационной фасетки по указанному механизму возможно только при превышении суммарного вектора Бюргерса дислокаций скопления некоторого порогового значения, зависящего от величины внешнего сдвигового напряжения σ и разориентировки границы θ . При напряжениях $\sigma \sim (5-8) \cdot 10^{-3} G$ критическое число дислокаций в скоплении относительно невелико и составляет (10 – 15) штук. Предложенная модель объясняет наблюдаемое на опыте уменьшение склонности границ зёрен к деформационному фасетированию при измельчении зеренной структуры и смещении спектра разориентировок границ в область больших углов при больших пластических деформациях (рис. 6).

Далее в главе приведен анализ механизмов релаксации упругой энергии от ротационно-сдвиговых мезодефектов за счет аккомодационной пластической деформации. Один из основных механизмов релаксации ротационных мезодефектов связан с формированием оборванных дислокационных границ вблизи морфологических особенностей границ исходных зерен.

Методом динамики дискретных дислокаций проведено моделирование формирования специфических оборванных дислокационных границ, наблюдающихся в фрагментированной структуре альфа-железа в условиях одноосного сжа-

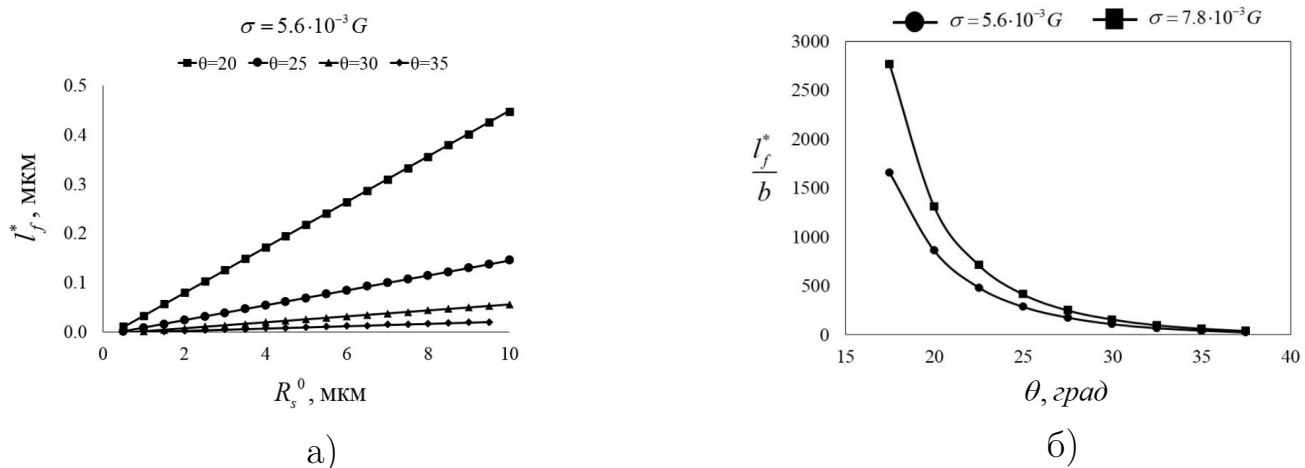


Рисунок 6 — Зависимости длины фасетки от а) исходного расстояния от дислокационного источника до границы зерна R_s^0 при различных значениях угла разориентировки границы θ , б) разориентировки границы θ при различных значениях внешнего сдвигового напряжения σ



Рисунок 7 — EBSD карты, иллюстрирующие фрагментированную структуру деформированного поликристалла альфа-железа одноосное сжатие, $\varepsilon_{pl} = 1$, скорость деформации 10 с^{-1} , при 400°C

тия (рис. 7). Особенностью наблюдаемых в эксперименте оборванных границ является то, что они резко меняют плоскость залегания при их прорастании на расстояние от вершины фасетки, сопоставимое с протяженностью самой фасетки. Рассмотрен модельный 2D бикристалл, содержащий фасетированную границу зерна, состоящую из достаточно большого количества симметричных фасеток. Исходное распределение мезодефектов на границе задавали, используя скачок тензора пластической деформации $[\varepsilon_{pl}]$ на границе зерна.

Расчеты показали, что по мере увеличения $||[\varepsilon_{pl}]||$ происходит рост внутренних напряжений от наведенных на границу зерна сдвиговых и нормальных мезодефектов. В результате чего в приграничной зоне активируется аккомо-

дационное движение дислокаций, а упругие поля от расположенных в вершинах фасеток стыковых дисклинаций разделяют потоки дислокаций и создают пространственно-локализованные области с повышенной плотностью дислокационного заряда. Далее из них постепенно формируются уходящие от вершин фасеток в тело зерна оборванные дислокационные границы. Характерная для этой стадии дислокационная структура показана на рис. 8, а. Процесс формирования таких дислокационных границ можно представить как отщепление от исходной дисклинации и уход в тело зерна частичных дисклинаций. Расщепленные дисклинации своими упругими полями возмущают потоки решеточных дислокаций, движущихся из объема зерен по активным плоскостям скольжения по направлению к границе, вследствие чего на них могут зарождаться новые оборванные границы другой ориентации. Результаты моделирования дислокационной структуры, формирующейся при взаимодействии прямолинейной оборванной границы с потоком дислокаций, движущихся в теле зерна под действием внешнего напряжения представлены на рис. 8, б.

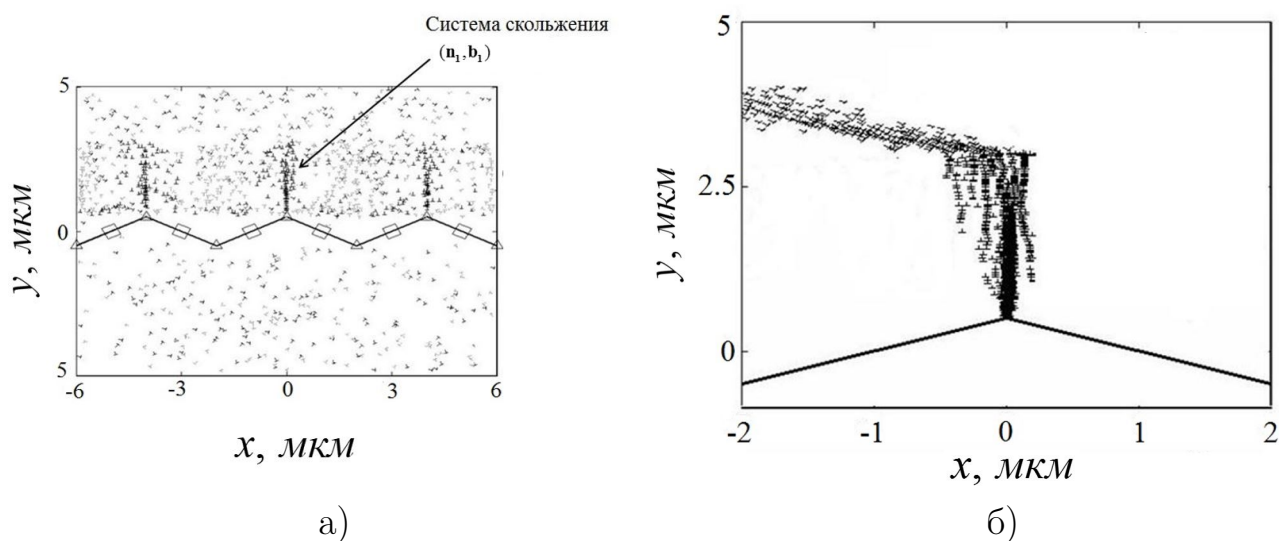


Рисунок 8 — Характерная дислокационная структура формирующаяся а) на начальной стадии образования дислокационных границ вблизи фасетированной границы в условиях одноосного сжатия бикристалла, б) на стыке фасеток при действии двух (основной и аккомодационной) систем скольжения

Далее в главе рассмотрен процесс релаксации полей упругих напряжений от планарного сдвигового мезодефекта. Показано, что этот процесс может осуществляться путем формирования в близлежащей области зерна аккомодационной полосы скольжения. Такие полосы скольжения наблюдаются на электронно-микроскопических снимках структуры деформированных поли-

кристаллов. В качестве исходного рассмотрен мезодефект с однородной плотностью скользящих дислокаций $\mathbf{w}_\tau$ и длиной $2a$ (рис. 9, а). Процесс его аккомодации осуществлялся посредством последовательного испускания в тело зерна дислокационных стенок с разориентировкой $\mathbf{w}_{\text{wall}}$, численно равной плотности вектора Бюргерса распределенных вдоль стенки дислокаций. Образование такой стенки в рамках модели дискретных дислокаций можно рассматривать как последовательное испускание дислокаций, осуществляемое таким образом, что каждая новая дислокация встраивается в стенку, сформированную ранее испущенными дислокациями. Отщепление и последующее движение стенок осуществлялось в суммарном поле упругих напряжений мезодефекта и внешнего запирающего напряжения, в результате чего, дислокационная структура исходного мезодефекта трансформировалась. Процесс эволюции мезодефекта продолжался до тех пор, пока система не приходила в равновесное положение, то есть в такое положение, в котором вариация координаты любой из стенок или отщепление новой дает увеличение суммарной энергии системы (рис. 9, б).

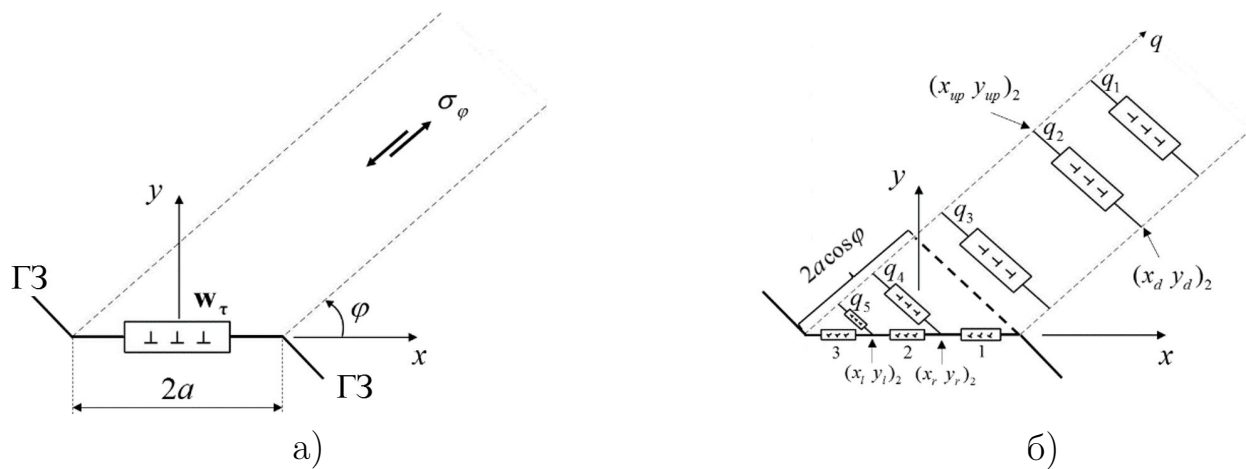


Рисунок 9 — Схематичное представление сдвигового мезодефекта а) в исходном состоянии, б) после релаксации

В результате проведения численных расчетов были найдены равновесные положения системы при характерных параметрах исходного мезодефекта и кристаллогеометрии полосы аккомодационного скольжения. В качестве примера на рис. 10 приведены зависимости энергии релаксированного состояния E/E_0 , от ориентации полосы φ при различных значениях параметров исходного мезодефекта $2a$ и w_τ .

Как следует из проведенного анализа, процесс аккомодационной пластиче-

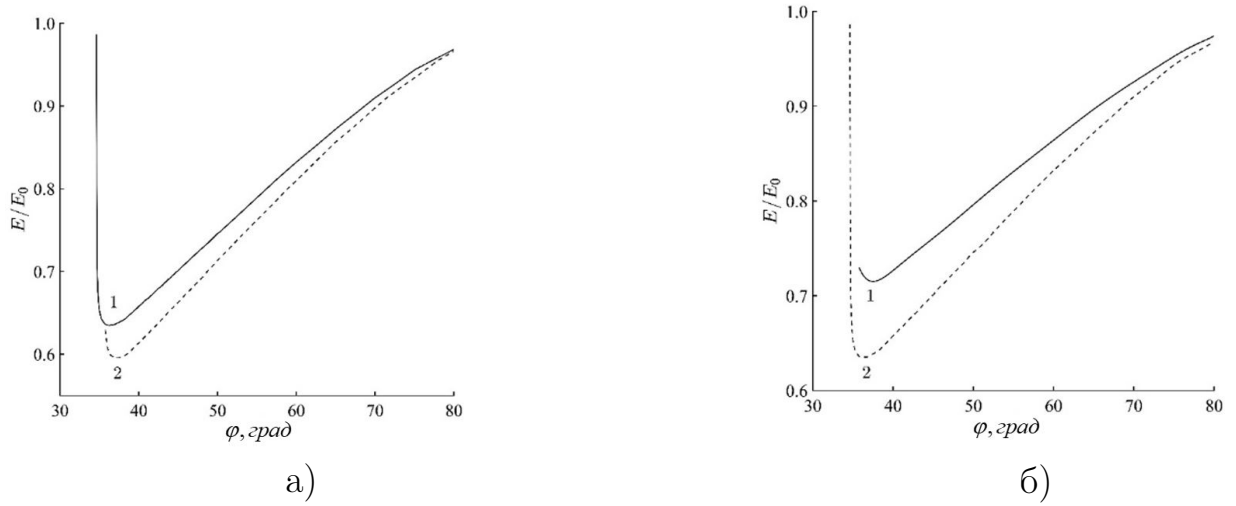


Рисунок 10 — Зависимость нормированной упругой энергии системы дефектов E/E_0 после процесса релаксации, от величины угла φ при различных величинах а) длины мезодефекта: 1 — $2a = 0.2$ мкм, 2 — $2a = 0.4$ мкм ($w_\tau = 6 \cdot 10^{-2}$, $\sigma_\varphi = 30$ МПа), б) мощности мезодефекта: 1 — $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$, 2 — $w_\tau = 6 \cdot 10^{-2}$ ($2a = 0.2$ мкм, $\sigma_\varphi = 30$ МПа)

ской деформации, приводящий к релаксации упругой энергии планарного мезодефекта, оказывается возможным только в определенном диапазоне значений угла φ . При этом существует критический угол φ_{cr} , меньше которого аккомодационная пластическая деформация по механизму испускания дислокационных стенок оказывается энергетически невыгодной. Распределение пластической деформации в аккомодационной полосе ε_{pl} при этом имеет характерный вид, приведенный на рис. 11.

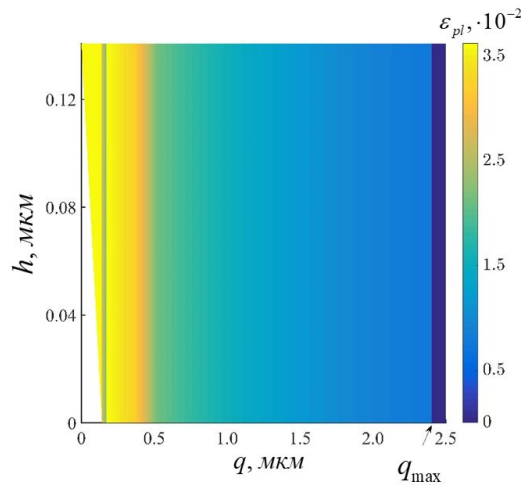


Рисунок 11 — Распределение величины пластической деформации по длине полосы скольжения при $\varphi = 45^\circ$, $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$, $2a = 0.2$ мкм, $\sigma_\varphi = 30$ МПа

Глава 3. Роль мезодефектов в процессах зарождения и распространения микротрещин в фрагментированной структуре.

В случае сильно фрагментированных структур, когда размер фрагментов не превышает $0.2 - 0.3$ мкм, классические модели разрушения поликристаллов, основанные на представлениях о формировании трещины в голове заторможенного границей зерна плоского скопления решёточных дислокаций, становятся неприменимы. Исходя из этого в диссертации сделан вывод о том, что модели зарождения, распространения и накопления стабильных микротрещин в материалах с сильно фрагментированной структурой должны быть построены на представлении о решающей роли мезодефектов в этих процессах.

Для проведения анализа условий существования стабильных микротрещин и их характеристик был использован энергетический метод, согласно которому распространение трещины происходит в случае, если:

$$\frac{dE_{el}}{dl} + \frac{d\Gamma}{dl} \leq 0, \quad (3)$$

где dE_{el} – изменение (релаксация) упругой энергии системы при продвижении микротрещины на величину dl , $d\Gamma$ – изменение энергии системы, связанное с формированием берегов трещины, выделением тепла, формированием пластической зоны и т.д при продвижении микротрещины на величину dl .

Для расчета E'_{el} использовали метод конфигурационной силы. Для плоской деформации изотропного материала выражение для конфигурационной силы F , определяемой как величина упругой энергии, выделяющейся при продвижении трещины на единичный отрезок, имеет вид:

$$F(l) = -\frac{dE_{el}}{dl} = \frac{l}{8D} (\chi \bar{\sigma}_{\varphi\varphi}^2 + \bar{\sigma}_{r\varphi}^2) \quad (4)$$

где $D = G/2\pi(1 - \nu)$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, l – длина трещины, φ – угол, задающий ориентацию рассматриваемой трещины, $\bar{\sigma}_{\varphi\varphi}$, $\bar{\sigma}_{r\varphi}$

– средневзвешенные суммарные напряжения в окрестности трещины:

$$\bar{\sigma}_{\varphi\varphi} = \frac{2}{\pi l} \int_0^l \sigma_{\varphi\varphi}(r, \varphi) \sqrt{\frac{r}{l-r}} dr, \quad \bar{\sigma}_{r\varphi} = \frac{2}{\pi l} \int_0^l \sigma_{r\varphi}(r, \varphi) \sqrt{\frac{r}{l-r}} dr, \quad (5)$$

$$\chi = \begin{cases} 1, & \bar{\sigma}_{\varphi\varphi} > 0, \\ 0, & \bar{\sigma}_{\varphi\varphi} \leq 0 \end{cases}$$

где $\sigma_{\varphi\varphi}(r, \varphi), \sigma_{r\varphi}(r, \varphi)$ – компоненты напряжения в полярной системе координат.

Считали, что вкладом диссипативных процессов в изменение энергии рассматриваемой системы при распространении трещины можно пренебречь. Также исходя из того, что в сильно-фрагментированной структуре протекание пластической деформации внутри фрагмента затруднено, вследствие чего затруднена и релаксация напряжений в кончике трещины, то предполагалось, что микротрещина распространяется без формирования пластической зоны. Тогда, $d\Gamma = 2\gamma dl$, где γ – удельная энергия свободной поверхности (не зависит от длины микротрещины).

Равновесные длины микротрещин для заданного направления φ будут определяться из соотношения $F(l_{eq}, \varphi) = 2\gamma$, γ – удельная энергия свободной поверхности. При этом равновесная длина трещины l_{st} называется стабильной или устойчивой, если выполняется условие $F'(l_{st}, \varphi) < 0$, то есть дальнейший рост трещины является энергетически невыгодным процессом. Равновесная длина трещины l_{un} называется нестабильной или неустойчивой, если выполняется условие $F'(l_{un}, \varphi) > 0$. В случае $F'(l, \varphi) = 0$ (или существовании только односторонней производной) для исследования стабильности микротрещин необходимо проводить более детальный анализ.

В начале главы проведен анализ условий существования стабильных микротрещин, формирующихся в полях расположенного на границе фрагмента комбинированного ротационно-сдвигового мезодефекта (рис. 12). Полагалось, что микротрещина, формируется вблизи отрицательной дисклинации диполя, создающей благоприятные для ее появления высокие растягивающие напряжения. На рис. 13 приведен характерный вид зависимостей конфигурационной силы $F(l)$ от длины микротрещины.

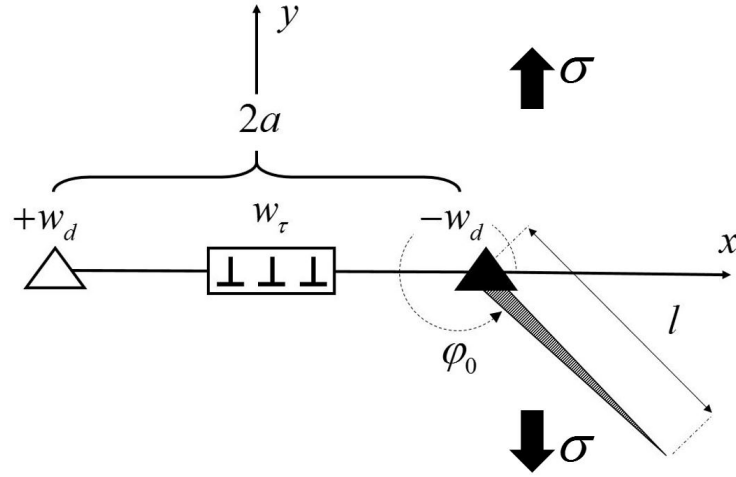
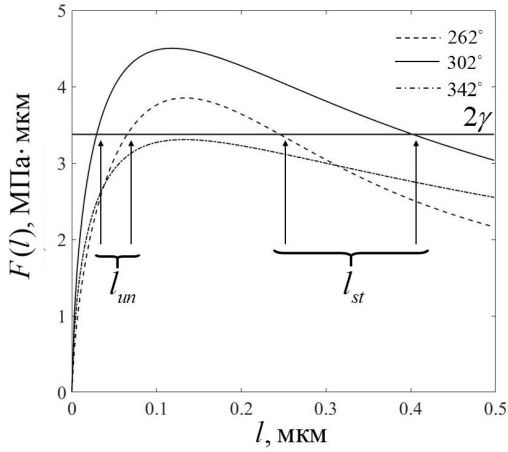
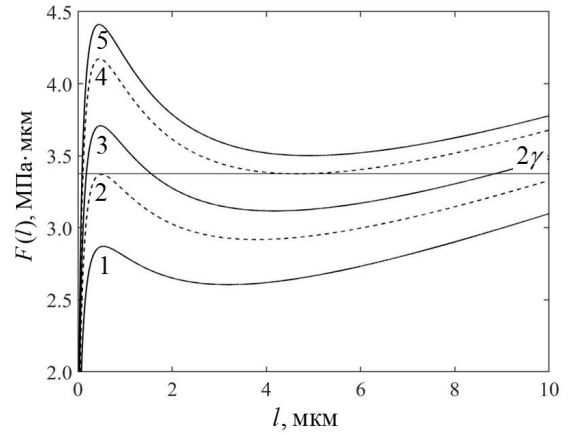


Рисунок 12 — Схематическое изображение комбинированного мезодефекта и микротрещины, формирующейся вблизи отрицательной дисклинации диполя



а)



б)

Рисунок 13 — Зависимости конфигурационной силы F от длины формирующейся на мезодефекте трещины l а) во внутренних полях мезодефекта: $w_\tau = w_N = 0.05$, $2a = 0.4$ мкм, б) в суммарном внешнем однородном и внутреннем поле мезодефекта: $w_\tau = 0$, $2a = 0.7$ мкм, $\sigma/G = 2.2 \cdot 10^{-3}$, 1 — $w_N = 0.05$, 2 — $w_N = 0.0549$, 3 — $w_N = 0.058$, 4 — $w_N = 0.062$, 5 — $w_N = 0.064$

Далее определены критические параметры рассматриваемой системы, при которых могут существовать стабильные микротрещины. На рис. 14 приведены области существования стабильных микротрещин в конфигурационном пространстве $(w_N, 2a)$.

Видно, что при фиксированных значениях внешнего напряжения существование стабильной трещины возможно лишь в определенной области значений параметров мощности и длины мезодефекта. При увеличении его длины

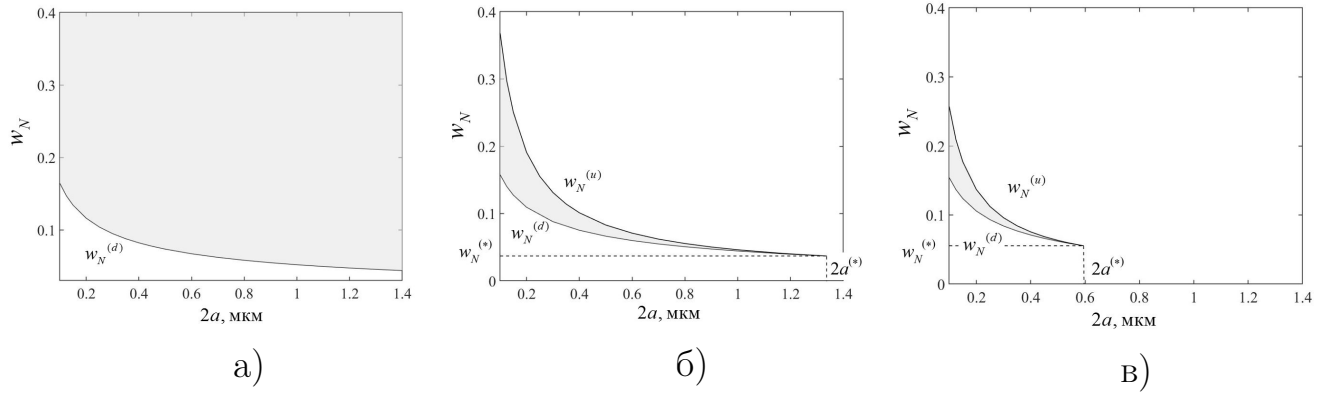


Рисунок 14 — Области существования стабильной трещины в конфигурационном пространстве параметров $(w_N, 2a)$ при $w_\tau = 0$ а) $\sigma/G = 0.0$, б) $\sigma/G = 2.2 \cdot 10^{-3}$, в) $\sigma/G = 3.3 \cdot 10^{-3}$

происходит постепенное сужение интервала значений мощности $(w_N^{(d)}, w_N^{(u)})$ и стягивание его в точку при некотором значении длины плеча диполя $2a^{(*)}$. Сравнение приведённых диаграмм показывает, что увеличение внешнего напряжения σ приводит к всё более выраженной локализации области существования стабильных микротрещин в конфигурационном пространстве параметров мезодефекта и её смещению в сторону меньших значений длины мезодефекта.

Далее рассмотрены условия необходимые для зарождения трещины в тройном стыке зерен при атермическом проскальзывании вдоль границы фрагмента, содержащей сдвиговый мезодефект (рис. 15, а). Полагалось, что взаимное смещение зёрен вдоль любого локального участка рассматриваемой границы возможно лишь в том случае, когда действующее на нём сдвиговое напряжение превышает некоторое пороговое значение τ_0 . В результате проскальзывания и торможения пластического сдвига вблизи тройных стыков зёрен увеличивается концентрация напряжений, а на границе устанавливается равновесное распределение плотности вектора Бюргерса виртуальных скользящих дислокаций, при котором суммарное сдвиговое напряжение в каждой точке границы меньше или равно пороговому напряжению проскальзывания (рис. 15, б, рис. 16).

В качестве условия появления микротрещины использовался критерий Стро. В данном случае этот критерий можно сформулировать как условие, необходимое для накопления суммарного вектора Бюргерса дислокаций равного $2b$ (b – вектор Бюргерса решёточной дислокации) в примыкающей к тройному стыку области границы протяжённостью $2b$.

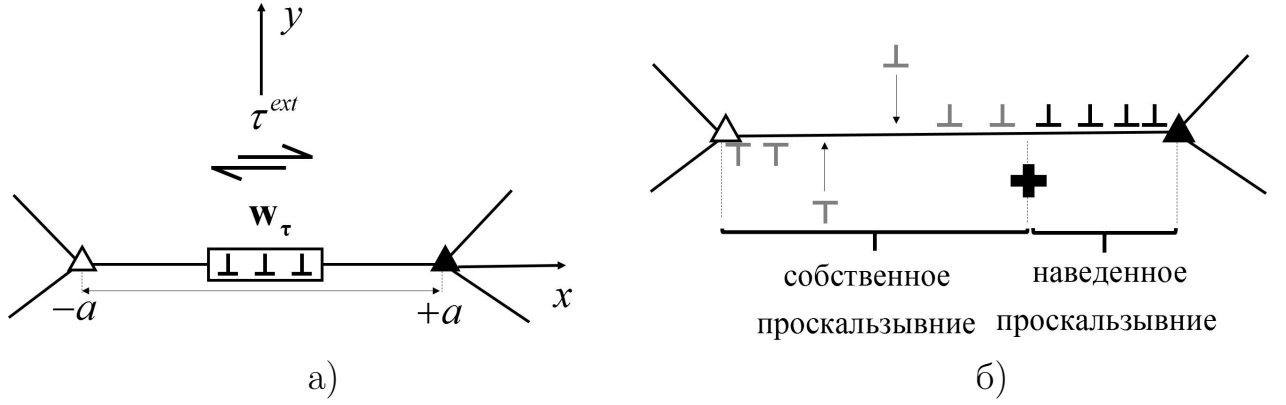


Рисунок 15 — Схема сдвигового мезодефекта в а) исходном состоянии б) после наведенного и собственного проскальзываний

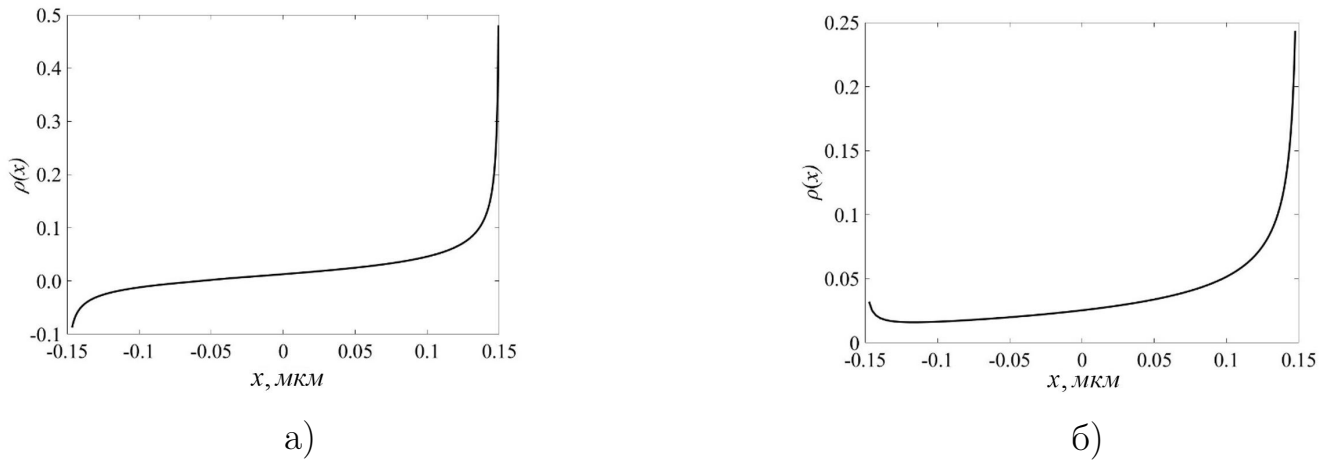


Рисунок 16 — Равновесные распределения плотности вектора Бюргерса $\rho(x)$ полученные при следующих параметрах системы а) $\tau^{ext} = \tau_{cr} = 3.1 \cdot 10^{-2}G$, $2a = 0.3$ мкм, $w_\tau = 0.02$, б) $\tau^{ext} = \tau_{cr} = 2.1 \cdot 10^{-2}G$, $2a = 0.3$ мкм, $w_\tau = 0.04$

Зависимости критического внешнего напряжения τ_{cr} , при достижении или превышении которого выполняется критерий зарождения микротрещины, от длины границы $2a$, рассчитанные при различной мощности исходного сдвигового мезодефекта w_τ при значении порогового напряжения $\tau_0 = 0.8 \cdot 10^{-2}G$, приведены на рис. 17. Видно, что наличие в границе дислокаций сдвигового мезодефекта, реализующих наведённое проскальзывание, приводит к значительному уменьшению τ_{cr} по сравнению со случаем собственного проскальзывания в отсутствие мезодефекта. Рассмотренная модель позволяет объяснить зарождения микротрещин в мелкозернистых материалах и материалах с фрагментированной структурой.

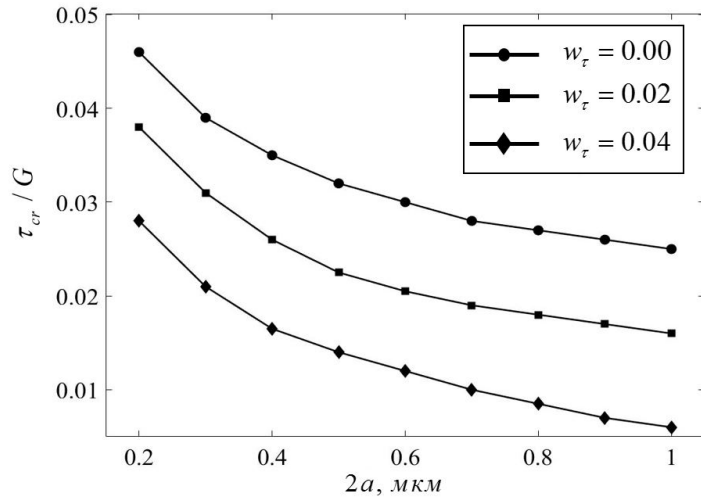


Рисунок 17 — Зависимость критического напряжения зарождения трещины τ_{cr} от длины границы $2a$ при различных значениях мощности мезодефекта w_τ и фиксированном значении порогового напряжения $\tau_0 = 0.8 \cdot 10^{-2}G$

В заключении главы рассмотрен случай блокировки распространяющихся микротрещин упругими полями от мезодефектов. Сформированная вблизи одного из рассмотренных выше мезодефектов нестабильная микротрещина может при своем распространении стабилизироваться упругими полями соседних мезодефектов. Подробно рассмотрены случаи блокировки дислокационной трещины с вектором Бюргерса b_T упругим полем дисклинационного диполя (рис. 18, а) и упругим полем сдвигового мезодефекта (рис. 18, б).

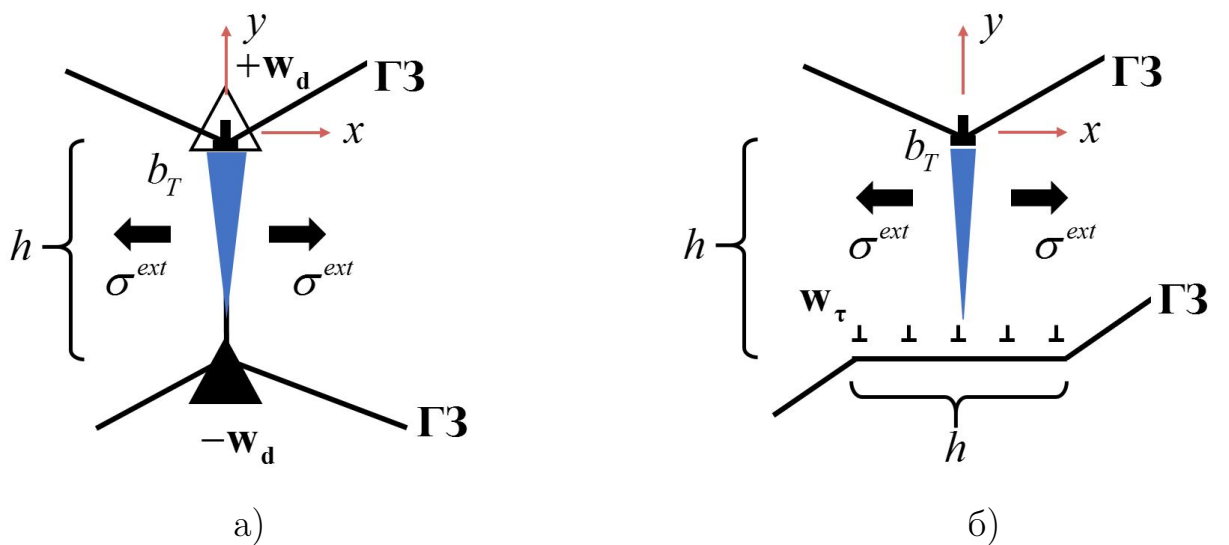


Рисунок 18 — Схема дислокационной трещины, в случае ее блокировки а) диполем клиновых дисклинаций, б) планарным сдвиговым мезодефектом

При этом мощность дисклинационного диполя характеризовалась величиной проекции w_N вектора $\mathbf{w}_N$ на ось Ox : если $w_N > 0$, то микротрещина распространялась из стыка, содержащего дисклинацию, создающую в окрестности стыка сжимающие напряжения; если $w_N < 0$, то микротрещина распространялась из стыка, содержащего дисклинацию, создающую растягивающие напряжения. В случае сдвигового мезодефекта, рассматривалась микротрещина, распространяющаяся из стыка зёрен по нормали к плоскости мезодефекта. Мощность мезодефекта считали положительной, если величина проекции w_τ вектора $\mathbf{w}_\tau$ на ось Ox положительна, и отрицательной в противном случае.

Результаты расчётов областей стабильности трещин в конфигурационном пространстве параметров (b_T, w_N) и (b_T, w_τ) и карты распределения в этом пространстве длин стабильных трещин при внешнем напряжении $\sigma^{ext}/G = 0.02$ приведены на рис 19.

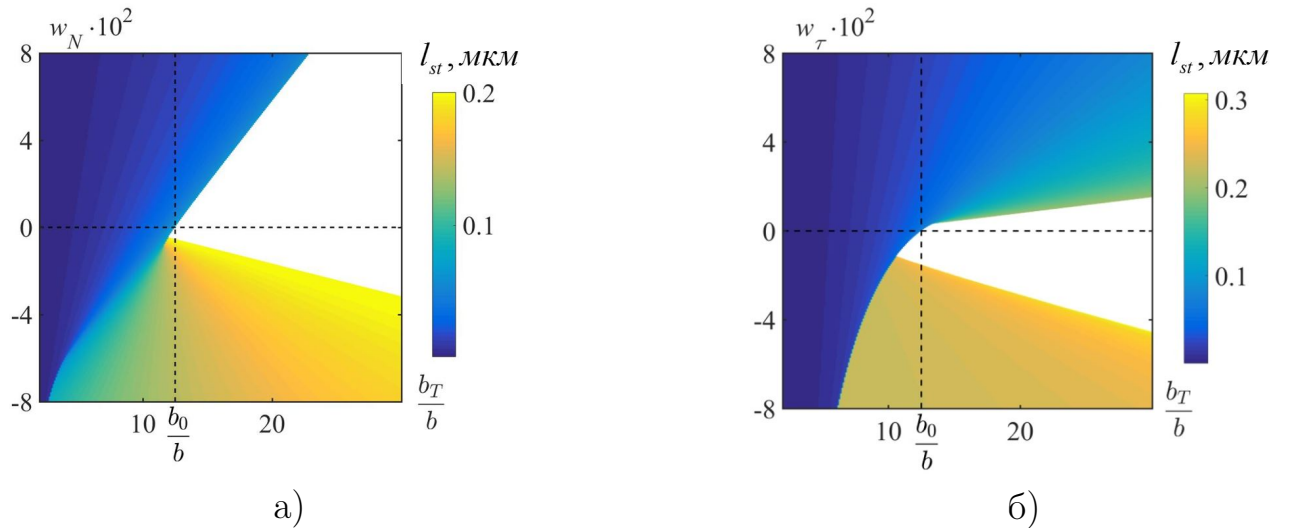


Рисунок 19 — Карты распределения длин стабильных трещин в случае их блокировки а) дисклинационным диполем, б) сдвиговым мезодефектом при величине внешних напряжений $\sigma/G = 0.02$

Белым цветом на них выделены те области, в которых стабильных трещин не существует. Также установлено, что как в случае дисклинационного диполя, так и в случае сдвигового мезодефекта, с увеличением внешнего напряжения области неустойчивости трещин сдвигаются в сторону меньших значений b_T и расширяются в сторону больших значений мощности мезодефектов. При этом при фиксированных величинах b_T и σ^{ext} длины стабильных микротрещин оказываются больше в интервале отрицательных значений мощности мезодефек-

тов, чем в интервале их положительных значений.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Проведён систематический анализ ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границах зерен и в приграничных областях при пластической деформации поликристаллических материалов. Для наиболее типичных мезодефектов, получены аналитические выражения для полей упругих напряжений, собственных упругих энергий и энергии их взаимодействия.
2. Рассмотрены модели образования ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границах зерен поликристаллического материала, при их взаимодействии с локализованной пластической деформацией. Получены аналитические выражения, позволяющие по заданным параметрам решеточного скольжения рассчитать характеристики деформационных фасеток.
3. Методом динамики дискретных дислокаций проведено моделирование процессов формирования оборванных дислокационных границ на фасетированных границах зерен на начальных стадиях фрагментации материала. Показано, что особенности морфологии и размеры этих границ определяются геометрией фасетированной границы и загрузкой актуальных систем скольжения решеточных дислокаций.
4. Предложена модель аккомодационной пластической деформации и релаксации упругой энергии планарных сдвиговых мезодефектов, возникающих на границах зёрен в процессе пластической деформации поликристаллов. Показано, что аккомодационная подстройка структуры может осуществляться путём последовательного отщепления от мезодефекта и ухода в тело зерна дислокационных стенок. Рассчитаны зависимости длины аккомодационной полосы скольжения от её угла наклона по отношению к границе зерна при разных величинах запирающего внешнего напряжения и характеристиках исходного сдвигового мезодефекта. Получено пространственное распределение величины аккомодационной пластической деформации в окрестности мезодефекта.
5. Определены характеристики ротационно-сдвигового мезодефекта, при которых возможно существование стабильной микротрещины, формирующейся

вблизи мезодефекта. Проведен анализ влияния характеристик мезодефекта на ориентацию и длину стабильной микротрещины.

6. Проведён анализ условий существования стабильных микротрещин в суммарном поле внешнего напряжения и напряжении от двухосного диполя клиновых дисклинаций. В конфигурационном пространстве параметров рассматриваемой системы определены области в которых возможно появление таких трещин. Показано, что увеличение внешнего напряжения приводит к существенной локализации этих областей, а также к стягиванию интервалов значений длин стабильных микротрещин.
7. Предложена модель зарождения микротрещины в стыке зерен за счет атермического проскальзывания по большеугловой границе зерна, содержащей сдвиговый мезодефект. Показано, что при превышении величины внешнего напряжения некоторого порогового значения планарный мезодефект, теряет устойчивость. В результате наведенного проскальзывания, осуществляемого перемещением виртуальных скользящих дислокаций мезодефекта, вблизи стыка зёрен возникает концентратор напряжений, создающий условия для появления дислокационной трещины. Получены зависимости величины критического напряжения зарождения трещины от протяжённости границы зерна, мощности исходного сдвигового мезодефекта и величины порогового напряжения атермического проскальзывания зёрен вдоль границы.
8. Рассмотрены условия блокировки растущих под действием поля внешних напряжений дислокационных трещин упругими полями диполя клиновых дисклинаций и планарного сдвигового мезодефекта. С использованием метода конфигурационной силы в конфигурационном пространстве параметров (мощность мезодефекта – вектор Бюргерса трещины, внешнее напряжение) определены области существования стабильных трещин, и построены карты распределения длин таких трещин. При типичных для стадии предразрушения материала размерах фрагментов и величинах внешнего напряжения длина таких трещин оказывается сопоставимой с размером фрагментов и лежит в интервале значений 0.1 – 0.3 мкм.

ОСНОВНЫЕ НАУЧНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Rybin V. V., Perevezentsev V. N., Kirikov S. V. Formation of strain-induced broken dislocation boundaries at faceted grain boundaries // The Physics of Metals and Metallography. – 2018. – V. 119. – № 5. – P. 421-429.
2. Kirikov S. V., Perevezentsev V. N., Svirina Y. V. Computer simulation of the kinetics of accumulation of primary mesodefects at grain boundaries and their junctions // Russian metallurgy (Metally). – 2018. – V. 2018. – № 10. – P. 904-909.
3. Kirikov S. V., Svirina J. V. The influence of different types of mesodefects on the formation of strain induced broken dislocation boundaries at the faceted grain boundary // Materials Physics and Mechanics. – 2018. – V. 38. – № 1. – P. 33-39.
4. Кириков С. В., Перевезенцев В. Н. К расчету внутренних напряжений от мезодефектов, накапливающихся на границах раздела при пластической деформации твердых тел // Проблемы прочности и пластичности. – 2019. – Т. 81. – № 2. – С. 212-221.
5. Kirikov S. V., Perevezentsev V. N., Pupynin A. S. On the Effect of External Stress on the Stability of a Crack Located near a Wedge Disclination Dipole // The Physics of Metals and Metallography. – 2021. – V. 122. – № 8. – P. 820-824.
6. Perevezentsev V. N., Kirikov S. V., Svirina Y. V. Conditions of Strain-Induced Facet Formation during Interaction between a Lattice Dislocation Pile-Up and a Grain Boundary // The Physics of Metals and Metallography. – 2020. – V. 121. – № 10. – P. 929-935.
7. Кириков, С. В., Перевезенцев В. Н. Анализ условий существования стабильных микротрещин в упругом поле напряжений от ротационно-сдвигового мезодефекта // Письма о материалах. – 2021. – Т. 11. – № 1(41). – С. 50-54.
8. Kirikov S. V., Pupynin A. S., Svirina Yu. V. Analysis of local fields of elastic stress generated by rotational-shear mesodefects near the junctions of grains // Problems of strength and plasticity. – 2021. – V. 83. – № 2. – P. 235-244.

9. Perevezentsev, V. N. Kirikov S. V., Svirina Ju. V. The role of a shear planar mesodefect in the nucleation of a crack at a grain junction due to athermal grain boundary sliding // Letters on Materials. – 2021. – V. 11. – № 4(44). – P. 467-472.
10. Кириков С.В., Перевезенцев В.Н., Пупынин А.С. Модель аккомодации сдвигового планарного мезодефекта // Деформация и разрушение материалов. – 2022. – № 5. – С. 2-10.
11. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N., Pupynin A.S., Svirina J.V. Crack arrest by the elastic field of wedge disclination and planar shear mesodefect // Materials Physics and Mechanics. – 2022. – № 1. – P. 33-39.