ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

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

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/31

К ОБЪЕДИНЕННОМУ КВАНТОВАННОМУ И МЕХАНИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЯМ
МАКРОПОЛОСЫ ЛОКАЛИЗОВАННОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЧЕРНОВА-ЛЮДЕРСА

Решетняк А.А., Шилько Е.В., Шаркеев Ю.П.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Основными задачами исследований в материаловедении являются поиски возможностей управления внутренней дефектной подструктурой кристаллитов для получения наилучших прочностных и пластических свойств поликристаллических (ПК) материалов. Оптимизация указанных свойств использует новые технологии, включающие методы ИПД и их комбинации с рекристаллизационным отжигом, метод осаждения из газовой фазы и др. [1], позволяя варьировать ориентацию, линейные размеры, d , элементов микроструктуры материалов, от мезополикристаллических и крупнозернистых (КЗ, 10–1000 мкм), до мелкозернистого (МЗ, 2–10 мкм), ультрамелкозернистого (УМЗ, 0,5–2 мкм), субмикрокристаллического (СМК, 100–500 нм) и нанокристаллических (НК, <100 нм) образцов. Физико-механические свойства ПК материалов: микротвердость, H , пределы текучести, σ_y , и прочности, σ_s , имеют особенности механизма упрочнения при переходе к УМЗ, СМК и НК состояниям, отмеченными в отклонении от эмпирического соотношения Холла-Петча (ХП) [2]: $\sigma_y(d) = \sigma_0 + kd^{-1/2}$. Исследования были продолжены в работах Р. Армстронга, Г. Конрада, Ф. Кокса, Г. Лэнгфорда, А. Томпсона, Дж. Севильяна, С.А.Фирстова, Б.А.Мовчана, Ю.Я. Подрезова, В.В. Рыбина, В.А.Лихачева, Р.З.Валиева, В.Е. Панина, Э.В. Козлова, Н.А. Коневой А.И. Тюменцева, А.Д. Коротаева. Теоретического обоснования закона ХП, объяснения наличия и поведения максимумов σ_y , σ_s и вывода аналитической связи $\sigma = \sigma(\varepsilon, d)$, при пластическом деформировании (ПД) вне концепций механики сплошной среды не имелось. В наших работах [3, 4, 5, 6] предложена теоретическая модель распределения энергии каждого кристаллита одномодального ПК материала по квазистационарным квантованным зонам (уровням конечной ширины, кристаллической решетки (КР)) при квазистатическом ПД. Энергетический спектр каждого кристаллита был выбран в 1-м приближении эквидистантным (при реализации наиболее вероятного ансамбля дислокаций с одним вектором Бюргерса, b), начиная от его нулевой энергии без дефектов, E_0 и до уровня E_N , с максимальным числом атомов на оси диаметральной (полной) дислокации, $N = N(d) = d/b$. Выражения для статистически определенной скалярной плотности дислокаций (СПД) $\rho(b, d, T)$, напряжения течения (НТ), включая, σ_y , ПК материалов при квазистатической ПД со скоростями: $\dot{\varepsilon} \sim 10^{-5} - 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, в зависимости от среднего размера, d , кристаллитов (зерен), а также величины зеренно-границной разупрочняющей фазы были определены в [3], [4]. В [4] была предложена квазичастичная интерпретация, для кванта энергии ПД, равного энергии единичной дислокации, $E_d^{Le} = \frac{1}{2}Gb_b^3$, с эффективным вектором $b_\varepsilon = b(1 + \varepsilon)$, необходимой для создания дислокации (в рамках сценария [3] зарождения дислокации при ПД из 0D-дефектов в термофлуктуационно созданных при ПД зонах локализованной пластичности (ЗЛП)) (E_d^{Le} соизмерима с энергией активации атома в материале при диффузии [3].), Он представляет собой составную квазичастицу (из несвободных акустических фононов), названную *дислоконом*, с энергией и частотой согласно корпускулярно-волновой гипотезе де Бройля: $\hbar\omega_\varepsilon = \frac{1}{2}Gb_b^3$, которая рождается при разрыве межатомных связей при акте ПД и может поглощаться этим или другим атомом КР кристаллита, приводя к локальному восстановлению трансляционной инвариантности КР.

Квазичастичное описание позволяет и вывести квантованно СПД $\rho(b, d, T)$, и элегантно описать физику процесса зарождения и распространения макрополосы Чернова-Людерса. Для этого мы вводим понятия механизма испускания и поглощения дислоконов с помощью **двухуровневой системы** для спектра энергий произвольного кристаллита одномодального ПК материала при ПД: E_m , и E_n , ($E_m < E_n$), $0 < m < n \leq N$. В процессе элементарного акта ПД при внешнем нагружении (возникновение дефекта) кристаллит в момент времени: $t = \varepsilon / \dot{\varepsilon}$, переходит из состояния с энергией $E_m(\varepsilon)$ в состояние с $E_n(\varepsilon)$ с поглощением дислокона с энергией $\hbar\omega_{\varepsilon|nm}$:

$$\hbar\omega_{\varepsilon|nm} = \frac{(n-m)}{2}Gb_b^3 = E_n(\varepsilon) - E_m(\varepsilon) \quad (1)$$

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

В этой связи введем два типа переходов из $E_m(\varepsilon)$ в $E_n(\varepsilon)$ в состоянии термодинамического равновесия зерна при заданном ε между актами ПД с минимальным временем [3] $\Delta t_0 \sim 10^{-1} \text{с} \gg \tau = a/v_{\text{зв}} \sim 10^{-12} \text{с}$, при $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{с}^{-1}$ и временем релаксации атомов КР в новые устойчивые положения (Процесс ПД, являясь неравновесным, представляется в виде последовательности равновесных процессов, скачкообразно меняющихся при актах ПД.). При первом (возникновение дефекта) происходит поглощение кристаллитом кванта энергии равного энергии дислокона: $E_m(\varepsilon) \rightarrow E_n(\varepsilon)$, а при втором: $E_n(\varepsilon) \rightarrow E_m(\varepsilon)$, (локальное восстановление КР, т.е. исчезновение дефекта или переход в состояние с дефектом с меньшей энергией) его испускание. Таких кристаллитов много. Мы выделяем (следуя А.Эйнштейну) **спонтанное и вынужденное испускание** такой порции энергии и ее **вынужденное поглощение** в состоянии равновесия. Вынужденное поглощение (с появлением дефекта) происходит под влиянием только внешнего воздействия при фиксированном ε . Спонтанное испускание происходит случайно, с появлением дислоконов в разных частях кристаллита с разными свойствами (некогерентными). Вынужденное испускание при переходе $E_n(\varepsilon) \rightarrow E_m(\varepsilon)$, возможно, если локализованная порция энергии к одному из атомов в возбужденном “дефектном” состоянии приводит к испусканию (при взаимодействии кристаллита с этой порцией) дислокона со свойствами как у 1-го дислокона (когерентные волны).

Подсчет среднего числа переходов dN_{nm}^ε из $E_n(\varepsilon)$ в $E_m(\varepsilon)$ за время $dt < \Delta t_0$ во всех кристаллитах образца при спонтанных испусканиях пропорционален вероятности перехода P_{nm}^ε и числу кристаллитов N_n^ε на верхнем уровне с $E_n(\varepsilon)$ в единице объема приводит к представлению

$$dN_{nm}^\varepsilon = P_{nm}^\varepsilon N_n^\varepsilon dt. \quad (2)$$

При вынужденном (индуцированном) испускании получим за то же dt в промежутке от t до $t + dt$, что среднее число таких переходов: $dN_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}}$, пропорционально вероятности вынужденных переходов $P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}}$, СПД $\rho(b, d, T, \varepsilon)$ с $b_\varepsilon = b_\varepsilon(\omega_{\varepsilon|nm})$ (чем больше дислокаций, а потому дислоконов в единице объема, тем больше $dN_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}}$) и заселенности N_n^ε уровня $E_n(\varepsilon)$

$$dN_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} = P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} N_n^\varepsilon \rho(b, d, T, \varepsilon) dt. \quad (3)$$

Наконец, при вынужденном поглощении квантованной порции механической энергии кристаллитами среднее число переходов $E_m(\varepsilon) \rightarrow E_n(\varepsilon)$ во всех кристаллитах в 1м^3 : $dN_{mn}^{\varepsilon|\text{вын}}$ в том же временном промежутке аналогично (3), но с заменой $(P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}}, N_n^\varepsilon) \rightarrow (P_{mn}^{\varepsilon|\text{вын}}, N_m^\varepsilon)$, с симметричными $P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} = P_{mn}^{\varepsilon|\text{вын}}$, определяемым лишь ПК материалом:

$$dN_{mn}^{\varepsilon|\text{вын}} = P_{mn}^{\varepsilon|\text{вын}} N_m^\varepsilon \rho(b, d, T, \varepsilon) dt. \quad (4)$$

Принцип детального равновесия при фиксированном ε означает, что верно равенство:

$$dN_{nm}^\varepsilon + dN_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} = dN_{mn}^{\varepsilon|\text{вын}} \Rightarrow \frac{N_n^\varepsilon}{N_m^\varepsilon} = \frac{P_{mn}^{\varepsilon|\text{вын}} \rho(b, d, T, \varepsilon)}{P_{nm}^\varepsilon + P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} \rho(b, d, T, \varepsilon)} \quad (5)$$

В состоянии термодинамического равновесия кристаллиты заселяют уровни энергий $E_i(\varepsilon)$, $i = n, m$ в соответствии с распределением Больцмана: $W_i = C \exp\left(-\frac{E_i(\varepsilon)}{NkT}\right)$. Поскольку $\frac{N_n^\varepsilon}{N_m^\varepsilon} = \frac{W_n}{W_m}$, то из (5) и (1) при $\omega_{\varepsilon|n, n-1} = \frac{1}{2}Gb_\varepsilon^3$ следует:

$$\rho(b, d, T, \varepsilon) = P_{nm}^\varepsilon / P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} \left(\exp\left(\frac{Gb_\varepsilon^3}{2NkT}\right) - 1 \right) \text{ и } \lim_{N=d/b \rightarrow \infty} \rho(b, d, T, \varepsilon) = \frac{P_{nm}^\varepsilon 2NkT}{P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} Gb_\varepsilon^3} \quad (6)$$

Из явного вида $\rho(b, d, T, \varepsilon)$ в КЗ пределе [3,4] $\rho(b, d, T, \varepsilon) = \frac{6\sqrt{2}}{\pi} \frac{\varepsilon m_0}{bd(1+\varepsilon)^3}$: с параметром полиэд-ральности m_0 , вытекает $P_{nm}^\varepsilon / P_{nm}^{\varepsilon|\text{вын}} = \varepsilon m_0 \frac{Gb^2}{2kTd^2} \frac{6\sqrt{2}}{\pi}$. Аналитическая зависимость для $\sigma(\varepsilon)$, в частности σ_y , следуют из закона деформационного упрочнения Тейлора [3] без 3Г фазы.

Полученный вывод $\sigma(\varepsilon)$ одновременно открывает путь к описанию физической природы макрополосы локализованной ПД Чернова-Людера в ПК материалах, явно возникающей при наличии площадки текучести, как макроскопическое явление сопровождающееся вынужденным квазикогерентным (из-за не-идентичности и изотропности распределения кристаллитов в ПК агрегате) испусканием коллективных фононов (дислоконов), что проявляется в кратном усилении акустической эмиссии таких образцов [7].

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

Схематично, для этого введем простую 3-уровневую систему с третьим промежуточным уровнем E_m , E_k , E_n , ($E_m \ll E_k < E_n$), $0 < m < k < n \leq N$ с выходом вне рамок эквидистантного спектра энергий кристаллита. На площадке текучести, (в случае аустенитных сталей) при квазистатическом ПД растяжением во всех кристаллитах множественно образуются ЗЛП, в которых, происходит инверсная заселенность N_n^ε ($N_n^\varepsilon > N_k^\varepsilon > N_m^\varepsilon$) уровней энергии кристаллитов с E_n при заданной ε за счет вынужденного локализованного поглощения кристаллитом энергии. Термодинамически каждому кристаллиту энергетически выгодно образовывать дефектно-дислокационную субструктуру с наименее возможной энергией, когда ($N_n^\varepsilon < N_k^\varepsilon < N_m^\varepsilon$). Время жизни дефекта с энергией E_n мало и со случайным испусканием дислоконов кристаллит перейдет в состояние с меньшей энергией дефекта E_k с заселенностью ($N_n^\varepsilon < N_k^\varepsilon$ и $N_k^\varepsilon > N_m^\varepsilon$). Выделенная при этом энергия ($N_n^\varepsilon - N_k^\varepsilon$) ($E_n - E_k$) идет на дальнейшее расширение размера ЗЛП. Это происходит до тех пор пока, в каком-то кристаллите, у края ПК образца, где стадия течения наиболее выражена с максимальной инверсной заселенностью ($N_k^\varepsilon > N_m^\varepsilon$) возникает множественный переход из состояния кристаллита с энергией E_k в состояние с E_m с множественным выделением потоков энергии (за счет вынужденного испускания квазикогерентных дислоконов). Выделившаяся энергия дислоконов передается вдоль атомов кристаллита от одной ЗЛП к другой ЗЛП, приводя к их объединению и повторению процесса выделения дислокационной энергии и доходит до границы зерна. Далее процесс развивается в уже в подготовленном заранее соседнем кристаллите с инверсной заселенностью уровней энергий кристаллита в своих ЗЛП и т.д. В результате макрополоса Чернова-Людерса прорастает визуально от границы образца к противоположной его границе и возникает фронт ее распространения как автоволны вдоль нагружения по всему образцу. Макрополоса может быть много, если описанные выше условия для реализации инверсной заселенности уровней энергии кристаллитов могут быть повторены.

Механически этот процесс обеспечивается за счет того факта, что в ЗЛП под действием высоких локальных внутренних напряжений происходят так называемые мартенситные превращения обеспечивающие прямой переход из ГЦК γ -фазы КР в ОЦК α' фазу, а затем обратно с образованием за счет комбинаций частичных дислокаций Шокли дефектов двойникового типа, с наименьшей энергией и уже с уменьшенными значениями локальных напряжений в кристаллите с зарождением макрополосы, а затем и в последующих кристаллитах.

Предложенная модель для объяснения физики макрополосы Чернова-Людерса может быть использована и для объяснения родственного ей эффекта Портевена-Ле-Шателье. Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований РАН на 2013-2020 гг.

1. R.Z., Valiev A.P., Zhilyaev T.G. Langdon, Bulk Nanostructured Materials: Fundamentals and Applications, Wiley & Sons, New Jersey, 2014.
- 2 E.O. Hall. // Proc. Roy. Soc.B. 1951. V.64. P.747–753; Petch N.J., //J. Iron Steel Inst. 1953. V.174. P.25–28.
3. Reshetnyak A.A., Statistical approach to flow stress and generalized Hall-Petch law for polycrystalline materials under plastic deformations // e-print - arXiv:1803.08247[cond-mat.mtr-sci].
4. Reshetnyak A.A., Peculiarities of temperature dependence for generalized Hall-Petch law and two-phase model for deformable polycrystalline materials // e-print - arXiv: 1805.08623[cond-mat.mtr-sci].
5. Reshetnyak A.A., On statistical quantized approach to flow stress and generalized Hall-Petch law for deformable polycrystalline materials. Temperature-size effect. (submitted in Phys. Rev. B)
6. Reshetnyak A.A., Sharkeev Yu.P., Two-phase model of the polycrystalline aggregate with account for grain-boundary states under quasi-static deformation // AIP Conference Proceedings. –2018. V.2056, 1p.020251 e-print - arXiv:1809.03628[cond-mat.mes-hall].
7. Л.Б. Зуев, В.И. Данилов, Б.С. Семухин, Пространственно-временное упорядочение при пластическом течении твердых тел // УФМ.–2002.–Т.3.–№3.–С.237–304.