

УДК 539.37

О.И. ДАНЕЙКО^{1,2}, Т.А. КОВАЛЕВСКАЯ^{1,2}

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИСПЕРСНО-УПРОЧНЁННЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С НЕКОГЕРЕНТНЫМИ НАНОРАЗМЕРНЫМИ ЧАСТИЦАМИ*

С использованием математического моделирования исследуется влияние температуры и размеров некогерентных частиц на прочностные свойства гетерофазного сплава на основе алюминия в материалах с одинаковой объёмной долей упрочняющей фазы. Показан вклад дислокаций различного типа (матричных, призматических петель, диполей) в плотность дислокаций в процессе деформации. Выявлено, что кривые течения в материалах с одинаковой объёмной долей упрочняющих частиц могут иметь различный вид в зависимости от сочетания масштабных характеристик упрочняющей фазы при разных температурах деформации. Выявлены области сильной и слабой температурной зависимости напряжения течения.

Ключевые слова: дисперсно-упрочнённые материалы, пластическая деформация, математическое моделирование, наноразмерные частицы, деформационное упрочнение.

Введение

В настоящее время перед материаловедческими науками стоит задача создания принципиально новых материалов с уникальными свойствами для нужд авиа-, ракетно- и машиностроения, а также других отраслей промышленности. Композиционные материалы различного типа широко используются для этих целей, поскольку сочетание разнородных веществ приводит к созданию новых материалов, свойства которых могут заметно отличаться от свойств каждого из его составляющих. Актуальным остаётся применение композитов на основе металлической матрицы, упрочнённой дисперсными частицами второй фазы. Металлические дисперсно-упрочнённые материалы обладают наилучшим соотношением между прочностью и пластичностью. Варьируя состав матрицы и наполнителя, можно получить широкий спектр материалов с требуемым набором свойств.

Современные методы математического моделирования позволяют прогнозировать пластическое поведение дисперсно-упрочнённого материала, исследовать механизмы и процессы, происходящие при пластической деформации и определяющие прочностные и пластические свойства материала [1–10]. Математическое моделирование позволяет варьировать характеристики дисперсно-упрочнённого материала и воздействие на него в широких пределах, что практически невозможно сделать экспериментально.

Целью настоящей работы является исследование пластического поведения материала с алюминиевой матрицей и упрочняющими некогерентными частицами различной дисперсности при разных температурах. Для исследования использовалась математическая модель пластической деформации дисперсно-упрочнённых материалов с ГЦК-матрицей и некогерентными недеформируемыми сферическими частицами.

Математическая модель пластической деформации

В основе математической модели пластической деформации и деформационного упрочнения дисперсно-упрочнённых сплавов лежит концепция упрочнения и отдыха [6, 7, 10]. Модель включает уравнения баланса деформационных линейных (сдвигообразующие дислокации, призматические петли вакансионного и межузельного типов, дислокационные диполи вакансионного и межузельного типов) и точечных (межузельные атомы, моновакансии и бивакансии) дефектов с учетом их генерации, аннигиляции и трансформации в процессе пластической деформации. Предполагалось, что формирование дислокационных диполей начинается при достижении в материале критической плотности дислокаций [10], определяемой масштабными характеристиками упрочняющей фазы (размером частиц, расстоянием между центрами частиц). Внешнее воздействие на материал задается уравнением или системой уравнений, имеющих различную структуру в зависимости от

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 17-13-01252).

физического воздействия, которое является причиной деформации. Система дифференциальных уравнений, описывающих процессы накопления линейных и точечных дефектов, имеет следующий общий вид [11–17]:

$$\frac{d\rho_k}{da} = G(\delta, \Lambda_p, \tau_{\text{dyn}}, D) + R(\rho_k, \dot{a}),$$

где ρ_k – плотность дефекта какого-либо типа; a – деформация сдвига; \dot{a} – скорость деформации; G – генерация (появление и размножение) и R – релаксация (аннигиляция и трансформация) какого-либо дефекта; δ – диаметр упрочняющих частиц; Λ_p – расстояние между частицами; τ_{dyn} – напряжение, избыточное над статическим сопротивлением движению дислокаций; D – диаметр зоны сдвига.

Атермическая составляющая сопротивления движению дислокаций τ_a в дисперсно-упрочнённом сплаве с некогерентными частицами обусловлена напряжением трения τ_f , взаимодействием с реагирующими дислокациями леса τ_d и напряжением обхода частиц $\tau_{\text{ог}}$: $\tau_a = \tau_f + \tau_d + \tau_{\text{ог}}$ [11, 12, 16].

Для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих баланс деформационных линейных и точечных дефектов, заданы начальные значения концентраций точечных дефектов и плотностей дислокаций: начальная плотность сдвигообразующих дислокаций соответствует состоянию недеформированного кристалла, предполагается отсутствие дислокационных призматических петель и дислокаций в дипольных конфигурациях; начальная концентрация точечных дефектов соответствует концентрации термодинамически равновесных точечных дефектов при данной температуре [11, 16, 17].

Основные расчеты проведены для монокристаллов дисперсно-упрочнённых сплавов с алюминиевой матрицей при варьировании объёмной доли и масштабных характеристик упрочняющей фазы при разных температурах. Скорость деформации задавалась равной 10^{-3} с^{-1} , размеры упрочняющих частиц и расстояния между ними варьировались в физически реализуемых пределах.

Анализ полученных результатов

Решение системы уравнений численными методами позволило получить зависимости плотностей всех линейных и точечных дефектов от степени деформации, а также кривые течения $\tau(a)$. Исследованы материалы с тремя объёмными долями упрочняющих частиц, с разными сочетаниями масштабных характеристик упрочняющей фазы в каждом из случаев.

Результаты расчётов показывают, что зависимость напряжения течения от деформации является в основном возрастающей (рис. 1). Большинство кривых деформационного упрочнения $\tau(a)$ при низких и средних температурах имеют двухстадийный характер (рис. 1, температуры 193 и 293 К), обусловленный достижением в процессе деформации критической плотности дислокаций и вследствие этого формированием дислокационных диполей. В результате этого на кривой течения наблюдается излом, который разделяет кривую на две части. Одна характеризует докритическую область плотностей дислокаций, когда дислокационная подсистема включает только сдвигообразующие дислокации и призматические петли, другая – закритическую область, в которой в составе дислокационного ансамбля начинается формирование дипольных структур.

При высоких температурах критическая плотность дислокаций в материале не достигается, деформация протекает полностью в докритической области (рис. 1, *ж, з, л, м*), особенно это касается материалов с большей объёмной долей упрочняющей фазы. При увеличении размера частиц в пределах одной объёмной доли упрочняющей фазы начало стадии с накоплением диполей смещается в область малых значений степеней деформации на кривой течения (рис. 1, *а–в, д, и*). В материалах с малой объёмной долей упрочняющей фазы критическая плотность дислокаций достигается даже при высоких температурах (рис. 1, *г*, кривая 3).

Первая стадия (соответствующая докритической области плотностей дислокаций) на кривой течения имеет параболический вид, наблюдается монотонное возрастание величины напряжения течения с ростом степени деформации (рис. 1). Увеличение размера частиц в пределах одной объёмной доли приводит к снижению на первой стадии всех прочностных характеристик материала: предела текучести, коэффициента деформационного упрочнения и напряжения течения.

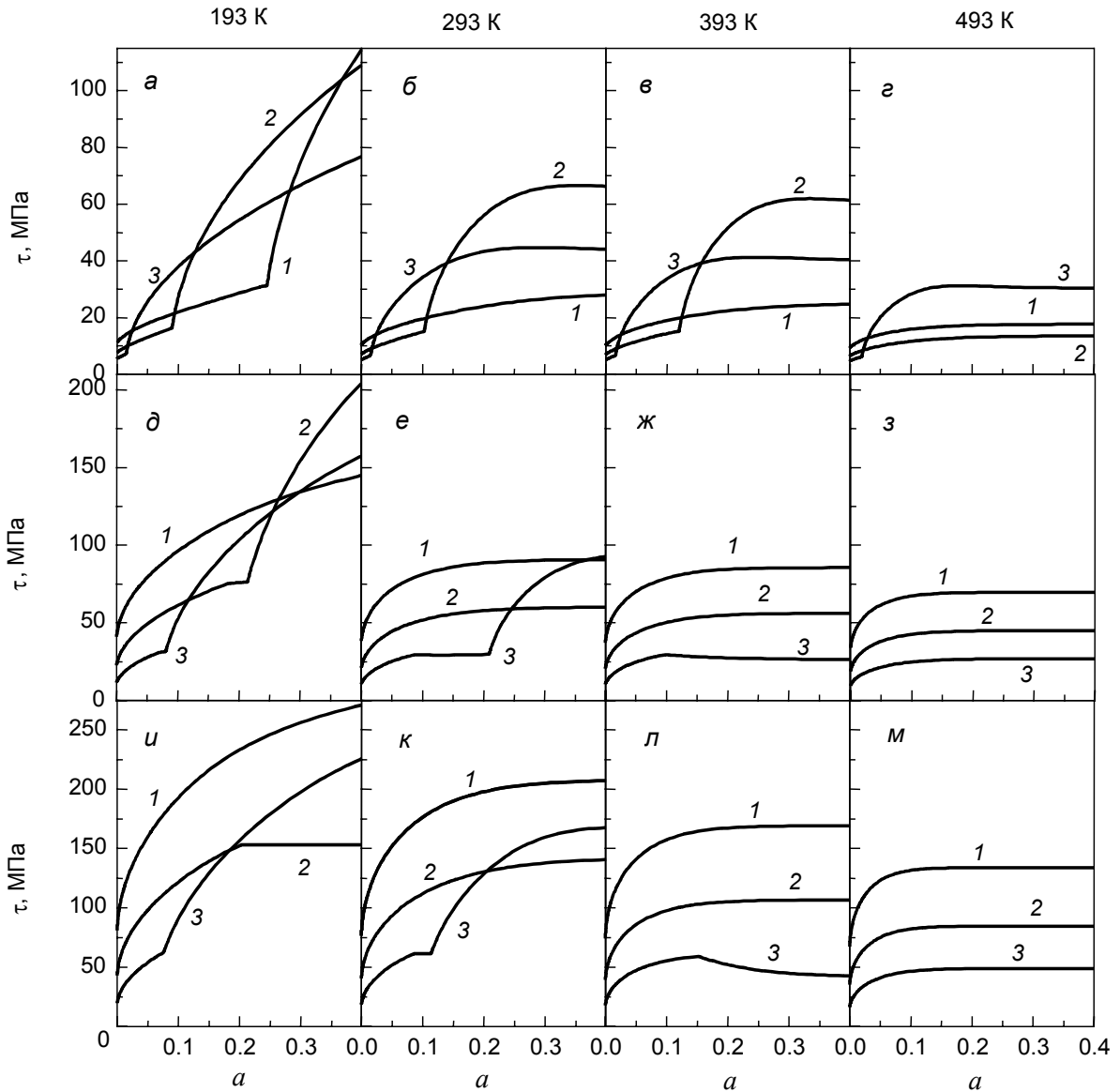


Рис. 1. Кривые деформационного упрочнения алюминиевого сплава с некогерентными частицами объёмной долей, %: *а, б, в, г* – 10^{-4} ; *д, е, ж, з* – 10^{-2} ; *и, к, л, м* – 10^{-1} . Диаметр частиц, нм: *1* – 10; *кр. 2* – 20; *кр. 3* – 50

Появление дислокационных диполей на второй стадии при достижении критической плотности дислокаций сопровождается увеличением коэффициента деформационного упрочнения и резким ростом напряжения течения. При этом коэффициент деформационного упрочнения в сплавах с меньшим размером частиц заметно больше, чем в сплавах с более крупными частицами. Так как критическая плотность дислокаций достигается в материалах с разным сочетанием масштабных характеристик упрочняющей фазы при разных деформациях, то в рамках одной объёмной доли упрочняющей фазы получают кривые течения разного вида (рис. 1, *а, б, д, и*). На первой стадии при всех температурах деформации упрочнение сплава более интенсивно в присутствии более мелких частиц. Переход ко второй стадии сопровождается увеличением прочностных свойств материала. С увеличением деформации при не очень высоких температурах наблюдается инверсия: при увеличении размера упрочняющих частиц напряжение может и увеличиваться, и уменьшаться. Следовательно, материалы с одной объёмной долей упрочняющей фазы имеют разные прочностные характеристики (зависящие от размера частиц), соотношение между которыми меняется в зависимости от степени деформации.

Таким образом, теоретические расчёты, позволяя прогнозировать поведение кривых течения, могут рекомендовать технологам выбрать такие параметры упрочняющих частиц, которые фор-

мируют необходимые для практики прочностные свойства материала в зависимости от условий деформирования (температура, скорость деформации) и для заданных интервалов деформаций.

Увеличение объёмной доли упрочняющих некогерентных частиц приводит к увеличению механических свойств моделируемого кристаллического материала с алюминиевой матрицей (рис. 1).

На рис. 2 показан вклад дислокаций различного типа в суммарную плотность дислокаций в процессе деформации при низких температурах. Наблюдается различное соотношение плотностей дислокаций различного типа как в материалах с разной объёмной долей упрочняющей фазы, так и с одинаковой, но разным сочетанием размера упрочняющих частиц и расстояния между ними (рис. 2, а-в, г-е, ж-и)

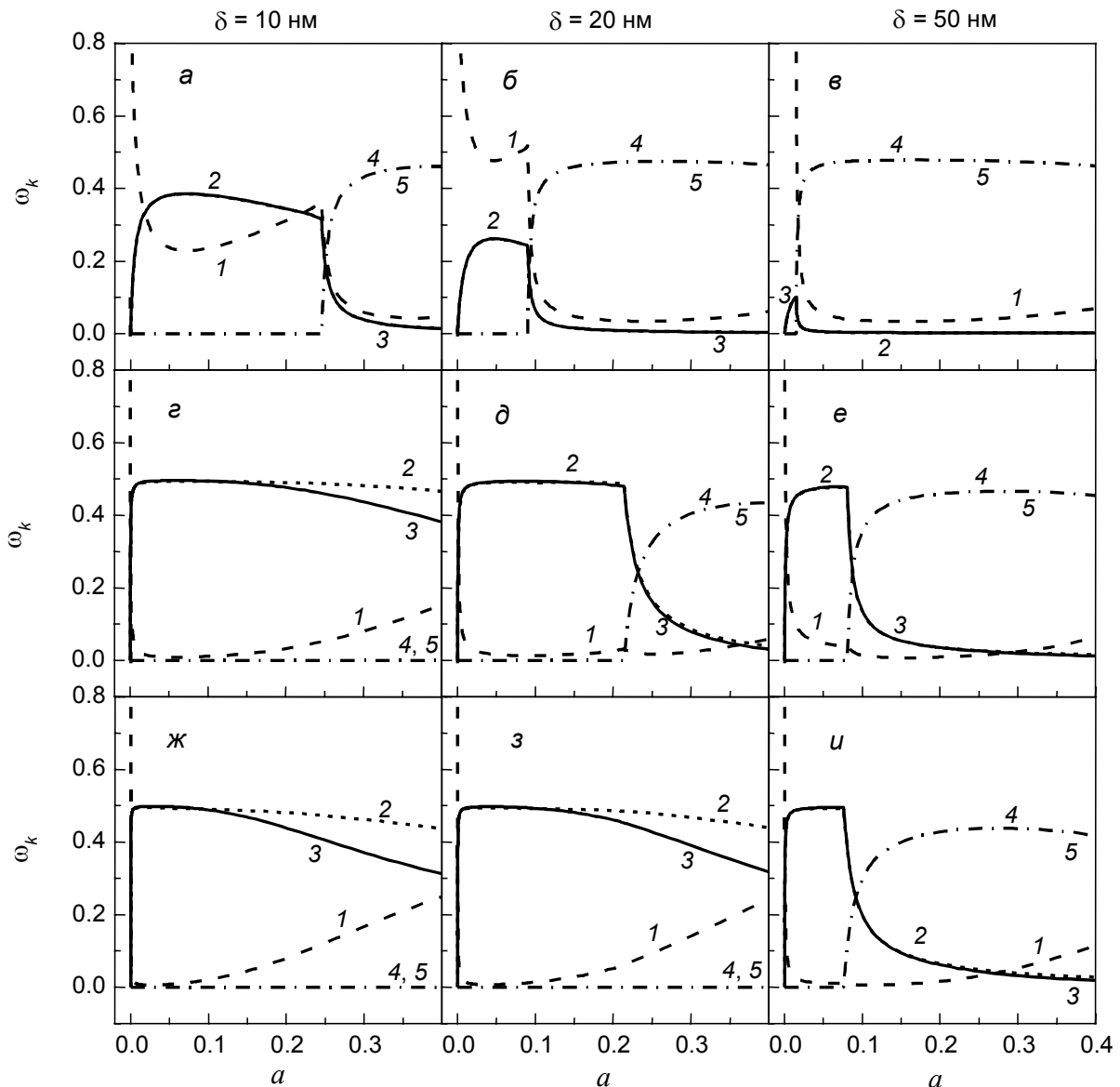


Рис. 2. Вклад плотности дислокаций различного типа в общую плотность дислокаций в процессе деформации; $\omega_k = \rho_k / \rho$ (ρ – суммарная плотность дислокаций, ρ_k – плотность дислокаций соответствующего типа): кр. 1 – сдвигообразующие дислокации; кр. 2, 3 – призматические петли вакансионного и межузельного типа; кр. 4, 5 – дислокации в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа. Дисперсно-упрочнённый материал на основе алюминия. Объёмная доля упрочняющей фазы, %: а, б, в – 10^{-4} ; г, д, е – 10^{-2} ; ж, з, и – 10^{-1} . Размер частиц δ указан на рисунке. Температура деформации 193 К

В докритической области плотностей дислокаций доминирующим элементом дислокационной структуры в основном являются призматические петли вакансионного и межузельного типов.

Исключение составляет материал с самой малой объёмной долей упрочняющей фазы: там доминирующим элементом могут являться сдвигообразующие дислокации (рис. 2, б) либо плотности дислокаций в призматических петлях и сдвигообразующих дислокаций соизмеримы (рис. 2, а).

При достижении в материале критической плотности дислокаций начинают формироваться дислокационные диполи, плотность которых заметно растёт с увеличением деформации (рис. 3). В закритической области плотностей дислокаций доминирующим элементом дислокационной структуры являются дипольные конфигурации (рис. 2, а–в, д, е, и). Вместе с тем появление диполей способствует более интенсивному росту плотности сдвигообразующих дислокаций за счёт релаксационных процессов, при которых происходит осаждение точечных дефектов на дислокациях, составляющих диполь, что влечёт за собой увеличение плеча диполя и перехода дипольной конфигурации в разряд сдвигообразующих дислокаций (рис. 4). Увеличение размера частиц в пределах одной объёмной доли упрочняющей фазы влечёт за собой более раннее формирование диполей в процессе деформации.

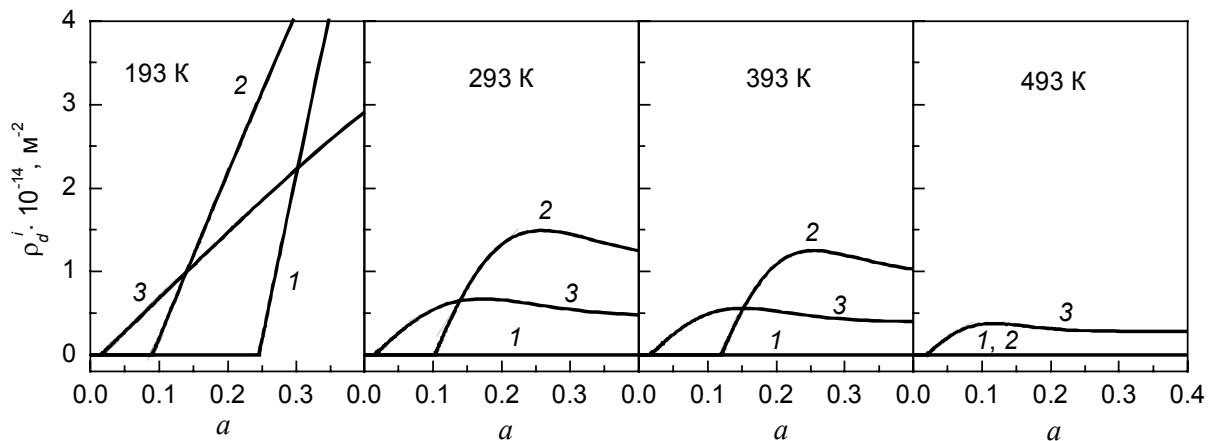


Рис. 3. Зависимость плотности дислокаций в дипольных конфигурациях междузельного типа от степени деформации при разных температурах. Объёмная доля упрочняющей фазы 10^{-4} %. Диаметр частиц, нм: кр. 1 – 10; кр. 2 – 20; кр. 3 – 50

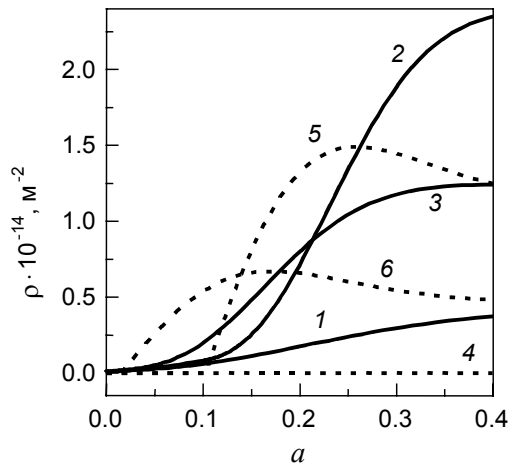


Рис. 4. Зависимость плотности сдвигообразующих дислокаций (кр. 1–3) и дислокационных диполей (кр. 4–6) от степени деформации. Объёмная доля упрочняющей фазы 10^{-4} %. Диаметр частиц, нм: кр. 1, 4 – 10; кр. 2, 5 – 20; кр. 3, 6 – 50. Температура деформации 293 К

В материалах с большей объёмной долей упрочняющей фазы (рис. 2, г, ж, з) деформация проходит полностью в докритической области. В таких материалах элементами дислокационной структуры являются сдвигообразующие дислокации и призматические петли вакансионного и междузельного типов. Наибольший вклад в плотность дислокаций вносят призматические петли ва-

кансионного типа, особенно при достаточно больших степенях деформации, так как призматические петли межузельного типа, разрастаясь за счёт осаждения на них межузельных атомов, становятся неустойчивыми и переходят в разряд сдвигообразующих дислокаций. За счёт этого растёт плотность сдвигообразующих дислокаций, становясь в процессе деформации сравнимой с плотностью дислокаций в призматических петлях межузельного типа (рис. 2, ж, з).

Рассмотрим температурную зависимость напряжения течения (рис. 5 и 6). Уменьшение размера упрочняющих частиц при малых деформациях приводит к увеличению механических свойств материала (рис. 5, кривые 1–3). При больших деформациях ($a = 0.2$) такой однозначной зависимости нет (рис. 5, кривые 4–6). При достаточно высоких температурах наблюдается увеличение напряжения течения при уменьшении размера частиц, т.е. самое большое напряжение течения достигается в материалах с самыми мелкими частицами (рис. 5, кривая 4). При низких температурах ($T < 300$ К) такая зависимость от размера упрочняющих частиц нарушается: в материале с диаметром частиц 50 нм напряжение течения выше, чем в материале с диаметром частиц 20 нм (рис. 5, кривые 5, 6). Это происходит по причине формирования разного состава дислокационной структуры. В материале с более крупными частицами ($\delta = 50$ нм при степени деформации $a = 0.2$) начали формироваться дислокационные диполи (рис. 2, е), а в материале с размером частиц $\delta = 20$ нм дислокационная структура включает только сдвигообразующие дислокации и призматические петли (рис. 2, д).

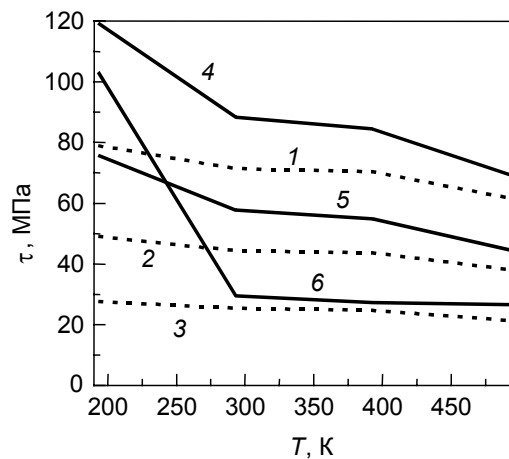


Рис. 5. Температурная зависимость напряжения течения. Объёмная доля упрочняющей фазы 10^{-2} %. Диаметр частиц, нм: кр. 1, 4 – 10; кр. 2, 5 – 20; кр. 3, 6 – 50. Степень деформации: кр. 1–3 – 0.05; кр. 4–6 – 0.2

Интервал термической стабильности ($\tau(T) \approx \text{const}$ [16]) для материалов с малым размером частиц лежит в диапазоне $293 \text{ К} \leq T \leq 393 \text{ К}$ (рис. 5, кривые 1–3). С увеличением степени деформации до $a = 0.2$ интервал термической стабильности сужается (рис. 5, кривые 4, 5), так как при высоких температурах ($T > 400$ К) становятся подвижными термодинамически равновесные точечные дефекты, которые усиливают аннигиляцию линейных дефектов (сдвигообразующих дислокаций, призматических петель вакансионного и межузельного типов, дислокационных диполей вакансионного и межузельного типов), что приводит к уменьшению плотности дислокаций и, как следствие, к снижению напряжения течения. Увеличение размера частиц до 50 нм увеличивает протяжённость интервала термической стабильности (рис. 5, кривая 6). Разность между напряжениями течения при степенях деформации $a = 0.2$ и 0.05 в зоне термической стабильности уменьшается при увеличении размера частиц (рис. 5, ср. кривые 1 и 4, 2 и 5, 3 и 6), т.е. значения напряжения при разных деформациях сближаются, сохраняясь неизменными на всей кривой течения. Более того, в некоторых материалах при увеличении деформации напряжение течения уменьшается (рис. 1, ж, л, кривая 3).

В материалах с объёмной долей упрочняющей фазы 0.1 % (самой большой из исследованных) также наблюдается снижение напряжения течения с увеличением температуры деформации (рис. 6). Отсутствие диполей в составе дислокационной структуры приводит к монотонному

уменьшению напряжения течения при возрастании температуры деформации (рис. 6, кривые 1–7). Наблюдается также увеличение напряжения течения при уменьшении размера частиц в пределах одной объёмной доли упрочняющей фазы (рис. 6). Появление дипольных структур в составе дислокационного ансамбля дисперсно-упрочнённого сплава с размером частиц $\delta = 50$ нм при низких температурах нарушает монотонную последовательность снижения напряжения течения с ростом размера наночастиц (рис. 6, кривая 9). Вместе с тем формирование дипольных дислокационных конфигураций в материалах является причиной наличия областей сильной температурной чувствительности на кривых температурной зависимости напряжения течения (рис. 6, кривые 8, 9).

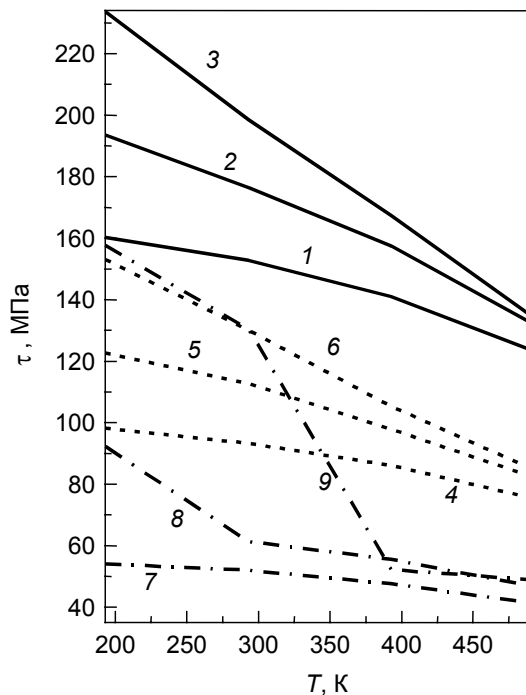


Рис. 6. Температурная зависимость напряжения течения. Объёмная доля упрочняющей фазы 0.1 %. Диаметр частиц, нм: кр. 1–3 – 10; кр. 4–6 – 20; кр. 7–9 – 50. Степень деформации: кр. 1, 4, 7 – 0.05; кр. 2, 5, 8 – 0.1; кр. 3, 6, 9 – 0.2

Заключение

Таким образом, в настоящей работе проведено математическое моделирование поведения в процессе пластической деформации прочностных свойств дисперсно-упрочнённого сплава на основе алюминия с наноразмерными некогерентными частицами. Показано, что размер упрочняющих частиц является определяющим параметром для величины напряжения течения дисперсно-упрочнённых сплавов при разных температурах и объёмных долях упрочняющей фазы.

Наблюдается монотонное уменьшение напряжения течения с ростом температуры деформации. В докритической области плотностей дислокаций увеличение размера частиц упрочняющей фазы (при фиксированной объёмной доле упрочняющей фазы) снижает напряжение течения. С появлением дипольных конфигураций в составе дислокационного ансамбля значительно увеличивается плотность дислокаций и напряжение течения соответствующих материалов, что влечёт за собой нарушение монотонного снижения напряжения течения с ростом размера упрочняющих частиц.

Обнаружен диапазон температур для материалов с разной объёмной долей упрочняющей фазы и разным сочетанием масштабных характеристик упрочняющей фазы, в котором наблюдается термическая стабильность напряжения течения. Выявлены области сильной температурной зависимости напряжения течения, связанные с наличием при низких температурах и отсутствием при высоких дислокационных диполей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ashby M.F. // *Phil. Mag.* – 1966. – V. 14. – No. 132. – P. 1157–1178.
2. Ebeling R. and Ashby M.F. // *Phil. Mag.* – 1966. – V. 13. – No. 124. – P. 805–834.
3. Эшби М.Ф. // *Физика прочности и пластичности.* – М.: Металлургия, 1972. – С. 88–108.
4. Хирш П.Б., Хэмпфри Ф.Дж. // *Физика прочности и пластичности.* – М.: Металлургия, 1972. – С. 158–186.
5. Humphreys F.J. and Hirsch P.V. // *Phil. Mag.* – 1978. – V. 34. – P. 373–399.
6. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. // *Изв. вузов. Физика.* – 1982. – Т. 25. – № 6. – С. 56–82.
7. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. *Пластическая деформация сплавов.* – М.: Металлургия, 1984. – 182 с.
8. Stewart A.T. and Martin J.W. // *Acta Met.* – 1975. – V. 23 – P. 1–7.
9. Humphreys F.J. and Hirsch P.V. // *Proc. Roy. Soc. Lond.* – 1970. – V. A318. – No. 1532. – P. 73–92.
10. Ковалевская Т.А., Виноградова И.В., Попов Л.Е. *Математическое моделирование пластической деформации гетерофазных сплавов.* – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1992. – 168 с.
11. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2009. – Т. 52. – № 9/2. – С. 125–131.
12. Данейко О.И., Кулаева Н.А., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. // *Изв. вузов. Физика.* – 2015. – Т. 58. – № 3. – С. 46–51.
13. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. и др. // *Известия РАН. Сер. физич.* – 2014. – Т. 78. – № 3. – С. 351.
14. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Кулаева Н.А. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2014. – Т. 57. – № 2. – С. 21–29.
15. Матвиенко О.В., Данейко О.И., Ковалевская Т.А. // *Изв. вузов. Физика* – 2017. – Т. 60. – № 2. – С. 35–45.
16. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Матвиенко О.В. // *Изв. вузов. Физика.* – 2018. – Т. 61. – № 7. – С. 40–46.
17. Matvienko O., Daneyko O., and Kovalevskaya T. // *Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.).* – 2018. <https://DOI.org/10.1007/s40195-018-0754-0>.

¹ Томский государственный архитектурно-строительный университет,
г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 09.07.18.

² Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия

Данейко Ольга Ивановна, к.ф.-м.н., доцент каф. теоретической механики ТГАСУ, ст. науч. сотр. НИ ТГУ, e-mail: olya_dan@mail.ru;

Ковалевская Татьяна Андреевна, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. теоретической механики ТГАСУ, ст. науч. сотр. НИ ТГУ, e-mail: takov47@mail.ru.