На правах рукописи

ДАНЕЙКО Ольга Ивановна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ЭЛЕМЕНТАРНОМ И ЛОКАЛИЗОВАННОМ СКОЛЬЖЕНИИ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ С НЕКОГЕРЕНТНОЙ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗОЙ

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск, 2005

Работа выполнена в Томском государственном архитектурно-строительном университете

Научный руководитель: зав. кафедрой теоретической механики Томского государственного архитектурно-строительного университета, доктор физико-математических наук, профессор Ковалевская Т.А.

Официальные оппоненты: заведующий лабораторией Сибирского физико-технического института, доктор физико-математических наук, профессор Чумляков Ю.И.

доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Томского государственного архитектурно-строительного университета Конева Н.А.

Ведущая организация: Алтайский государственный технический **университет им. И.И.Ползунова, г. Барнаул**

Защита состоится 20 октября 2005 г. в 14.30 на заседании диссертационного совета Д 212.267.07. в Томском государственном университете
по адресу: 634050, г. Томск, пр.Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного университета

Автореферат разослан ” ” 2005 г.

Учёный секретарь диссертационного Совета
доктор физико-математических наук И.В. Ивонин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Одной из основных тенденций в современном материаловедении является широкое использование высокопрочных гетерофазных материалов, постоянный прогресс в конструировании которых требует опережающего исследования фундаментальных физических процессов, происходящих в твердых телах при пластической деформации. Процессы пластической деформации в дисперсно-упрочненных сплавах осуществляются на различных структурных и масштабных уровнях и обусловлены несколькими явлениями, определяющими пластическое деформирование материалов: кристаллографическим скольжением, двойникованием, фазовым превращением, диффузионным массопереносом. Наиболее универсальным явлением, ответственным за пластическую деформацию кристаллов, является кристаллографическое скольжение. Основой элементарных процессов и механизмов пластической деформации скольжением является возникновение, размножение, движение и аннигиляция дефектов различного типа.

В связи с этим математическое моделирование механизмов, процессов и закономерностей пластической деформации является самостоятельной актуальной задачей и одновременно необходимым дополнением экспериментальных исследований, поскольку позволяет выявить роль различных факторов, таких как дефектное состояние сплава, характеристики упрочняющей фазы и материала матрицы, тип и параметры деформирующего воздействия, неоднородности пластической деформации в деформационном упрочнении и эволюции дефектной структуры дисперсно-упрочненных материалов.

Целью диссертационной работы является развитие модели пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов посредством учета особенностей локализации скольжения в зоне сдвига, исследование методами математического моделирования и вычислительного эксперимента закономерностей пластической деформации и процессов локализации скольжения в зоне сдвига в дисперсно-упрочненных материалах с г.ц.к. матрицей и недеформируемыми частицами упрочняющей фазы.

Для реализации цели исследования необходимо решить следующие ***задачи***:

1. Выявить посредством вычислительного эксперимента на основе математической модели пластической деформации скольжения в гетерофазных материалах с недеформируемыми частицами упрочняющей фазы роль различных механизмов и процессов пластической деформации скольжения в деформационном упрочнении и эволюции деформационной дефектной подсистемы.

2. Установить вклад дислокаций различного типа (сдвигообразующих, дислокаций в призматических петлях вакансионного и межузельного типа, вакансионных и межузельных диполей) в деформационное упрочнение гетерофазных материалов с недеформируемой упрочняющей фазой в процессе деформации при различных условиях.

3. Выявить факторы, определяющие локализацию скольжения в зоне сдвига, и построить модель, учитывающую критерии перехода от интервалов локализованного скольжения к интервалам элементарного скольжения.

4. Исследовать влияние масштабных характеристик второй фазы, параметров воздействия и исходного дефектного состояния материала на величину локализации скольжения и на протяженность интервалов локализованного и элементарного скольжения при различных температурах.

5. Провести исследование влияния локализации скольжения на деформационное упрочнение и эволюцию дефектной подсистемы дисперсно-упрочненных материалов.

Научная новизна и практическая значимость. На основе математической модели пластической деформации скольжения дисперсно-упрочненных материалов с некогерентной упрочняющей фазой проведено систематическое исследование влияния характеристик второй фазы, параметров воздействия и исходного дефектного состояния материала на кривые деформационного упрочнения и кинетику составляющих дефектной подсистемы. Выявлена роль различных механизмов и процессов пластической деформации скольжением в деформационном упрочнении гетерофазных материалов при различных температурах и скоростях деформации. Проанализированы вклады дислокаций различного типа в суммарную плотность дислокаций при различных степенях деформации, температурах и исходной дефектности материала.

Впервые в математической модели пластической деформации скольжения дисперсно-упрочненных материалов с некогерентной упрочняющей фазой учтена локализация скольжения в зоне сдвига в зависимости от соотношения масштабных характеристик упрочняющей фазы и дислокационной структуры. Показано, что пластическая деформация в дисперсно-упрочненных материалах может развиваться либо с выраженной локализацией скольжения в зоне сдвига, либо движением одиночных дислокаций.

Впервые исследовано влияние скорости и температуры деформации на локализацию скольжения в зоне сдвига. Изучено влияние характеристик второй фазы, параметров воздействия, исходного дефектного состояния материала на величину локализации (число дислокаций в зоне сдвига) и на протяженность интервалов локализованного и элементарного скольжения при различных температурах и скоростях деформации. Впервые рассмотрено влияние локализации скольжения в зоне сдвига на эволюцию дефектной подсистемы и на упрочнение гетерофазных материалов с недеформируемой второй фазой.

Полученные в работе результаты вносят вклад в построение теории пластичности и прочности материалов и могут быть использованы при разработке эффективных методов прогнозирования механических характеристик дисперсно-упрочненных сплавов и при создании материалов с заданными физико-механическими свойствами.

На защиту выносятся:

1. Математическая модель пластической деформации и деформационного упрочнения гетерофазных сплавов с учетом физических механизмов локализации скольжения в зоне кристаллографического сдвига.
2. Результаты сравнительного анализа роли различных механизмов и процессов пластической деформации скольжением в деформационном упрочнении и эволюции деформационной дефектной среды гетерофазных материалов с г.ц.к. матрицей, упрочненных недеформируемыми частицами.
3. Результаты исследования влияния масштабных характеристик упрочняющей фазы, обратных полей напряжений от дислокаций, температуры и скорости деформации на интенсивность генерации дислокаций источником и протяженность стадий локализованного и элементарного скольжения в гетерофазных материалах.
4. Результаты исследования влияния локализации скольжения на деформационное упрочнение и эволюцию дефектной подсистемы в монокристаллах гетерофазных материалов при разных температурах и скоростях деформации.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: Международных семинарах «Современные проблемы прочности» им. В.А. Лихачева (Великий Новгород, 1999, 2000,

2001); Международном семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 1998); Международной конференции «Релаксационные явления в твердых телах» (Воронеж, 1999); V-th Russian-Chinese International Symposium “ADVANCED Materials and processes” (Байкальск, 1999); Всероссийских конференциях молодых ученых «Физическая мезомеханика материалов» (Томск, 2000, 2003); Международном семинаре «Актуальные проблемы прочности» (Киев, 2001); Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике (Пермь, 2001); Международных конференциях молодых ученых по математике, математическому моделированию и информатике (Новосибирск, 2000, 2001, 2002); Всероссийской конференции «Дефекты структуры и прочность кристаллов» (Черноголовка, 2002); XXX Summer School “Advanced problems in Mechanics” (St. Petersburg, 2002); Fifth World Congress on Computational Mechanics (Vienna, Austria, 2002); Thirteenth International Conference on the Strength of Materials «Fundamental Aspects of the Deformation and Fracture of Materials» (Budapest, Hungary, 2003); XV Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (Тольятти, 2003); Международной конференции по физике кристаллов «Кристаллофизика 21-го века» (Москва, 2003); International Congress for Particle Technology (Nuremberg, Germany, 2004); Международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов» (Черноголовка, 2004).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 31 работе, из которых 10 статей и 21 – тезисы докладов.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав и списка литературы. Работа содержит 284 страницы, включая 123 рисунка и 3 таблицы. Список литературы включает 222 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** определена тема работы, обоснована ее актуальность, научная новизна и практическая значимость, сформулированы цель и задачи исследования, дана краткая аннотация разделов работы, сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава «Основные механизмы и закономерности пластической деформации г.ц.к. сплавов с некогерентными частицами» содержит обзор литературы, посвященной исследованию эволюции деформационной дефектной структуры материалов, упрочненных недеформируемыми частицами, особенностям неоднородности пластической деформации кристаллических материалов на разных масштабных и структурных уровнях. Рассмотрено развитие теоретических представлений об атомно-дислокационных механизмах пластической деформации, лежащих в основе математических моделей пластичности дисперсно-упрочненных материалов, начиная с работ Орована и до современных моделей пластичности кристаллов. На основе анализа современного состояния теоретических исследований механизмов и процессов пластической деформации в дисперсно-упрочненных материалах сформулирована цель и поставлены задачи исследования.

Во второй главе «Моделирование процессов деформационного упрочнения и эволюции деформационно-дефектной подсистемы дисперсно-упрочненного материала в условиях деформации с постоянной скоростью» методами вычислительного эксперимента с использованием математической модели пластической деформации скольжением в гетерофазных материалах с недеформируемыми частицами исследована роль различных механизмов и процессов пластической деформации скольжения.

Математическая модель является развитием моделей, основанных на концепции упрочнения и отдыха в формулировке М.А. Большаниной. Модель включа-

ет уравнения баланса сдвигообразующих дислокаций (плотность ρ_m), призматических дислокационных петель межузельного (ρ_P^i) и вакансионного (ρ_P^υ) типа, дислокаций в дипольных конфигурациях вакансионного (ρ_d^υ) и межузельного (ρ_d^i) типа, межузельных атомов (концентрация c_i), моновакансий ($c_{1\upsilon}$) и бивакансий ($c_{2\upsilon}$); а также уравнение, определяющее скорость деформации скольжения:

$$\frac{d\rho_m}{da} = (1-\omega_s P_{as})\frac{F}{Db} - \frac{2}{\dot{\varepsilon}}(1-\omega_s)\rho_m^2 b \min(r_a, \rho_m^{-1/2})(c_{2\upsilon}Q_{2\upsilon} + \tilde{c}_{1\upsilon}Q_{1\upsilon} + \tilde{c}_i Q_i) +$$

$$+\frac{2\alpha}{\dot{\varepsilon}} b\sqrt{\rho}(\rho_P^\upsilon(\tilde{c}_{1\upsilon}Q_{1\upsilon} + c_{2\upsilon}Q_{2\upsilon}) + \rho_P^i \tilde{c}_i Q_i) + \frac{2b}{\dot{\varepsilon} r_a}(\rho_d^i \tilde{c}_i Q_i + \rho_d^\upsilon(\tilde{c}_{1\upsilon}Q_{1\upsilon} + c_{2\upsilon}Q_{2\upsilon})),$$

$$\frac{d\rho_P^\upsilon}{da} = \frac{<\chi>\delta}{2\Lambda_P^2 b} - \frac{2\alpha}{\dot{\varepsilon}}\sqrt{\rho}\rho_P^\upsilon b(c_{2\upsilon}Q_{2\upsilon} + 2\tilde{c}_i Q_i + \tilde{c}_{1\upsilon}Q_{1\upsilon}),$$

$$\frac{d\rho_P^i}{da} = \frac{<\chi>\delta}{2\Lambda_P^2 b} - \frac{2\alpha}{\dot{\varepsilon}}\sqrt{\rho}\rho_P^i b(2c_{2\upsilon}Q_{2\upsilon} + \tilde{c}_i Q_i + 2\tilde{c}_{1\upsilon}Q_{1\upsilon}),$$

$$\frac{d\rho_d^\upsilon}{da} = \frac{1}{\Lambda_P b} - \frac{2b}{\dot{\varepsilon} r_a}\rho_d^\upsilon(c_{2\upsilon}Q_{2\upsilon} + \tilde{c}_i Q_i + \tilde{c}_{1\upsilon}Q_{1\upsilon}), \qquad (1)$$

$$\frac{d\rho_d^i}{da} = \frac{1}{\Lambda_P b} - \frac{2b}{\dot{\varepsilon} r_a}\rho_d^i(c_{2\upsilon}Q_{2\upsilon} + \tilde{c}_i Q_i + \tilde{c}_{1\upsilon}Q_{1\upsilon}),$$

$$\frac{dc_i}{da} = q\frac{\tau_{dyn}}{G} - \frac{c_i}{\dot{\varepsilon}}[((1-\omega_s)\rho_m + \rho_P + \rho_d)b^2 Q_i + Q_{1\upsilon}\tilde{c}_{1\upsilon} + Q_{2\upsilon}c_{2\upsilon} + Q_i(\tilde{c}_{1\upsilon} + c_{2\upsilon})],$$

$$\frac{dc_{2\upsilon}}{da} = \frac{5q}{6}\frac{\tau_{dyn}}{G} - \frac{1}{\dot{\varepsilon}}[(((1-\omega_s)\rho_m + \rho_P + \rho_d)b^2 + \tilde{c}_i)Q_{2\upsilon}c_{2\upsilon} + Q_i c_{2\upsilon}\tilde{c}_i - Q_{1\upsilon}\tilde{c}_{1\upsilon}{}^2],$$

$$\frac{dc_{1\upsilon}}{da} = \frac{q\tau_{dyn}}{6G} - \frac{1}{\dot{\varepsilon}}[(((1-\omega_s)\rho_m + \rho_P + \rho_d)b^2 + \tilde{c}_i + \tilde{c}_{1\upsilon})Q_{1\upsilon}c_{1\upsilon} + Q_i\tilde{c}_i c_{1\upsilon} - (Q_{2\upsilon} + Q_i)\tilde{c}_i c_{2\upsilon}],$$

$$\dot{\varepsilon} = \frac{8}{\pi}\frac{\nu_D B\beta_r^{1/2}}{\xi^{1/6}F(1-\beta_r)}\frac{\tau^3(((1-\beta_r)\rho_m + \rho_P + \rho_d)(\tau-\tau_a))^{1/3}}{G^{4/3}b^{1/3}(\tau^2 - G^2b^2\xi\beta_r\rho_m)\rho_m{}^{1/2}}\exp\left[-\frac{0{,}2Gb^3 - (\tau-\tau_a)\Lambda b^2}{kT}\right].$$

Здесь a – величина сдвига; $\rho=\rho_m+\rho_d+\rho_p$ – суммарная плотность дислокаций; δ - диаметр частиц упрочняющей фазы; Λ_p - расстояние между частицами; τ - приложенное напряжение; τ_{dyn} – напряжение, избыточное над статическим сопротивлением движению дислокаций; D – диаметр зоны сдвига; b – модуль вектора Бюргерса; $Q_j = Z_j\nu_D\exp(-U_j^{(m)}/kT)$, $U_j^{(m)}$ - энергия миграции точечных дефектов j-го типа; $\tilde{c}_j=c_j+c_j^{(0)}$, $c_j^{(0)}$ - концентрация термодинамически равновесных точечных дефектов j-го типа, $j=i, \upsilon$; Z_j - число мест, возможных для прыжка дефекта; ξ - множитель Смоллмэна $(\xi\approx0{,}5)$; ν_D - частота Дебая; k – постоянная Больцмана; T – температура деформации; $<\chi>$ - параметр, характеризующий “геометрию” дислокаций на частицах; параметр F определяется формой сдвигообразующих дислокационных петель и их распределением в зоне сдвига; B – параметр, определяемый вероятностью образования дислокационных барьеров, ограничивающих зону сдвига; G – модуль сдвига матрицы; q - параметр, определяющий число дислокаций в зоне сдвига и интенсивность генерации точечных дефектов; ω_s – доля винтовых дислокаций; β_r - доля реагирующих дислокаций леса; Λ - длина свободного дислокаци-

онного сегмента; α - параметр междислокационных взаимодействий; τ_a - атермическая составляющая сопротивления движению скользящей дислокации.

В модели учитывается, что при достижении в материале критической плотности дислокаций ρ_c, величина которой определяется масштабными характеристиками упрочняющей фазы, начинается формирование дислокационных дипольных структур. Уравнение для скорости деформации $\dot{\varepsilon}$ записано в предположении, что время формирования зоны сдвига определяется временем термоактивируемого продвижения дислокационного сегмента-источника до преодоления им критической конфигурации. Результаты расчетов получены для случая деформирования кристалла с постоянной скоростью деформации $\dot{\varepsilon} = const$.

Для исследования роли механизмов генерации и аннигиляции деформационных дефектов в деформационном упрочнении и эволюции дефектной структуры проведены расчеты с использованием моделей, построенных на основе учета в базовой модели различного набора механизмов генерации и аннигиляции (табл. 1).

Таблица 1

Варианты математической модели пластической деформации дисперсно-упрочненных ГЦК монокристаллов

Характеристики модели	**Номер модели**						
	1	2	3	4	5	6	7
Переменные модели							
Дислокации:							
сдвигообразующие	+	+	+	+	+	+	+
вакансионные призматические петли	+	+	+	+	+	+	+
межузельные призматические петли	+	+	+	+	+	+	+
вакансионные диполи	+	+	+	+	+	+	+
межузельные диполи	+	+	+	+	+	+	+
Точечные дефекты:							
вакансии	+	+	+	+	+	+	+
бивакансии	+	+	+	+	+	+	+
межузельные атомы	+	+	+	+	+	+	+
Зоны сдвига							
Размер определяется:							
дислокационными барьерами	+	+	+	+	+		+
пробегом винтовых дислокаций						+	
Механизмы аннигиляции							
Поперечное скольжение винтовых дислокаций		+	+	+	+	+	+
Переползание невинтовых дислокаций			+	+	+	+	+
Взаимная аннигиляция точечных дефектов				+	+	+	+
Аннигиляция с участием термодинамически равновесных точечных дефектов					+	+	+
Точечные дефекты							
Генерация моновакансий и бивакансий в соотношении 1/6 и 5/6	+	+	+	+	+	+	
Генерация моновакансий и бивакансий равновероятна							+

Показано, что генерация (модель 1) сдвигообразующих дислокаций (в отличие от других типов дефектов) тем интенсивнее, чем больше расстояние между частицами упрочняющей фазы и чем меньше размер частиц (рис. 1*б*). Скорость накопления дислокаций в призматических петлях вакансионного и межузельного типов увеличивается при увеличении размеров частиц упрочняющей фазы и при

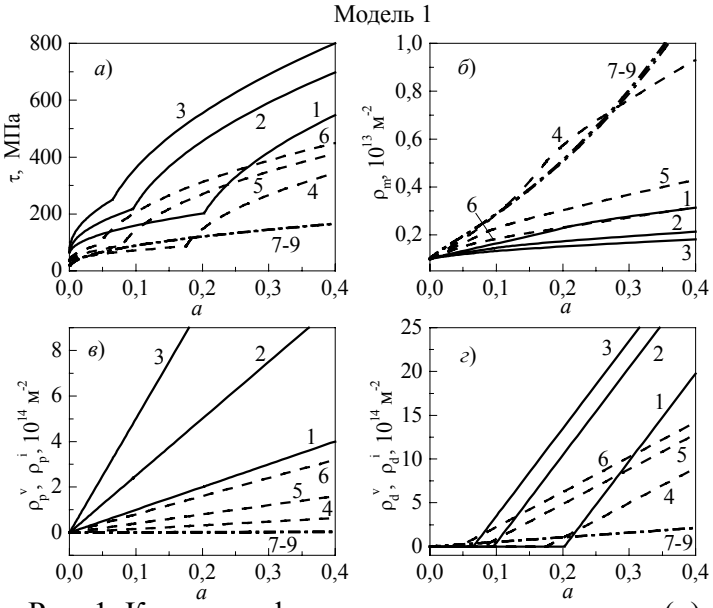


Рис. 1. Кривые деформационного упрочнения (*а*); зависимость плотности сдвигообразующих дислокаций (*б*), призматических петель (*в*) и диполей (*г*) от степени деформации. Медная матрица, размер частиц (мкм): *1, 4, 7* – 0,01; *2, 5, 8* – 0,05; *3, 6, 9* – 0,1; расстояние между ними (мкм): *1, 2, 3* – 0,4; *4, 5, 6* – 1; *7, 8, 9* – 7,5.

уменьшении расстояний между ними (рис. 1*в*). Скорость накопления дислокаций в дипольных конфигурациях уменьшается при увеличении расстояния между упрочняющими частицами, при этом диполи появляются при меньших степенях деформации (рис. 1*г*). Напряжение возрастает в процессе деформации при всех температурах и масштабных характеристиках упрочняющей фазы (рис. 1*а*). Излом на кривых деформационного упрочнения обусловлен достижением в материале критической плотности дислокаций ρ_c в процессе деформации и, соответственно, началом формирования дипольных конфигураций.

Аннигиляция винтовых дислокаций поперечным скольжением (модель 2) незначительно снижает интенсивность деформационного упрочнения и плотность всех составляющих деформационной дефектной подсистемы.

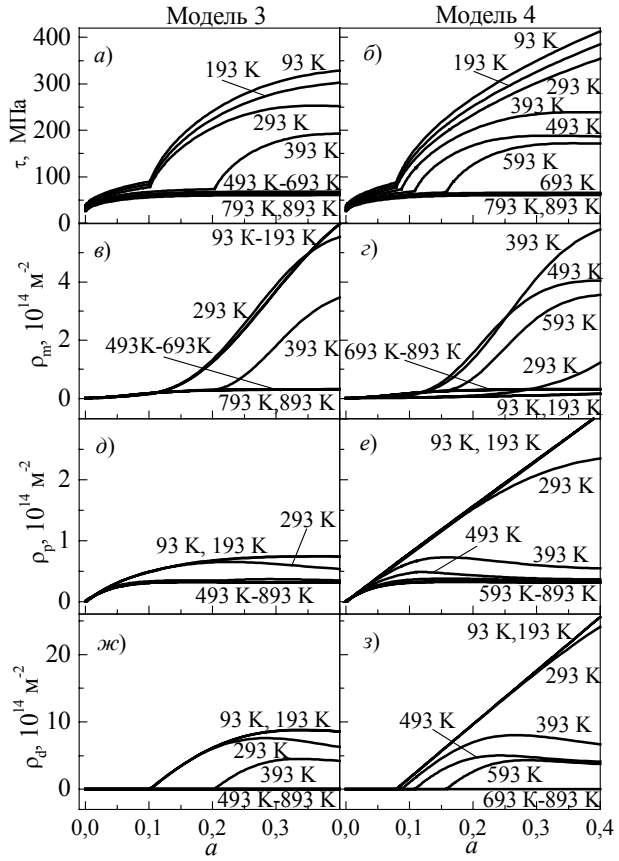


Рис. 2. Кривые деформационного упрочнения (*а, б*); зависимость плотности матричных дислокаций (*в, г*), призматических петель (*д, е*), дислокационных диполей (*ж, з*) от степени деформации. Материал на основе меди, $\delta = 0{,}05$ мкм, $\Lambda_p = 1$ мкм.

При учете аннигиляции невинтовых дислокаций переползанием за счет осаждения деформационных точечных дефектов (модель 3) деформационное упрочнение значительно уменьшается (рис. 2). Наблюдается тенденция к выходу кривых на стационарное состояние. Уменьшается интенсивность накопления дислокаций всех типов, кроме сдвигообразующих. Плотность ρ_m сдвигообразующих дислокаций интенсивно увеличивается за счет перехода разрастающихся призматических петель и диполей в разряд сдвигообразующих дислокаций.

Учет взаимодействия между точечными дефектами (модель 4) приводит к повышению деформирующего напряжения и плотностей составляющих дислокационной подсистемы при всех температурах (рис. 2). Термодинамически равновесные точечные дефекты играют роль в аннигиляционных процессах только при высоких

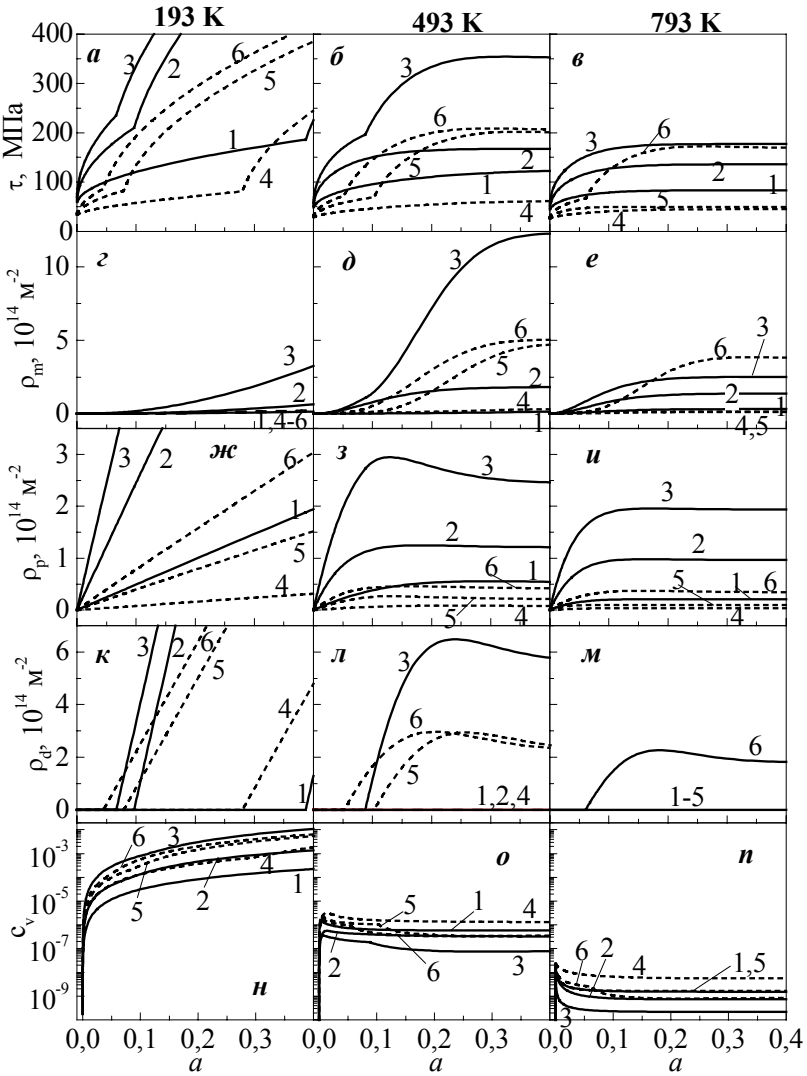


Рис. 3. Кривые деформационного упрочнения (*а, б, в*) и зависимость плотности сдвигообразующих дислокаций (*г, д, е*) призматических петель (*ж, з, и*), диполей (*к, л, м*), концентрации вакансий (*н, о, п*) от степени деформации для сплава на основе меди при разных температурах деформации. Расстояние между частицами: сплошная линия – 0,4 мкм; пунктирная линия – 1 мкм. Диаметр частиц δ (мкм): *1, 4* – 0,01; *2, 5* – 0,05; *3, 6* – 0,1 , скорость деформации 10^{-2} с$^{-1}$.

температурах (модель 5): плотности составляющих дислокационной подсистемы и напряжение течения в материале уменьшаются при учете в модели термодинамически равновесных точечных дефектов.

Исследование влияния масштабных характеристик упрочняющей фазы, параметров деформирующего воздействия и исходного состояния дефектной подсистемы на модельные кривые деформационного упрочнения и эволюцию составляющих деформационной дефектной подсистемы монокристаллов гетерофазных материалов показало, что скорость деформационного упрочнения возрастает при увеличении размера частиц при всех температурах деформации (рис. 3*а*, *б*, *в*). Увеличение расстояния между частицами и уменьшение размера частиц при разных температурах деформации существенно снижают плотность дислокаций в призматических петлях (рис. 3*ж*, *з*, *и*), так как уменьшение объемной доли упрочняющих частиц заметно снижает интенсивность генерации дислокационных призматических петель как вакансионного так и межузельного типа. При уменьшении размера частиц плотность дислокационных диполей при данной степени деформации, как правило, уменьшается при всех температурах (рис. 3*к*, *л*, *м*). При средних и высоких температурах деформации в материалах с мелкими частицами ($\delta < 0{,}05$ мкм, медная матрица) дислокационные диполи не образуются (рис. 3*л*, *м*). В материале с более крупными частицами критическая плотность дислокаций ρ_c, после которой начинается образование диполей, достигается при более низких степенях деформации (рис. 3*к*, *л*, *м*, кривые 3, 6). При увеличении расстояния между частицами критическая плотность дислокаций ρ_c в материале достигается при меньшей степени деформации и, следовательно, дислокационные диполи в таких сплавах формируются на более ранних стадиях деформации. В связи с этим обнаружена ситуация, когда в материале с

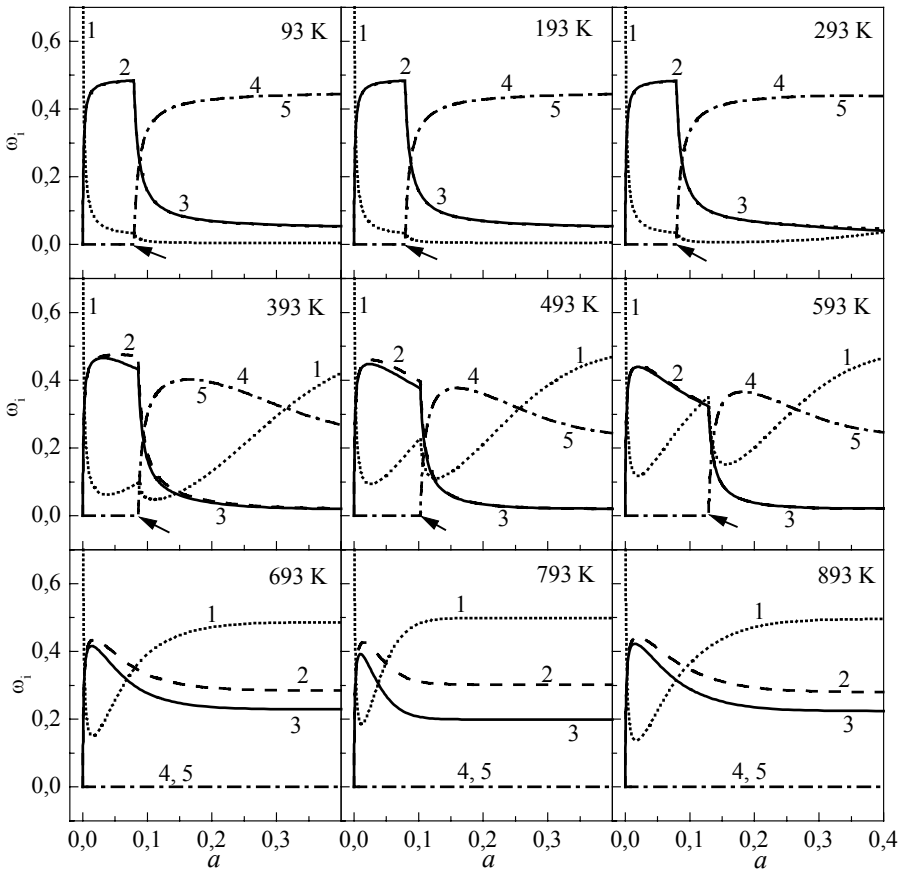


Рис. 4. Вклад плотности дислокаций различного типа в общую плотность дислокаций при разных температурах деформации; $\omega_i = \rho_i / \rho$, где ρ - общая плотность дислокаций, ρ_i - плотность дислокаций соответствующего типа: 1 – матричные дислокации, 2, 3 - призматические петли вакансионного и межузельного типа, 4, 5 – дислокации в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа. Дисперсно-упрочненный материал на основе меди, $\delta = 0{,}05$ мкм, $\Lambda_p = 1$ мкм, скорость деформации 10^{-2} с$^{-1}$.

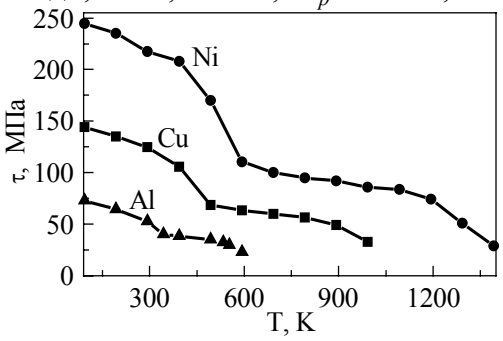


Рис. 5. Температурная зависимость напряжения течения в дисперсно-упрочненных материалах с разными г.ц.к. матрицами при δ=0,05 мкм, Λ_P=1 мкм, *a*=0,1.

меньшей объемной долей частиц деформационное упрочнение оказывается более высоким, чем в сплаве с большей объемной долей (рис. 3*а,* кривые 4, 1, рис. 3*б,* кривые 5, 2). Такой эффект наблюдался экспериментально[1]. При больших расстояниях между частицами деформация может начаться сразу в закритической области, так как величина ρ_c может оказаться меньше начальной плотности дислокаций.

Основной вклад в плотность дислокаций (рис. 4) при малых степенях деформации (*a*<0,08) вносят призматические петли. При низких и высоких температурах при деформациях выше 0,1 вклад дислокаций разного типа в суммарную плотность не изменяется. При средних температурах (393…593 К) наблюдается многократная смена в течение деформации доминирующих элементов дислокационной структуры. При низких температурах (93…293 К) дислокации в дипольных конфигурациях вносят определяющий вклад в суммарную плотность дислокаций на протяжении практически всей закритической области плотности дислокаций (рис. 4). При высоких температурах (693…893 К), когда диполи не образуются, сдвигообразующие дислокации и призматические петли вносят соизмеримый вклад в общую плотность дислокаций.

Изменение ***материала матрицы*** в используемой модели определяется из-

[1] Humphreys F.J., Hirsch P.B. // Phil. Mag. – 1978. – Vol. 34. – P. 373-399.

менением модуля сдвига матрицы, энергий образования и энергий активации миграции точечных дефектов различного типа. В материалах с разной г.ц.к. матрицей качественные закономерности поведения кривых, описывающих температурную зависимость напряжения течения (рис. 5) и зависимости плотностей различных составляющих дефектной подсистемы от степени деформации аналогичны. Абсолютные значения напряжения течения при данной температуре и при заданной степени деформации для сплавов с более высоким модулем сдвига матрицы выше, чем с низким (рис. 5).

Предел текучести в дисперсно-упрочненном сплаве увеличивается при уменьшении температуры деформации и при уменьшении расстояния между упрочняющими частицами. Эти результаты согласуются с экспериментальными данными (рис. 6) для дисперсно-упрочненного монокристалла меди. Масштабные характеристики упрочняющей фазы соответствуют использованным в эксперименте[2], начальная плотность дислокаций 10^{11} м$^{-2}$, скорость деформации $1{,}3\cdot10^{-4}$ с$^{-1}$.

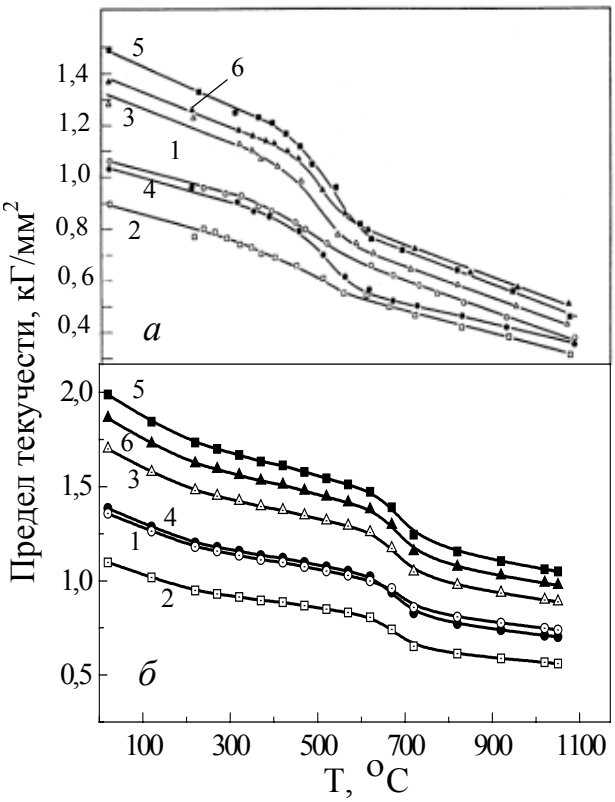


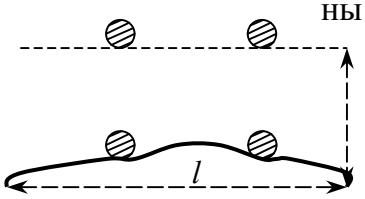
Рис. 6. Температурная зависимость предела текучести, *а* – эксперимент, *б* – расчетные кривые. Дисперсно-упрочненный монокристалл меди с диаметром частиц (мкм): 1 – 0,056; 2 – 0,073; 3 – 0,068; 4 – 0,087; 5 – 0,075; 6 – 0,081 и расстоянием между частицами (мкм): 1 – 1,45; 2 – 1,94; 3 – 1,16; 4 – 1,49; 5 – 0,99; 6 – 1,07.

Исходное дефектное состояние дисперсно-упрочненного материала оказывает существенное влияние на процесс пластической деформации на начальной стадии. Напряжение течения, плотность дислокаций различного типа и концентрация деформационных точечных дефектов имеют стационарные значения, которые понижаются при повышении температуры деформирования. При низких температурах деформирующее напряжение, плотность дислокаций различного типа и концентрации точечных дефектов растут с деформацией при всех значениях исходной плотности дислокаций. При повышении температуры наблюдаются интервалы начальных значений плотности дислокаций, для которых плотности различных составляющих дислокационной подсистемы и концентрации точечных дефектов снижаются с ростом степени деформации, приближаясь к стационарному значению; наблюдается деформационное разупрочнение. В гетерофазных материалах, в которых начальная плотность дислокаций различается на несколько порядков величины ($\rho_0 = 10^9 \ldots 10^{15}$ м$^{-2}$), при достижении деформации $a \approx 0{,}2$ текущая плотность дислокаций находится в пределах одного порядка величины. Экспериментально в дисперсно-упрочненных материалах наблюдается достаточно однородная дефектная среда до глубоких деформаций.

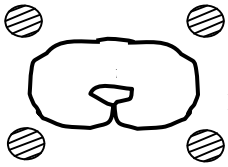
[2] Shewfelt R.S.W., Brown M.L. // Phil. Mag. - 1974. - Vol. 30. - N.5. - P. 1135-1145.

Соотношение масштабных характеристик	Конфигурация	Интервалы плотности дислокаций
$l_S >> \Lambda_p - \delta$ $y > \Lambda_p - \delta$		$\rho_0 < \rho < \rho_{Or}$ I интервал локализации скольжения
$\Lambda_p - \delta \le l_S$ $l_S \le 2\Lambda_p - \delta$		$\rho_{Or} < \rho < \rho_S$ интервал элементарного скольжения
$l_S < \Lambda_p - \delta$		$\rho_S < \rho < \rho_M$ II интервал локализации скольжения

Глава 3. «Моделирование процессов формирования зоны сдвига в дисперсно-упрочненных сплавах». Зона сдвига, являющаяся базовым структурным элементом при построении модели пластической деформации гетерофазных материалов, формируется, как правило, серией сдвигообразующих дислокаций, испущенных дислокационным источником. Это является локализацией деформации на микроуровне – локализацией скольжения в зоне сдвига. Продуктивность дислокационного источника обусловлена изменением конфигурации сегмента источника и его дислокационного окружения, которое сопровождается снятием блокировки исходно неподвижного источника. В работе исследованы факторы, характерные для дисперсно-упрочненных материалов, которые влияют на локализацию скольжения в зоне сдвига. Выявлены интервалы плотностей дислокаций, в которых осуществляется локализация скольжения в зоне сдвига (рис. 7) или элементарное скольжение (зона сдвига формируется движением одиночных дислокаций).



Процессы формирования зоны сдвига могут заметно различаться в зависимости от соотношения (рис. 7) масштабных характеристик дислокационной структуры (длина источника, расстояние между дислокациями) и структуры упрочняющей фазы (размеры и форма частиц, расстояние между частицами). Также значительное влияние на наличие и протяженность стадий локализованного и элементарного скольжения оказывают обратные поля напряжений от дислокаций.



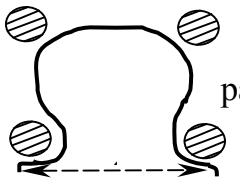


Рис. 7. Критические конфигурации дислокационных сегментов-источников в различных интервалах плотностей дислокаций.

Установлено, что существует несколько сценариев развития процесса пластической деформации в дисперсно-упрочненных материалах, включающих различные стадии пластической деформации в разных сочетаниях: 1) сначала I интервал локализации скольжения, затем интервал элементарного скольжения, затем II интервал локализованного скольжения; 2) I интервал локализованного скольжения и интервал элементарного скольжения; 3) сначала интервал элементарного скольжения, затем стадия локализованного скольжения; 4) элементарное скольжение, I интервал локализованного скольжения, снова элементарное скольжение, II стадия локализованного скольжения; 5) деформация протекает полностью в условиях элементарного скольжения и 6) наблюдается только локализованное скольжение. Чередование стадий пластической деформации зависит от соотношения масштабных характеристик упрочняющей фазы и началь-

ной плотности дислокаций. В сплавах с крупными частицами в процессе деформации происходит интенсивное упрочнение зоны сдвига, что влечет за собой «запирание» источника и невозможность локализованного скольжения. В мелкодисперсных материалах, процесс локализации скольжения в зоне сдвига при высоких и средних температурах также полностью подавлен, деформация осуществляется элементарным скольжением.

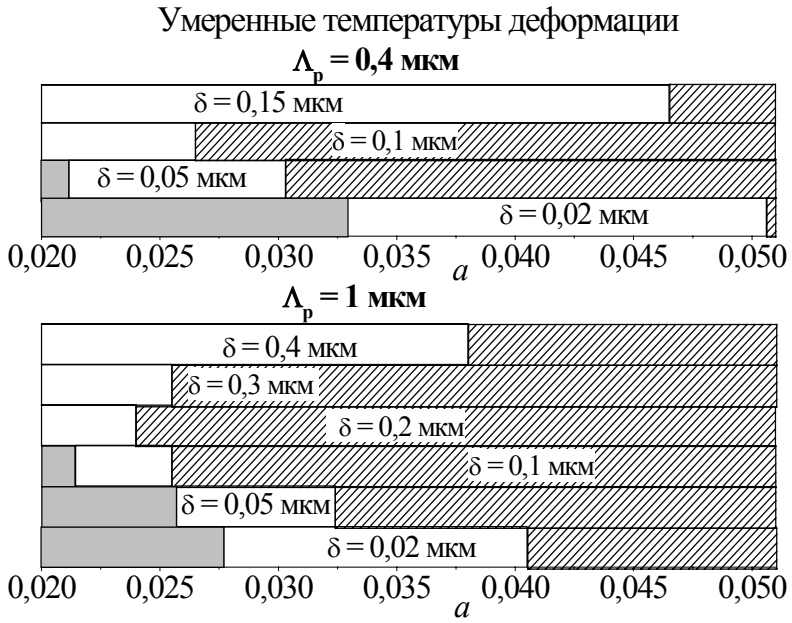


Рис. 8. Протяженность I (тёмные прямоугольники) и II (заштрихованные прямоугольники) интервалов локализованного скольжения и интервала элементарного скольжения в материале на основе меди с различными масштабными характеристиками упрочняющей фазы.

Протяженность интервалов локализованного и элементарного скольжения существенно зависит от размера упрочняющих частиц, расстояния между ними и температуры деформации (рис.8). При возрастании размера частиц δ наблюдается уменьшение протяженности I интервала локализованного скольжения вплоть до его полного исчезновения. Протяженность стадии элементарного скольжения изменяется немонотонно при увеличе-

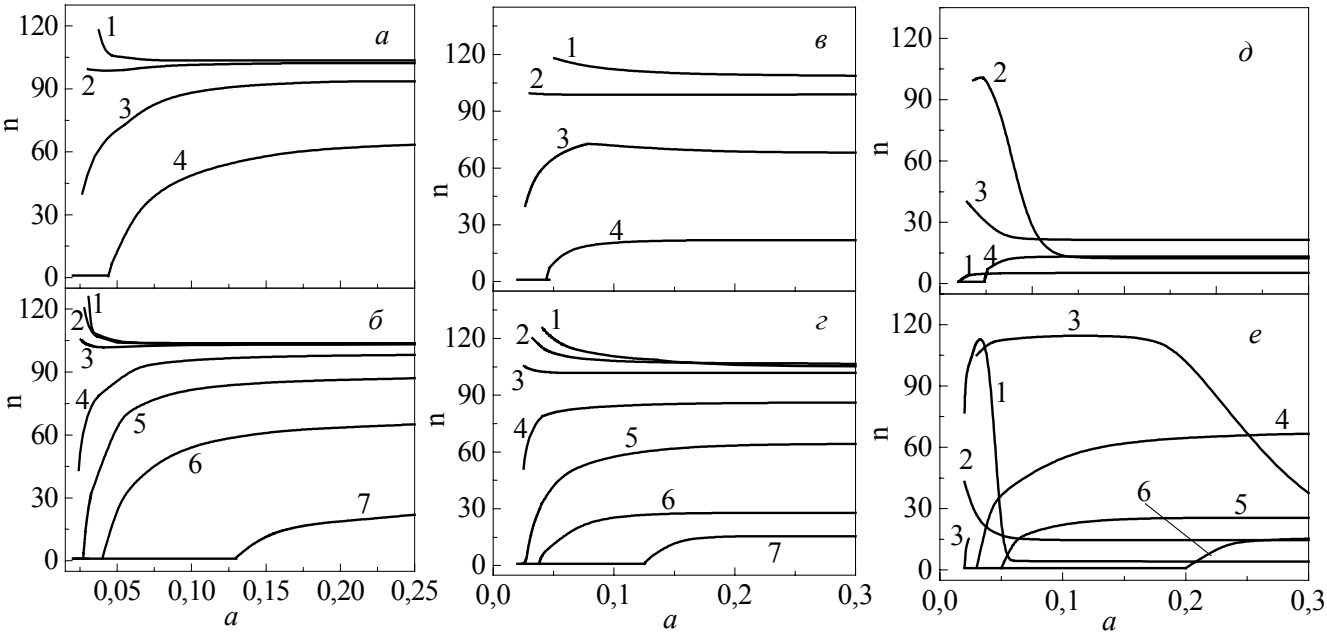


Рис. 9. Зависимость числа дислокаций в зоне сдвига от степени деформации в дисперсно-упрочненном материале на основе меди с различными масштабными характеристиками упрочняющей фазы при низких (*а, б*), умеренных (*в, г*) и высоких (*д, е*) температурах деформации. Расстояние между частицами, мкм: *а, в, д* - 0,4; *б, г, е* - 1. Диаметр частиц (мкм): 1 – 0,02; 2 – 0,05; 3 – 0,1; 4 – 0,15, 5 – 0,2, 6 – 0,3; 7 – 0,4.

нии размера частиц: сначала несколько уменьшается, затем увеличивается, вплоть до полного вытеснения стадии локализации.

Получено соотношение для числа дислокаций *n*, определяющего продуктивность дислокационного источника и, соответственно, величину локализации в зоне сдвига:

$$n=\frac{1-\nu}{2-\nu}\pi D\left\{\frac{\Delta\tau_{st}}{Gb}-\left[(\Lambda_p-\delta)\left(\pi\frac{1-\nu}{2-\nu}\frac{\Lambda_p-\delta}{\delta}-1\right)\right]^{-1}-\frac{\pi}{12}\frac{2-\nu}{1-\nu}\frac{\delta^2}{\Lambda_p^{\,3}}\left[2+\frac{\sqrt{3}G}{\tau+Gb/\delta}\left(\frac{1}{50}-\frac{\gamma}{Gb}\right)\right]\right\}, \quad (2)$$

где ν - коэффициент Пуассона, γ - энергия дефекта упаковки, $\Delta\tau_{st}$ - избыточное напряжение старта источника.

Исследовано влияние на величину локализации скольжения масштабных характеристик упрочняющей фазы, температуры, скорости и степени деформации. Установлено, что при увеличении размеров частиц, уменьшении расстояния между ними и повышении температуры снижается величина локализации скольжения (рис. 9). Наблюдается различный характер зависимости *n(a)*: при умеренных и низких температурах и малых размерах частиц значения *n(a)* монотонно уменьшаются, в материалах с более крупными частицами значения *n(a)* монотонно увеличиваются, выходя на некоторый стационар (рис. 9 *а-г*). При высоких температурах наблюдается более сложное поведение кривых (рис. 9 *д*, *е*). Вид кривых *n(a)* соответствует экспериментальным данным о поведении величины сдвига в следе скольжения для дисперсно-упрочнённых сплавов.

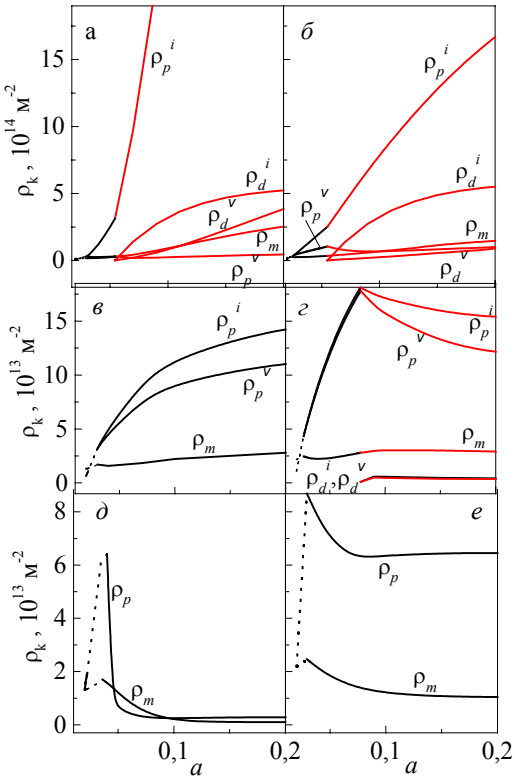


Рис. 10. Зависимость плотности дислокаций различного типа от степени деформации в сплаве на основе меди на стадии локализованного (сплошная линия) и элементарного (точки) скольжения. Расстояние между частицами 0,4 мкм, диаметр частиц (мкм): *а, в, д* – 0,05; *б, г, е* – 0,1. Низкие (*а, б*), умеренные (*в*, *г*) и высокие (*д, е*) температуры.

Четвертая глава «Математическое моделирование эволюции дислокационной подсистемы дисперсно-упрочненных гцк монокристаллов на стадиях локализованного и элементарного скольжения в зоне сдвига» посвящена исследованию влияния процесса локализации скольжения на эволюцию дефектной подсистемы и деформационное упрочнение дисперсно-упрочненного материала при разных температурах деформации в зависимости от масштабных характеристик упрочняющей фазы.

Поведение кривых различно в областях элементарного и локализованного скольжения и зависит от температуры и размера частиц. *При низких температурах* являются подвижными и участвуют в аннигиляционных процессах только межузельные атомы. Здесь основной вклад в накопление дислокаций дают межузельные призматические петли (рис. 10*а, б*), рост их плотности значительно выше на стадии локализованного скольжения (рис. 10*а, б,* сплошная линия). *При умеренных температурах* вклад в накопление плотности дислокаций вносят и межузельные, и вакансионные призматические петли, а также и сдвигообразующие дислокации, хотя плотность последних несколько ниже плотности дислокаций в приз-

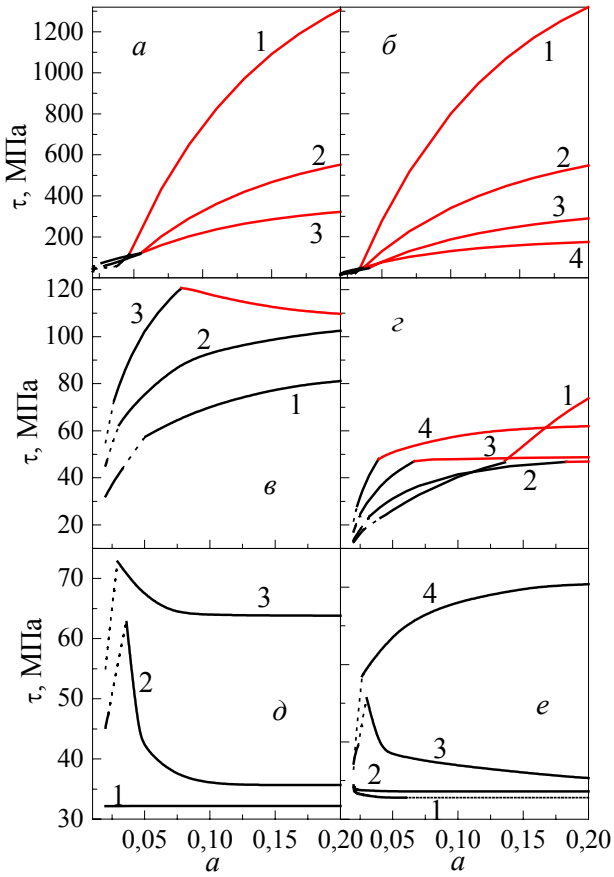


Рис. 11. Кривые деформационного упрочнения для сплава на основе меди с частицами второй фазы диаметром (мкм): 1 – 0,02; 2 – 0,05; 3 – 0,1; 4 – 0,2; расположенными на расстоянии (мкм): *а, в, д* – 0.4, *б, г, е* - 1. Низкие (*а, б*), умеренные (*в, г*) и высокие (*д, е*) температуры деформации.

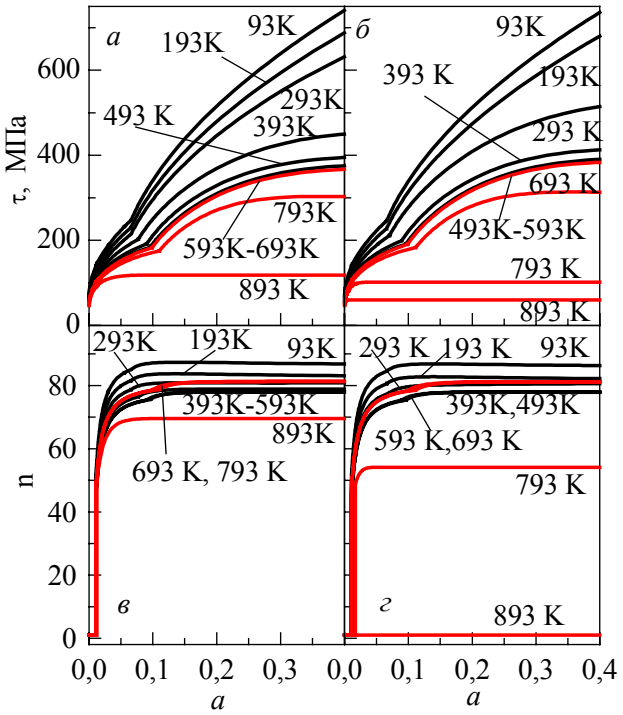


Рис. 12. Кривые деформационного упрочнения (*а, б*) и величина локализации скольжения (*в, г*) в дисперсно-упрочненном материале с медной матрицей, частицами диаметром 0,1 мкм и расстоянием между ними 0,4 мкм при различных температурах деформации. Скорость деформации (c^{-1}): *а, в* – 10^{-2}; *б, г* – 10^{-4}.

матических петлях (рис. 10*в, г*). *При высоких температурах* из-за мощных аннигиляционных процессов в интервале локализованного скольжения наблюдается довольно значительное снижение плотности и геометрически необходимых, и сдвигообразующих дислокаций (рис. 10*д, е*). Наибольший рост плотности геометрически необходимых и сдвигообразующих дислокаций наблюдается на стадии элементарного скольжения. Это связано с заметным ослаблением аннигиляционных процессов, обусловленным уменьшением концентрации деформационных точечных дефектов по сравнению со стадией локализованного скольжения.

Кривые деформационного упрочнения, соответствующие изменяющейся деформационно-дефектной подсистеме, рассчитаны для материалов с разными масштабными характеристиками упрочняющей фазы. На стадиях локализованного и элементарного скольжения они имеют различное поведение, которое зависит ещё и от температуры деформации (рис. 11). При *низких температурах* (в отличие от деформации при *средних и высоких температурах*) на стадии элементарного скольжения коэффициент деформационного упрочнения ниже, чем на стадии локализованного скольжения. В некоторых сплавах (рис. 11 *в, д, е*) при средних и высоких температурах можно наблюдать деформационное разупрочнения материала на стадии локализованной деформации.

Проведена оценка влияния скорости деформации на деформационное упроч-

нение и на величину локализации скольжения в зоне сдвига. При низких температурах деформирования (до 200 К) и в интервале температур 450 К-650 К кривые деформационного упрочнения практически нечувствительны к изменению скорости деформации (рис.12 *а*, *б*). В остальной области температур уменьшение скорости деформации ведет к существенному уменьшению скорости деформационного упрочнения и величины деформирующего напряжения. Уменьшение скорости деформации при низких и средних температурах незначительно влияет на число дислокаций в зоне сдвига, а при высоких температурах (более 700 К в материале с медной матрицей) значительно снижает величину локализации скольжения в зоне сдвига (рис. 12 *в*, *г*).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методами математического моделирования и вычислительного эксперимента проведено исследование влияния скорости деформации, температуры, масштабных характеристик упрочняющей фазы и локализации скольжения в зоне сдвига на эволюцию деформационных дефектов и закономерности пластической деформации скольжения в дисперсно-упрочненных г.ц.к. материалах с некогерентной упрочняющей фазой. Впервые в модели учтены особенности локализации скольжения в зоне сдвига в материалах, упрочненных дисперсными частицами.

2. Показано, что в условиях пластической деформации скольжения в дисперсно-упрочненных материалах: а) взаимодействие между точечными дефектами приводит к существенному повышению деформирующего напряжения при всех температурах и скоростях деформации; б) при низких температурах определяющее влияние на деформационное упрочнение оказывают процессы генерации деформационных дефектов; в) при умеренных температурах ($0{,}25T_{пл} < T < 0{,}5T_{пл}$) деформационное упрочнение определяется балансом процессов генерации и аннигиляции деформационных дефектов.

3. Установлено, что при малых степенях деформации (примерно до 0,1) доминирующим элементом дислокационной структуры в дисперсно-упрочненных материалах с недеформируемыми частицами являются дислокационные призматические петли. При последующем развитии деформации при низких температурах доминирующей составляющей дислокационной подсистемы становятся дислокации в дипольных конфигурациях, при высоких температурах – сдвигообразующие дислокации, при умеренных температурах происходит многократная смена в течение деформации определяющего вклада дислокаций различного типа в общую плотность дислокаций.

4. Выявлено посредством вычислительного эксперимента, что дислокационные диполи не образуются на протяжении всего процесса пластической деформации при высоких температурах деформации и при умеренных температурах в материалах с мелкими частицами (менее 50 нм). С уменьшением расстояния между упрочняющими частицами образование дислокационных диполей начинается при более высоких степенях деформации. При этом скорость накопления дислокаций в дипольных конфигурациях значительно выше в материалах с большей объемной долей упрочняющей фазы.

5. Образование дислокационных диполей при достижении критической плотности дислокаций приводит к заметному возрастанию коэффициента деформационного упрочнения на кривой течения. Выявлены условия аномального поведения коэффициента деформационного упрочнения: в гетерофазных сплавах с большей объемной долей упрочняющих частиц возможно меньшее упрочнение, что наблюдается в реальном эксперименте.

6. Показано, что пластический сдвиг в дисперсно-упрочненных материалах с

некогерентной пластически недеформируемой второй фазой может формироваться либо движением одиночных дислокаций (элементарное скольжение), либо в условиях генерации большого числа дислокаций в зоне сдвига (локализованное скольжение). Выявлено, что протяженность стадий локализованного и элементарного скольжения определяется масштабными характеристиками упрочняющей фазы. При высоких температурах и при малых объемных долях упрочняющей фазы пластическая деформация осуществляется полностью в условиях локализованного скольжения. В мелкодисперсных сплавах локализация скольжения в зоне сдвига может отсутствовать.

7. Проведенные теоретические исследования позволяют предсказать наличие, отсутствие или чередование стадий элементарного и локализованного скольжения в процессе пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов в зависимости от начальной плотности дислокаций, масштабных характеристик второй фазы, температуры и скорости деформации.

8. Показано, что на величину локализации скольжения в зоне сдвига оказывает заметное влияние температура испытания и размер упрочняющих частиц; число дислокаций в зоне сдвига существенно уменьшается с ростом температуры и увеличением размера частиц.

Основное содержание работы изложено в 31 публикации, из которых наиболее значимыми являются:

1. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н., Старенченко В.А. Математическая модель кинетики деформационного упрочнения монокристаллов гетерофазных сплавов / Изв. РАН. Серия физическая. – 2003. – Т. 67. - №6. - С. 892-896.
2. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н. Влияние масштабных характеристик упрочняющей фазы на закономерности пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов / Изв. РАН. Серия физическая. – 2004. – Т. 68. - № 10. - С. 1412-1418.
3. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н. Модель пластической деформации при низких температурах дисперсно-упрочненных кристаллических материалов с некогерентной фазой / Вестник ТГАСУ.– 2000. - № 2 (3). – С. 41-50.
4. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н. Влияние некогерентной фазы на локализацию кристаллографического скольжения в ГЦК материалах при разных температурах / Вестник ТГАСУ. – 2003. – №2. - С. 57-64.
5. Ковалевская Т.А., Виноградова И.В., Данейко О.И., Попов Л.Е. Моделирование деформационного упрочнения сплавов с Г.Ц.К. кристаллической матрицей, содержащей недеформируемые дисперсные частицы / Эволюция дефектных структур в конденсированных средах: тезисы докладов, 2-7 сентября 1998г., под ред. Старостенкова М.Д., Алтайский гос. техн. ун-т им. И.И.Ползунова. Барнаул, 1998. –С.22.
6. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н. Влияние масштабных характеристик фазовой и дислокационной структуры на локализацию пластической деформации в дисперсно-упрочненных кристаллических материалах / Научные труды III Международного семинара «Современные проблемы прочности» им. В.А.Лихачева. 20-24 сентября 1999 г. Старая Русса: В 2 т. – Т.2 / сост. В.Г.Малинин; Нов. ГУ им. Ярослава Мудрого. – Новгород. - 1999 г. – С. 29-33.
7. Kovalevskaya T.A., Vinogradova I.V., Daneyko O.I., Kolupaeva S.N., Popov L.E. Modelling of deformation strengthening of f.c.c. alloys with undeformed dispersion

particles / Program and Book of Abstracts of the V-th Russian – Chinese International Symposium “ADVANCED Materials and processes” / Fundamental Problems of Developing Advanced Materials and Processes of the XXI Century / (AMP`99), July 27 – August 1, 1999, Baikalsk, Russia, P. 79-80.

8. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н. Модель пластической деформации кристаллических материалов, упрочненных недеформируемой дисперсной фазой / Научные труды IV Международного семинара «Современные проблемы прочности» им. В.А.Лихачева. 18-22 сентября 2000 г., Старая Русса, С. 55-59.
9. Данейко О.И., Колупаева С.Н., Ковалевская Т.А. Математическое моделирование эволюции дислокационной подсистемы дисперсно-упрочненных сплавов в процессе пластической деформации при различных температурах / Труды конференции молодых ученых, посвященной 10-летию ИВТ СО РАН, Новосибирск, 26-26 декабря 2000г./ Т.II: Математическое моделирование, - С.44-47.
10. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н., Старенченко В.А. Математическое моделирование кинетики деформационного упрочнения гетерофазных сплавов при различных температурах / Тезисы докладов XXXVII международного семинара «Актуальные проблемы прочности» 3–5 июля 2001г., Киев, - С. 131.
11. Ковалевская Т.А., Григорьева Н.А., Данейко О.И., Козлов Э.В. Локализация деформации в дисперсионно-твердеющем сплаве Al-Zn-Mg / Научные труды V Международного семинара «Современные проблемы прочности» им. В.А.Лихачева. 17-21 сентября 2001 г. Старая Русса. - С. 116-120.
12. Kovalevskaya T.A., Daneyko O.I., Kolupaeva S.N., Starenchenko V.A. Mathematical modeling of a kinetic of strain hardening of dispersion-hardened alloys at different temperatures / Book of abstracts XXX Summer School “Advanced problems in Mechanics”. St. Petersburg (Repino), Russia, June 27 – July 6, 2002. – P.37.
13. Данейко О.И., Ковалевская Т.А. Моделирование деформационного упрочнения материалов с ГЦК матрицей, содержащей недеформируемые дисперсные частицы / Теоретические и прикладные вопросы современных информационных технологий: материалы всероссийской научно-технической конференции. Улан-Удэ: издательство ВСГТУ, 2002. – С. 56-61.
14. Kovalevskaya T.A., Daneyko O.I., Kolupaeva S.N., Starenchenko V.A. The localization of crystallographic slip in dispersion hardened alloys / Book of abstract Thirteenth International Conference on the Strength of Materials, ICSMA-13, «Fundamental Aspects of the Deformation and Fracture of Materials», Budapest, Hungary. 2003. - P. 308.
15. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Колупаева С.Н. Влияние масштабных характеристик упрочняющей фазы на закономерности пластической деформации дисперсно-упрочненных материалов / Физика прочности и пластичности материалов: Сб. тезисов и докладов XV Международной конференции (30 сентября-3 октября 2003 г., г. Тольятти) / ТГУ, Тольятти, 2003. – С. 148.
16. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н., Комарь Е.В. Математическое моделирование эволюции дефектной подсистемы монокристаллов дисперсно-упрочненных материалов / Тезисы 2-й Международной конференции по физике кристаллов «Кристаллофизика 21-го века», посвященной памяти М.П. Шаскольской, 28-31 октября 2003 г., Москва. - С. 153-155.