

Экранирование полей напряжения мезодефектов ансамблем движущихся дислокаций и формирование областей разориентации при пластической деформации металлов

Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н.

E-mail: sarafanov@sinn.ru

Нижегородский филиал Института машиноведения им. А.А.Благонравова РАН,
ул. Белинского 85, 603024 Нижний Новгород

Screening of mesodefect stress fields by ensemble of moving dislocations and misorientation regions formation during plastic deformation of metals

Sarafanov G.F., Perevezentsev V.N.

Nizhny Novgorod Branch of Mechanical Engineering Research Institute, Russian Academy of Science,
Belinskogo 85, 603024 Nizhny Novgorod

Представлены результаты аналитических исследований самосогласованной динамики дислокационного ансамбля в упругом поле мезодефектов (стыковой дисклинации, дисклинационного диполя, планарного мезодефекта). Показано, что упругие поля мезодефектов вызывают возмущение ламинарного потока дислокаций в результате чего формируются области повышенной плотности дислокационного заряда. Такое перераспределение дислокаций эффективно экранирует упругие поля мезодефектов, существенно понижает энергию системы и создает предпосылки для формирования разориентированных областей — оборванных субграниц вдоль линий экстремумов дислокационного заряда.

Ключевые слова: дислокации, дисклинации, мезодефекты, экранирование, разориентированные области.

The results of analytical studies of self-consistent dynamics of a dislocation ensemble in mesodefects (junction disclination, disclination dipole, planar mesodefect) elastic fields are presented. It is shown that mesodefects elastic fields disturb laminar flow of dislocations and course formation of increased dislocation charge density regions. Such redistribution of dislocations effectively screen mesodefect elastic fields, essentially decrease the energy of system and creates the preconditions for the formation of misoriented regions — broken sub-boundaries along the lines of dislocation charge extremum.

Keywords: dislocation, disclination, mesodefect, screening, misoriented regions.

1. Введение

Многолетние исследования феномена фрагментации [1-5] позволили заключить, что в поликристаллах его первопричиной являются мощные упругие напряжения, источники которых возникают на межзеренных границах и стыках. Именно вблизи стыков или морфологических особенностей исходных границ (ступеньки, уступы, изгибы) наблюдается зарождение новых границ, которые прорастают внутрь зерен и делят их на разориентированные между собой кристаллические элементы. Движущей силой этого процесса являются источники внутренних напряжений — пластические несовместности (первичные мезодефекты), которые накапливаются на границах из-за различия собственных

пластических деформаций смежных зерен. Возникая на межкристаллитных границах, первичные мезодефекты (стыковые дисклинации и примыкающие к ним планарные мезодефекты — плоские скопления эквидистантно расположенных скользящих дислокаций), формируют трехмерную пространственную сетку линейных мезодефектов. Мощность мезодефектов постоянно увеличивается по ходу продолжающейся пластической деформации. Своими дальнедействующими полями напряжений они возмущают плотность потока решеточных дислокаций, делают его неоднородным, вызывают коллективные эффекты в ансамбле дислокаций и в конце концов порождают в прилегающих объемах зерен вторичные мезодефекты ротационного типа. Наиболее

типичными представителями вторичных мезодефектов являются оборванные дислокационные границы распространяющиеся в тело зерна от стыка или излома большеугловой границы зерна. Оборванную границу обычно интерпретируют как дислокационную реализацию частичной дисклинации, в первом приближении — просто как частичную дисклинацию [6].

В существующих моделях [7-9] экранирование упругого поля частичных дисклинаций достигалось за счет дисклинаций противоположного знака. Тем самым предполагалось, что в реальных кристаллах дисклинационные системы всегда представляют собой диполи, квадруполь и другие скомпенсированные конфигурации.

Однако следует заметить, что во-первых, экспериментально наблюдаются и не скомпенсированные оборванные границы (ветвящиеся малоугловые границы, субграницы, оканчивающиеся “факелом” из решеточных дислокаций деформированного зерна и др.) [6]; во-вторых, очевидно, что как зарождение, так и движение оборванных субграниц (частичных дисклинаций) вглубь зерна происходит в результате коллективного движения дислокаций. Поэтому при оценке упругих полей дисклинационных конфигураций более корректно рассматривать их не индивидуально, а при учете вклада окружающих дислокаций, перераспределение которых в упругом поле всей совокупности мезодефектов способно за счет эффектов экранировки привести к понижению общей упругой энергии системы.

В настоящей работе обобщены результаты [10-14] аналитического рассмотрения экранирования упругих полей первичных мезодефектов ансамблем движущихся дислокаций и показана роль этого эффекта в формировании разориентированных структур в процессе пластической деформации.

2. Структурно-кинетические аспекты формирования мезодефектов

Рассмотрим сначала особенности формирования первичных мезодефектов. Было показано, что в результате множества сдвигов по отдельным кристаллографическим плоскостям дислокационная структура меняется не только в объеме зерен, но и на межзеренных границах, формируя так называемые мезодефекты — стыковые дисклинации и плоские скопления эквидистантно расположенных дислокаций (планарные мезодефекты).

Простейшая схема процесса формирования таких (первичных) мезодефектов показана на рис. 1, где представлен излом границы, в котором стыкуются фасетки с нормальными \mathbf{N}_1 и \mathbf{N}_2 . Разностная деформация $[\hat{\varepsilon}]$ реализуется за счет скольжения в S -м зерне решеточных дислокаций с вектором Бюргерса \mathbf{b} по плоскостям, отстоящим друг от друга на одинаковые расстояния h .

Подробно вопрос о строении стыковых дисклинаций рассмотрен в [5]. Там же приведено выражение для вектора ротации стыковой дисклинации, расположенной в стыке k зерен (или границ) при произвольных

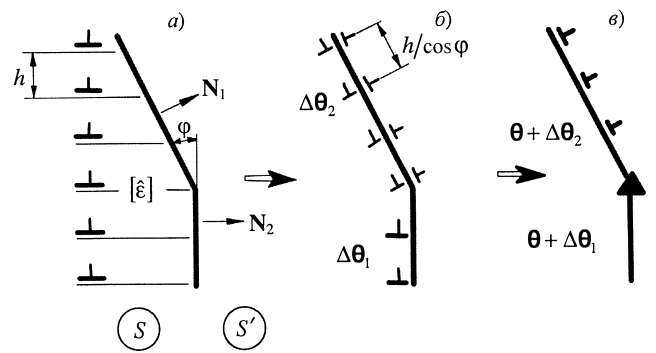


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая процесс формирования стыковой дисклинации мощности Ω и планарного мезодефекта с модулем вектора Бюргерса B [1].

значениях скачков тензора пластической деформации этих зерен

$$\Omega = \sum_{i=1}^k \Delta \theta_i^\varepsilon = - \sum_{i=1}^k \mathbf{N}_i \times [\varepsilon]_i \mathbf{N}_i, \quad (1)$$

где индексом i пронумерованы стыкующиеся границы. Здесь Ω - мощность стыковой дисклинации.

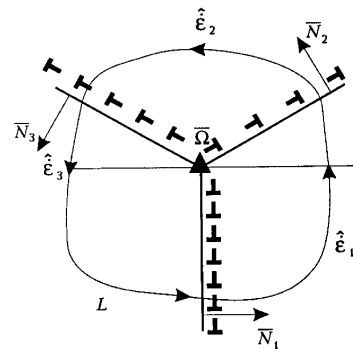


Рис. 2. Дислокационное строение стыковой дисклинации в тройном стыке [6].

На рис. 2 показано дислокационное строение стыковой дисклинации, состоящей из трех частичных и имеющей результирующую мощность Ω согласно (1).

Стыковая дисклинация в случае плоской деформации создает в окружающем пространстве упругие поля такие же как и отдельная частичная клиновидная дисклинация. Поэтому поля могут быть определены с помощью функции напряжений Эйри [15]:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{D\omega}{2} \left(r^2 \ln \frac{r}{R} - \frac{r^2}{2} \right), \quad (2)$$

где ω - мощность дисклинации, R - внешний радиус экранирования, например, размер кристалла, $D = G / 2\pi(1-\nu)$, ν - коэффициент Пуассона.

Зная поля напряжений, нетрудно вычислить энергию упругого поля [15]. В результате для для погонной энергии W клиновидной дисклинации, расположенной в центре цилиндра радиуса R , имеем [9]

$$W = \frac{D\omega^2 R^2}{8}. \quad (3)$$

Видно, что энергия клиновых дисклиний нарастает с увеличением размеров тела достаточно быстро, как $\sim R^2$.

Это означает, что в реальности упругие поля дисклиний являются экранированными, т.е. в окрестности дисклинии возникают вторичные мезодефекты, которые и понижают общую энергию системы. Для иллюстрации рассмотрим образование оборванной субграницы в окрестности стыковой дисклинии, сформированной в ходе пластической деформации.

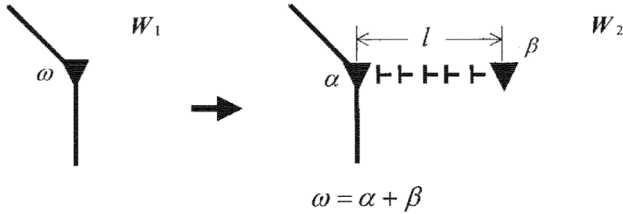


Рис. 3. Элементарный акт фрагментации путем образования дислокационной стенки в окрестности стыковой дисклинии.

Субграницу будем рассматривать как дислокационную стенку (рис.3), имеющую длину l и разориентировку $\theta = h/b$ (где h - расстояние между дислокациями в стенке). Тогда исходную дисклинию мощности ω и стенку можно в совокупности рассматривать как две частичные дисклинии мощности $\alpha = (1-\gamma)\omega$ и $\beta = \gamma\omega = \theta$, соответственно. Вторую дисклинию, смещенную относительно первой на расстояние l , можно рассматривать как отщепившуюся от материнской. Тогда минимум изменения энергии $\Delta W = W_2 - W_1$ при таком расщеплении, достигается при $\gamma \sim 0,5$. Таким образом, отщепление дисклинии примерно половинной мощности от материнской оказывается наиболее энергетически выгодным процессом.

Еще одним типичным мезодефектом является дисклинионный диполь. Если граница зерна имеет двойной излом, как это показано на рис.4, то на нем при пластической деформации формируются дисклинии, образующие диполь.

Несмотря на то, что эта система дисклиний является более экранированной, чем одиночная дисклиния, существует тенденция понижения и ее энергии путем дстройки диполя дислокационными границами разного знака, т.е. путем формирования полосы переориентации (рис.4). Впервые описание такого процесса в рамках дисклинионного подхода (как движение диполя частичных дисклиний) было сделано в работе [7].

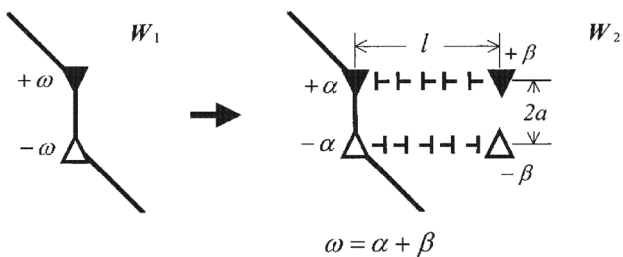


Рис. 4. Элементарный акт фрагментации от диполя частичных дисклиний путем образования полосы переориентации [7,8].

Сопреженным дефектом стыковых дисклиний при их формировании является планарный мезодефект типа плоского скопления (рис.1). Показано [14], что планарный мезодефект может инициировать формирование полосы переориентации подобно диполю частичных дисклиний.

Проведенный анализ, будучи сугубо статическим, не дает ответа на вопрос, как в окрестности мезодефектов динамически образуются субграницы, и почему они, будучи оборванными, являются устойчивыми. Ответ был дан в работах [11-14], где на основе кинетического подхода было проведено исследование самосогласованной коллективной динамики распределенного дислокационного ансамбля в упругом поле дисклиний и планарного мезодефекта.

3. Уравнения самосогласованной динамики дислокационного ансамбля в упругом поле мезодефектов

Поведение ансамбля дислокаций описывалось системой эволюционных уравнений для плотности дислокаций $\rho_a(\mathbf{r}, t)$ и функции напряжений Эйри $\psi^{eff}(\mathbf{r}, t)$ системы дефектов [12-14]:

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \text{div}[\rho_a M_a (\mathbf{f}_a + \mathbf{f}_a^{eff})] = F_a(\rho_a), \quad (4)$$

$$\mathbf{f}_a^{eff} = -b_a \nabla \frac{\partial \psi^{eff}}{\partial y}.$$

$$\psi^{eff}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \sum_{a=+} \int \rho_a(\mathbf{r}', t) \psi_a^e(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}', \quad (5)$$

где $\Psi(r)$ - функция напряжений Эйри клиновой дисклинии (или, в общем случае, мезодефекта), $\psi_a^e(\mathbf{r}) = -b_a D y \ln(r/R_c)$ - функция напряжений Эйри краевой дислокации [15], \mathbf{f}_a - сила Пича-Келера, обусловленная внешним полем $\sigma_e = \sigma_{xy}^{(e)}$, \mathbf{f}_a^{eff} - сила, действующая на дислокации со стороны упругого поля системы дефектов, M_a - тензор подвижности дислокаций, $F_a(\rho_a)$ - нелинейные функции, ответственные за кинетику дислокаций, \mathbf{r}_i - радиус-вектор, задающий расположение дисклиний.

Исследование (4), (5) показало, что дисклинии своими дальнедействующими полями напряжений возмущают ламинарный поток решеточных дислокаций, вызывая расслоение их однородного распределения и формируя в прилегающих объемах зерна области избыточной плотности дислокаций $I = \rho_+ - \rho_-$.

Для случая одиночной клиновой дисклинии (при $r_i=0$) решение имеет вид

$$I(x, y) = \frac{\omega}{\pi b r_d} \text{sh}(y/r_d) K_0(r/r_d), \quad (6)$$

где ω - мощность дисклинии, r_d - радиус экранирования упругого поля, $K_0(r)$ - функция Макдональда нулевого порядка. Соответствующий график зависимости $I=I(x, y)$ и эффективное поле сдвиговых компонент тензора напряжений $\sigma_{xy}^{eff} = -\partial^2 \psi^{eff} / \partial x \partial y$ показаны на рис.5.

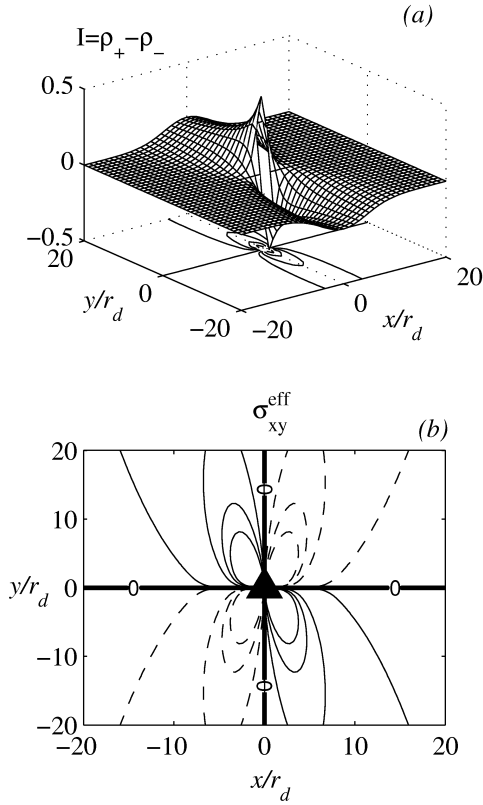


Рис. 5. Распределение нормированной на $I_c = \omega / \pi b r_d$ избыточной плотности дислокаций $I(x, y)$ согласно формуле (6) в упругом поле дисклинации (a) и изолинии компоненты σ_{xy}^{eff} тензора эффективных напряжений (b).

Оказалось, что такое перераспределение дислокаций в упругом поле дисклинации способно существенно понизить общую упругую энергию системы. Проведенный анализ [11] экранировки упругого поля клиновой дисклинации системой дислокаций позволил получить выражение для упругой энергии кристалла в области размера R

$$W_e = \frac{\sqrt{\pi}}{4} D \omega^2 r_d^2 \sqrt{\frac{R}{r_d}}.$$

Сравнивая эту энергию с энергией $U = D \omega R^2 / 8$ неэкранированной дисклинации, получаем, что имеет место существенное снижение упругой энергии для дисклинации, экранированной системой избыточных дислокаций, распределенных по закону (6). Действительно, если за характерный масштаб R взять размер зерна $D = 10 \mu\text{m}$, то эффект составляет $W_e / W \sim 3 \cdot 10^{-2}$.

Рассмотрим теперь экранирование упругого поля дисклинационного диполя, когда две клиновые дисклинации мощности ω разного знака, расположенные друг от друга на расстоянии $2a$ вдоль оси Ox , находятся в окружении ансамбля краевых дислокаций [12,13]. Аналогично предыдущему рассмотрению для избыточной плотности находим

$$I(r) = I_c \operatorname{sh}(y/r_d) \left[K_0(r_-/r_d) - K_0(r_+/r_d) \right], \quad (7)$$

где $r_+ = \sqrt{y^2 + (x+a)^2}$, $r_- = \sqrt{y^2 + (x-a)^2}$,

$\mathbf{a} = a \mathbf{e}_x$ — вектор смещения дисклинаций из начала координат, $2a$ — плечо дисклинационного диполя. График зависимости, соответствующий выражению (7), описывающему расслоение дислокационного заряда дисклинационным диполем показан на рис.6.

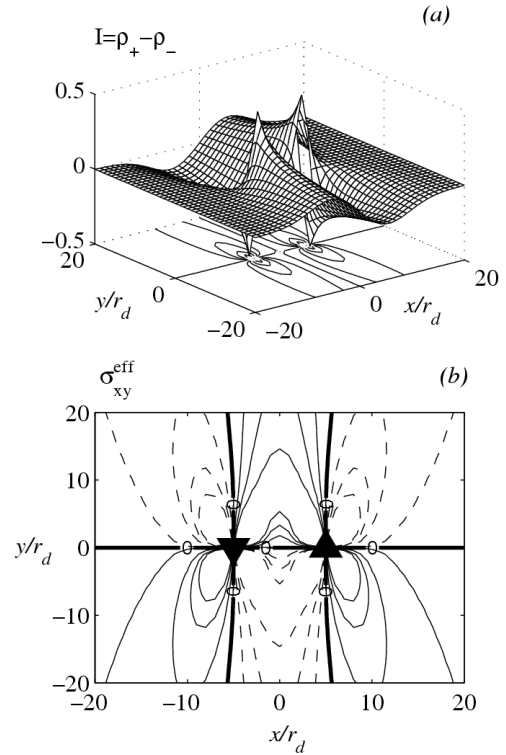


Рис. 6. Распределение нормированной избыточной плотности дислокаций $I(x, y)$ в поле дисклинационного диполя (a) и изолинии сдвиговой компоненты тензора эффективных напряжений (b)

Этот случай интересен тем, что дисклинационный диполь уже является экранированной системой [7]. Соответствующее выражение для энергии при $R > a^2/r_d$ имеет вид [12]

$$W_e = \frac{\pi D \omega^2 a r_d}{2} \left[1 - \frac{a}{\sqrt{\pi R}} \right], \quad (8)$$

где $2a$ — плечо дисклинационного диполя.

Если сравнить эту энергию с упругой энергией неэкранированного дислокациями дисклинационного диполя $W = D \omega^2 a^2 [2 \ln(R/2a) + 3]$ [7,8], то даже при значениях $a = 2r_d$ и $R/2a = 10$ их отношение оказывается достаточно малым: $W_e / W \sim 0,1$.

Исследование эффекта экранирования упругого поля планарного мезодефекта подвижными дислокациями дает аналогичный результат [14]. Изолинии сдвиговой компоненты тензора экранированных упругих напряжений показаны на рис. 7.

Соответственно, распределение избыточной плотности дислокаций $I(x, y)$ в поле планарного мезодефекта дается выражением [14]

$$I(r) = I_c \sum_{\alpha=\pm} \left[ch \frac{y_\alpha}{r_d} J_1(x, y_\alpha) + sh \frac{y_\alpha}{r_d} J_2(x, y_\alpha) \right],$$

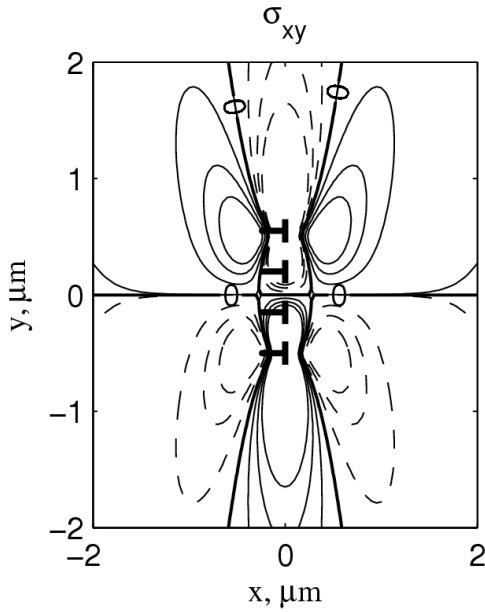


Рис. 7. Экранированное поле напряжений планарного мезодефекта при значении радиуса экранирования $r_d = 0,2 \mu\text{m}$, длине мезодефекта $L = 0,1 \mu\text{m}$, его мощности $\Omega = b/h = 0,02$ (h — расстояние между дислокациями в мезодефекте).

где

$$J_1(x, y_\alpha) = \int_0^x K_0(r_\alpha / r_d) \frac{dx}{r_d},$$

$$J_2(x, y_\alpha) = y_\alpha \int_0^x r_\alpha^{-1} K_1(r_\alpha / r_d) \frac{dx}{r_d},$$

и показано на рис. 8.

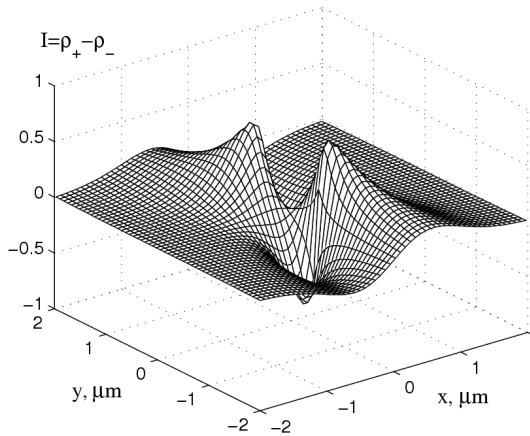


Рис. 8. Распределение избыточной плотности дислокаций $I(x, y)$ в поле планарного мезодефекта [14].

Полученные результаты позволяют провести энергетический анализ. На рис.9 показана зависимость энергии упругого поля W кристалла от размера пластической зоны R для двух случаев неэкранированного и экранированного упругого поля.

Проведенные исследования показывают, что экранирование первичных мезодефектов системой движущихся дислокаций во всех рассматриваемых случаях приводит к существенному понижению энергии упругого поля кристалла.

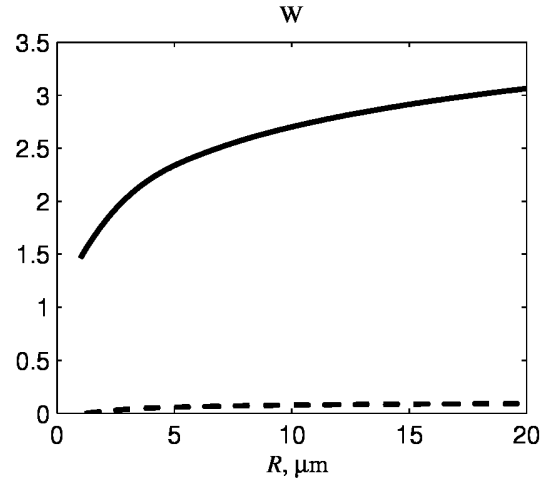


Рис. 9. Зависимость энергии упругого поля W (в единицах $D\Omega^2 L^2$) от размера пластической зоны R для двух случаев (при $L = 1 \mu\text{m}$): штриховая линия — случай экранированного поля при $r_d = 0,2 \mu\text{m}$, сплошная линия — случай неэкранированного поля [14].

4. Разориентация областей кристалла вблизи вторичных мезодефектов

Из полученных выше результатов следует, что дислокационное экранирование оказывается эффективным способом понижения упругой энергии деформируемого кристалла. Такое выгодное энергетическое состояние реализуется как неравновесное состояние в условиях самосогласованного пластического течения в окрестности первичных мезодефектов и при выраженной дислокационной кинетике.

Пользуясь выражением для избыточной плотности дислокаций нетрудно определить величину связанной с ней разориентировки кристалла. Так для отдельной дисклинации согласно (6), имеем

$$\theta_{st} = \frac{\omega}{\pi\beta} \int_0^\beta \int_{-\beta}^\beta \text{sh}(y') K_0(r') dx' dy', \quad (9)$$

где $\beta = R / 2r_d$, $y' = y / r_d$, $x' = x / r_d$, $r' = r / r_d$.

Анализ интеграла (9) показывает, что при $\beta \gg 1$ его значение стремится к значению $\theta_{st} = 0,5\omega$. Таким образом, дисклинация собирает вокруг себя дислокационный заряд, который создает разориентировку прилегающих к нему областей кристалла примерно равную половине мощности дисклинации.

Особенностью образующихся областей разориентации является то, что они формируются вдоль линий нулевого уровня экранированного поля напряжений σ_{xy}^{eff} дисклинации перпендикулярно действующей системе скольжения дислокаций (рис. 5b). Эти области являются сугубо динамическими образованиями и имеют кинетическую природу возникновения.

Для дисклинационного диполя кинетический эффект еще более нагляден (рис.6b). В этом случае области разориентации противоположного знака располагаются почти параллельно в соответствии с линиями нулевого уровня σ_{xy}^{eff} , в то время как в статике нулевые изолинии

поля напряжений σ_{xy} дисклинационного диполя расходятся под прямым углом [7].

Аналогичный эффект имеет место и для планарного мезодефекта. Действительно, планарный мезодефект мощности Ω на расстояниях существенно превышающих его длину L эквивалентен супердислокации с модулем вектора Бюргерса $B = \Omega L$ или диполю частичных дисклиний мощности $\omega = B/\Delta l$ где Δl - плечо диполя. Области разориентации (рис.8), формируемые экстремумами избыточной плотности дислокаций $I(x,y)$ располагаются вдоль линий нулевого уровня сдвиговой компоненты σ_{xy} экранированного упругого поля планарного мезодефекта (рис.7), подобно тому, как это имеет место для случая дисклинационного диполя (рис.6). Тогда разориентировка формируемых областей должна составлять $\theta \approx \omega / 2$ или

$$\theta \approx \frac{\Omega L}{2\Delta l},$$

что согласуется с результатами работы [16], где формирование субграниц в упругом поле планарного мезодефекта исследовалось методом компьютерного моделирования.

5. Выводы

Представлены результаты теоретических исследований, в которых развит кинетический подход к описанию формирования разориентированных областей кристалла вблизи мезодефектов:

1. Проведено аналитическое исследование самосогласованной динамики дислокационного ансамбля в поле первичных мезодефектов. Получены эффективные поля напряжений, учитывающие экранирующий эффект от системы распределенных дислокационных зарядов.

2. Показано, что рассмотренные мезодефекты вызывают расслоение однородного потока дислокаций и формируют области повышенной плотности дислокационного заряда. Такое перераспределение дислокаций эффективно экранирует упругие поля мезодефектов, существенно понижает энергию системы за счет формирования разориентированных областей вдоль линий экстремумов дислокационного заряда и создает предпосылки для формирования вторичных мезодефектов — оборванных субграниц. Таким образом, показана

кинетическая природа возникновения оборванных субграниц и процесса фрагментации.

3. Континуальное рассмотрение, проведенное в настоящей работе позволяет установить общие закономерности формирования дислокационных образований типа оборванных субграниц. Рассмотрение кинетики процессов формирования дислокационных структур указанного типа в рамках дискретного подхода было проведено в работах [16-19].

Литература

1. V.V. Rybin. Large plastic deformations and fracture of metals. M.: Metallurgia; 1986. (in Russian)
2. R.Z. Valiev, M.J. Zehetbauer, Y. Estrin, H.W. Höppel, Y. Ivanisenko, H. Hahn, et al. Advanced Engineering Materials 9, 527 (2007).
3. T.G. Langdon. Journal of Materials Science. 42, 3388 (2007).
4. A.A. Zisman, V.V. Rybin. Acta Mater. 4, 403 (1996).
5. V.V. Rybin, A.A. Zisman, N.Yu. Zolotarevsky. Acta Met. Mater. 41, 2211 (1993).
6. V.V. Rybin. Problems of material science, 1, 5 (2003).
7. V.I. Vladimirov, A.E. Romanov. Phys.Stat.Sol. (a). 20, 3114 (1978).
8. M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, A.E. Romanov, Klimanek P. Phys.Stat.Sol. (a). 193, 35 (2002).
9. A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova. Progress in Materials Science. 54, 740 (2009).
10. G.F. Sarafanov. Physics of the Solid State. 39, 1403 (1997).
11. G.F. Sarafanov, V.N. Perevezentsev. Technical Physics Letters 31, 936 (2005).
12. G.F. Sarafanov, V.N. Perevezentsev. Physics of the Solid State. 49, 1867 (2007).
13. V.N. Perevezentsev, G.F. Sarafanov. Problems of materials science. 4, 246 (2007).
14. G.F. Sarafanov, V.N. Perevezentsev. Physics of the Solid State. 51, 2309 (2009).
15. J.G. Hirth, J. Lothe. Theory of dislocations. McGraw-Hill; New-York; 1968.
16. G.F. Sarafanov, V.N. Perevezentsev. Technical Physics Letters. 35, 302 (2009).
17. G.F. Sarafanov, V.N. Perevezentsev. Technical Physics Letters, 33, 400 (2007).
18. V.N. Perevezentsev, G.F. Sarafanov. Mater. Sci. Eng (a). 503, 137 (2009).
19. G.F. Sarafanov, V.N. Perevezentsev, Y.V. Svirina. Technical Physics. 54, 549 (2009).