

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ДЕФЕКТНОЙ ПОДСИСТЕМЫ ГЕТЕРОФАЗНЫХ СПЛАВОВ

Комарь Е.В.

Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск

Ключевые слова: дефектная подсистема, дислокации, гетерофазные материалы с некогерентными частицами, математическое моделирование.

Аннотация. В работе представлены результаты исследования кинетики дефектной подсистемы на основе математической модели пластической деформации гетерофазных сплавов с некогерентными частицами, включающей одно уравнения баланса дислокаций. Модель учитывает аннигиляцию дислокаций за счет межузельных атомов. Показано, что для эволюции дислокационной подсистемы наблюдается два стационарных состояния – устойчивое и неустойчивое.

QUALITATIVE STUDY OF THE EVOLUTION OF THE DISLOCATION SUBSYSTEM OF DISPERSED-HARDENED MATERIALS

Komar E.V.

Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk

Keywords: defective subsystem, dislocations, heterophase materials with incoherent particles, mathematical modeling.

Abstract. The paper presents the results of a study of the kinetics of a defective subsystem based on a mathematical model of plastic deformation of heterophase alloys with incoherent particles, including one dislocation balance equation. The model takes into account the annihilation of dislocations due to interstitial atoms. It is shown that for the evolution of the dislocation subsystem, two stationary states are observed – stable and unstable.

Математическое моделирование механизмов пластической деформации, основанное на теоретических и экспериментальных сведениях о дефектах кристаллической решетки и их поведения при различных режимах термомеханического нагружения, является важной составляющей для целенаправленного создания сплавов с заданными механическими свойствами.

Проведем исследование кинетики дефектной подсистемы гетерофазных сплавов на основе математической модели, состоящей из одного уравнения баланса дислокаций, учитывая при этом, что в гетерофазном материале существуют дополнительные препятствия (частицы второй фазы), на которых происходит накопление дислокаций [1-3]. Исследование проведем для области низких температур, где достаточно высокой подвижностью обладают только межузельные атомы, поэтому ограничимся рассмотрением аннигиляции дислокаций в результате осаждения на них деформационных точечных дефектов именно этого типа.

$$\frac{d\rho}{da} = \frac{FP_j \xi \langle \Delta E_k \rangle}{8\tau_{dyn} b^3} \rho + \frac{\langle \chi \rangle \delta}{2\Lambda_p^2 b} + \frac{1}{\Lambda_p b} - q \frac{16\tau_{dyn}}{3Gb} \rho^{\frac{1}{2}}. \quad (1)$$

Здесь a – деформация сдвига; ρ – суммарная плотность дислокаций; F – безразмерный параметр, определяемый геометрией зоны сдвига; b – модуль вектора Бюргерса; G – модуль сдвига; τ_{dyn} – напряжение, избыточное над статическим сопротивлением движению дислокаций; $\xi \approx 0,5$ – фактор Смоллмена; $\langle \chi \rangle$ – параметр, характеризующий геометрию дислокаций на частицах; Λ_p – расстояние между частицами; δ – диаметр частицы; P_j – доля порогообразующих дислокаций леса [1-3].

Для определения стационарных состояний уравнения (1) запишем уравнение:

$$\rho - \frac{128q\tau_{dyn}^2 b^2}{3FP_j \xi \langle \Delta E_k \rangle G} \rho^{\frac{1}{2}} + \frac{8\tau_{dyn} b^3}{FP_j \xi \langle \Delta E_k \rangle} \left(\frac{1}{\Lambda_p b} + \frac{\langle \chi \rangle \delta}{2\Lambda_p^2 b} \right) = 0. \quad (2)$$

Рассмотрим случай $\tau_{dyn} = \text{const}$.

Уравнение (2) можно представить в виде

$$\left(\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho_s^1} \right) \left(\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho_s^2} \right) = 0,$$

где $\sqrt{\rho_s^1}$ и $\sqrt{\rho_s^2}$ – корни квадратного трехчлена в правой части уравнения (2), и

$$\rho_s^{1,2} = \left(\frac{64q\tau_{dyn}^2 b^2}{3FP_j \xi \langle \Delta E_k \rangle G} \mp \sqrt{\left(\frac{64q\tau_{dyn}^2 b^2}{3FP_j \xi \langle \Delta E_k \rangle G} \right)^2 - \frac{8\tau_{dyn} b^3}{FP_j \xi \langle \Delta E_k \rangle} \left(\frac{1}{\Lambda_p b} + \frac{\langle \chi \rangle \delta}{2\Lambda_p^2 b} \right)} \right)^2.$$

Представим уравнение (1) эволюции дислокационной подсистемы в виде

$$\frac{d\rho}{da} = M \left(\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho_s^1} \right) \left(\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho_s^2} \right), \quad (3)$$

где $M = \frac{FP_j \xi \langle \Delta E_k \rangle}{8\tau_{dyn} b^3}$.

Очевидно, что уравнение (3) имеет два стационарных значения при $\rho = \rho_s^1$ и $\rho = \rho_s^2$, анализ которых показал, что возможны три случая. В первом случае, при низких значениях τ_{dyn} оба значения стационарных плотностей дислокаций ρ_s^1 , ρ_s^2 являются комплексными, и стационарные состояния дислокационной подсистемы отсутствуют (рис. 1, а). В этом случае при любых имеющих физический смысл значениях параметров модели и при любых начальных значениях ρ_0 плотность дислокаций в процессе деформации возрастает. Физически это может быть связано с двумя причинами: 1) с уменьшением τ_{dyn} снижается интенсивность производства точечных дефектов дислокациями, так как замедление быстрых дислокаций, а затем их иммобилизация происходит при меньших линейных плотностях порогов. 2) уменьшается пробег дислокаций l_d , поэтому осуществление той же деформации связано с генерацией большей плотности дислокаций.

Во втором случае, при высоких значениях τ_{dyn} оба корня являются действительными и различными (рис. 1, в). Стационарное состояние, характеризуемое плотностью ρ_s^1 устойчиво, то есть при любом отклонении

плотности дислокаций от стационарной величины дислокационная подсистема возвращается к стационарному значению плотности дислокаций ρ_s^1 . Состояние, характеризуемое стационарным значением плотности дислокаций ρ_s^2 , соответствует неустойчивому равновесию. При любом отклонении плотности дислокаций от стационарной дислокационная подсистема удаляется от стационарного состояния.

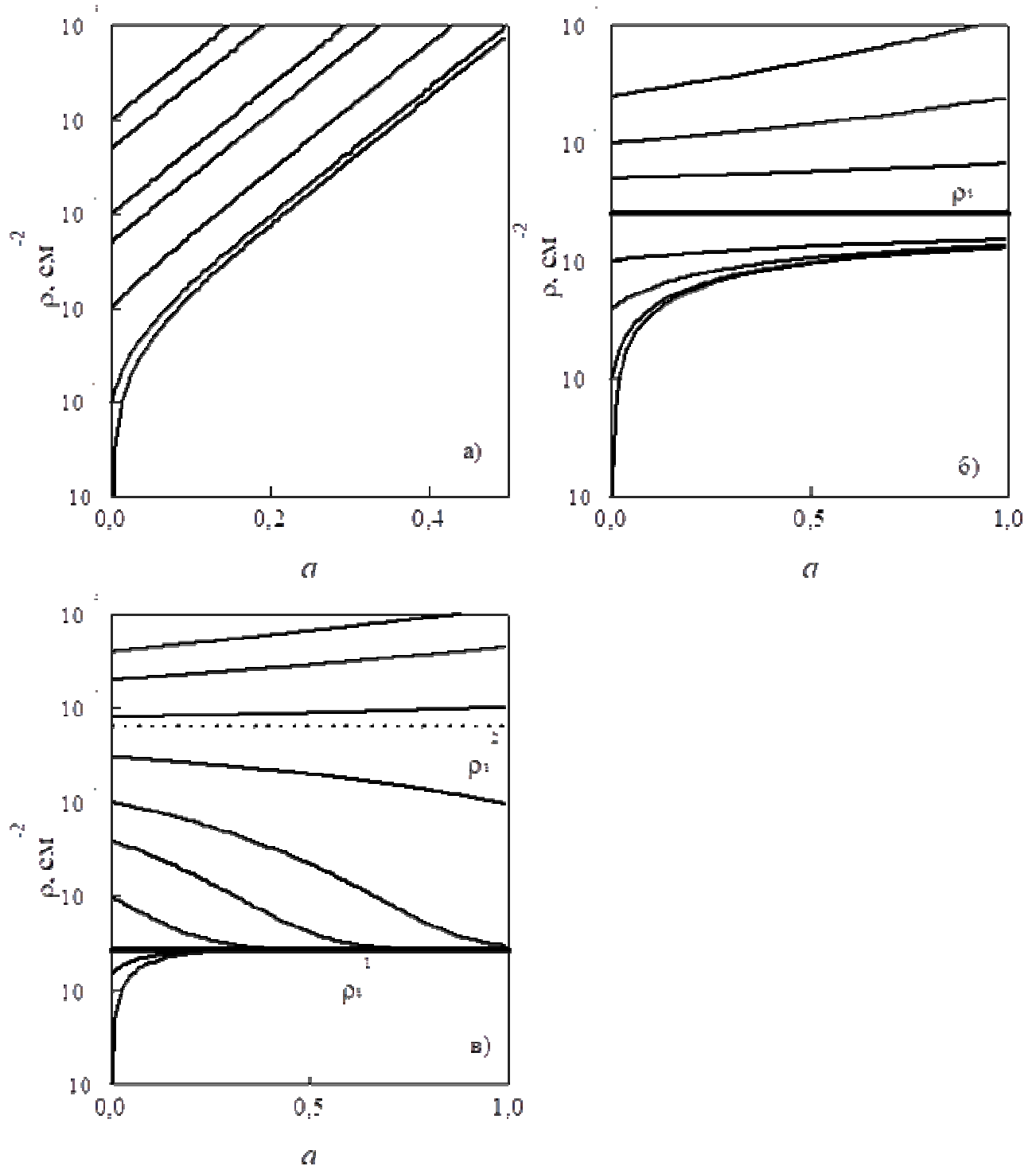


Рис. 1. Зависимость плотности дислокаций ρ от деформации. $L_p=7 \cdot 10^{-5}$ см, $G=10^5$ МПа, $\delta=5 \cdot 10^{-6}$ см и избыточном напряжении: а) $\tau_{dyn}=100$ МПа; б) $\tau_{dyn}=612$ МПа; в) $\tau_{dyn}=1000$ МПа

Заметим, что возрастание плотности дислокаций при $\rho > \rho_s^2$ в рамках рассматриваемой модели ничем не ограничено (рис. 1). Это дает основание предполагать, что в кристалле в процессе деформации в таком режиме могут быть достигнуты плотности дислокаций, несовместимые с кристаллическим состоянием ($\rho > 10^{14} \text{ см}^{-2}$).

При плотностях дислокаций близких к ρ_s^2 , вследствие неоднородности дислокационной подсистемы плотность дислокаций в локальных областях может быть выше или ниже стационарной величины. В областях, где $\rho < \rho_s^2$, плотность дислокаций будет монотонно уменьшаться, асимптотически приближаясь к стационарному значению ρ_s^1 , соответствующему устойчивому равновесию. В областях, где $\rho > \rho_s^2$, будет происходить неограниченное возрастание плотности дислокаций пока существует кристаллическая решетка. Дислокационная подсистема распадается на две “фазы” с различной плотностью дислокаций. Вместе с тем, гетерофазный материал «распадается» на области кристаллического состояния и области аморфоподобного (нанокристаллического) состояния. Возникновение нанокристаллических структур экспериментально наблюдалось на дисперсно-упрочненном материале (Al-Zn-Mg), подвергнутом интенсивному ударному нагружению [4].

При уменьшении τ_{dyn} стационарные значения плотностей дислокаций ρ_s^1 и ρ_s^2 сближаются. При

$$\left(\frac{64q\tau_{dyn}^2 b^2}{3FP_j \xi < \Delta E_k > G} \right)^2 = \frac{8\tau_{dyn} b^3}{FP_j \xi < \Delta E_k >} \left(\frac{1}{\Lambda_p b} + \frac{< \chi > \delta}{2\Lambda_p^2 b} \right)$$

оба стационарных значения совпадают, $\rho_s^1 = \rho_s^2 = \rho_s$. Эту ситуацию иллюстрируют рисунок 1, б. При совпадении ρ_s^1 и ρ_s^2 заключенная между ними область, в которой плотность дислокаций монотонно уменьшается с деформацией, исчезает. При плотностях дислокаций $\rho < \rho_s$ интенсивность накопления дислокаций $\frac{d\rho}{da} > 0$, и плотность дислокаций асимптотически приближается к стационарному значению. При плотностях дислокаций $\rho > \rho_s$ интенсивность накопления дислокаций $\frac{d\rho}{da}$ также положительна, но плотность дислокаций неограниченно возрастает. В гетерофазном материале со средней плотностью дислокаций $\rho \approx \rho_s$ в локальных областях, где $\rho > \rho_s$, с увеличением деформации будет происходить нарастание плотности дислокаций вплоть до достижения состояний, близких к аморфным. При этом дислокационная подсистема дисперсно-упрочненного материала ведет себя асимметрично по отношению к флуктуациям плотности дислокаций разного знака. При локальных уменьшениях плотности дислокаций флуктуации “рассасываются”, и дислокационная подсистема возвращается в стационарное состояние, тогда как при отклонениях плотности дислокаций в сторону увеличения дислокационная

подсистема неограниченно удаляется от стационарного состояния. Поэтому возникновение каждой флуктуации с $\rho > \rho_s$ сопровождается появлением новой высокодефектной области. С ростом деформации число таких областей постоянно возрастает.

Таким образом, в зависимости от соотношения между плотностью дислокаций и избыточным напряжением кинетика дислокационной подсистемы может иметь существенно различный характер.

Проведенный анализ позволяет предполагать возможный характер изменения дислокационной подсистемы в зависимости от характеристик материала, его исходной дефектности и условий деформирования.

Сравнение полученных результатов с результатами исследований моно- и поликристаллов однофазных материалов показывает, что общий характер поведения дислокационной подсистемы в поликристаллах однофазных материалов и гетерофазных материалов аналогичен [5]. И для тех, и для других наблюдается два стационарных состояния с аналогичным изменением параметрического портрета при изменении τ_{dyn} , что является, по-видимому, следствием того, что как в поликристаллах однофазных материалов, так и в гетерофазных материалах возникают дополнительные барьеры при движении дислокаций.

Список литературы

1. Комарь Е.В. Математическое моделирование деформационного упрочнения и эволюции дефектной подсистемы гетерофазных г.ц.к. материалов с некогерентной упрочняющей фазой: Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. – Томск, 2003. – 302 с.
2. Колупаева С.Н., Ерыгина Е.В., Ковалевская Т.А., Попов Л.Е. Качественное исследование эволюции дефектной подсистемы гетерофазных сплавов с некогерентной упрочняющей фазой при интенсивных воздействиях // Физическая мезомеханика. – 2000. – Т. 3. – Вып. 2. – С. 63-79.
3. Комарь Е.В., Колупаева С.Н. Исследование эволюции дефектной подсистемы дисперсно-упрочненных материалов // Фундаментальные основы механики. – 2019. – №4. – С. 188-190.
4. Григорьева Н.А., Ковалевская Т.А., Козлов Э.В. Эволюция дефектно-деформационной среды дисперсно-твердеющего сплава Al-Zn-Mg // Эволюция дислокационной структуры, упрочнение и разрушение сплавов. – Томск: Изд-во ТГУ, 1992. – С. 73-83.
5. Попов Л.Е., Колупаева С.Н., Вихорь Н.А. Исследование дислокационной кинетики при деформации г.ц.к. монокристаллов в условиях интенсивных деформирующих воздействий // Известия вузов. Физика. – 1997. – № 8. – С. 43-48.

Сведения об авторе:

Комарь Елена Васильевна – к.ф.-м.н., доцент.