

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

1

DOI: 10.17223/9785946217408/264

**ДВУХФАЗНАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО АГРЕГАТА С УЧЕТОМ
ЗЁРЕННО-ГРАНИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ КВАЗИСТАТИЧЕСКОМ
ДЕФОРМИРОВАНИИ**

Решетняк А.А., Шаркеев Ю.П.,

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

reshet@ispms.tsc.ru, sharkeev@ispms.tsc.ru

Развивается предложенная в работах [1,2] теория напряжения течения, в том числе, предела текучести, σ_y , поликристаллических (ПК) материалов при квазистатической пластической деформации (ПД) в зависимости от среднего размера кристаллитов (зерен), d , в диапазоне 10^{-8} м - 10^{-2} м. Зависимость основана на статистической модели распределения энергии каждого кристаллита в случае одномодального ПК материала по квазистационарным уровням при пластическом нагружении с наибольшим уровнем, равным энергии максимальной прямолинейной дислокации в рамках вакансионно-дислокационного механизма деформирования. Энергетический спектр кристаллита выбран в виде эквидистантно отстоящих энергетических зон (при реализации наиболее вероятного ансамбля дислокаций с одним вектором Бюргерса, b), начиная от нулевой энергии кристаллита без дефектов, E_0 , до уровня с максимальным значением для атомов на оси дислокации, E_N , $N=d/b$. Порция (квант) энергии, необходимая для перехода из одного состояния кристаллита в соседнее, равна энергии единичной дислокации, $\frac{1}{2}Gb^3$, соизмеримой с энергией активации атома в материале при диффузии.

Неравновесный процесс деформирования представлен в виде последовательности равновесных процессов, с учетом малости времени релаксации атомов кристаллической решетки зерна в новые устойчивые состояния в сравнении со значением минимального времени между актами ПД. На участках равновесности при накопленной ПД вероятности, ε , появления любого из возможных дефектов при элементарном акте ПД в момент времени, $t=\varepsilon/\dot{\varepsilon}$, распределены в соответствии с распределением Больцмана, $P_n(\varepsilon) \sim A(\varepsilon) \exp\left\{-\frac{n}{2}Gb\varepsilon^3/NkT\right\}$, со значением вектора Бюргерса $b_\varepsilon = b(1 + \varepsilon)$.

Распределение скалярной плотности дислокаций в каждом кристаллите, во-первых, приводит к напряжению течения $\sigma(\varepsilon)$ согласно механизму деформационного упрочнения Тейлора, содержащему нормальный [3] и аномальный соотношения Холла-Петча соответственно для крупно- и нанокристаллических зерен. Во-вторых, $\sigma(\varepsilon)$ имеет максимум для напряжения течения при экстремальном зерне среднего размера d_0 :

$$d_0(\varepsilon, T) = b \frac{Gb^3(1+\varepsilon)^3}{2 \cdot 1,59363 \cdot kT}, \quad (1)$$

который имеет порядок 10^{-8} - 10^{-7} м и смещается в область более крупных зерен с уменьшением температуры и увеличением накопленной ПД. Продемонстрировано появление и эволюция ячеистых и ячеисто-сетчатых дислокационных субструктур (ДСС), возникающих при накоплении ПД ввиду меняющейся кривизны КР в зависимости от d . Полученная на основе механических представлений скалярная плотность дислокаций эквивалентно может быть вычислена в рамках квазичастичной интерпретации для кванта энергии пластической деформации, условно названного *дислоконом* [1,2]. Этот объект в рамках корпускулярно-волнового дуализма Л. Де Бройля является ни чем иным как составной квазичастицей из акустических фононов, окружающих атомы при разрыве связи между ними в кристаллической решетке. Эти фононы не являются свободными и объединены в дислоконы лишь при неупругом воздействии на кристаллическую решетку [2]. В рамках предложенной статистической теории напряжения течения, достигнуты совпадения теоретических и экспериментальных данных для σ_y , экстремального размера d_0 для материалов с ОЦК (α -фаза Fe), ГЦК (Cu, Al, Ni) и ГПУ (α -Ti, Zr) кристаллическими решетками при $T=300$ К. Исследована температурная зависимость прочностных характеристик. Показано на примере Al, что предел текучести, σ_y , с уменьшением температуры увеличивается при всех зернах, больших $3d_0$, затем

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

уменьшается в нанокристаллической области [2]. Построены деформационные кривые для кристаллической фазы α -Fe с учетом условия разрушения Бэкофена-Консидера.

Однофазная модель ПК материала расширена за счет включения разупрочняющей зеренно-границной фазы до двухфазной с интегральным напряжением течения [2]:

$$\sigma_{\Sigma}(\varepsilon) = (1 - n \frac{b}{d})\sigma_C(\varepsilon) + (n - m)\frac{b}{d}\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB}) - m\frac{b}{d}\sigma_P(\varepsilon, d_P), m \leq n$$

$$\sigma_C(\varepsilon, d) = \sigma(\varepsilon) = \sigma_0(\varepsilon) + \alpha m \frac{Gb}{d} \sqrt{\frac{6\sqrt{2}}{\pi} m_0 \varepsilon M(0)} \left(e^{M(\varepsilon) \frac{b}{d}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}}, M(\varepsilon) = Gb\varepsilon^2 / 2kT, \quad (2)$$

где $\sigma_C(\varepsilon, d) = \sigma(\varepsilon, d)$ - напряжение для первой (твердой) фазы, основных зерен диаметра d образца, $\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB})$ и $\sigma_P(\varepsilon, d_P)$ - напряжения для зерен и пор из области ГЗ средних размеров d_{GB} и d_P соответственно, с некоторой постоянной $n \sim 10^0 - 10^2$, учитывающей среднее расстояние между зернами и сильно зависящей от подготовки состояний ГЗ. При $n = m$ вся область второй фазы заполнена порами разных диаметров. Величина m_0 в (2) является параметром полиэдральности [1,2], который для КЗ-материалов из предела нормального закона Холла-Петча для напряжения течения (2) при $\varepsilon = 0,002$ определяется связью с экспериментально устанавливаемым коэффициентом Холла-Петча $k(\varepsilon)$ [1] в приближении однофазной модели:

$$\sigma(\varepsilon)_{|d \gg b} = \sigma_0(\varepsilon) + k(\varepsilon)d^{-\frac{1}{2}}, \quad k(\varepsilon) = \alpha m G \sqrt{\frac{6\sqrt{2}}{\pi} m_0 \varepsilon b} \frac{M(0)}{M(\varepsilon)} \Rightarrow m_0 = \frac{\pi}{6\sqrt{2}} \frac{k^2(\varepsilon)}{(\alpha m G)^2 \varepsilon b} \frac{M(\varepsilon)}{M(0)}. \quad (3)$$

Построены теоретические зависимости Холла-Петча для указанных материалов для разного выбора мягкой фазы от малоугловых до высокоугловых границ с новыми значениями $d_{\Sigma 0}$ экстремальных зерен и максимумов σ_y . Показана модификация температурной зависимости для Al. О температурной зависимости в нормальном законе Холла-Петча смотри, например [4].

Требуется экспериментальная проверка предсказанного размерно-температурного эффекта. А именно, необходимо верифицировать увеличение экстремального размера зерна $d_{\Sigma 0}(\varepsilon, T)$ с понижением температуры и отдельно с ростом накопленной ПД, ε , с одновременным уменьшением для малоугловых границ зерен максимального значения $\sigma_{\Sigma}(\varepsilon)$. Указанные явления характерны для НК и субмикроскристаллических образцов. Предложенная теоретическая модель имеет очевидные перспективы применения в космической, военно-космической технике, экспериментально выполненных ранее на образцах сплава α -Ti VT1-0 в УМЗ области ПК образцов [5]. Имея нанокристаллическое покрытие с плотноупакованными кристаллитами из ПК материала на космическом изделии, можно обеспечить его жаропрочность при движении в плотных слоях атмосферы, поскольку теория предсказывает увеличение прочностных характеристик покрытия с ростом температуры при условии неизменности его фазового состояния. Модель впервые позволила на основе простых физических концепций и применения аппаратов статистической физики и теории вероятности получить аналитическое выражение для зависимости “ σ - ε ” ПК материалов во всех диапазонах размеров зерен, значений накопленной ПД, температуры, верно соответствуя экспериментальным данным. Ожидается ее дальнейшее развитие для случая многих ансамблей дислокаций и многомодальности по зернам ПК образца.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований РАН на 2013-2020гг.

Литература

1. А.А.Решетняк, Статистический подход к напряжению течения и обобщенный закон Холла-Петча для поликристаллических материалов при пластических деформациях Послана в Изв. вузов. Физика (2018). Arxiv:1803.08247[cond-mat.mtr-sci] (on English).
2. А.А.Решетняк, Особенности температурной зависимости обобщенного закона Холла-Петча и двухфазная модель для деформируемых поликристаллических материалов. Направлена в Изв. вузов. Физика (2018). Arxiv:1805.08623[cond-mat.mtr-sci] (on English).
3. E.O. Hall. Proc. Roy. Soc. В **64**, 474 (1951); N.J. Petch. J. Iron Steel Inst. 174, 25 (1953).
4. В.Е.Панин, R.W. Armstrong, Физ. Мезомеханика, 18, 3, 5 (2015).
5. И.А. Курзина, А.Ю. Ерошенко., Ю.П. Шаркеев и др., Материаловедение. №5. 49 (2010).