

**ВЛИЯНИЕ НЕКОГЕРЕНТНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ
НА АННИГИЛЯЦИЮ ДИСЛОКАЦИЙ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ
АЛЮМОМАТРИЧНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ***О.И. Данейко^{1,2}, Т.А. Ковалевская^{1,2}, Т.А. Шалыгина¹, В.Г. Симоненко³¹ *Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия*² *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*³ *Государственный университет «Дубна», г. Дубна, Московская обл., Россия*

С использованием математического моделирования выявлены закономерности изменения плотностей составляющих дислокационной подсистемы в дисперсно-упрочненных материалах в зависимости от объемной доли и масштабных характеристик упрочняющей фазы при разных температурах деформации. Показано, что аннигиляция дислокаций значительно уменьшается при уменьшении объемной доли наноразмерных некогерентных частиц во всех исследуемых материалах с упрочняющими частицами различных размеров. Выявлено, что плотность дислокаций в призматических петлях в значительной мере определяется размером частиц и объемной долей упрочняющей фазы.

Ключевые слова: математическое моделирование, пластическая деформация, дисперсно-упрочненные материалы, наноразмерные частицы, плотность дислокаций.

Введение

Упрочнение частицами металлических сплавов значительно повышает их механические характеристики, поэтому дисперсно-упрочненные материалы к настоящему времени нашли широкое применение в различных отраслях промышленности. Механические свойства таких материалов определяются сложными процессами, возникающими при взаимодействии металлической матрицы с упрочняющими частицами [1–6], в результате чего формируется дефектная структура матрицы и происходит ее эволюция в процессе пластической деформации [7–10]. Удобным и универсальным инструментом исследования этих микропроцессов является математическое моделирование, которое позволяет варьировать характеристики дисперсно-упрочненного материала и воздействия на него в широких пределах [11–15], что практически невозможно сделать экспериментально.

В настоящей работе использовалась математическая модель пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов с алюминиевой матрицей и некогерентными недеформируемыми сферическими частицами [11, 12]. В рамках детально разработанной модели [16, 17] пластической деформации скольжением при постоянной скорости деформации проводится анализ влияния температуры на аннигиляционные процессы, происходящие в дисперсно-упрочненных сплавах с некогерентными наноразмерными частицами. Прослежено изменение плотностей различных видов дислокаций в зависимости от температуры деформации и размера частиц при трех объемных долях упрочняющей фазы ($f_1 = 10^{-4}\%$, $f_2 = 0.01\%$, $f_3 = 0.1\%$). При этом в рамках фиксированной объемной доли размеры частиц δ варьируются в наномасштабном диапазоне ($\delta_1 = 10$ нм, $\delta_2 = 20$ нм, $\delta_3 = 50$ нм).

Математическая модель пластической деформации

Пластическая деформация осуществляется движением сдвигообразующих дислокаций в зоне сдвига, которые взаимодействуют друг с другом, с точечными дефектами и некогерентными дисперсными частицами. Результатом таких взаимодействий является образование в зоне сдвига геометрически необходимых дислокаций, которые формируются вблизи некогерентных частиц: кольца Орована [1–3], призматические петли [4–7], дипольные дислокационные конфигурации [11]. Начало формирования в зоне сдвига дипольных дислокационных конфигураций определяется

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

достижением в процессе пластической деформации некоторой критической плотности дислокаций ρ_c [11], величина которой зависит от масштабных характеристик упрочняющей фазы:

$$\rho_c = \frac{60}{\Lambda_p^2 - \pi\delta^2/4},$$

где Λ_p – расстояние между центрами частиц. И чем меньше размер упрочняющих частиц δ , тем при более высоких степенях деформации начинается формирование дислокационных диполей. С момента появления в зоне сдвига диполей механические характеристики материала заметно увеличиваются [12, 13, 16, 17].

Появление дислокаций различного типа в зоне сдвига и изменение их плотностей в процессе пластической деформации связано с характеристиками гетерофазного сплава. С одной стороны, это упрочнение материала, определяемое генерацией дислокаций и точечных дефектов различного вида и их последующей аннигиляцией, с другой стороны, важное значение имеют масштабные характеристики упрочняющих частиц и внешние условия деформации (скорость, температура, вид деформации).

Система уравнений модели пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов записана в виде [12, 16]

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_m}{da} &= (1-\omega_s P_{as}) \frac{F}{Db} - \frac{2b}{\dot{a}} \left((1-\omega_s) \rho_m^2 \min(r_a, \rho_m^{-1/2}) (c_{2v} Q_{2v} + c_{1v} Q_{1v} + c_i Q_i) + \right. \\ &\quad \left. + \alpha \sqrt{\rho} (\rho_p^v (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v}) + \rho_p^i c_i Q_i) + \frac{1}{r_a} (\rho_d^i c_i Q_i + \rho_d^v (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v})) \right), \\ \frac{d\rho_p^i}{da} &= \frac{\langle \chi \rangle \delta}{2\Lambda_p^2 b} - \frac{2\alpha}{\dot{a}} \sqrt{\rho} \rho_p^i b (2c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + 2c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{d\rho_p^v}{da} &= \frac{\langle \chi \rangle \delta}{2\Lambda_p^2 b} - \frac{2\alpha}{\dot{a}} \sqrt{\rho} \rho_p^v b (c_{2v} Q_{2v} + 2c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{d\rho_d^v}{da} &= \frac{1}{\Lambda_p b} - \frac{2b}{\dot{a} r_a} \rho_d^v (c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{d\rho_d^i}{da} &= \frac{1}{\Lambda_p b} - \frac{2b}{\dot{a} r_a} \rho_d^i (c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}), \\ \frac{dc_i}{da} &= q \frac{\tau_{\text{dyn}}}{G} - \frac{c_i}{\dot{a}} [((1-\omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 Q_i + Q_{1v} c_{1v} + Q_{2v} c_{2v} + Q_i (c_{1v} + c_{2v})], \\ \frac{dc_{1v}}{da} &= \frac{q \tau_{\text{dyn}}}{6G} - \frac{1}{\dot{a}} [(((1-\omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 + c_i + c_{1v}) Q_{1v} c_{1v} + Q_i c_i c_{1v} - (Q_{2v} + Q_i) c_i c_{2v}], \\ \frac{dc_{2v}}{da} &= \frac{5q \tau_{\text{dyn}}}{6G} - \frac{1}{\dot{a}} [(((1-\omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 + c_i) Q_{2v} c_{2v} + Q_i c_i c_{2v} - Q_{1v} c_{1v}^2]. \\ \dot{a} &= \frac{8}{\pi} \frac{\nu_D B \beta_r^{1/2}}{\xi^{1/6} F (1 - \beta_r)} \frac{\tau^3 (((1 - \beta_r) \rho_m + \rho_p + \rho_d) (\tau - \tau_a))^{1/3}}{G^{4/3} b^{1/3} (\tau^2 - G^2 b^2 \xi \beta_r \rho_m) \rho_m^{1/2}} \exp \left[-\frac{0,2Gb^3 - (\tau - \tau_a) \Lambda b^2}{kT} \right]. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь a – деформация сдвига; \dot{a} – скорость деформации, F – параметр, определяемый формой дислокационных петель и их распределением в зоне сдвига; ω_s – доля винтовых дислокаций; P_{as} – вероятность аннигиляции винтовых дислокаций; r_a – критический радиус захвата, τ_{dyn} – напряжение, избыточное над статическим сопротивлением движению дислокаций; Q_j – кинетический коэффициент; ν_D – частота Дебая; k – постоянная Больцмана; T – температура деформирования;

$\langle \chi \rangle$ – средняя величина параметра, характеризующего геометрию дислокаций на частицах; q – параметр, определяющий интенсивность генерации точечных дефектов; ρ_m – плотность сдвигообразующих дислокаций; ρ – суммарная плотность дислокаций; ξ – множитель Смоллмэна; $\rho_p = \rho_p^i + \rho_p^v$ – плотность призматических дислокационных петель; $\rho_d = \rho_d^i + \rho_d^v$ – плотность дислокаций в дипольных конфигурациях; Λ – длина свободного дислокационного сегмента; β_r – доля реагирующих дислокаций леса. Атермическая составляющая сопротивления движению дислокаций τ_a в дисперсно-упрочненном сплаве с некогерентными частицами обусловлена напряжением трения τ_f , взаимодействием с реагирующими дислокациями леса τ_d и напряжением обхода частиц τ_{Or} : $\tau_a = \tau_f + \tau_d + \tau_{Or}$.

Численное моделирование дифференциальных уравнений (1) проведено для монокристаллов дисперсно-упрочненных сплавов с алюминиевой матрицей при варьировании объемной доли и масштабных характеристик упрочняющей фазы. Начальная плотность сдвигообразующих дислокаций задавалась соответствующей состоянию недеформированного кристалла, при этом предполагалось отсутствие дислокационных призматических петель и дислокаций в дипольных конфигурациях. Начальная концентрация точечных дефектов соответствовала концентрации термодинамически равновесных точечных дефектов при данной температуре. Скорость деформации задавалась равной 10^{-3} с^{-1} .

Анализ полученных результатов

Решение системы уравнений численными методами позволило получить зависимости плотностей всех линейных и точечных дефектов от степени деформации, а также кривые течения $\tau(a)$. На рис. 1 показаны зависимости плотности дислокаций от размера некогерентных частиц при фиксированном значении объемной доли, скорости деформации и двух температурах ($T_1 = 193 \text{ К}$, $T_2 = 493 \text{ К}$). Выявлено, что средняя плотность дислокаций в основном увеличивается с ростом объемной доли некогерентных наноразмерных частиц (рис. 1). Однако эта тенденция нарушается для сплавов с размерами упрочняющих частиц больше 40 нм при температуре 493 К (рис. 1, кривые 1, 3).

Повышение температуры деформации до 493 К усиливает аннигиляционные процессы до такой степени, что плотность дислокаций значительно уменьшается при всех величинах объемной доли упрочняющих частиц (рис. 1, кривые 1, 3, 5).

Размер упрочняющих частиц неоднозначно влияет на плотность дислокаций. При самой малой из исследованных объемных долей упрочняющей фазы ($f_1 = 10^{-4} \%$) увеличение размера частиц ведет к увеличению суммарной плотности дислокаций и при низких, и при высоких температурах (рис. 1, кривые 1, 2). А в материалах с большей объемной долей упрочняющей фазы ($f_2 = 0.01\%$, $f_3 = 0.1\%$) наблюдается, в основном, уменьшение плотности дислокаций при увеличении размера частиц (рис. 1, кривые 3, 5, 6). В материале с объемной долей упрочняющей фазы $f_2 = 0.01\%$ при температуре деформации 193 К наблюдается немонотонное изменение плотности дислокаций при увеличении размера частиц (рис. 1, кривая 4). Это объясняется разным составом дислокационного ансамбля в указанных материалах. При появлении в материале дипольных дислокационных конфигураций плотность дислокаций значительно увеличивается. В этом случае процессы генерации дислокаций преобладают над аннигиляционными процессами.

Интересно отметить тот факт, что разница между значениями плотностей дислокаций ($\rho_{T_1} - \rho_{T_2} = \Delta\rho$) при низкой (193 К) и высокой (493 К) температурах заметно возрастает при увеличении объемной доли упрочняющей фазы (рис. 2). Это обусловлено тем, что с ростом объемной доли частиц роль аннигиляционных процессов увеличивается при повышении температуры деформации. Причем абсолютные значения $\Delta\rho$ возрастают при увеличении объемной доли упрочняющей фазы.

Анализ плотности составляющих дислокационной структуры при разных температурах деформации позволил выявить, какой тип дислокаций (сдвигообразующие, призматические петли, дипольные конфигурации) и при каких параметрах упрочняющих частиц дает больший вклад в аннигиляционный процесс (см. таблицу).

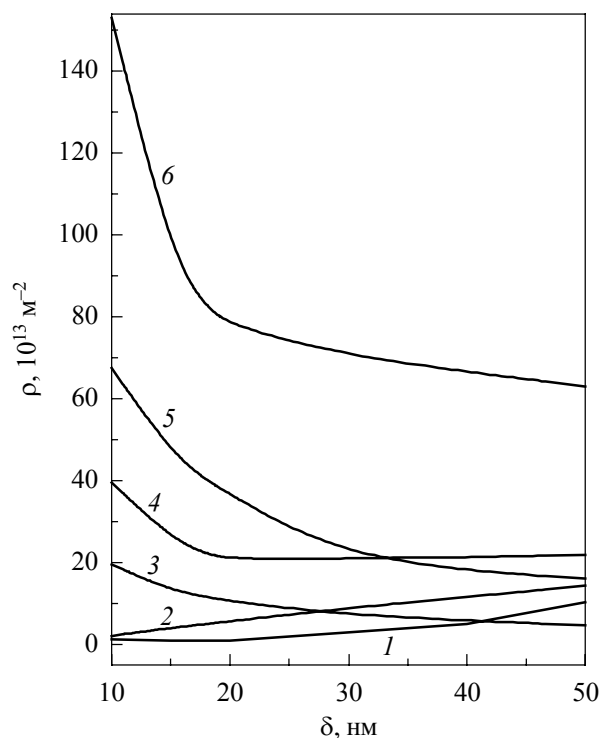


Рис. 1. Зависимость плотности дислокаций от размера упрочняющих частиц дисперсно-упрочненного материала на основе алюминия. Температура деформации: кр. 1, 3, 5 – 493 К; кр. 2, 4, 6 – 193 К. Объемная доля упрочняющей фазы, %: кр. 1, 2 – 10^{-4} ; кр. 3, 4 – 0.01; кр. 5, 6 – 0.1. Степень деформации – 0.1

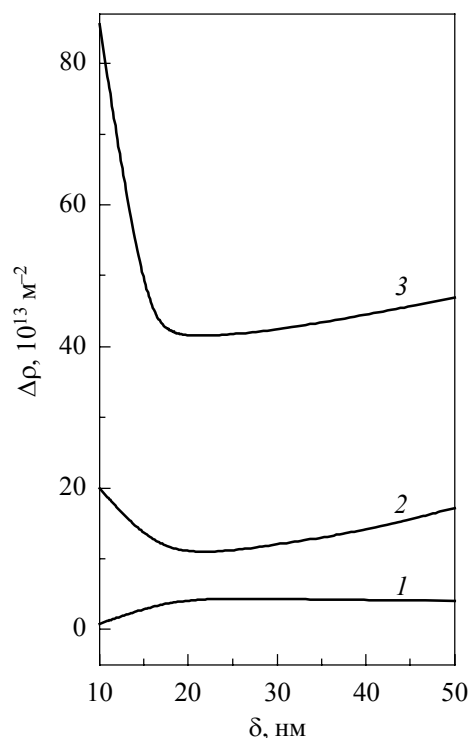


Рис. 2. Зависимость разности плотностей дислокаций при низкой (193 К) и высокой (493 К) температурах деформации от размера упрочняющих частиц. Степень деформации – 0.1. Объемная доля упрочняющей фазы, %: кр. 1 – 10^{-4} ; кр. 2 – 0.01; кр. 3 – 0.1

Плотность сдвигообразующих дислокаций (ρ_m), дислокаций в призматических петлях (ρ_p) и дислокаций в дипольных конфигурациях (ρ_d) при деформации $a = 0.1$

Объемная доля, %	Размер частиц	$\rho_m, 10^{13} \text{ м}^{-2}$		$\rho_p, 10^{13} \text{ м}^{-2}$		$\rho_d, 10^{13} \text{ м}^{-2}$	
		193 К	493 К	193 К	493 К	193 К	493 К
10^{-4}	$\delta_1 = 10 \text{ нм}$	0.484	0.538	1.58	0.691	0	0
	$\delta_2 = 20 \text{ нм}$	0.858	0.528	0.73	0.357	2.154	0
	$\delta_3 = 50 \text{ нм}$	0.53	2.925	0.113	0.034	6.747	3.693
0.01	$\delta_1 = 10 \text{ нм}$	0.451	6.325	39.157	13.232	0	0
	$\delta_2 = 20 \text{ нм}$	0.29	3.46	19.814	7.027	0	0
	$\delta_3 = 50 \text{ нм}$	0.322	1.64	6.011	3.013	7.704	0
0.1	$\delta_1 = 10 \text{ нм}$	3.186	22.98	152.3	44.45	0	0
	$\delta_2 = 20 \text{ нм}$	1.115	12.28	77.39	24.47	0	0
	$\delta_3 = 50 \text{ нм}$	1.114	5.35	25.63	10.8	19.156	0

Так, максимальный вклад в аннигиляцию в сплаве с объемной долей $f_3 = 0.1\%$ вносят дислокации в призматических петлях при всех исследованных размерах упрочняющих частиц. Данные об изменении плотности сдвигообразующих дислокаций, а именно возрастание ρ_m с ростом температуры, свидетельствуют о трансформации призматических петель в сдвигообразующие дислокации, за счет чего уменьшается плотность последних с увеличением температуры.

При температуре 493 К дипольные дислокационные конфигурации в основном не формируются при всех объемных долях и размерах упрочняющих частиц, так как критическая плотность дислокаций ρ_c [11] в материале не достигается из-за интенсивной аннигиляции дислокаций в призматических петлях.

При малой объемной доле упрочняющей фазы ($f_1 = 10^{-4}\%$), в отличие от больших объемных долей, эффект трансформации призматических петель в сдвигообразующие дислокации заметен только при размере частиц $\delta = 50$ нм (см. таблицу). Плотность сдвигообразующих дислокаций ρ_m значительно возрастает при увеличении температуры от 193 до 493 К: со значения $\rho_m = 0.53 \cdot 10^{13}$ до $2.925 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-2}$.

Сравнение разности плотностей дислокаций при низкой (193 К) и высокой (493 К) температурах деформации в дисперсно-упрочненных материалах с одним размером частиц, но с разными их объемными долями показывает, что при каждом размере частиц разность плотностей при различных температурах деформации возрастает при увеличении объемной доли упрочняющей фазы (рис. 2). Эти данные свидетельствуют об активизации аннигиляционных процессов в сплавах с большей объемной долей упрочняющих наноразмерных некогерентных частиц, которая происходит вследствие большей плотности дислокаций, в частности дислокаций в призматических петлях, в зоне сдвига. При этом сдвигообразующие дислокации, двигаясь через большое количество призматических петель, создают при их взаимном пересечении большое количество точечных дефектов (межузельных атомов, вакансий, бивакансий), которые при высокой температуре активизируют аннигиляцию дислокаций. Призматические петли могут уменьшаться в процессе пластической деформации (вплоть до полной аннигиляции) при осаждении вакансий и бивакансий на призматические петли междуузельного типа и при осаждении междуузельных атомов на вакансионные призматические петли. Может происходить также рост призматических петель и их трансформация в сдвигообразующие дислокации при осаждении на вакансионные петли междуузельных атомов и при осаждении на междуузельные призматические петли вакансий и бивакансий. Появление дополнительных сдвигообразующих дислокаций способствует появлению дополнительного количества точечных дефектов, которые образуются благодаря пересечению дислокаций леса сдвигообразующими дислокациями, формированию на них порогов и соответственно точечных дефектов для обеспечения движения порогов.

Анализ величин плотности дислокаций в призматических петлях ρ_p для разных объемных долей и масштабных характеристик упрочняющей фазы показывает уменьшение плотности ρ_p с ростом температуры в 2–3 раза (см. таблицу). Выявлено увеличение плотности сдвигообразующих дислокаций ρ_m с ростом температуры практически при всех исследуемых параметрах упрочняющей фазы. При малой объемной доле частиц возрастание $\rho_m(T)$ незначительно. При высоком содержании объемной доли упрочняющей фазы выявлено более интенсивное возрастание ρ_m с ростом температуры при разных размерах частиц (см. таблицу). Это объясняется, с одной стороны, более интенсивной генерацией призматических петель на частицах и соответственно интенсификацией процессов трансформации призматических петель в сдвигообразующие дислокации. С другой стороны, формирование дипольных дислокационных конфигураций и участие их в процессах аннигиляции и релаксации способствуют увеличению плотности сдвигообразующих дислокаций с ростом температуры.

Заключение

Таким образом, результаты математического моделирования позволили выявить закономерности изменения плотностей различных составляющих дислокационной подсистемы в пластически деформируемых материалах, упрочненных некогерентными наноразмерными частицами, в зависимости от температуры, объемной доли и масштабных характеристик упрочняющей фазы.

Возрастание объемной доли упрочняющих частиц приводит к значительному увеличению плотности дислокаций в призматических петлях, а для дислокаций в дипольных конфигурациях такой однозначной зависимости нет. Интенсивность аннигиляции дислокаций значительно уменьшается при уменьшении объемной доли наноразмерных некогерентных частиц.

Выявлено аномальное поведение плотности сдвигообразующих дислокаций в зависимости от температуры деформации: плотность увеличивается с ростом температуры. Это связано с трансформацией призматических петель и дипольных конфигураций в сдвигообразующие дислокации.

Обнаружено, что в дисперсно-упрочненных материалах с большей объемной долей частиц плотность дислокаций может быть меньше при некоторых сочетаниях масштабных характеристик упрочняющей фазы, что объясняется разным составом дислокационного ансамбля. Разница между плотностями дислокаций при разных температурах тем больше, чем больше объемная доля упрочняющих частиц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ashby M.F. // *Phil. Mag.* – 1966. – V. 14. – No. 132. – P. 1157–1178.
2. Ebeling R., Ashby M.F. // *Phil. Mag.* – 1966. – V. 13. – No. 124. – P. 805–834.
3. Humphreys F.J., Hirsch P.V. // *Pros. R. Soc. Lond.* – 1970. – V. A318. – No. 1532. – P. 73–92.
4. Хирш П.Б., Хэмпфри Ф.Дж. // *Физика прочности и пластичности.* – М.: Металлургия, 1972. – С. 158–186.
5. Hazzledine P.M., Hirsch P.V. // *Phil. Mag.* – 1974. – V. 30. – No. 6. – P. 1331–1351.
6. Stewart A.T., Martin J.W. // *Acta Met.* – 1975. – V. 23 – P. 1–7.
7. Эшби М.Ф. // *Физика прочности и пластичности.* – М.: Металлургия, 1972. – С. 88–108.
8. Humphreys F.J., Hirsch P.V. // *Phil. Mag.* – 1978. – V. 34. – P. 373–399.
9. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. // *Изв. вузов. Физика.* – 1982. – Т. 25. – № 6. – С. 56–82.
10. Попов Л.Е., Кобытев В.С., Ковалевская Т.А. *Пластическая деформация сплавов.* – М.: Металлургия, 1984. – 182 с.
11. Ковалевская Т.А., Виноградова И.В., Попов Л.Е. *Математическое моделирование пластической деформации гетерофазных сплавов.* – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1992. – 168 с.
12. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Матвиенко О.В. // *Изв. вузов. Физика.* – 2018. – Т. 61. – № 7. – С. 40–46.
13. Данейко О.И., Ковалевская Т.А. // *Изв. вузов. Физика.* – 2018. – Т. 61. – № 9. – С. 120–127.
14. Matvienko O., Daneyko O., Kovalevskaya T. // *Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.).* – 2018. – V. 31. – No. 12. – P. 1297–1304.
15. Matvienko O., Daneyko O., Kovalevskaya T. // *Crystals.* – 2020. – V. 10. – No. 12. – P. 1–18.
16. Ковалевская Т.А., Данейко О.И. // *Изв. вузов. Физика.* – 2019. – Т. 62. – № 12. – С. 81–87.
17. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Шалыгина Т.А. // *Изв. вузов. Физика.* – 2020. – Т. 63. – № 4. – С. 139–143.

Поступила в редакцию 28.06.2021.

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

Ковалевская Татьяна Андреевна, д.ф.-м.н., профессор кафедры физики, химии и теоретической механики ТГАСУ, ст. науч. сотр. НИ ТГУ, e-mail: takov47@mail.ru;

Шалыгина Татьяна Анатольевна, к.ф.-м.н., доцент кафедры высшей математики ТГАСУ, e-mail: kvm@tsuab.ru;

Симоненко Владимир Григорьевич, к.т.н., доцент кафедры физико-технических систем Инженерно-физического института государственного университета «Дубна», e-mail: simonenko@trn.ru.