

PACS numbers: 61.72.Bb, 61.72.Cc, 61.72.Hh, 61.72.Yx, 81.40.Cd, 81.40.Ef, 83.60.La

## **Физические основы длительной прочности твёрдых растворов с различной кинетикой подвижных дефектов**

В. Г. Ткаченко

*\*Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины,  
ул. Кржижановского, 3  
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

В рамках выдвинутой структурно-энергетической концепции упрочнения разработана физическая теория длительной, исключаящей разрушение, прочности твёрдых растворов, основанная на дислокационной модели зависящего от времени сопротивления микротекучести и динамических приближениях дислокационных наносегментов с подвижными узлами закрепления ниже макроскопического предела текучести. В аналитических выражениях, описывающих переход от однородной к сосредоточенной микродеформации с локализацией сдвига, критический уровень локальных напряжений связывается с потерей упругой (сдвиговой) устойчивости дислоцированной кристаллической решётки, избыточной энергией, скоростью и плотностью скользящих дислокаций и полями внутренних напряжений, вызванных растворёнными атомами. Для термически активированных процессов прерывистого (повторного) закрепления и коттрелловского блокирования дислокаций учтены вклады близкодествующих механизмов торможения связанных дефектов в кинетике явлений дислокационной релаксации упругих напряжений и дислокационной ползучести, указывающих на решающую роль локализации сдвига в структурной подготовке преждевременного разрушения. Результаты теоретических исследований и термоактивационного анализа находятся в разумном соответствии с опубликованными экспериментальными данными. Новый подход предназначен для использования при количественной оценке эффективности легирования, потенциала термического сопротивления (жаропрочности) и ожидаемого ресурса эксплуатации новых экспериментальных сплавов, в том числе с эффектом Портевена–Ле Шателье.

В рамках запропонованої структурно-енергетичної концепції зміцнення розроблено фізичну теорію тривалої, що виключає руйнування, міцності твердих розчинів, яку засновано на дислокаційній моделі залежного від часу опору мікроплинності та динамічних наближеннях дислокаційних наносегментів з рухомими вузлами закріплення нижче макрос-

копічної межі плинності. В аналітичних виразах, що описують перехід від однорідної до зосередженої мікрODEФОРМАЦІЇ з локалізацією зсуву, критичний рівень локальних напружень пов'язується із втратою пружної (зсувної) стійкості дислокованої кристалічної ґратниці, надлишковою енергією, швидкістю та густиною ковзних дислокацій і полями внутрішніх напружень, викликаних розчиненими атомами. Для термічно активованих процесів переривчастого (повторного) закріплення і Коттреллового блокування дислокацій враховано внески близькодійючих механізмів гальмування пов'язаних дефектів у кінетиці явищ дислокаційної релаксації пружних напружень і дислокаційної плазучості, що вказують на вирішальну роль локалізації зсуву в структурній підготовці передчасного руйнування. Результати теоретичних досліджень і термоактиваційної аналізи знаходяться у розумній відповідності до опублікованих експериментальних даних. Новий підхід призначено для використання при кількісному оцінюванні ефективності легування, потенціалу термічного опору (жароміцності) й очікуваного ресурсу експлуатації нових експериментальних стопів, у тому числі з ефектом Портевена–Ле Шательє.

A new dynamical model of time-dependent dislocation microyielding is proposed using the suggested structure–energy concept of strengthening in terms of dragging mechanisms responsible for microyield resistance in solid solutions below macroscopic yield stress. A physical theory of long-term, non-destructive strength is developed taking as a basis the derived relations for strain rates in metal alloy systems with mobile modes of dislocation pinning. The new approach, thermoactivated analysis and quantitative energy (dislocation) criterion of time-dependent strength account for influence of the short-range dislocation–solute interaction in real scale of time and predict a transition from homogeneous strain to localized shear strain contributing to a probable fracture. In accordance with the revised equations of the dislocation stress relaxation and derived energy relations, the threshold stress of long-term strength of a given alloy is associated with shear instability of its dislocated crystal lattice, density and rate of sliding dislocations, their excess energy (line tension) as well as fields of internal elastic stresses produced by solutes. The theoretical results are in reasonable agreement with published experimental data obtained by means of using dislocation relaxation and creep strain rate measuring techniques. They are suitable to advanced alloys with the Portevin–Le Châtelier effect and could be useful for quantitative assessment of alloying effectiveness, potential of heat-resistance, and expected service resource.

**Ключевые слова:** микротекучесть, длительная прочность, механизмы торможения дислокаций.

**Ключові слова:** мікроплинність, тривала міцність, механізми гальмування дислокацій.

**Keywords:** long-term strength, microyielding mechanisms, dislocation-solute dragging.

(Получено 2 марта 2016 г.)

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Твёрдые растворы — основа всех важнейших конструкционных и нержавеющей сталей, бронз, латуней, алюминиевых, титановых и магниевых сплавов высокой прочности, а также многих полупроводников, сегнетоэлектриков и других функциональных материалов современной твёрдотельной электроники [1–4]. За последние десятилетия были существенно расширены наши представления о природе интенсивной (макроскопической, активной) пластической деформации (ПД) и механизмах, контролирующих кратковременную прочность металлов и сплавов с твёрдорастворным упрочнением (в условиях непрерывного растяжения) [5–7]. Однако по литературным данным [8–12] уровень кратковременных механических свойств ( $\sigma_r$ ,  $\sigma_{\text{вн}}$ ,  $K_{1C}$  и т.д.) — критерий, недостаточный для оценки работоспособности новых материалов и надёжности элементов конструкций, которые работают в динамических условиях длительного нагружения, когда удельная высокая жёсткость  $E/\rho$ , низкий момент инерции и сопротивление зависимой от времени микротекучести (МКТ) становятся определяющими. К конструкционным сплавам, работающим обычно при напряжениях ниже макроскопического предела текучести в условиях длительной релаксации напряжений, предъявляются более высокие требования релаксационной стойкости и сохранения размерной стабильности изготовленных из них деталей узлов конструкций.

В периодической литературе скорость микротекучести и ползучести твёрдых растворов описывается феноменологическими уравнениями, учитывающими диффузионные характеристики и концентрации ингредиентов [13], а для медленных дислокаций — как правило, эмпирическим уравнением [14]

$$\dot{\varepsilon}_n = \sigma^n \exp\left(-\frac{U}{RT}\right), \quad (1)$$

где  $1/n = m = \partial \ln \sigma / \partial \ln \dot{\varepsilon} = f(\dot{\varepsilon})$ . Анализ уравнения (1) в координатах  $\ln \dot{\varepsilon} - \ln \sigma$  и  $\ln \dot{\varepsilon} - 1/T$  с усреднённой оценкой энергии активации (э.а.)  $U$  и параметра упрочнения  $n$ , чувствительного к скорости деформации, даёт общие представления о дислокационно-диффузионном характере МКТ, но не указывает на физическую природу дислокационного механизма, так как э.а. не является критическим параметром [7]. Шерби с сотрудниками [15] сделана попытка разделить вклады диффузионного и дислокационного

механизмов, ответственных за скорость структурных превращений. По этим данным при температурах, соответствующих одинаковой диффузионной подвижности растворенных атомов и фиксированной скорости дислокационной микротекучести ( $\dot{\epsilon}/D_{\text{эф}} \cong \text{const}$ ), для большого количества поликристаллов металлических систем сплавов с ГПУ-, ОЦК- и ГЦК-структурой в двойных логарифмических координатах наблюдается надёжная линейная корреляция между напряжением течения (на устойчивой стадии высокотемпературной ползучести) и упругим модулем Юнга  $E$ . Иными словами, приращение упругих констант можно рассматривать как способ улучшения длительных (зависимых от времени) свойств металлов и сплавов, например, предела ползучести  $\sigma_n$ . Тем не менее, и в этом случае фиксированная скорость ползучести  $\dot{\epsilon}_n$  связывается с параметром феноменологическим соотношением

$$\dot{\epsilon}_n = (kD_{\text{эф}}/b^2)f(\sigma_n/E). \quad (2)$$

При этом функция  $f(\sigma_n/E)$  остаётся неопределённой. Такого рода подходы усложняют или делают проблематичной физическую интерпретацию новых результатов.

В наших работах длительная прочность при умеренных и повышенных температурах связывается с торможением подвижных дислокаций определёнными элементами микроструктуры металлов и сплавов [8–16]. Чтобы понять их природу и эффективность, необходимы теоретические исследования, физические подходы и адекватные модели, способные в рамках термоактивационного анализа установить физическую природу сопротивления микротекучести с привлечением близкодействующих механизмов торможения дефектов в условиях зависящего от времени нагружения. В связи с этим становится целесообразным промоделировать и провести комплекс фундаментальных исследований физической природы дислокационной МКТ и механизма формирования длительной прочности, обобщить результаты оригинальных и опубликованных работ и на этой основе разработать критерий для определения пределов полезной и максимальной длительной прочности ( $\dot{\epsilon}_n = \text{const}$ ) в условиях, когда накапливаемая пассивная (зависимая от времени) микродеформация (ниже макроскопического предела текучести) ограничивается полезным временем, исключающим образование (зарождение) опасных дефектов (субмикротрещин, микропор и т.д.). Основной целью настоящей работы является изучение принципиальной возможности повышения сопротивления МКТ и термического сопротивления (жаропрочности) новых экспериментальных сплавов на основе термически активированных дислокационных механизмов динамического торможения связанных подвижных дефектов в твёрдых

растворах с ГПУ-, ОЦК- и ГЦК-структурой. Фундаментальные концепции, обеспечивающие количественные характеристики активационных параметров, могут быть руководством для разработки физико-химических принципов легирования, инженерного контроля новых экспериментальных сплавов и сокращения времени, затраченного на эмпирические подходы.

## 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ: ФИЗИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ И ОБОСНОВАНИЕ ПОДХОДА

Для поликристаллов предложен ряд моделей термически активированного процесса накопления МКТ с аналитическими решениями дифференциальных уравнений для скорости релаксации напряжений ниже предела текучести [17–19]. В частности, по данным [19] превышение макроскопического предела упругости, который рассматривается в рамках статистической теории как критерий релаксационной стойкости, приводит к потере размерной стабильности, связанной с начальным напряжением при активной деформации металлов и сплавов. Вместе с тем отсутствие полномасштабного (численного) термоактивационного анализа дифференциальных уравнений релаксации является принципиальным недостатком известных дислокационных моделей Доценко [18], Кузнецова–Павлова [17] и Почиваловой [19], исключающих возможность их экспериментальной проверки и определения контролирующих механизмов МКТ.

Руководствуясь основополагающей теорией Гранато–Люкке дислокационного затухания твёрдых растворов [20], неупругие потери энергии в твёрдых растворах следует связывать с закреплением и раскреплением дислокаций. Исследования внутреннего трения на резонансных частотах свободно затухающих колебаний (1–5 Гц) подтверждают наличие слабых фиксированных точек закрепления растворенных ПА/ЛЭ с небольшой энергией связи  $E_{св}$ , а также малоподвижных дислокаций, прочно закреплённых на межфазных границах, например, доэвтектических систем [8]. При этом активационная длина подвижного дислокационного наносегмента  $L_c$  коррелирует с эффективным активационным объёмом (а.о.)  $V^*$ , который по существу является мерой активационной длины дислокаций. В отличие от классической дислокационной теории Гранато–Люкке, рассматривающей атермический (силовой) отрыв (раскрепление) дислокации от точечных дефектов (ТД), в теории дислокационного гистерезиса Инденбома–Чернова [21] появляется возможность исследовать количественные характеристики термически активированного взаимодействия между дислокациями и ТД; однако этот подход нельзя использовать для оценок коротких ( $L_c < 50b$ ) дислокационных сег-

ментов, наблюдаемых в реальных процессах раскрепления дислокаций, так как измеряемая активационная длина  $L_c$  не согласуется с критической длиной, предсказанной для фиксированных барьеров.

В известных концепциях и моделях рассматриваются в основном закономерности взаимодействия подвижных дислокаций с неподвижными примесными атомами, ПА (блокирование) или подвижных ПА с неподвижными дислокациями (деформационное старение), как правило, в условиях активной деформации, т.е. непрерывного растяжения ( $\dot{\epsilon}_n = \text{const}$ ). При этом зависимые от времени процессы дислокационной ползучести и дислокационной релаксации напряжений исследуются в основном как явления, без ограничения допустимой деформации. Эффективная энергия активации, э.а. (полная энтальпия активации)  $U^*$  — важная физическая характеристика, однако её величина не является критическим параметром для установления физической природы контролирующего механизма микротекучести [16]. Поэтому обычно определяют э.а.  $U^*$  и а.о.  $V^*$ , которые считаются некоторым основанием для выбора наиболее вероятного механизма. Хотя а.о.  $V^*$  непосредственно связан с физическим механизмом деформации, усреднённые оценки  $U^*$  и  $V^*$  подчёркивают некоторую неопределённость физической интерпретации результатов [22].

В настоящей работе теоретически анализируется зависимое от времени сопротивление микротекучести для идентификации контролирующих механизмов торможения подвижных дислокаций, взаимодействующих с подвижными растворёнными атомами, с привлечением большего количества активационных параметров. Предлагается более точная методика оценки абсолютных значений  $\tau^*(\dot{\epsilon}, T)$  для широкого диапазона значений термической компоненты приложенного напряжения  $\tau^*$ . В отличие от долговечности (сопротивления разрушению по закону ( $\tau_d \dot{\epsilon}_n = \text{const}$ )) рассматривается концепция полезной длительной прочности (ПДП), ограниченной (по времени  $t^*$ ) заданной (на практике) пассивной микропластической деформацией  $\epsilon = \int_0^{t^*} \dot{\epsilon} dt = \text{const}$  (не более 0,2–0,4%), при которой исключается локализация сдвига (из-за размножения дефектов), а значит и преждевременное разрушение. В отличие от макроскопической деформации при кратковременных испытаниях зависящая от времени скорость дислокационной МКТ  $\dot{\epsilon}_{\text{МКТ}} = d\epsilon/dt$  характеризует мгновенную скорость процесса, а  $\ln \dot{\epsilon}_{\text{МКТ}}$  — её медленное изменение. Такой подход позволяет выполнить полномасштабный (численный) термоактивационный анализ с использованием большего количества физических (активационных) параметров.

Дислокационная релаксация упругих напряжений представляет собой по существу дислокационную ползучесть при перемен-

ном напряжении, что позволяет моделировать микротекучесть в обоих случаях с единых позиций и оценивать а.о.  $V^*$  по кривым ползучести или ступенчатым нагружением [16, 22]. Тогда

$$\frac{\partial \ln \dot{\varepsilon}_n}{\partial \tau^*} \rightarrow \frac{\partial \ln \dot{\varepsilon}_n}{\partial \sigma} \approx \frac{\ln(\dot{\varepsilon}_1/\dot{\varepsilon}_2)}{\Delta \sigma} = \frac{V^*}{kT} \approx \frac{b^2 L_c}{kT}. \quad (3)$$

Предложена модель, в которой рассматривается динамическое взаимодействие полей напряжений подвижных дислокаций и подвижных легирующих элементов (ЛЭ) в условиях пассивной (зависимой от времени) деформации ( $\sigma_n = \text{const}$ ) ниже макроскопического предела текучести, в том числе в интервале температур динамического деформационного старения (ДДС) (синеломкости, водородного охрупчивания, горячеломкости) [16]. На основе этой модели исследованы дислокационные механизмы динамического торможения дефектов, обеспечивающего сопротивление микропластической деформации на уровне  $\varepsilon_n \sim 10^{-9} - 10^{-10} \text{ с}^{-1}$ . Формулировка дислокационной модели сопротивления микротекучести твёрдых растворов даёт возможность проведения полномасштабного (численного) термоактивационного анализа с оценкой активационных параметров ( $U^*$ ,  $V^*$ ,  $E_{\text{св}}$  и  $L_c$ ) в широком интервале температур  $(\partial \ln \dot{\varepsilon}_{\text{мкт}}/\partial T)_\sigma$  и напряжений  $(\partial \ln \dot{\varepsilon}_{\text{мкт}}/\partial \sigma)_T$ . Эти данные использованы для правильного выбора контролирующего дислокационного механизма.

## 2.1. Первое приближение: отсутствие размножения дислокаций

Так как средняя плотность подвижных дислокаций  $\bar{\rho}_{\text{пд}}$  слабо зависит от деформации  $\varepsilon$  [23], на ранних стадиях  $\varepsilon_\Sigma$  она принимается постоянной. Тогда в условиях равномерного удлинения дислокационная МКТ определяется в основном скоростью и преимущественным перераспределением подвижных дислокаций, то есть  $d \ln \dot{\varepsilon}/d\tau^* = \partial \ln \bar{\rho}_{\text{пд}}/\partial \tau^* + \partial \ln \bar{v}_{\text{пд}}/\partial \tau^* \cong \partial \ln \bar{v}_{\text{пд}}/\partial \tau^*$ .

Если процесс термически активированного закрепления дислокаций является доминантным и сопровождается образованием атмосфер Коттрелла при температурах ниже температуры конденсации (насыщения) ( $T = 453 - 473 \text{ К}$  для Mg сплавов), тогда для больших напряжений и низких температур ( $V^* \tau^* > kT$ ) скорость динамического торможения дислокаций выражается уравнением:

$$\dot{\varepsilon}_{\text{мкт}} = 2\bar{\rho}_{\text{пд}} (b\bar{\lambda}v) \exp\left(-\frac{U^* + E_{\text{св}} - L_c^2 b \tau^*}{kT}\right), \quad (4)$$

где  $2\bar{\rho}_{\text{пд}} (b\bar{\lambda}v) = \text{const}$ ;  $\lambda$  — длина свободного пробега дислокации (между термически активными барьерами);  $v$  — частота

успешных прыжков-колебаний дислокации;  $b$  — модуль вектора Бюргерса;  $U^*$  — э.а. движения дислокации;  $E_{\text{св}}$  — энергия связи дислокации с подвижной атмосферой Коттрелла;  $\tau^*$  — эффективное напряжение сдвига;  $L_c$  — активационная длина дислокационного наносегмента, закреплённого подвижной атмосферой Коттрелла из растворенных атомов;  $kT$  — термодинамическая температура.

Смещение подвижного равновесия этой системы соответствует физико-химическому принципу Ле Шателье–Брауна [24]. Явление ДДС и макроскопический эффект Портевена–Ле Шателье (jerky flow), которые проявляются при активной деформации ( $\dot{\epsilon}_n = \text{const}$ ,  $\sigma \neq \text{const}$ ) в тонкой структуре кривых непрерывного растяжения, свидетельствуют о динамическом взаимодействии растворенных ЛЭ/ПА с подвижными дислокациями [25]. В интервале температур, вызывающих эффект Портевена–Ле Шателье, т.е. в условиях  $\tau^*V^* \ll kT$ , дислокация рывками взаимодействует с атмосферой Коттрелла, вызывая скачкообразное протекание МКТ и ограничение подвижности дислокаций в твёрдых растворах. На гладких кривых растяжения этот эффект проявляется в виде «зубцов» прерывистого течения (для скоростей дислокаций  $u_d > u_{\text{кр}}$  и  $u_d < u_{\text{кр}}$ ) [26, 27]. Для аналитического описания этого процесса выдвинута физическая идея расщепления (на два энергетических уровня) активационного потенциального барьера на уровне предела МКТ, необходимого для активированного (ограниченного) движения временно связанных дислокаций. Скачкообразное движение по существу означает термически активированное закрепление дислокаций (с долей  $\exp\{E_{\text{св}}/(kT)\}$  и э.а.  $U^*$ , превышающей потенциальный барьер  $U$  на величину  $E_{\text{св}}$ , и термически активированное раскрепление дислокаций (с долей  $\exp\{-E_{\text{св}}/(kT)\}$  и э.а.  $U^*$  ниже  $U$  на величину энергии отрыва  $-E_{\text{св}}$ ). Таким образом, рассматривается двухуровневый процесс термически активированного взаимодействия указанных дефектов.

Если раскрепление дислокаций осуществляется только за счёт термических флуктуаций ( $\tau^* = 0$ ), энергия активации для её отрыва увеличивается до  $2E_{\text{св}}$  при энтропийной температуре ( $T_3$ ). Если подвижные термические препятствия увеличивают или уменьшают э.а. движения дислокаций на величину энергии связи по конкурентному механизму, их динамика торможения не противоречит концепции Гранато–Люкке и согласуется с физико-химическим принципом смещения подвижного равновесия Ле Шателье–Брауна.

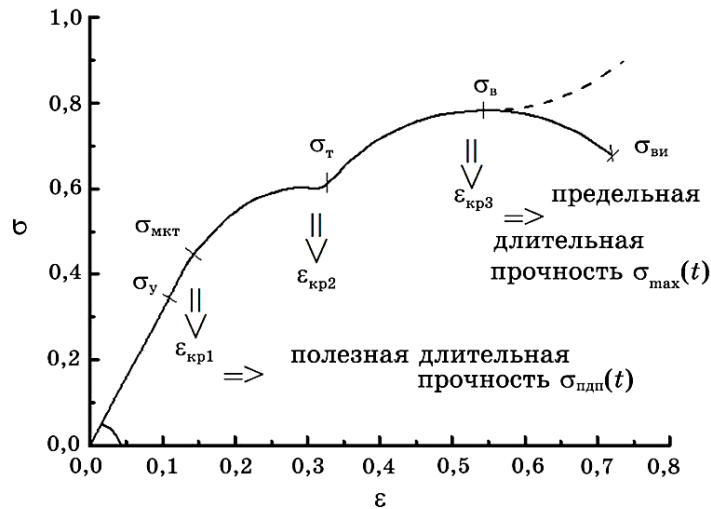
Таким образом, ограничение скорости микропластической деформации рассматривается как результат разности прямых и обратных термически активируемых процессов закрепления дислокаций (динамическое торможение) и раскрепления дислокаций растворенными элементами (динамическое ускорение). При не-



больших сдвиговых напряжениях и повышенных температурах ( $V^* \tau^* \ll kT$ ) (в условиях аккомодации диффузионных механизмов) скорость дислокационной микротекучести  $\dot{\epsilon}_{\text{мкт}}$  связывается соотношением:

$$\dot{\epsilon}_{\text{мкт}} = 2\bar{\rho}_{\text{пд}}(b\bar{\lambda}\nu) \exp\left(-\frac{U^* - L_c^2 b \tau^*}{kT}\right) \text{sh}\left(\frac{E_{\text{св}}}{kT}\right). \quad (5)$$

На рисунке 1 схематически представлены предельные (критические, зависимые от времени) деформации на уровне предела микротекучести  $\sigma_{\text{мкт}}$  до деформации Людерса ( $\epsilon_{\text{кр1}}$ ), макроскопического предела текучести  $\sigma_{\text{т}}$  в условиях активации источников размножения дислокаций ( $\epsilon_{\text{кр2}}$ ) и условного предела прочности  $\sigma_{\text{в}}$ , временного сопротивления ( $\epsilon_{\text{кр3}}$ ), т.е. максимального значения нагрузки, которая вызывает (перед разрушением) образование эллиптического сечения (шейки). В фазе неустойчивости (бифуркаций) для изменения состояния системы достаточно незначительных нагрузок. Критическая точка  $\epsilon_{\text{кр}}$  (1) означает переход (ниже макроскопического предела текучести) от однородной к сосредоточенной деформации с локализацией полос сдвига;  $\epsilon_{\text{кр}}$  (2) означает переход (выше макроскопического предела текучести) к интенсивному размножению дислокаций (начало деформационного и субструктурного упрочнения);  $\epsilon_{\text{кр}}$  (3) означает переход от одноосного к трёхосному растяжению (вблизи условного предела прочности).



**Рис. 1.** Схематическое представление критических точек (бифуркаций) на различных структурно-энергетических уровнях, объединяющих кратковременные и длительные (зависимые от времени) характеристики металлических кристаллов.<sup>1</sup>

## 2.2. Второе приближение: слабое размножение дислокаций

Размножение дислокаций в процессе активной деформации учитывается в моделях Орована

$$\dot{\varepsilon} = \bar{\rho} b \bar{v}_d + \frac{d\rho}{dt} b \bar{\lambda}, \quad (6)$$

где первый член этого силового критерия представляет вклад скольжения ( $d\rho/dt = 0$ ,  $\bar{\rho} \cong \text{const}$ ),  $\bar{\rho}$  — плотность существующих дислокаций), второй член — вклад размножения дислокаций, а  $\bar{v}_d$  — скорость дислокаций.

В отличие от уравнения Орована (6) для активной макродеформации с дальнедействующими полями внутренних напряжений работа эффективного напряжения  $\tau^* V^*$  для твёрдых растворов связывается с активацией термически активированного (близкодействующего) механизма дислокационной релаксации упругой энергии. С учётом  $\partial \ln \dot{\varepsilon} / \partial \tau^* = V^* / (kT)$  для плотности дислокаций  $\bar{\rho}_{\text{пл}}$ , успешно преодолевших (на межатомных расстояниях) термические препятствия,

$$\Delta \tau^* V^* = -kT (\partial \ln \bar{\rho}_{\text{пл}} + \partial \ln \bar{\lambda}), \quad (7)$$

что позволяет оценить активационные параметры из выражения:

$$\frac{U^* + E_{\text{св}}}{kT} \cong -(\partial \ln \bar{\rho}_{\text{пл}} + \partial \ln \bar{\lambda}) \left( \frac{1}{\partial \ln \tau^*} + \frac{1}{\partial \ln T} \right). \quad (8)$$

Для малых  $\Delta \tau^*$

$$\Delta \tau^* V^* = -kT \left( \ln \frac{\rho_1}{\rho_2} + \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right), \quad (9)$$

где  $\partial \ln \bar{\rho}_{\text{пл}}$  — скорость медленного изменения плотности подвижных дислокаций.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

### 3.1. Физическая теория

В рамках структурно-энергетической концепции дислокационной микротекучести твёрдых растворов с подвижной наноразмерной структурой [16] уравнение дислокационной релаксации упругих напряжений в полулогарифмических координатах  $\Delta \tau^* - \ln t$  описывается соотношением

$$\Delta\tau^* = (1/V^*)[(U^* + E_{\text{св}}) - kT \ln(\beta t)] \quad (10)$$

для контролирующего термически активированного механизма торможения дислокационными атмосферами с подвижными узлами закрепления (растворенными атомами) или

$$\Delta\tau^* = (1/V^*)[(U^* - 2E_{\text{св}}) - kT \ln(\beta t)] \quad (11)$$

для контролирующего термически активированного механизма торможения в условиях прерывистого (повторного) закрепления дислокаций; здесь

$$\beta = K_n \dot{\epsilon}_0 V^* / (kT), \quad \dot{\epsilon}_0 = \bar{\rho}_{\text{пл}} b \lambda v, \quad V^* = L_c b^2.$$

После потенцирования уравнений (10) и (11) время дислокационной релаксации  $t$ , необходимое для равномерной МКТ (до локализации сдвига) для двух указанных механизмов вычисляется из соотношений:

$$t = \beta^{-1} \exp\left[(U^* + E_{\text{св}} - \Delta\tau^* V^*) / (kT)\right] \quad (12)$$

или

$$t = \beta^{-1} \exp\left[(U^* - 2E_{\text{св}} - \Delta\tau^* V^*) / (kT)\right]. \quad (13)$$

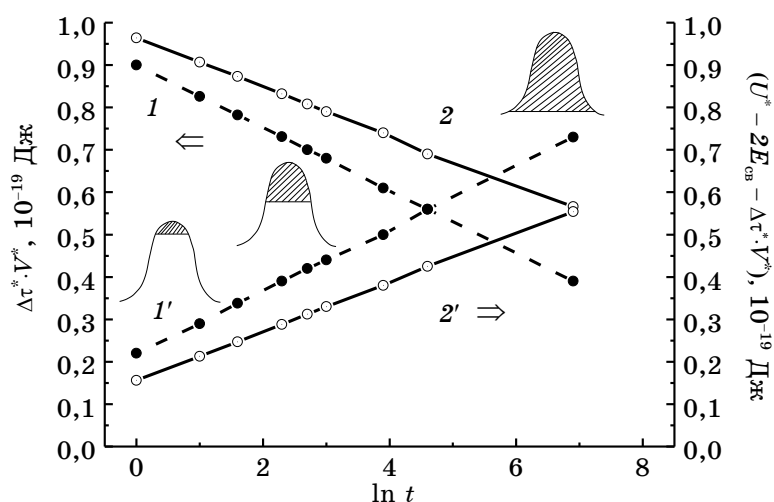
При  $\Delta\tau^* = 0$  время перехода к атермической компоненте приложенного напряжения  $t_G$  определяется из выражений:

$$(U^* - 2E_{\text{св}}) / V^* = kT \ln(\beta t_G) / V^* \quad (14)$$

или

$$U^* - 2E_{\text{св}} = kT \ln(\beta t_G). \quad (15)$$

Уравнения дислокационной релаксации (10) и (11) позволяют разделить на межатомных расстояниях близкодействующие (зависимые от времени) вклады энергии термических флуктуаций и контактного (силового) взаимодействия дислокаций с подвижными узлами закрепления растворёнными атомами ЛЭ. В частности, численный анализ уравнения (11), выведенного для механизма прерывистого (повторного) закрепления дислокаций, разделяет в нанобъёме  $V^*/b^3$  (в единицах модуля вектора Бюргера) вклады энергий термической активации и работы эффективного напряжения сдвига  $\Delta\tau^* V^*$ . Для сплавов на основе ГПУ-Mg, занимающего первое место среди технических металлов по характеристикам усталости, при исследовании кривых дислокационной



**Рис. 2.** Временной закон дислокационной релаксации для первичных  $\alpha$ -твёрдых растворов с ГПУ-структурой в системе Mg–Al–Ca–Ti с разделением близкодействующих вкладов работы эффективного напряжения  $\Delta\tau^*V^*$  (1, 2) и энергии  $(U^* - 2E_{св} - \Delta\tau^*V^*)$  термических флуктуаций (1', 2'), обеспечивающих преодоление близкодействующих барьеров по механизму прерывистого (повторного) закрепления дислокаций в сплаве Mg–12,5% Al–1,3% Ca–0,1% Ti при 523 K и  $V^* = 35b^3$  (1, 1'), 423 K и  $V^* = 20b^3$  (2, 2'). Здесь заштрихованные области схематически отражают усиление вклада термической активации.<sup>2</sup>

релаксации (упругих напряжений) установлено (рис. 2), что с увеличением времени релаксации  $t$  (по логарифмическому закону) работа эффективного напряжения  $\Delta\tau^*V^*$  стремится линейно к атермической компоненте, связанной со структурной релаксацией и полями обратных упругих напряжений, а энергия, подводимая к барьеру по термофлуктуационному механизму, линейно повышается до величины потенциального барьера сопротивления движению дислокаций. Иными словами, линейное уменьшение вклада  $\Delta\tau^*V^*$  с увеличением времени релаксации сопровождается линейным усилением вклада термической активации (в том же нанобъёме). Таким образом, в этом случае процесс прерывистого течения поликристаллических сплавов с эффектом Портевена–Ле Шателье [27], а значит, и сопротивление микротекучести контролируются механизмом прерывистого динамического торможения дислокаций с полной свободной энергией, необходимой для преодоления близкодействующего барьера в условиях термически активированного закрепления и раскрепления этих дефектов.

В соответствии с результатами теоретических вычислений физический критерий полезной, исключаящей разрушение, дли-

тельной прочности может быть представлен в виде

$$\Delta\tau^* t^* < \frac{Gb \ln(r/b)}{8\pi(1-\mu)\nu_{\text{кр}}} \exp\left(\frac{U^* + E_{\text{св}} - V^* \tau^*}{kT_{\text{пдп}}}\right) \quad (16)$$

и

$$\Delta\tau^* t^* < \alpha \frac{Gb^2 \ln(r/b) \bar{\rho}_{\text{кр1}}}{8\pi(1-\mu)\dot{\epsilon}_{\text{кр1}}} \exp\left(\frac{U^* + E_{\text{св}} - V^* \tau^*}{kT_{\text{пдп}}}\right) \quad (17)$$

для механизма торможения дислокаций, связанных атмосферами Коттрелла (при  $\tau^* V^* > kT$ ) и в виде

$$\Delta\tau^* t^* < \alpha \frac{Gb \ln(r/b)}{8\pi(1-\mu)\bar{\nu}_{\text{кр}}} \exp\frac{U^* - 2E_{\text{св}} - L_c b^2 \tau^*}{kT_{\text{пдп}}}, \quad (18)$$

и

$$\Delta\tau^* t^* < \alpha \frac{Gb^2 \ln(r/b) \cdot \bar{\rho}_{\text{кр}}}{8\pi(1-\mu)\dot{\epsilon}_{\text{кр}}} \exp\frac{U^* - 2E_{\text{св}} - L_c b^2 \tau^*}{kT_{\text{пдп}}} \quad (19)$$

для механизма прерывистого (повторного) закрепления дислокаций (при  $\tau^* V^* \ll kT$ ). Здесь  $\dot{\epsilon}_{\text{кр1}}$  — предельная (критическая) скорость сдвиговой деформации, которая характеризует переход от однородной деформации к локализации сдвига (рис. 1);  $\alpha$  — усреднённый геометрический коэффициент Шмида (Schmid factor), связывающий деформацию растяжения с деформацией сдвига для поликристаллов ( $\alpha = \tau/\sigma \cong 0,5$ );  $\rho_{\text{кр}}$  — предельная (критическая) плотность подвижных дислокаций;  $\mu$  — коэффициент Пуассона;  $r$  — радиус кривизны дислокаций (между подвижными узлами закрепления для кристалла, который содержит подвижную дислокацию),  $r = Gb/\sigma$ , где  $\sigma$  — приложенное напряжение;  $G$  — модуль сдвига ( $E/G \approx 2,6$  для металлов);  $Gb$  — сдвиговая устойчивость (жёсткость) кристаллической решётки;  $r_0 \cong b$  — модуль вектора Бюргера, который характеризует степень искаженности кристаллической решётки по контуру невязки;  $\sigma Gb^2$  — линейное натяжение (избыточная энергия) дислокаций (на единицу длины);  $T_{\text{пдп}}$  — максимальная полезная температура длительной прочности, предложенная Рид-Хиллом [28].

Если  $T \rightarrow T_s^*$ , где  $T_s^*$  — энтропийная температура, при которой когерентные термические флуктуации преодолевают потенциальный барьер без внешних сил ( $\tau^* \rightarrow 0$ ), уравнение (19) принимает вид

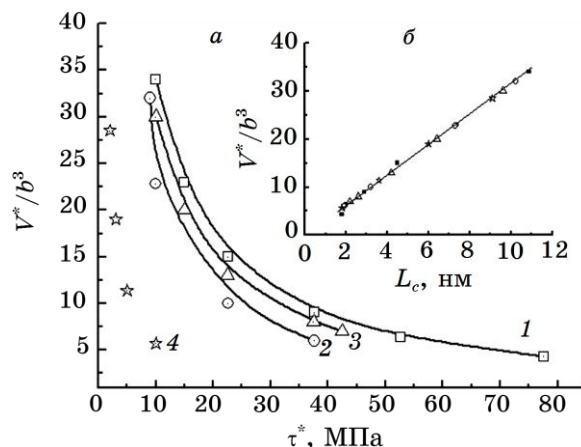
$$\Delta\tau^* t^* < \frac{Gb \ln(r/b)}{8\pi(1-\mu)\bar{\nu}_{\text{д}}} \exp\frac{U^* - 2E_{\text{св}}}{kT_s^*}, \quad (20)$$

где  $\bar{v}_d = f(T, U^*, E_{cb}, \tau^*, V^*)$ .

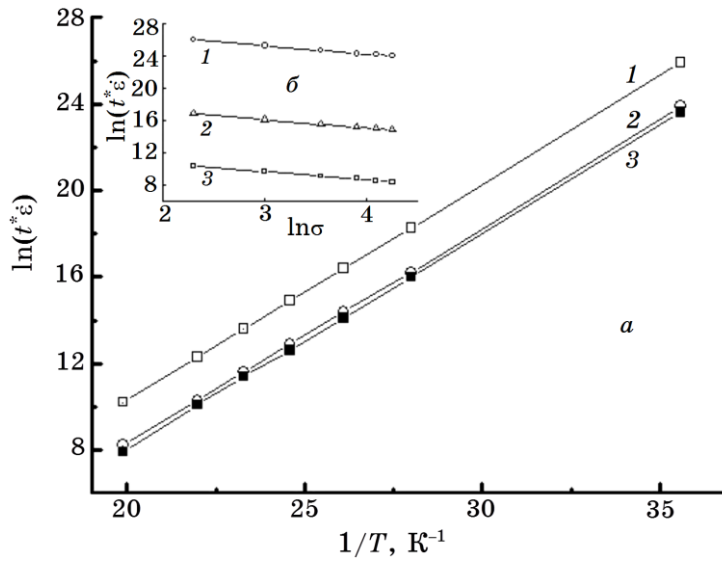
Ряд дислокационных (количественных) критериев ПДП (16)–(20) связывает локальное напряжение торможения дислокаций в критических точках (бифуркаций) с потерей упругой (сдвиговой) устойчивости кристаллической решётки ( $Gb$ ), избыточной энергией (линейным натяжением  $Gb^2$ ), скоростью и плотностью дислокаций, а также активацией близкодействующих механизмов торможения этих линейных дефектов.

### 3.2. Сравнение теории и эксперимента: проверки достоверности модельных представлений

Как известно, активационный объём (а.о.)  $V^*$  (в единицах вектора Бюргерса) является мерой активационной длины дислокационного наносегмента  $L_c$ , закреплённого в данном случае подвижными узлами — растворёнными атомами легирующих элементов (рис. 3, б). Зависимости  $V^*(\tau^*)$  для различных наиболее вероятных механизмов, контролирующих сопротивление МКТ, представлена



**Рис. 3.** Зависимость активационного объёма от эффективного напряжения (термической компоненты) для твёрдых растворов сплавов ГПУ-Mg-12,5% Al-1,2% Ca (1-3) и ГЦК-Fe-32% Ni-0,1% C (a): 1 — динамическое торможение подвижных дислокаций атмосферами Коттрелла из растворённых атомов (Al и Ca) с энергией активации (э.а.)  $1,4 \cdot 10^{-19}$  Дж при 423 К; 2 — прерывистое закрепление дислокаций в условиях прерывистого течения поликристаллов при 523 К; 3 — распад атмосфер в условиях прерывистого течения поликристаллов с э.а.  $2,1 \cdot 10^{-19}$  Дж, равной э.а. восхождения (переползания) освобождённых дислокаций (по вакансионному или кластерному механизму); 4 — динамическое торможение дислокаций углеродными атмосферами Коттрелла в условиях прерывистого течения сплава ГЦК-Fe-32% Ni-0,12% C [26].<sup>3</sup>



**Рис. 4.** Зависимости  $\ln(t^*\dot{\epsilon})$  от  $1/T$  (а) при напряжениях 10 МПа (1), 70 МПа (2) и 100 МПа (3), а также  $\ln(t^*\dot{\epsilon})$  от  $\ln\sigma$  (б) при температурах 293 К (1), 393 К (2) и 423 К (3) для сплава Mg-12,5% Al-1,3% Ca ( $\sigma_n = \text{const}$ ).<sup>4</sup>

на рис. 3. Результаты теоретических исследований согласуются с экспериментальными данными [16, 26].

С использованием количественного (дислокационного) критерия ПДП и соответствующих уравнений  $\ln(t^*\dot{\epsilon}) = \beta + \ln\gamma - \ln\sigma$ , где  $\ln\gamma = \ln[Gb^2 \ln(\gamma/\beta)\rho_D]/8\pi(1-\mu)$  и  $\beta = (U^* + E_{\text{св}} - \tau^*V^*)/(kT)$ , построены теоретические зависимости в координатах  $\ln(t^*\dot{\epsilon}) - 1/T$  (рис. 4, а) и  $\ln(t^*\dot{\epsilon}) - \ln\sigma$  (рис. 4, б). С учётом линейной корреляции между  $\ln(t^*\dot{\epsilon})$  и  $1/T$  из одинаковых наклонов прямых (1, 2 и 3)  $(U^* + E_{\text{св}})/k$  установлен единый контролирующий термически активированный механизм торможения наноразмерной подвижной системы (рис. 4) дислокационными атмосферами, состоящими из растворенных ЛЭ (Al и Ca), с э.а.  $1,4 \cdot 10^{-19}$  Дж, равной энергии миграции избыточных вакансий в системе Mg-Al, Ca [6]. Важно подчеркнуть, что эта теоретическая оценка э.а.  $U^*$  совпадает с её экспериментальным значением, вычисленным по данным  $\tau^*V^*$  для различных наиболее вероятных механизмов, контролирующих сопротивление МКТ сплавов (рис. 3). При  $\tau^* = 0$  параметр  $(t^*\dot{\epsilon})$  проявляет слабую чувствительность к приложенному (атермическому) напряжению. Так как явление релаксации — это проявление ползучести при переменном напряжении при  $\epsilon_{\Sigma} = \text{const}$ , термически активированные процессы дислокационной релаксации упругих напряжений и дислокационной ползучести контролируются одними и теми же механизмами, ответственными за

**ТАБЛИЦА 1.** Термоактивационный анализ металлических сплавов с твёрдорастворным упрочнением (в условиях прерывистого, повторного закрепления дислокаций растворёнными атомами внедрения и замещения).<sup>5</sup>

Базовая система	Термическая компонента $\tau^*$ , МПа	Активационный объём $V^*$ , $10^{-10}$ м	Энергия активации $U^*$ , эВ		$L_c$ , нм
			$\tau^*V^* > 0$	$\tau^*V^* = 0$	
Mg–Al, Zn (AZ91D), Mg–Al, Ca (Ti)	20	$35b^3$	0,90	1,25	4,2
			0,47	0,90	
			0,27	0,90	
			–	1,25	
ГПУ- $\alpha$ -Zr– 0,15% O <sub>2</sub> [29]	40	$50b^3$	–	0,8	–
				1,0	
ГЦК-Al–5% Mg	30	$85b^3$	0,37	1,28	–
	10	$35b^3$	0,55	0,90	
ОЦК-Cr [30]	20	$50b^3$	0,4 0,2	$1,08 \approx 0,1Gb^3$ при 500 К	–
ГЦК-Ni–H [31]	10	$7,1b^3$	0,44	–	2,3
	3	$23,8b^3$			7,6
ГЦК-Fe–32% Ni–0,12% C [26]	10	$5,7b^3$	0,35	–	1,8
	3	$19b^3$			6,0

скорость пассивной микротекучести в широком интервале температур и напряжений. Эти представления дают возможность объединить полномасштабный термоактивационный (численный) анализ этих данных и проверить достоверность дислокационной модели и физической теории (табл. 1–3).

Справедливость предложенной модели подтверждается появлением в спектрах поглощения упругой энергии ГПУ-кристаллов ( $\alpha$ -Ti и Mg) дислокационной релаксации Снука–Кёстера, которая, как известно, является достаточно общим явлением для деформированных металлов и сплавов [23]. Наблюдаемый динамический эффект медленного движения связанных дислокаций, обогащённых подвижными атмосферами Коттрелла (на уровне  $\dot{\epsilon} = 10^{-9}$ – $10^{-10}$  с<sup>-1</sup>) объясняется увеличением высоты потенциального барьера, который обеспечивает торможение этих дефектов за счёт э.а. отрыва дислокаций от растворённых примесных и легирующих элементов и э.а. их диффузии вдоль и поперёк дислокаций в полном соответствии с теоретическими представлениями G. Schoeck, A. Seeger, I. C. Ritchie [33]. Теоретический анализ дислокационной микротекучести подтверждается также новыми измерениями рентгеновских параметров МПД при испытаниях на ползучесть [23, 34]. Концепция полезной длительной прочности металлических кристаллов открывает новые возможности для



**ТАБЛИЦА 2.** Критические температуры полезной длительной прочности металлов и сплавов с твёрдорастворным упрочнением: теория vs. эксперимент.<sup>6</sup>

Базовая система	$T_{пл}, K$	$T_{пдп}, K$ при $\tau^*V^* > 0$	$T_{пдп}/T_{пл}, \%$ по абс. шкале	$\dot{\epsilon}_{пдп}, c^{-1}$	$T_3, K$	Примечание
Mg-12,5% Al-1,3% Ca-0,2% Ti	923	618	67	$1 \cdot 10^{-5}$	684	Теория
		623	66	$5 \cdot 10^{-5}$		Эксперимент [32]
ГПУ- $\alpha$ -Zr- 0,15% O <sub>2</sub>	2128		47	$7,8 \cdot 10^{-4}$	1003	Теория
			41	$2 \cdot 10^{-6}$	870	Сопротивление ползучести [29]
			46	$1 \cdot 10^{-6}$	984	Релаксация напряжений [29]
ГЦК-Al- 5% Mg	933	517	55	$1 \cdot 10^{-7}$	473	Теория
		431	46	$1 \cdot 10^{-4}$		Кратковременные испытания [29]

дальнейшего развития физической теории температурной зависимости истинного разрушающего напряжения и построения принципиально новой схемы квазихрупкого перехода, основанных на законе равенства энергий активации на стадиях дислокационной микротекучести, предшествующей и сопутствующей квазихрупкому разрушению [4] в условиях длительного нагружения.

Для наиболее перспективных металлических кристаллов из дислокационных критериев ПДП вычислены критические температуры ( $T_{кр}^*$  и  $T_{кр}^{**}$ ) (табл. 2), соответствующие максимальной

**ТАБЛИЦА 3.** Сопротивление микротекучести и полезная длительная прочность лучших литейных магниевых сплавов при 423 K.<sup>7</sup>

Состав сплавов	Скорость деформации (ползучести) $\dot{\epsilon}, c^{-1}$	Предел ползучести, МПа	$t, час$	Деформация ползучести, $\epsilon\%$
AZ91D (Dow Chemical Corp., USA)	$1 \cdot 10^{-7}$	35	200 100*	2,50 разрушение
Mg-12,5% Al-1,3% Ca	$1 \cdot 10^{-8}$	64	200	0,35
Mg-12,5% Al-1,3% Ca-0,3% Y-0,5% Fe	$1 \cdot 10^{-9}$	70	200	0,21
Mg-12,5% Al-1,3% Ca-0,4% Mn-0,2% Ti	$1 \cdot 10^{-9}$	70	200	0,28

прочности, которую лучший потенциальный сплав может выдержать без разрушения ( $T_{кр}^* = T_{пдп}/T_{пл}$ ), а также термическому сопротивлению этого сплава в точке ( $\tau^* = 0$ ), исключающей силовое близкодействующее взаимодействие дефектов ( $T_{кр}^{**} = T_a$ ) и характеризующей максимальный (энтропийный) вклад термической активации для преодоления близкодействующего препятствия по термофлуктуационному механизму. При энтропийной температуре  $T_{кр}^{**}$  микротекучесть осуществляется термическим возбуждением дислокаций независимо от структуры и концентрации ЛЭ. При  $T > T_{кр}^{**}$  доминирует диффузионная ползучесть без участия дислокаций с э.а., равной э.а. самодиффузии атомов. По данным [34] в системе Mg–Al–Ca–Ti достигнуты наиболее высокие характеристики сопротивления ползучести (без разрушения) и полезной длительной прочности: ( $\varepsilon_n \sim 10^{-9}-10^{-10} \text{ с}^{-1}$ , при  $\varepsilon_\Sigma = 0,2-0,4\%$  и 70–80 МПа в течение 150–200 часов) (табл. 3).

Термическая стабилизация сплавов включает термическую стабилизацию фазового состава, концентрацию твёрдых растворов, вакансионно-дислокационной структуры и релаксацию остаточных напряжений. Достижение этих состояний существенно повышает термическое сопротивление новых экспериментальных сплавов. В частности, преодоление низкотемпературной хрупкости (рис. 5 и рис. 6, а) и возврат/восстановление механических свойств твёрдого раствора  $\alpha$ -Ti–H при эффективной термообработке (рис. 6, б) связывается с окончательной структурой, сфор-

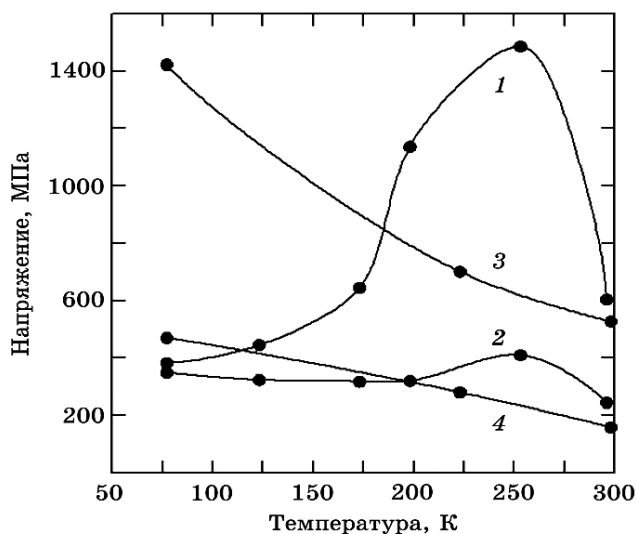
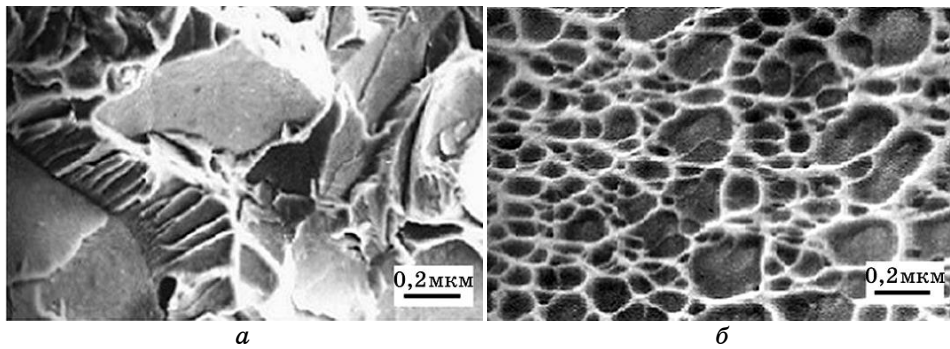


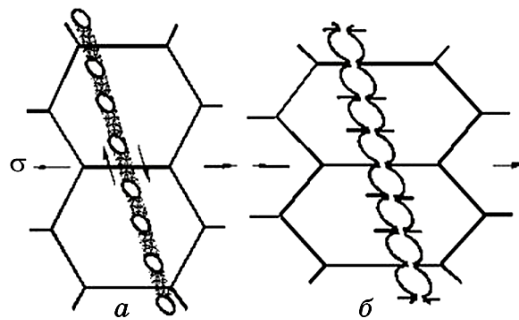
Рис. 5. Температурные зависимости истинного разрушающего напряжения (1, 3) и макроскопического предела текучести (2, 4) для твёрдого раствора  $\alpha$ -Ti–H после отжига при 923 К (1, 2) и 1073 К (3, 4).<sup>8</sup>



**Рис. 6.** Электронные микрофотографии поверхности разрушения твёрдого раствора  $\alpha$ -Ti-H при 77 К, отожжённого 2 часа при 923 К (а) и 1073 К (б).<sup>9</sup>

мированной в процессе непрерывного растяжения этого сплава с различной физической кинетикой взаимодействующих дефектов. Если удалить стоки для избыточных решёточных вакансий  $V_i$  при оптимальной температуре отжига (1073 К) [23], взаимодействие растворённых атомов водорода с дефектами с различными энергиями связи ( $E_{св} \cong 0,6$  эВ избыточных вакансий и  $E_{св} \cong 0,2$  эВ для дислокаций) происходит по конкурентному механизму. Преимущественный захват атомов водорода диффузионными ловушками — избыточными вакансиями с образованием парных дефектов  $V_i-H_i$  исключает возможные закрепления решёточных, в том числе экранирующих, дислокаций (Д) с образованием парных дефектов  $D-H_i$  в процессе непрерывного растяжения.

Изменение кинетики парных дефектов полностью изменяет



**Рис. 7.** Схематическое представление вязкого (транскристаллитного) разрушения (а) и разрушения (б), которое сопровождается пластической релаксацией растущих микротрещин на вязких (релаксирующих) границах ячеек [8, 23] по модифицированной схеме Дж. Ли [25] для твёрдых растворов с разориентированной ячеистой структурой, сформированной в процессе непрерывного растяжения.<sup>10</sup>

структурную подготовку разрушения (рис. 6 и 7) и подавляет водородное охрупчивание  $\alpha$ -Ti. Формирование окончательной микроструктуры сопровождается образованием энергетически благоприятной ячеистой структуры с дислокационными стенками ячеек, свободными от охрупчивающих атомов водорода и поэтому повышающими сопротивление дислокационной микротекучести на стадиях, предшествующей и сопутствующей разрушению. Наблюдаемое изменение механизма разрушения (рис. 6, а и б) указывает на пластическую релаксацию вязких (релаксирующих) границ ячеек — новых барьеров для торможения субкритических микротрещин длиной, соизмеримой с размером ячеек (рис. 6, б).

#### 4. ДИСКУССИЯ

Результаты настоящих исследований согласуются с теоретическими оценками прочности ОЦК-нанокристаллов Mo и Fe в условиях одноосного [100] и равномерного трёхосного (triaxial) растяжения [35]. Методами компьютерного моделирования (молекулярной динамики) установлено, что переход от упругой к пластической деформации (на наноуровне) сопровождается её локализацией, вызывающей потерю сдвиговой устойчивости кристаллической ОЦК-решётки. При этом зарождение дефектов (дислокаций и двойников) становится критическим событием, обусловленным критической деформацией и соответствующим критическим напряжением сдвиговой неустойчивости из-за флуктуаций касательных напряжений. Обосновывается важный вывод о том, что даже в самых жёстких условиях гидростатического растяжения разрушение ОЦК-нанокристаллов происходит не на стадии однородной упругой деформации ОЦК-решётки, а в локальной области нарушений регулярной структуры нанокристалла. Вместе с тем по экспериментальным данным [36, 37] поведение кристалла (от температуры испытания до температуры плавления) оказывается близким к предельной деформации (при сдвиге), когда его кристаллическая решётка теряет устойчивость. Для Al эти значения приближаются к 7% [36]. При этом максимальная упругая деформация бездефектных монокристаллов приводит к потере жёсткости кристаллической решётки, снижением напряжения течения и пластической деформации с потерей сопротивляемости формоизменению, если при потере упругости не происходит хрупкого разрушения (отрывом).

Упругая энергия дефектов кристаллической решётки поликристаллов (твёрдых растворов) обнаруживает новые закономерности. Исследование физической природы зависящего от времени сопротивления микротекучести на основе временного закона дислокационной релаксации для твёрдых растворов открывает новые

возможности для решения физических проблем полезной длительной прочности металлических кристаллов на основе термически активированных (близкодействующих) механизмов, контролирующих торможение (ограниченное движение) дислокаций в твёрдых растворах на межатомных расстояниях. Структура уравнений (4, 5, 7, 10 и 11) учитывает физическую кинетику химически связанных дефектов и динамику медленных дислокаций ниже макроскопического предела текучести твёрдых растворов. Критерий полезной длительной прочности (16–20) контролирует эффективность динамического торможения дислокаций в поле приложенных напряжений и эффективность легирования, которые предупреждают локализацию сдвига и расширяют область равномерного удлинения.

Повышение жаропрочности и длительной прочности перспективных сплавов, например, в области ДДС ограничивается пластической неустойчивостью, возникающей в результате локализации сдвига [27, 34]. Локализация деформации вызывает высокую концентрацию напряжений, в частности, в приграничных зонах (Гинье–Престона), свободных от выделений, или тройных точках зерен. Следует отметить, что в аморфных атомных структурах ближнего порядка методами нанoidентифицирования также обнаружен переход от однородной к локализованной деформации в результате самоорганизации полосы сдвига [38].

В соответствии с обобщённым физико-химическим принципом смещения подвижного равновесия [24] изменение одного из факторов равновесия (температуры, давления, концентрация, числа атомов в единице объёма) вызывает смещение этого равновесия в направлении, противоположным (по знаку или исходным условиям проведения) для восстановления исходного равновесия. Смещение подвижного равновесия атмосферы Коттрелла создаёт динамический эффект торможения связанной дислокации. Важно здесь подчеркнуть, что процесс динамического торможения дислокаций взаимосвязан с прерывистым течением, которое проявляется по механизму Хана в виде макроскопического эффекта Портевена–Ле Шателье [39]. Согласно классической теории термически активированного течения металлов ниже критической температуры  $T_c$  или  $T_0$  термические флуктуации содействуют преодолению подвижными дислокациями близкодействующих барьеров [22]. Выше  $T_c$  или  $T_0$  энергии самих термических флуктуаций достаточно для преодоления близкодействующих препятствий ( $\tau^* = 0$ ). В этом случае приложенные напряжения используются для преодоления дальнедействующих барьеров при более высоких э.а.  $U^*$  и поэтому не нуждаются в термических флуктуациях, то есть напряжение течения становится температурно-независимым и равным так называемому атермическому напряжению  $\tau_c$ . Ниже  $T_c$  или  $T_0$  скорость пластиче-

ской деформации  $\varepsilon(T, \sigma)$  соответствует максимально достижимой скорости дислокаций.

Таким образом, есть все основания подчеркнуть решающую роль локализации сдвига, вызывающего сдвиговую неустойчивость любой кристаллической решётки, и в активации преждевременного разрушения, что подтверждается дислокационным критерием, характеризующим переход от критической однородной деформации (равномерного удлинения) к локализации сдвига с потерей сдвиговой устойчивости (жёсткости) кристаллической решётки  $\alpha Gb$ . Комплексы точечных дефектов (ТД), например, вакансионные кластеры создают вокруг себя несимметричные деформации, так что атомные сдвиги в окрестности ТД становятся центрами локальных потерь устойчивости кристаллической решётки дефектных кристаллов. При этом, в частности, обеспечивается бездиффузионный характер структурных (мартенситных) превращений и изменяется кинетика фазового перехода [9]. По данным [40] ГПУ-Ti технической чистоты разрушается легко активируемым базисным сколом с потерей пластичности при 77 К. При этом в системе  $\alpha$ -Ti — водород наблюдается эффект пластифицирования (восстановление пластичности), если поверхностная энергия границ поликристаллов становится меньше поверхностной энергии матричного скола. Его блокирование в результате интенсивной деформации по границам ( $\sigma_T^M > \sigma_T^{I3}$ ) сопровождается подавлением активации механизма низкотемпературной хрупкости  $\alpha$ -Ti. В настоящей работе дана новая физическая интерпретация эффекта пластифицирования наводороженного  $\alpha$ -Ti по экспериментальным данным, представленным на рис. 5–7. В соответствии с фундаментальной концепцией Г. Конрада [41] низкотемпературным механизмом, контролирующим скорость деформации, является термически активируемое преодоление атомов внедрения дислокациями, которые движутся в призматических плоскостях первого порядка  $\{1010\}\langle 1020\rangle$ . При этом влияние концентрации ПАВ на термическую составляющую предела текучести ( $\tau^*$ ) возрастает с понижением температуры. Поэтому процесс подавления низкотемпературной водородной хрупкости обусловлен не изменением состояния границ поликристаллов, а формированием в кристаллической структуре матрицы субграниц с высоким сопротивлением дислокационной МКТ, то есть эффектом, блокирующим образование опасных дефектов на стадиях, предшествующей и сопутствующей замедленному разрушению.

## 5. ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выдвинута концепция длительного упрочнения и рассмотрены физические основы формирования полезной, исключаящей раз-

рушение, длительной прочности твёрдых растворов, которая определяется мерой адаптивности системы к сдвигу и ограничивается потерей устойчивости (в точках бифуркаций) кристаллической решётки и трансляционной симметрии. В этой концепции преждевременная локализация сдвига, ответственная за преждевременное разрушение, является физической границей длительной прочности.

В рамках выдвинутой концепции разработана физическая теория длительной прочности твёрдых растворов с аналитическими решениями, основанными на дислокационной модели зависимого от времени сопротивления микротекучести и двух приближениях, исключаяющим или допускающим слабое размножение подвижных дислокаций.

Для твёрдых растворов выведены кинетические уравнения, которые подчиняются временному (логарифмическому) закону дислокационной релаксации, а также устраняют противоречия концепции Шерби с сотрудниками и ограничения критерия Рид-Хилла. Выполнен полномасштабный (численный) термоактивационный анализ перспективных сплавов с твёрдорастворным упрочнением. Установлены наиболее вероятные термически активированные (близкодействующие) механизмы, контролирующие скорость динамического торможения (подвижность) связанных дефектов и повышение сопротивления дислокационной микротекучести, в том числе (а) механизм торможения дислокационными атмосферами Коттрелла с э.а., равной энергии миграции избыточных вакансий ( $\cong 0,8-0,9$  эВ), при высоких  $\sigma$  и низких  $T$  ( $\tau^*V^* > kT$ ); (б) механизм термически активированного прерывистого (повторного) закрепления дислокаций с э.а., которая зависит от природы ЛЭ при низких  $\sigma$  и высоких  $T$  ( $\tau^*V^* \ll kT$ ) и составляет 1,3 эВ для магниевых сплавов. Результаты теоретических исследований согласуются с опубликованными экспериментальными данными с точностью до числового множителя или по порядку величины, по крайней мере, в первом приближении.

Впервые в области предтекучести металлических твёрдых растворов на межатомных расстояниях разделены зависимые от времени энергетические (близкодействующие) вклады термической активации и силового (контактного) взаимодействия подвижных дислокаций с растворенными атомами ЛЭ для сплавов с эффектом Портевена-Ле Шателье. Показано, что для исследованного механизма с увеличением времени релаксации термически активированное напряжение стремится к атермической компоненте, а энергия, подведённая к барьерам по термофлуктуационному механизму, линейно повышается до величины потенциального барьера сопротивления движению дислокаций.

Сформулирован физический (дислокационный) критерий по-

лезной длительной прочности, характеризующий переход от однородной к сосредоточенной деформации с локализацией сдвига из-за потери пластической устойчивости твёрдого раствора в критических точках (бифуркаций) и предупреждающий образование опасных/разрушающих дефектов. В соответствующих аналитических выражениях критический уровень локальных напряжений связывается с упругой (сдвиговой) устойчивостью дислокационной кристаллической решётки, скоростью и плотностью скользящих дислокаций, их избыточной энергией (линейным натяжением), а также полями упругих напряжений, вызванных растворенными атомами.

Подчёркивается решающая роль локализации сдвига в структурной подготовке преждевременного разрушения (*destructive long-term strength*). Для подавления водородного охрупчивания ГПУ  $\alpha$ -Ti технической чистоты предложен метод восстановления его механических свойств, основанный на идее повышения сопротивления дислокационной микротекучести в результате конкурентного взаимодействия растворенных атомов водорода и дефектов с различной кинетикой и энергиями связи (0,6 эВ для избыточных вакансий и 0,2 эВ для дислокаций), а также эволюции энергетически благоприятной дислокационной ячеистой структуры. Окончательно сформированная микроструктура обеспечивает существенное повышение низкотемпературной прочности (до 77 К) в условиях вязкого разрушения по субструктурному механизму.

Физика длительной прочности расширяет наши представления о процессах упругого (коттрелловского) взаимодействия между полями напряжений от дислокаций и растворенных атомов. Изложенные теоретические представления могут быть использованы для физической интерпретации пластической (сдвиговой) неустойчивости в критических точках (бифуркаций), количественной оценки эффективности легирования, термического сопротивления (потенциала жаропрочности) металлических сплавов с минимальной локализацией микротекучести, а также ожидаемого ресурса безопасности функционирования новых экспериментальных сплавов, предназначенных для авиакосмической, атомной (ядерно-энергетической) и автомобильной промышленности.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. B. V. Petukhov and P. A. Klyuchnik, *Crystall. Rep.*, **57**, No. 3: 388 (2012).
2. E. Ma, *Progress in Mater. Sci.*, **50**, No. 4: 413 (2005).
3. В. С. Иванова, *Введение в междисциплинарное наноматериаловедение* (Москва: Сайнс-Пресс: 2005).
4. M. A. Meyers, A. Mishra, and D. J. Benson, *Progress in Mater. Sci.*, **51**, No. 4: 427 (2006).



5. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, *Пределная прочность — кристаллы, металлы, элементы, конструкции* (Киев: Наукова думка: 2008).
6. B. Tang, X.-S. Wang, S.-S. Li, D.-B. Zeng, and R. Wu, *Mater. Sci. Techn.*, **21**, No. 5: 574 (2005).
7. K. Khantha, V. Vitek, and D. P. Pope, *Mater. Sci. Eng. A*, **319–321**: 484 (2001).
8. В. Г. Ткаченко, *Успехи физики металлов*, **10**, № 1: 103 (2009).
9. И. П. Суздальев, П. И. Суздальев, *Успехи химии*, **75**, № 8: 715 (2006).
10. Н. П. Лякишев, М. П. Алымов, *Российские нанотехнологии*, № 1–2: 71 (2006).
11. П. Гленсдорф, И. Пригожин, *Термическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций* (Москва: Мир: 1973).
12. В. А. Поздняков, А. М. Глезер, *Физика твердого тела*, **44**, № 4: 705 (2002).
13. K. S. B. Rose and S. G. Glever, *Acta Metall.*, **14**: 1505 (1966).
14. A. M. Brown and M. F. Ashby, *Scripta Metall.*, **14**, No. 12: 1297 (1980).
15. D. Sherby, R. H. Klundt, and A. K. Miller, *Metallurg. Trans. A*, **8**: 843 (1977).
16. В. Г. Ткаченко, *Наноструктурное материаловедение*, № 4: 61 (2012).
17. Р. И. Кузнецов, В. А. Павлов, *Физ. мет. металловед.*, **25**, № 5: 934 (1968).
18. V. I. Dotsenko, *phys. stat. sol. (b)*, **93**: 11 (1979).
19. Г. П. Почивалова, *Релаксация напряжения и усталость поликристаллов ГЦК сплавов в области микропластической деформации* (Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук) (Томск: Томский государственный университет: 1987).
20. K. Lucke and A. V. Granato, *Phys. Rev. B*, **24**, No. 12: 6991 (1981).
21. Л. А. Шувалов, *Современная кристаллография* (Москва: Наука: 1981), т. 4.
22. А. Ивенс, Р. Роулингс, *Термически активированные процессы в кристаллах: Сборник* (ред. А. Н. Орлов) (Москва: Мир: 1973), с. 172.
23. V. G. Tkachenko, K. H. Kim, B. G. Moon, and A. S. Vovchok, *J. Mater. Sci.*, **46**, No. 14: 4880 (2011).
24. M. Kheilova and M. Strunc, *J. Non-Equilib. Thermodyn.*, **20**, No. 1: 19 (1995).
25. J. C. M. Li, *Canadian J. Phys.*, **45**: 493 (1967).
26. R. W. Hayes and W. C. Hayes, *Acta Metall.*, **30**, No. 7: 1295 (1982).
27. H. Yoshinaga and S. A. Morozumi, *Phil. Mag.*, **23**: 1351 (1971).
28. R. E. Reed-Hill, *Techniques of Metals Research* (Ed. R. F. Bunshah) (New York: Interscience: 1968), vol. 2, p. 257.
29. D. H. Sastry, Y. V. R. K. Prasad, and K. I. Vasu, *J. Mater. Sci.*, **6**: 332 (1971).
30. H. Conrad and W. Hayes, *Trans. ASM*, **56**: 249 (1963).
31. J. Glen, *J. Iron Steel Inst.*, **186**: 21 (1957).
32. R. E. Reed-Hill, *Physical Metallurgy Principles* (2<sup>nd</sup> ed.) (New York: D. Van Nostrand Company: 1973).
33. I. C. Ritchie, *Scripta Metall.*, **16**: 249 (1982).
34. В. Г. Ткаченко, К. Ч. Ким, Б. Г. Мун, А. И. Дегтяр, О. П. Карасевская, А. С. Вовчок, *Успехи физики металлов*, **11**, № 2: 249 (2010).
35. О. В. Овсянников, *Особливості деформації та руйнування перехідних ОЦК металів у нанооб'ємі* (Дисер. ... канд. фіз.-мат. наук) (Київ: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України: 2006).

36. О. Д. Канчеев, *Металлы*, № 3: 144 (1983).
37. К. А. Осипов, С. Г. Федотов, *Изв. АН СССР*, № 2: 96 (1956).
38. C. A. Schuh, A. S. Argon, T. G. Nieh, and J. Wadsworth, *Phil. Mag.*, **83**, No. 22: 2585 (2003).
39. H. Yoshida, K. Toma, K. Abe, and S. Morozumi, *Phil. Mag.*, **23**, No. 186: 1387 (1971).
40. Б. А. Колачев, А. В. Мальков, *Физические основы разрушения титана* (Москва: Металлургия: 1983).
41. H. Conrad, *Canadian J. Phys.*, **45**: 581 (1967).

## REFERENCES

1. B. V. Petukhov and P. A. Klyuchnik, *Crystall. Rep.*, **57**, No. 3: 388 (2012).
2. E. Ma, *Progress in Mater. Sci.*, **50**, No. 4: 413 (2005).
3. V. S. Ivanova, *Vvedenie v Mezhdistsiplinarnoe Nanomaterialovedenie* [Introduction to the Interdisciplinary Nanomaterials Science] (Moscow: Sains-Press: 2005) (in Russian).
4. M. A. Meyers, A. Mishra, and D. J. Benson, *Progress in Mater. Sci.*, **51**, No. 4: 427 (2006).
5. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Predel'naya Prochnost'—Kristally, Metally, Elementy, Konstruktsii* [Ultimate Strength—Crystals, Metals, Elements, Constructions] (Kiev: Naukova Dumka: 2008) (in Russian).
6. B. Tang, X.-S. Wang, S.-S. Li, D.-B. Zeng, and R. Wu, *Mater. Sci. Techn.*, **21**, No. 5: 574 (2005).
7. K. Khantha, V. Vitek, and D. P. Pope, *Mater. Sci. Eng. A*, **319–321**: 484 (2001).
8. V. G. Tkachenko, *Uspehi Fiziki Metallov*, **10**, No. 1: 103 (2009) (in Russian).
9. I. P. Suzdalev and P. I. Suzdalev, *Russ. Chem. Rev.*, **75**, No. 8: 637 (2006) (in Russian).
10. N. P. Lyakishev and M. P. Alymov, *Russian Nanotechnologies*, Nos. 1–2: 71 (2006) (in Russian).
11. P. Glansdorff and I. Prigogine, *Thermodynamics Theory of Structure, Stability and Fluctuations* (London: Wiley-Interscience: 1971).
12. V. A. Pozdnyakov and A. M. Glezer, *Fizika Tverdogo Tela*, **44**, No. 4: 705 (2002) (in Russian).
13. K. S. B. Rose and S. G. Glever, *Acta Metall.*, **14**: 1505 (1966).
14. A. M. Brown and M. F. Ashby, *Scripta Metall.*, **14**, No. 12: 1297 (1980).
15. D. Sherby, R. H. Klundt, and A. K. Miller, *Metallurg. Trans. A*, **8**: 843 (1977).
16. V. G. Tkachenko, *Nanostructurnoe Materialovedenie*, No. 4: 61 (2012) (in Russian).
17. R. I. Kuznetsov and V. A. Pavlov, *Fiz. Met. Metalloved.*, **25**, No. 5: 934 (1968) (in Russian).
18. V. I. Dotsenko, *phys. stat. sol. (b)*, **93**: 11 (1979).
19. G. P. Pochivalova, *Relaksatsiya Napryazheniy i Ustalost' Polikristallov GTsK Splavov v Oblasti Mikroplasticheskoy Deformatsii* [Relaxation and Stress Fatigue of Polycrystalline F.C.C. Alloys in a Microplastic Deformation Field] (Thesis of Dissert. for Cand. Phys.-Mat. Sci.) (Tomsk:

- Tomsk State University: 1987) (in Russian).
20. K. Lucke and A. V. Granato, *Phys. Rev. B*, **24**, No. 12: 6991 (1981).
  21. L. A. Shuvalov, *Sovremennaya Kristallografiya* [Contemporary Crystallography] (Moscow: Nauka: 1981), vol. 4 (in Russian).
  22. A. Evans and R. Rawlings, *Termicheski Aktivirovannaya Deformatsiya Kristallicheskih Materialov* [Thermally-Activated Deformation of Crystalline Materials] (Ed. A. N. Orlov) (Moscow: Mir: 1973), p. 172 (Russian translation).
  23. V. G. Tkachenko, K. H. Kim, B. G. Moon, and A. S. Vovchok, *J. Mater. Sci.*, **46**, No. 14: 4880 (2011).
  24. M. Kheilova and M. Strunc, *J. Non-Equilib. Thermodynamics*, **20**, No. 1: 19 (1995).
  25. J. C. M. Li, *Canadian J. Phys.*, **45**: 493 (1967).
  26. R. W. Hayes and W. C. Hayes, *Acta Metall.*, **30**, No. 7: 1295 (1982).
  27. H. Yoshinaga and S. A. Morozumi, *Phil. Mag.*, **23**: 1351 (1971).
  28. R. E. Reed-Hill, *Techniques of Metals Research* (Ed. R. F. Bunshah) (New York: Interscience: 1968), vol. 2, p. 257.
  29. D. H. Sastry, Y. V. R. K. Prasad, and K. I. Vasu, *J. Mater. Sci.*, **6**: 332 (1971).
  30. H. Conrad and W. Hayes, *Trans. ASM*, **56**: 249 (1963).
  31. J. Glen, *J. Iron Steel Inst.*, **186**: 21 (1957).
  32. R. E. Reed-Hill, *Physical Metallurgy Principles* (2<sup>nd</sup> ed.) (New York: D. Van Nostrand Company: 1973).
  33. I. C. Ritchie, *Scripta Metall.*, **16**: 249 (1982).
  34. V. G. Tkachenko, K. H. Kim, B. G. Moon, O. I. Dekhtyar, O. P. Karasevska, and O. S. Vovchok, *Uspehi Fiziki Metallov*, **11**, No. 2: 249 (2010) (in Russian).
  35. O. V. Ovsjannikov, *Osoblyvosti Deformatsii ta Ruinuvannya Perekhidnykh OTsK Metaliv u Nanoob'yemi* [Peculiarities of Plastic Deformation and Fracture of Transition B.C.C. Metals on Nanoscale] (Thesis of Dissert. for Cand. Phys.-Math. Sci.) (Kyiv: G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of N.A.S. of Ukraine: 2006) (in Ukrainian).
  36. O. D. Kancheev, *Metally*, No. 3: 144 (1983) (in Russian).
  37. K. A. Osipov and S. G. Fedotov, *Izvestiya Akademii Nauk SSSR*, No. 2: 96 (1956) (in Russian).
  38. C. A. Schuh, A. S. Argon, T. G. Nieh, and J. Wadsworth, *Phil. Mag.*, **83**, No. 22: 2585 (2003).
  39. H. Yoshida, K. Toma, K. Abe, and S. Morozumi, *Phil. Mag.*, **23**, No. 186: 1387 (1971).
  40. B. A. Kolachev and A. V. Mal'kov, *Fizicheskie Osnovy Razrusheniya Titana* [Physical Principles of Titanium Destruction] (Moscow: Metallurgy: 1983) (in Russian).
  41. H. Conrad, *Canadian J. Phys.*, **45**: 581 (1967).

\*I. M. Frantsevych Institute for Problems in Materials Science, N.A.S. of Ukraine,  
3 Krzhyzhanovskyy Str.  
UA-03680 Kyiv-142, Ukraine

<sup>1</sup> Fig. 1. Schematic representation of the critical points (bifurcations) on different structure-energy levels uniting the short-term and long-term (time-dependent) characteristics of metal crystals.

<sup>2</sup> Fig. 2. The time-dependent law of dislocation relaxation for primary  $\alpha$ -solid solutions having h.c.p.-structure in Mg-Al, Ca, Ti systems with separation of short-range contributions of effective stress work  $\Delta\tau^*V^*$  (1, 2) and energy ( $U^* - 2E_{cs} - \Delta\tau^*V^*$ ) of thermal fluctuations (1',

2'), providing overcoming of the short-range barriers by discontinuous (repeated) pinning-dislocation mechanism in Mg-12.5% Al-1.3% Ca-0.1% Ti alloy at 523 K, and  $V^* = 35b^3$  (1, 1'), and 423 K and  $V^* = 20b^3$  (2, 2'). Here, the shaded regions schematically show enhancement of thermal activation contribution.

<sup>3</sup> Fig. 3. Activation volume *vs.* the effective stress (thermal component) for solid solutions of h.c.p.-Mg-12.5% Al-1.2% Ca (1-3) and f.c.c.-Fe-32% Ni-0.1% C (4) alloys: 1—dynamical retardation (dragging) of mobile dislocations by Al and Ca solute Cottrell atmospheres with activation energy (a.e.) of  $1.4 \cdot 10^{-19}$  J at 423 K; 2—discontinuous pinning of dislocations under jerky flow conditions at 523 K; 3—dislocation of solute atmospheres under jerky flow conditions of polycrystals with a.e. of  $2.1 \cdot 10^{-19}$  J equal to that for dislocation climb (by vacancy- or cluster-induced mechanism); 4—dynamical dragging of dislocations by C—Cottrell atmospheres under jerky flow of f.c.c.-Fe-32% Ni-0.12% C alloy [26].

<sup>4</sup> Fig. 4. Dependencies of  $\ln(\dot{\epsilon})$  on  $1/T$  (a) at the stresses of 10 MPa (1), 70 MPa (2), and 100 MPa (3), and also  $\ln(\dot{\epsilon})$  on  $\ln \sigma$  (b) at the temperatures of 293 K (1), 393 K (2), and 423 K (3) for Mg-12.5% Al-1.3% Ca alloy ( $\sigma_n = \text{const}$ ).

<sup>5</sup> TABLE 1. Thermal-activation analysis of metal alloys with solid solution strengthening under conditions of discontinuous (repeated) pinning of dislocations by interstitial and substitutional solutes.

<sup>6</sup> TABLE 2. Critical temperatures of undistracted long-term strength for metals and alloys with solid solution strengthening: theory as compared with experiment.

<sup>7</sup> TABLE 3. Microyield resistance and undistracted long-term strength of the best casting alloys at 423 K.

<sup>8</sup> Fig. 5. Temperature dependences of the true fracture stress (1, 3) and the yield stress (2, 4) for  $\alpha$ -Ti-H solid solution after annealing at 923 K (1, 2) and 1073 K (3, 4).

<sup>9</sup> Fig. 6. SEM-micrographs of the tensile fracture surfaces at 77 K for  $\alpha$ -Ti-H solid solution after annealing for two hours at 923 K (a) and 1073 K (b).

<sup>10</sup> Fig. 7. Schematic representation of the conventional viscous (transcrystalline) fracture (a) and the strange fracture (b) that follows by microplastic relaxation of the growing microcracks interacting with the viscous (relaxing) cell boundaries [8, 23] by J. C. M. Li modified scheme [25] for solid solutions with dislocation cell structure being formed during continuous axial tension.