

Моделирование высокопрочных состояний в Al сплавах

Чембарисова Р.Г.[†], Александров И.В.

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа

[†]chroza@yandex.ru

Modeling of high-strength states in Al alloys

R.G. Chembarisova[†], I.V. Alexandrov

Ufa State Aviation Technical University, Ufa

Рассмотрен один из способов повышения прочности металлических материалов на примере Al сплавов. Методами математического моделирования показано, что варьирование фактора размерного несоответствия путем подбора примесных элементов с соответствующими радиусами атомов и их концентрации в Al сплавах, подвергнутых интенсивной пластической деформации, можно сформировать ультрамелкозернистые структуры, приводящие к значительному повышению их прочности.

Ключевые слова: моделирование, примесные атомы, энергия взаимодействия, напряжение закрепления краевой дислокации.

One of the ways to improve the strength of metallic materials on the basis of Al alloys has been reviewed here. By the methods of mathematical modeling it has been shown that variability of the lattice misfit factor by matching the impurity atoms with the corresponding radii of atoms and their concentration in Al alloys, subjected to severe plastic deformation, can develop ultrafine grain structures, bringing to considerable strength increase.

Key words: modeling, impurity atoms, interaction energy, the locking stress of the edge dislocation.

1. Введение

Интенсивная пластическая деформация (ИПД) открывает возможности для формирования структур, приводящих к высокопрочным состояниям в металлах и сплавах. Среди факторов, влияющих на прочностные свойства, выделяются измельчение структуры, повышение плотности дислокаций, выделение частиц второй фазы и формирование сегрегаций атомов вдоль границ зерен (ГЗ).

В ультрамелкозернистых (УМЗ) материалах повышается роль границ зерен как источников и стоков дислокаций. Характерным для них является высокая плотность дислокаций в ГЗ и отсутствие дислокаций в их внутренних областях. В результате создаются благоприятные условия для стекания примесных атомов в область ГЗ. Дислокации оказываются погруженными в твердый раствор с повышенной концентрацией примесных атомов C_0 . Энергия взаимодействия дислокаций с облаком примесных атомов зависит от их концентрации C_0 , фактора размерного несоответствия ϵ между атомами матрицы и примеси, от температуры T . Чем больше значения C_0 и ϵ , тем выше энергия взаимодействия. Повышение температуры способствует рассеиванию облака и соответственно понижению энергии взаимодействия.

Вклад ГЗ в упрочнение материала может заключаться и в затруднении испускания дислокаций (источении границы). Например, в различных сплавах на основе Fe,

Ni, Cu, порог упругости повышается при сегрегации атомов В на ГЗ [1]. Авторы работы [2] проанализировали причины наблюдающихся экспериментально высоких значений предела текучести, отклоняющихся от закона Холла-Петча в большую сторону, в сплаве 1570 (Al-5,7Mg-0,32Sc-0,4Mn, вес. %), подвергнутой ИПД кручением при разных температурах. При экспериментальных исследованиях структуры сплава были выявлены сегрегации вдоль ГЗ, которым отводится важная роль в формировании указанных сверхпрочных состояний [3].

2. Закрепление дислокаций атмосферами примесных атомов

Энергия взаимодействия краевой дислокации с примесным атомом с учетом компонент тензора напряжений в градиентной теории упругости имеет вид [4, 5]

$$W = \beta \left[\frac{1}{r} - \frac{K_1 \left(\frac{r}{\sqrt{s}} \right)}{\sqrt{s}} \right] \sin \Theta, \quad (1)$$

В направлении вектора Бюргерса угол $\Theta = 0$. Градиентный коэффициент для краевой дислокации $\sqrt{s} \approx a/4$, a - параметр кристаллической решетки,

$$\beta = \frac{4}{9} a^3 \varepsilon \frac{1+\nu}{1-\nu} Gb, \quad \varepsilon = (R_s - R_a) / R_a, \quad R_a - \text{радиус}$$

атома матрицы, R_s - радиус атома примеси, G - модуль сдвига, ν - коэффициент Пуассона, b - величина вектора Бюргерса, r - радиус - вектор атома примеси.

$$K_1\left(\frac{r}{\sqrt{s}}\right), \quad K_0\left(\frac{\rho}{\sqrt{s}}\right) - \text{модифицированные функция}$$

Бесселя второго рода первого и нулевого порядков соответственно. Экстремальное значение безразмерной энергии взаимодействия $\tilde{W} = W\sqrt{s} / \beta$ при $\Theta = 3\pi/2$ определяется из выражения

$$\frac{1}{y^2} - K_0(y) - \frac{K_1(y)}{y} = 0, \quad (2)$$

где $y = r / \sqrt{s}$. Приближенное значение корня полученного уравнения равно $y_0 \approx 1.115$ [5]. При $y = y_0$ энергия взаимодействия достигает наименьшего отрицательного значения, соответствующего максимальному значению энергии связи при $\Theta = 3\pi/2$ (Рис. 1). Атомы замещения с $R_s > R_a$ и все атомы внедрения притягиваются к области под краем экстраплоскости.

Равновесное распределение концентрации точечных дефектов, окружающих дислокацию, описывается соотношением

$$C_d = C_{d0} \exp\left(-\frac{W}{k_B T}\right), \quad (3)$$

где k_B - постоянная Больцмана, T - температура. При смещении дислокации от замороженного облака на расстояние x суммарная энергия взаимодействия дислокации с облаком примесных атомов W на единицу длины дислокационной линии равна [2]

$$\frac{W}{L} = \beta \int_{r_0}^{\infty} \int_0^{2\pi} (c - c_0) \left[\frac{1}{\rho} - \frac{K_1\left(\frac{r}{\sqrt{s}}\right)}{\sqrt{s}} \right] \frac{r \sin \Theta}{\rho} r dr d\Theta, \quad (4)$$

где $\rho = \sqrt{r^2 + x^2 - 2rx \cos \Theta}$. При этом появляется сила, действующая на дислокацию. Сила закрепления краевой дислокации на единицу её длины определяется как производная от энергии связи W на единицу длины дислокации по смещению x [6]. Напряжение закрепления краевой дислокации τ_{ag} определяется из уравнения

$$\tau_{ag} b = \frac{F}{L} = \frac{1}{L} \frac{\partial W}{\partial x}, \quad (5)$$

В работе [2] было получено выражение, характеризующее зависимость силы закрепления краевой дислокации на единицу её длины от величины смещения x :

$$\frac{F\sqrt{s}}{L} = 4\beta c_0 \int_{r_0}^{\infty} \int_0^{\pi} sh \left[\frac{\beta}{kT} \left(\frac{1}{r} - \frac{K_1\left(\frac{r}{\sqrt{s}}\right)}{\sqrt{s}} \right) \sin \Theta \right] \times \\ \times \left\{ \frac{\sqrt{s} r^2 \sin \Theta (x - r \cos \Theta)}{(x^2 + r^2 - 2rx \cos \Theta)^2} - \frac{r^2 \sin \Theta (x - r \cos \Theta)}{(x^2 + r^2 - 2rx \cos \Theta)} Q(x) \right\} dr d\Theta, \quad (6)$$

$$Q(x) = \frac{K_0\left(\frac{\rho}{\sqrt{s}}\right)}{2\sqrt{s}} + \frac{K_1\left(\frac{\rho}{\sqrt{s}}\right)}{\rho}.$$

На дислокацию, смещенную на некоторое расстояние x от облака примесей, будет действовать чувствительная к температуре среды сила закрепления дислокации, рассчитанная на единицу её длины, пропорциональная концентрации примесей в области шириной около 3 нм вдоль ГЗ и фактору размерного несоответствия ε .

3. Результаты моделирования

В работе [2] представлены результаты численного моделирования наблюдающихся на опыте закономерностей пластической деформации горячепрессованного сплава Al 1570 (Al-5.7Mg-0.32Sc-0.4Mn, вес. %), отожженного при 380 °С в течение 2 часов (крупнокристаллическое (КК) состояние), а также УМЗ состояний данного сплава, полученных последующим кручением под высоким давлением при комнатной температуре (состояние УМЗ 1), а также при температурах 100 °С (состояние УМЗ 2) и 200 °С (состояние УМЗ 3), в результате которого произошло выделение атомов магния из твердого раствора в область ГЗ шириной около 3 нм. Концентрации атомов Mg в области ГЗ соответственно приняли значения, представленные в Табл. 1.

Как следует из анализа экспериментальных данных, атомы магния, стекая в ГЗ, остаются преимущественно в твердом растворе, образуя сегрегации вдоль ГЗ. В исходном отожженном состоянии при концентрации магния 5.7 вес.% в сплаве ($\approx 37.05 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$) атомы магния были распределены равномерно в объеме зерен. В состояниях после интенсивной пластической деформации кручением при комнатной температуре (КТ), 100° С и 200° С напряжение закрепления дислокаций составило 106.4, 115.2 и 161.7 МПа, соответственно за счет увеличения концентрации атомов магния C_0 в области границ зерен [2]. Концентрация атомов примеси вдали от дислокации C_{d0} была принята равной повышенной концентрации в сегрегации C_0 , так как на расстоянии 3 нм от дислокации атомы примеси слабо чувствуют поле дислокации и соответственно концентрация атомов примеси мало отличается от концентрации в сегрегации (Рис. 2).

Представим, что вместо атомов Mg в ГЗ в процессе обработки методами ИПД выделилось такое же коли-

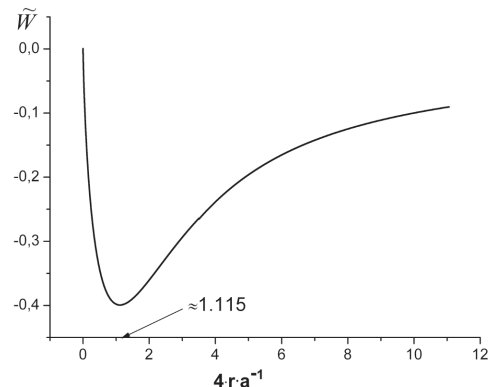


Рис. 1. Зависимость безразмерной энергии взаимодействия от параметра $y=4r/a$.

Таблица 1.

Величины параметров, использованных при моделировании.

Состояния	d , нм [3]	σ_y , МПа [3]	C_0 , м ⁻³ [2]
КК	$\approx 60 \cdot 10^3$	231 ± 9	$\approx 37.05 \cdot 10^{26}$ (5.7вес.%)
УМЗ 1	130 ± 10	905 ± 31	$98.37 \cdot 10^{26}$
УМЗ 2	130 ± 10	865 ± 25	$106.47 \cdot 10^{26}$
УМЗ 3	210 ± 7	845 ± 33	$149.53 \cdot 10^{26}$

Таблица 2.

Значения радиусов атомов исследуемых элементов.

Элемент	Mg	Ni	Be
Радиус атома (пм)	160	124	112

чество атомов Ni или атомов Be. В табл. 2 приведены значения радиусов их атомов. Тогда при одной и той же температуре вклад напряжения закрепления дислокаций τ_{ag} атомами примесей в предел текучести сплава будет значительно отличаться в зависимости от размера R_s соответствующих атомов. Например, заменяя атомы Mg в Al матрице атомами Ni при одинаковых значениях C_0 и T , напряжение закрепления дислокаций может быть повышена в 1.3 раза (Рис 3 а, б). Если предположить, что в ГЗ выделились атомы Be, то при тех же одинаковых значениях C_0 и T напряжение закрепления дислокаций возрастает при КТ в 4.0, при температуре 400 К - в 3.6, при температуре 600 К - в 3.4 раза (Рис. 3 а, в). При этом

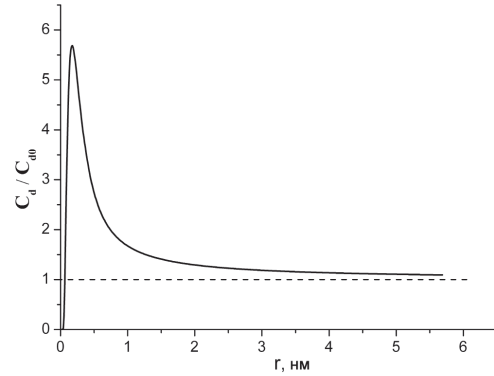


Рис. 2. Зависимость концентрации атомов магния по отношению к концентрации вдали от дислокации в зависимости от расстояния от дислокации r .

напряжение закрепления дислокаций атомами Be при 600 К даже выше, чем напряжение закрепления атомами Mg при КТ (Рис. 3 г).

Подвергая сплавы с подобранным фактором размерного несоответствия и соответствующей концентрации ИПД, формируя требуемые структуры, можно добиться значительного повышения их предела текучести и получать легкие материалы, не теряющие высокой прочности даже при высоких температурах.

4. Заключение

В представленной работе методами математического моделирования показано, что повышая фактор размерного несоответствия ϵ путем подбора элемента с соответствующим радиусом атома, можно значительно

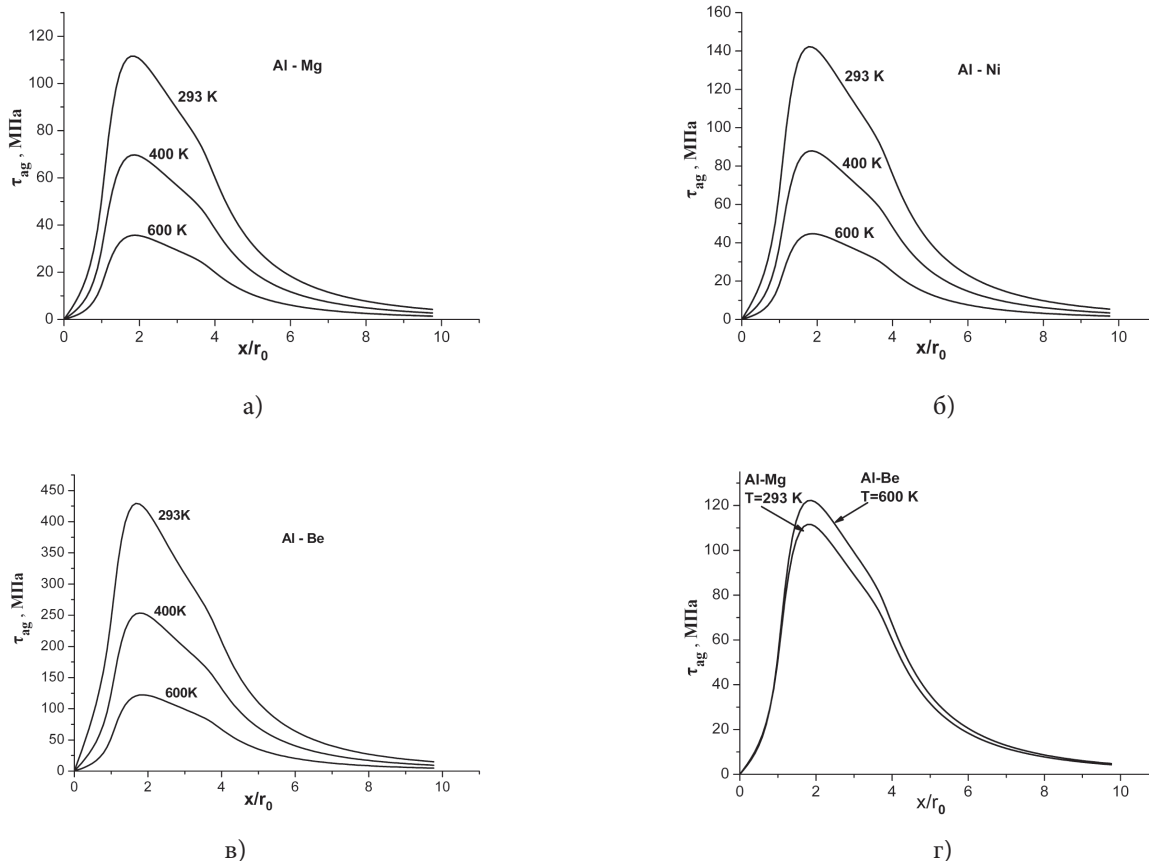


Рис. 3. Зависимость напряжения τ_{ag} закрепления дислокаций от величины смещения дислокации x от замороженного облака. r_0 – размер ядра дислокации, принятый равным $1.45b$. Концентрация примесных атомов равнялась м⁻³.

повысить вклад напряжения закрепления дислокаций в предел текучести сплава. Например, заменяя атомы Mg в Al - Mg сплавах атомами Be при равных значениях концентрации C_0 и температуры T , напряжение закрепления дислокаций может быть повышена при КТ в 4 раза. Причем напряжение закрепления при повышенных температурах в сплавах с Be даже выше, чем напряжение закрепления при КТ в сплавах с Mg. Возможность конструирования легких высокопрочных материалов откроет перспективы их использования в различных областях науки и техники, где подобные материалы являются востребованными.

Литература

1. Рахштадт А.Г. Пружинные сплавы. (Свойства и термическая обработка). М.: Металлургия, 1965, 364 с.
2. Alexandrov I.V., Chembarisova R.G., Latypov M.I. Kinetic modeling of the deformation behavior of high-strength nanostructured Al-Mg alloys. *Materials Science Forum*, 2011, V. 683, P. 203 - 211.
3. Murashkin M.Yu., Kil'mametov A.R., and Valiev R.Z. Structure and mechanical properties of an aluminum alloy 1570 subjected to severe plastic deformation by high-pressure torsion. *Phys. Met. Metallogr.*, 2008, V. 106, P. 90 - 96.
4. Gutkin M.Yu., Mikaelyan K.N. and Aifantis E.C. Behavior of screw dislocations near phase boundaries in the gradient theory of elasticity. *Phys. Solid State*, 2000, V. 42, №9, P. 1652 - 1658.
5. Vlasov N.M. Interaction of point defects with an edge dislocation in the gradient theory of elasticity. *Phys. Solid State*, 2001, V. 43, № 11, P. 2083 - 2086.
6. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of dislocations*. New York: Wiley, 1982, 787 p.