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»

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: 10.17223/9785946218412/266

**К ТЕОРИИ НАПРЯЖЕНИЯ ТЕЧЕНИЯ В МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ АГРЕГАТАХ. ЭФФЕКТ ДИСПЕРСИОННОГО
УПРОЧНЕНИЯ**

¹Решетняк А.А., ¹Шаркеев Ю.П., ²Чевизович Д.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск,*

²*Vinca Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Serbia,*

Предложенная в работах [1,2,3] 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, расширенная для включения зернограницных областей в рамках двухфазных моделей в [4], развита для мультимодального распределения зерен по их размерам в ПК образце. Зависимость основана на статистической модели распределения энергии каждого кристаллита, вначале в случае одномодального ПК материала по квазистационарным энергетическим уровням при пластическом нагружении с наибольшим уровнем, равным энергии максимальной прямолинейной дислокации в рамках дислокационного механизма деформирования, с неизменным фазовым состоянием кристаллитной части при фиксированной температуре. Механизм деформирования основан на порождении зон локализованной деформации (ЗЛП), в которых, при нагружении термо-флуктуационно, нарушена локальная трансляционная инвариантность кристаллической решетки (КР) в данной фазе. Энергетический спектр кристаллита выбран в простом 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 [1] атомов КР зерна в новые устойчивые состояния в сравнении со значением минимального времени между актами ПД в нем. На участках равновесности при накопленной ПД, ε - вероятности появления любого из возможных дефектов при элементарном акте ПД в момент времени, $t=\varepsilon/\dot{\varepsilon}$, (отсчитываемого от начала собственно неупругой деформации) распределены в соответствии с распределением Больцмана, $P_n(\varepsilon) \sim A(\varepsilon) \exp\left\{-\frac{n}{2}Gb\varepsilon^3/NkT\right\}$, с эффективным значением вектора Бюргерса $b_\varepsilon = b(1 + \varepsilon)$, и постоянным при заданной температуре модулем сдвига G .

Распределение скалярной плотности дислокаций (СПД) в каждом кристаллите, во-первых, приводит к напряжению течения $\sigma(\varepsilon)$ согласно механизму деформационного упрочнения Тейлора, содержащему нормальный [5] и аномальный соотношения Холла-Петча соответственно для крупно- и нанокристаллических зерен. Во-вторых, $\sigma(\varepsilon)$ имеет максимум для напряжения течения при экстремальном среднем размере зерна 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 T и увеличением накопленной ПД ε . Во-вторых, температурное поведение $\sigma(\varepsilon)$, и в частности, σ_y , составляет, в совокупности с соотношением (1) так называемый *размерно-температурный эффект* (РТЭ), заключающийся для плотноупакованных зерен одномодального ПК агрегата в увеличении его предела текучести σ_y с ростом T при всех размерах зерен $d < 3d_0$ (т.е. в нанокристаллической области) и обычном уменьшении σ_y при $d > 3d_0$ (о температурной зависимости в нормальном законе Холла-Петча отмечено, например в [6]).

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

Продемонстрированы появление и эволюция ячеистых и ячеисто-сетчатых дислокационных субструктур, возникающих при накоплении ПД ввиду меняющейся кривизны КР в зависимости от d . Полученная статистически на основе механических представлений СПД, эквивалентно может быть вычислена в рамках квазичастичной интерпретации для кванта энергии пластической деформации, условно названного *дислоконом* [1,2, 3]. Этот объект в рамках корпускулярно-волнового дуализма Л. Де Бройля является ни чем иным как составной квазичастицей из акустических фононов, испускаемых атомами зерна в ЗЛП. Эти фононы не являются свободными и объединены в дислоконы лишь при неупругом воздействии на КР [2,3]. 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) КР при $T=300K$. Построены деформационные кривые для кристаллической фазы α -Fe с учетом условия разрушения Бэкофена-Консидера [2, 3].

Однофазная модель ПК материала расширена за счет включения разупрочняющей зеренно-границной фазы до двухфазной с интегральным напряжением течения [2, 3,4]:

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

$$\sigma_C(\varepsilon, d) = \sigma(\varepsilon) = \sigma_0(\varepsilon) + \alpha m \frac{Gb}{d} \sqrt{\frac{6\sqrt{2}}{\pi} m_0 \varepsilon M(0)} \left(e^{M(\varepsilon) \frac{b}{d}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}}, M(\varepsilon) = Gb\varepsilon^3/2kT, \quad (2)$$

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. На примере α -Fe [1], показано, что теоретический предел прочности, $\sigma_s = 13,27$ ГПа, (недостижимый с учетом критерия Бэкофена-Консидера), при $(d_m, \varepsilon_m) = (40,6 \text{ нм}; 0,2)$ уменьшается в 3,5 раза до $\sigma_s = 3,81$ ГПа при увеличении доли зернограницной мягкой фазы до $m(b/d) = 36\%$. 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:

$$\sigma(\varepsilon)|_{d \gg b} = \sigma_0(\varepsilon) + k(\varepsilon)d^{-\frac{1}{2}}, k(\varepsilon) = \alpha m G \sqrt{\frac{6\sqrt{2}}{\pi} m_0 \varepsilon b M(0)/M(\varepsilon)} \Rightarrow m_0 = \frac{\pi}{6\sqrt{2}} \frac{k^2(\varepsilon)}{(\alpha m G)^2 \varepsilon b} \frac{M(\varepsilon)}{M_0}. \quad (3)$$

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 [3,4]. Показано, что РТЭ сохраняется для малоугловых ГЗ, но с ростом доли мягкой фазы аномальное Т-поведение σ_y исчезает.

Реальные ПК агрегаты получаемые в рамках применения ИПД, неоднородны по размерам зерен в кристаллитной фазе при заданной T . Кроме того, в ПК материалы для дисперсионного упрочнения добавляются частицы других химических элементов. Двухфазная модель, эффективно используется как для случая многомодальности ПК агрегатов (выделяя его, вторую, третью и т.д. моды из зерен второй фазы $(n - m)(b/d)$ в [2]), так и расширяется на случай дисперсионного упрочнения, предложенного модельно в [4] включением “3-й фазы” с членом $\sigma_{dis}(\varepsilon, d_{dis})$ до трехфазной модели с дисперсионным упрочнением и интегральным напряжением:

$$\sigma_{\Sigma dis}(\varepsilon) = (1 - U_{dis}) \sigma_C(\varepsilon) + U_{dis} \sigma_{dis}(\varepsilon, d_{dis}), \quad 0 \leq U_{dis} < 1 \quad (4)$$

с весом U_{dis} , и d_{dis} – средним размером частиц (из других материалов в сравнении с 2-фазным материалом, например, C , Si и т.д.), реализующих упрочнение. Роль σ_{dis} аналогичная роли $\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB})$ для зерен 2-й фазы, но с собственным модулем сдвига и вектором Бюргерса наиболее вероятных ансамблей дислокаций G_{dis}, b_{dis} . Такое решение не единственно и приемлемо, если дисперсионные частицы не способствуют появлению новой фазы в кристаллитной части.

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

Ключевым моментом теории, является экспериментальная проверка предсказанного РТЭ. 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 субмикроскопических образцов и частично были выявлены на образцах сплава α -Ti ВТ1-0 в УМЗ области [7].

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

1. 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].
2. 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].
3. 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)
4. 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.2051-p.020251 – e-print - arXiv:1809.03628[cond-mat.mes-hall].
5. 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
6. Panin V.E., Armstrong R.W. Hall-Petch analysis for temperature and strain rate dependent deformation of polycrystalline lead // Phys. Mesomechanics. 2016. V.19. №1. P. 35–40.
7. Курзина И.А., Ерошенко А.Ю., Шаркеев Ю.П. и др. // Материаловедение. 2010. №5. С.49.