

PACS: 62.20.–x

Ю.Н. Подрезов, Е.М. Борисовская, В.М. Даниленко, Н.М. Марченко

## О ВЛИЯНИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НА ПЕРЕХОД ОТ ТРАНСЛЯЦИОННОГО К РОТАЦИОННОМУ МЕХАНИЗМУ ДЕФОРМАЦИИ

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины

Статья поступила в редакцию 15 марта 2016 года

*Проанализировано влияние размера зерна на смену механизма деформации в сильнодеформированных материалах. Экспериментально установлено, что деформация, соответствующая переходу от параболического к линейному упрочнению, быстро снижается с уменьшением размера зерна, а величина деформационного упрочнения при этой деформации практически не зависит от размера зерна. Методом дислокационной динамики показано, что развитие ротационного механизма деформации в поликристалле происходит по эстафетному механизму. Зерна поликристалла последовательно вовлекаются в данный механизм деформации, причем это происходит тем раньше, чем ближе друг к другу расположены границы, иначе говоря, чем меньше размер зерна.*

**Ключевые слова:** механизм пластической деформации, ротации, трансляции, дислокации, размер зерна

*Проаналізовано вплив розміру зерна на зміну механізму деформації в сильнодеформованих матеріалах. Експериментально встановлено, що деформація, яка відповідає переходу від параболического до лінійного зміцнення, швидко знижується зі зменшенням розміру зерна, а величина деформаційного зміцнення при цій деформації практично не залежить від розміру зерна. Методом дислокаційної динаміки показано, що розвиток ротаційного механізму деформації в полікристалі відбувається за естафетним механізмом. Зерна полікристалла послідовно залучаються до цього механізму деформації, причому це відбувається тим раніше, чим ближче одна до одної знаходяться границі, інакше кажучи, чим менший розмір зерна.*

**Ключові слова:** механізм пластичної деформації, ротації, трансляції, дислокації, розмір зерна

Среди задач физики прочности вопрос об эволюции структуры в процессе деформации является не только наиболее актуальным, но и самым сложным. Проблема заключается в том, что визуализация изменения структуры в деформируемом макрообразце практически невозможна, а структура, которая фиксируется в электронном микроскопе после разгрузки, не соответствует реальной картине из-за процессов возврата. К сожалению, следует констатировать, что эти проблемы существенно усложняются при переходе к боль-

шим степеням деформации. Широко используемый для исследования малых и средних степеней деформации пошаговый анализ структурных перестроек для больших деформаций оказывается мало эффективным ввиду незначительных изменений в деформационной наноструктуре.

Анализ структурной чувствительности кривых деформационного упрочнения позволяет достаточно точно определить интервал деформации, где осуществляется переход от трансляционных механизмов деформации к ротационным. В работах Зехетбауэра [1,2], Неса [3] и других авторов [4–6] результаты механических испытаний использованы для исследования влияния условий нагружения (температуры и скорости деформирования) на смену механизма деформации.

В наших работах [7,8] с помощью кривых деформационного упрочнения изучено влияние размера зерна на склонность к формированию деформационной наноструктуры. Основываясь на существующих представлениях о том, что переход к ротационному механизму соответствует началу стадии линейного упрочнения [3,6], определили точку перехода из условия равенства скорости упрочнения на параболической и линейной стадиях (третьей и четвертой стадиях – согласно принятой классификации). Величины деформирующего напряжения  $\sigma_{III=IV}$  и степени деформации  $\epsilon_{III=IV}$ , соответствующих изменению механизма деформации, для рекристаллизованного молибдена с разным размером зерна приведены в таблице.

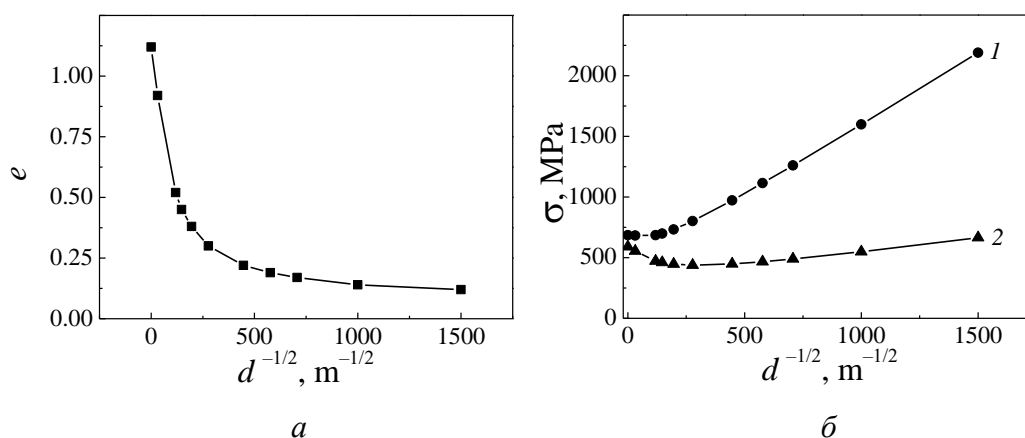
Таблица

**Значения напряжения и степени деформации в области перехода от параболического к линейному упрочнению для рекристаллизованного молибдена с разным размером зерна**

$D, \text{m} \cdot 10^{-6}$	$d^{-1/2}, \text{m}^{-1/2}$	$\sigma_{02}$	$\sigma_{III=IV}$	$\sigma_{III=IV} - \sigma_{02}$	$\epsilon_{III=IV}$
		МПа			
$\infty$	0	95	685	590	1.12
1000	31.6	129	683	554	0.92
70	119	213	685	472	0.52
46	147	239	699	460	0.45
26	196	285	732	447	0.38
13	277	363	801	438	0.30
5	447	524	972	448	0.22
3	577	648	1114	466	0.19
2	707	771	1260	489	0.17
1	1000	1050	1599	549	0.14
0.225	1500	1525	2190	665	0.12

Представив эти данные в виде графиков (рис. 1), можно обнаружить, что деформация, соответствующая переходу от параболического к линейному упрочнению, достаточно сильно уменьшается с уменьшением размера зерна (рис. 1,а). При этом деформирующее напряжение, напротив, резко увеличи-

вается (рис. 1, б, кривая 1), однако это увеличение определяется не дислокационными эффектами, а лишь ростом предела текучести. Величина деформационного упрочнения, определяемая из условия  $\sigma_{st} = \sigma - \sigma_{02}$ , практически не зависит от размера зерна (рис. 1, б, кривая 2).



**Рис. 1.** Зависимость от размера зерна величины деформации (а) и напряжения (б), при которых осуществляется переход от параболического упрочнения к линейному: 1 – деформирующее напряжение, 2 – напряжение деформационного упрочнения

Поскольку связь между величиной деформационного упрочнения и плотностью дислокаций определяется уравнением Тейлора

$$\sigma_{st} = \alpha G b \rho^{1/2} \quad (1)$$

(где  $\alpha$  – коэффициент, величина которого разная на разных стадиях;  $G$  – модуль сдвига;  $b$  – вектор Бюргера;  $\rho$  – плотность дислокаций), можно заключить, что независимо от размера зерна переход к ротационному механизму происходит при одинаковой плотности дислокаций. При этом критическая плотность дислокаций в материалах с малым зерном достигается значительно быстрее, чем в крупнокристаллических.

Таким образом, увеличение плотности границ способствует ускорению процесса структурных перестроек и, как следствие, достижению критической деформации, необходимой для смены механизма. Об особой роли границ в активизации ротационных механизмов деформации свидетельствуют данные работы Салищева с сотрудниками [9], где зафиксировано изменение разориентировки большеугловых границ при формировании вблизи них ротационных дефектов.

Следует также обратить внимание на то, что переход от параболического упрочнения к линейному происходит в достаточно узком диапазоне деформаций. Причиной быстрой смены механизма деформации может быть то, что возникшие ротационные дефекты провоцируют зарождение новых источников ротации. Сарафанов и Перевезенцев [10,11] показали, что в при-

существовании дисклинаций происходит упорядочение окружающей дислокационной структуры с образованием полигонизационных стенок.

В наших публикациях, посвященных исследованию структурных перестроек в деформируемом материале методом дислокационной динамики [12], была рассмотрена работа дислокационного источника в поле действия дислокаций леса. Поскольку в зависимости от соотношения компонент действующего напряжения дислокации способны либо скользить, либо переползать, источник Франка–Рида может работать в двух разных режимах: 1) генерировать pile-up или 2) создавать полигонизационные стенки.

В данной работе метод дислокационной динамики используется для исследования особенностей эволюции дислокационной структуры при наличии вблизи границы зерна дисклинационной стенки разной мощности. Изучается влияние параметров дисклинационного дефекта и его положения относительно границы на эволюцию дислокационной структуры в соседнем зерне, а также на изменение силовых и энергетических характеристик дислокаций, движущихся под действием приложенного напряжения.

При моделировании методом дислокационной динамики использовали следующие параметры модели: модельный материал – молибден, его модуль упругости  $E = 290 \text{ GPa}$ , модуль сдвига  $G = 190 \text{ GPa}$ , вектор Бюргерса  $b = 3.14 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ . Напряжение трения решетки (напряжение Пайерлса)  $5 \text{ MPa}$ . Размер модельного кристалла  $10000b$ . Дисклинация вблизи границы зерна представляется как высокоугловая дислокационная стенка с разным количеством дислокаций (10, 70 и 100), она может быть наклонена к границе зерна под углами  $0, \pi/8$  и  $\pi/4$ .

Напряжение прикладывали, как показано на рис. 2, и увеличивали пошагово со скоростью  $5 \cdot 10^4 \text{ MPa/s}$ . Если напряжение на дислокационном источнике превосходило напряжение Пайерлса, то источник разблокировался и эмитировал пару дислокаций. Всего в зерне располагалось 6 источников, из них 3 эмитировали дислокации в плоскости приложения загрузки, а 3 – в перпендикулярной плоскости (рис. 2).

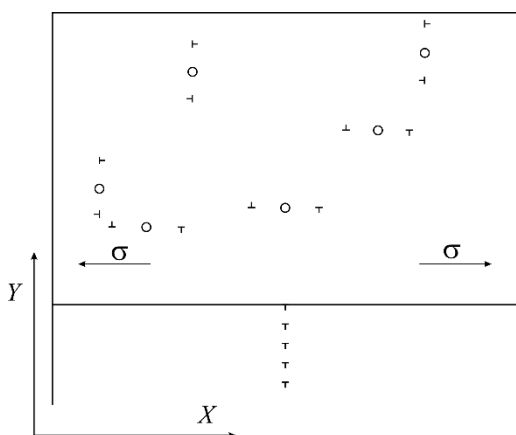


Рис. 2. Схема модельного кристалла

Дислокационное скольжение происходило по двум системам скольжения,

расположенным под углом  $90^\circ$  одна к другой. Шаг по времени выбирали таким образом, чтобы дислокация, на которую действует максимальное напряжение, успевала пройти расстояние  $2b$ . Деформацию рассчитывали как общее перемещение дислокаций, которые скользят в плоскости  $x$ :

$$\varepsilon = b\rho L, \quad (2)$$

где  $\rho$  – плотность дислокаций,  $L$  – длина свободного пробега.

Наличие в модельном кристалле границы зерна требует учета в силовом балансе силы изображения. В этом случае суммарное напряжение, которое действует на каждую дислокацию, состоит из следующих компонент: внешнего напряжения  $\sigma_v$ ; напряжения собственных сил изображения  $\sigma_{im_s}$ ; напряжения со стороны других дислокаций ансамбля  $\sigma_i$  и их сил изображения  $\sigma_{im_i}$ :

$$\sigma = \sigma_v + \sigma_{im_s} + \sum_i (\sigma_i + \sigma_{im_i}), \quad (3)$$

$$\sigma_i = -\sigma_{11} \cos\beta \sin\beta + \sigma_{22} \sin\beta \cos\beta + \sigma_{12} (\cos^2\beta - \sin^2\beta), \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{22} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{12} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \end{aligned} \quad (5)$$

$\beta$  – угол между векторами Бюргера дислокаций [13]. Поскольку моделировали большое зерно, принимали во внимание силы изображения только от одной границы, рядом с которой располагается дисклинация.

Скорость дислокаций рассчитывали как линейную функцию действующего напряжения [14]. В зависимости от того, какая компонента напряжения, действующего на дислокацию, оказывалась больше, дислокация либо скользила, либо переползала со скоростью

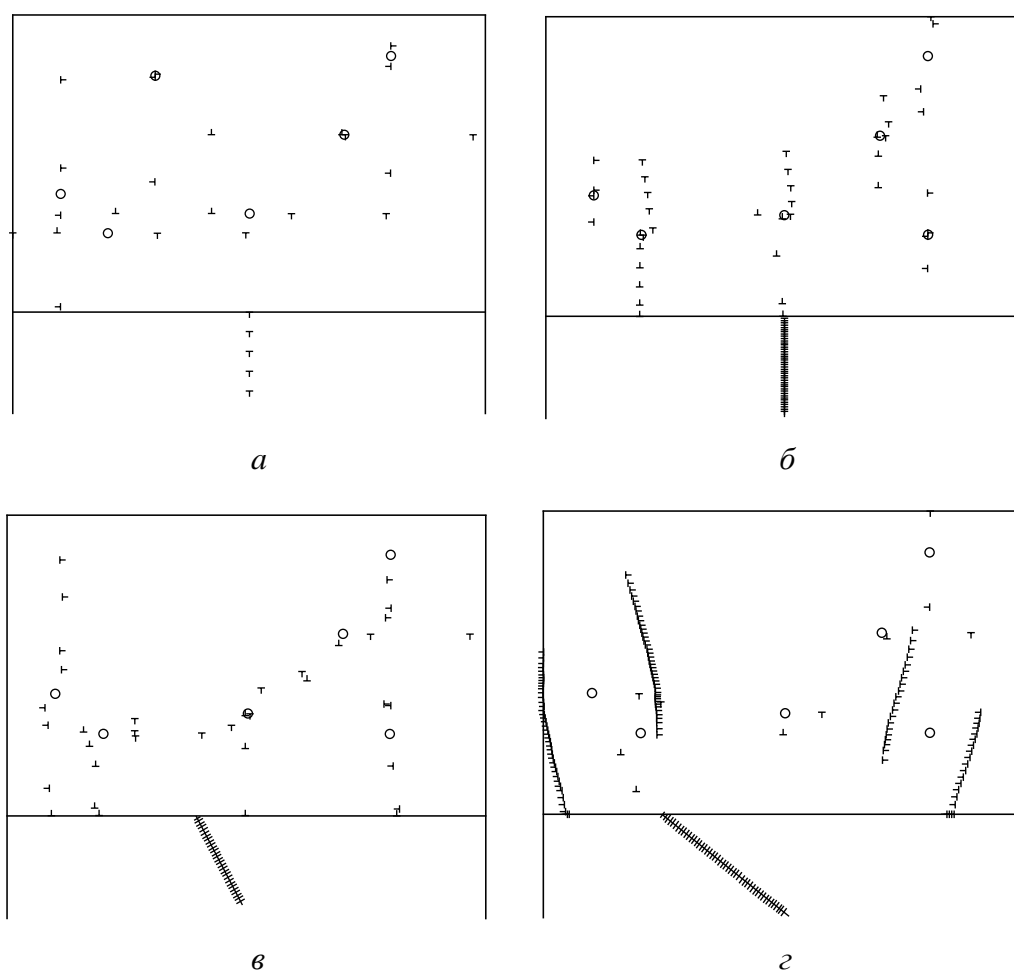
$$v = v_c \sigma, \quad (6)$$

где

$$v_c = \frac{D_s b}{kT} \quad (7)$$

( $D_s$  – коэффициент самодиффузии,  $\sigma$  – действующее напряжение).

Расчеты показали, что в том случае, когда число дислокаций  $n$  в дисклинационном дефекте не очень большое (от 10 до 70), присутствие дисклинации существенно не влияет на формируемую дислокационную структуру: дислокации двигаются в плоскости скольжения, создавая плоские нагромождения. На рис. 3,а приведена дислокационная структура, формирующаяся при наличии дисклинационной стенки, содержащей 10 дислокаций. При наличии мощной ( $n = 100$ ) дисклинации изменяется механизм генерации дислокационных пар: дислокации начинают переползать сразу с момента их эмиссии источником. Источники быстро разблокируются после появления очередной пары дислокаций, что ведет к созданию и быстрому росту полигонизационных стенок в соседнем зерне (рис. 3,б). Их незначительный изгиб обусловлен взаимодействием между образовавшимися стенками.

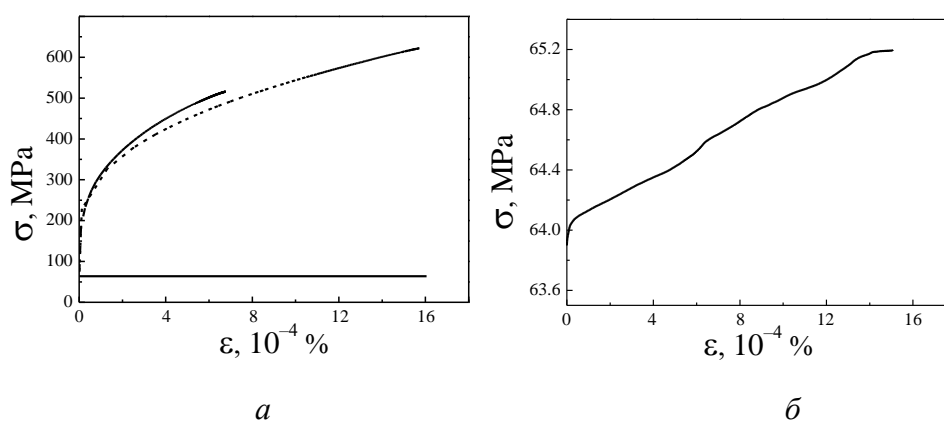


**Рис. 3.** Эволюция дислокационной структуры в процессе нагружения при разных мощностях дисклинаций: а – угол 0,  $n = 10$ ; б – угол 0,  $n = 100$ ; в – угол  $\pi/8$ ,  $n = 70$ ; г – угол  $\pi/4$ ,  $n = 70$

Смена механизма формирования дислокационной субструктуры происходит, когда количество дислокаций в дисклинации достигает 70. При наличии

такого дефекта источники равновероятно могут эмитировать скользящие и переползающие пары дислокаций. В этом случае наиболее ярко проявляется влияние положения дисклинации относительно границы зерна. При малых углах отклонения от нормали, например на угол  $\pi/8$  (рис. 3,е), образовавшаяся дислокационная структура формируется как скользящими, так и переползающими дислокациями. Хаотичное распределение дислокаций, характерное для случая, представленного на рис. 3,а, сменяется образованием полигональных стенок, однако в данном случае эти стенки маломощные и состоят из единичных и сравнительно далеко расположенных дислокаций. При больших углах отклонения дисклинации от нормали, например на угол  $\pi/4$  (рис. 3,з), формируются ярко выраженные полигональные стеки большой мощности, заметный изгиб которых обусловлен наличием дисклинационно-го дефекта, расположенного под углом.

Рассчитывая по формулам (2)–(7) текущие значения деформации, удается построить кривые нагружения модельного кристалла, содержащего дисклинации разной мощности и расположенные нормально к границе (по сути это модельные кривые деформационного упрочнения для данной стадии деформации). Результаты расчета приведены на рис. 4. Из представленных данных видно, что при малых мощностях дисклинационных дефектов кривая упрочнения имеет вид параболы (рис. 4,а). При наличии мощной дисклинации зависимость напряжения от деформации можно описать прямой линией (рис. 4,б). Такой вид кривой упрочнения характерен для больших степеней деформации, где дисклинации играют определяющую роль в процессе упрочнения. Важно, что при наличии мощной дисклинации модельный кристалл демонстрирует низкие значения деформирующего напряжения и его слабый рост с увеличением деформации. Таким образом, активизация ротационных дефектов способствует реализации пластической деформации без заметного прироста напряжения, что характерно для стадии линейного упрочнения.



**Рис. 4.** Кривые нагружения модельного кристалла при наличии дисклинаций низкой (а) и высокой (б) мощности, расположенных нормально к плоскости границы: ---  $n = 10$ , - · - · -  $n = 70$ , —  $n = 100$

Сопоставляя силовые параметры кривых упрочнения, представленных на рис. 4, можно заключить, что при образовании дисклинационных стенок пластическая деформация требует меньшего прироста напряжения и, следовательно, более энергетически выгодна. Важно, что при включении ротационной моды деформации этот механизм развивается автомодельно и охватывает весь кристалл.

Возвращаясь к вопросу о роли границ зерен в реализации дисклинационного механизма, обратим внимание на то, что процесс зарождения дисклинационных стенок резко ускоряется именно при наличии границы зерна. Поскольку склонность к образованию стенок уменьшается по мере их удаления от границы, для возобновления работы данного механизма в соседнем зерне необходимо, чтобы его граница находилась как можно ближе к тому участку, где расположен дисклинационный дефект. В таком случае развитие ротационного механизма деформации происходит по своеобразному эстафетному механизму: зерна поликристалла последовательно вовлекаются в данный механизм деформации, причем это происходит тем раньше, чем ближе друг к другу расположены границы, иначе говоря, чем меньше размер зерна.

### Выводы

1. Деформация, соответствующая переходу от параболического к линейному упрочнению, достаточно сильно уменьшается с ростом размера зерна. Деформирующее напряжение, напротив, резко увеличивается с уменьшением размера зерна, однако это увеличение определяется не дислокационными эффектами, а лишь ростом предела текучести.

2. Величина деформационного упрочнения, определяемая из условия  $\sigma_{st} = \sigma - \sigma_0$ , практически не зависит от размера зерна. С учетом уравнения Тейлора можно заключить, что независимо от размера зерна переход к ротационному механизму происходит при одинаковой плотности дислокаций. При этом критическая плотность дислокаций в материалах с малым зерном достигается значительно быстрее, чем в крупнокристаллических.

3. Моделирование эволюции дислокационной структуры при наличии вблизи границы зерна дисклинационной стенки разной мощности методом дислокационной динамики показало, что:

– в том случае, когда число дислокаций в дисклинационном дефекте не очень большое ( $n = 10$ ), присутствие дисклинации существенно не влияет на формируемую дислокационную структуру: дислокации двигаются в плоскости скольжения, создавая плоские нагромождения;

– при наличии мощной ( $n = 100$ ) дисклинации дислокационная структура эволюционирует по другому закону: дислокации начинают переползать сразу с момента их эмиссии источником, что ведет к созданию и быстрому росту полигонизационных стенок в соседнем зерне;



– смена механизма структурообразования происходит при наличии дисклинации, состоящей из 70 дислокаций. В этом случае механизм эволюции структуры зависит от ориентации дисклинации относительно границы зерна. При малых углах отклонения дисклинации от нормали к границе образуются маломощные стенки, которые состоят из единичных и сравнительно далеко расположенных дислокаций, при больших углах – формируются полигональные стенки высокой мощности, заметный изгиб которых обусловлен наличием «повернутого» дисклинационного дефекта.

4. Сопоставление силовых параметров кривых упрочнения модельного кристалла показывает, что при образовании дисклинационных стенок пластическая деформация происходит с меньшим приростом напряжения и, следовательно, более энергетически выгодна.

5. Процесс зарождения дисклинационных стенок резко ускоряется при наличии границы зерна. Развитие ротационного механизма деформации происходит по эстафетному механизму. Зерна поликристалла последовательно вовлекаются в данный механизм деформации, причем это происходит тем раньше, чем ближе друг к другу расположены границы, иначе говоря, чем меньше размер зерна.

1. *M. Zehetbauer, V. Seumer*, Acta metall. mater. **41**, 577 (1993).
2. *M. Zehetbauer, D. Trattner*, Mater. Sci. Eng. **A89**, 93 (1987).
3. *E. Nes*, Prog. Mater. Sci. **41**, 129 (1998).
4. *H. Mughrabi*, Mater. Sci. Eng. **85**, 15 (1987).
5. *Y. Estrin, L.S. Tóth, A. Molinari, Y. Bréchet*, Acta Mater. **46**, 5509 (1998).
6. *U.F. Kocks, H. Mecking*, Prog. Mater. Sci. **48**, 171 (2003).
7. *Ю.Н. Подрезов, В.И. Даниленко, Н.И. Даниленко, С.А. Фирстов, Н.М. Марченко*, ФТВД **25**, № 1–2, 66 (2015).
8. *Ю.Н. Подрезов, В.И. Даниленко, Н.И. Даниленко*, ФТВД **25**, № 3–4, 90 (2015).
9. *G. Salishchev, S. Mironov, S. Zhrebtsov, A. Belyakov*, Materials Characterization **61**, 732 (2010).
10. *V.N. Perevezentsev, G.F. Sarafanov*, Mater. Sci. Eng. **A503**, 137 (2009).
11. *G.F. Sarafanov, V.N. Perevezentsev*, Technical Physics Letters № 31, 936 (2005).
12. *Е.М. Борисовская, Ю.Н. Подрезов, С.А. Фирстов*, в сб.: Электронная микроскопия и прочность материалов, ИПМ НАН Украины, Киев (2007), вып. 14, с. 3–11.
13. *V.I. Semenov, A.G. Raab*, Machines, Technologies, Materials **11**, 41 (2012).
14. *Дж. Хирт, И. Лоте*, Теория дислокаций, Атомиздат, Москва (1972).

*Yu.N. Podrezov, E.M. Borisovskaya, V.I. Danilenko, N.M. Marchenko*

## ON THE INFLUENCE OF GRAIN BOUNDARIES ON THE TRANSITION FROM TRANSLATIONAL TO ROTATIONAL MECHANISM OF DEFORMATION

The influence of the grain size on the change of deformation mechanism in deformed materials has been analyzed. It has been established experimentally that the deformation corresponding to the transition from parabolic to linear hardening rapidly decreases with decreasing grain size, but the value of strain hardening at this deformation is independent of the grain size. The method of dislocation dynamics shows that the development of a rotational mechanism of deformation in a polycrystal occurs by the relay mechanism. The grains become consistently involved in the deformation mechanism. The closer are the boundaries to each other, in other words, the smaller the grain size is, the earlier this process starts.

**Keywords:** mechanism of plastic deformation, rotation, translation, dislocations, grain size

**Fig. 1.** Grain size dependence of the strain ( $a$ ) and the stress ( $b$ ), where the transition from the parabolic hardening to the linear one occurs: 1 – deforming stress, 2 – stress of the deformation hardening

**Fig. 2.** Scheme of the model crystal

**Fig. 3.** Evolution of the dislocation structure in the course of loading at varied disclination strength:  $a$  – zero angle,  $n = 10$ ;  $b$  – zero angle,  $n = 100$ ;  $c$  – angle of  $\pi/8$ ,  $n = 70$ ;  $d$  – angle of  $\pi/4$ ,  $n = 70$

**Fig. 4.** Loading branches of the model crystal in the presence of the disclination of low strength ( $a$ ) and high strength ( $b$ ) located normally to the boundary plane: --- –  $n = 10$ , -·-·- – 70, — – 100