ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/158

**ОПИСАНИЕ ВНУТРЕННИХ МЕЗО- И МИКРОНАПРЯЖЕНИЙ В РАМКАХ
МНОГОУРОВНЕВЫХ МОДЕЛЕЙ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ
ПОЛИКРИСТАЛЛОВ**

Волегов П.С., Озерных В.С.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

Интенсивные пластические деформации (ИПД) поликристаллических материалов приводят к существенной эволюции внутренней структуры; в частности, для ИПД характерно появление неоднородных внутренних полей напряжений в кристаллитах (зернах, субзернах), которые затормаживают или ускоряют движение дислокаций; эти поля напряжений способствуют развитию процессов упрочнения, разупрочнения и накопления поврежденности, наблюдаемых на мезо- и микроуровне. Появление различного рода препятствий для движения дислокаций (барьеров, границ фрагментов, зерен, включения второй фазы и т.д.) приводит к формированию мощных дислокационных скоплений, которые, в свою очередь, в некоторых случаях формируют микротрещины. Особое значение при описании таких процессов имеют эволюционирующие в процессе деформирования поля внутренних («обратных») мезо- и микронапряжений, возникающие вблизи препятствий для движения дислокаций, например, вблизи дислокационных барьеров, сформированных в результате реакций с участием расщепленных дислокаций, или вблизи границы зерен в результате формирования сложных дефектных структур в приграничной области. Непосредственное включение в описание механизмов и носителей процессов деформирования на мезо- и микро- масштабных уровнях возможно в рамках многоуровневых моделей для анализа неупругого деформирования поликристаллов, основанных на физических теориях пластичности (ФТП); при этом деформируемый материал рассматривается как иерархическая система, в которой носители процесса деформирования распределены по различным масштабным и структурным уровням.

Для описания полей внутренних мезо- и микронапряжений в кристаллитах рассмотрен процесс образования дислокационных скоплений вблизи барьеров, образованных расщепленными дислокациями, в частности, решена задача определения поля напряжений некоторого скопления дислокаций, поджатых у непреодолимого препятствия. Получена зависимость значения среднего и наименьшего расстояния между дислокациями в скоплении от количества дислокаций в скоплении, а также сделана оценка зависимости длины скопления от действующего касательного напряжения в рассматриваемой системе скольжения дислокаций. Исходя из анализа результатов численных экспериментов, можно сделать вывод о том, что значение среднего расстояния достигает «насыщения» и перестает изменяться при количестве дислокаций в скоплении, равном некоторому пороговому значению, конкретная величина которого зависит от упругих и пластических характеристик исследуемого материала, а также действующим напряжениям. Полученные на микроуровне результаты, включающие в том числе геометрические и энергетические характеристики барьеров, использованы для описания возможных сценариев развития дислокационной субструктуры вблизи барьера: образование микротрещины, разрушение барьера путем его рекомбинации или преодоление барьера дислокациями скопления путем переползания.

Также рассматриваются процессы формирования дислокационных скоплений вблизи границ зерен. В частности, показано, что появление внутреннего поля мезонапряжений вблизи границы, действующего на внутризеренные дислокации, может привести к блокировке системы скольжения в направлении «к границе», что, в свою очередь, приводит к образованию скоплений дислокаций вблизи границы. При определенных условиях может произойти слияние дислокаций в головной части скопления и образование микротрещины. Вычислены критические значения эффективных напряжений, которые могут привести к появлению микротрещин вблизи границы, получены эволюционные уравнения для плотности таких дефектов. Кроме того, в явном виде учитываются средний размер зерна и распределение зерен

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

по размерам; было обнаружено, что материал с более мелким зерном имеет повышенные прочностные характеристики, но более подвержен образованию микротрещин вблизи границ зерен или фаз. Показано, что блокировка системы скольжения в некоторых случаях приводит к активации новых, так называемых вторичных систем скольжения, в результате дислокации «обходят» барьер, сформированный на системе скольжения, благодаря чему вероятность образования микротрещины снижается.

В целях уточнения и классификации механизмов взаимодействия решеточных дислокаций и межзеренной границы реализована подмодель прямого типа на основе метода молекулярной динамики с использованием ЕАМ-потенциалов. Выявлены типы дислокационных структур, формирующихся вблизи границы, а также их роль в процессе неупругой деформации. Описан и исследован специфический механизм неупругой деформации, связанный с выбрасыванием границей дислокационных петель, что позволяет говорить о границе как об активном источнике дислокаций в процессах ИПД.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 17-19-01292).