К ОПИСАНИЮ УПРОЧНЕНИЯ ПРИ НЕУПРУГОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ: УЧЕТ ДИСЛОКАЦИОННЫХ БАРЬЕРОВ

Н.В. Котельникова, Д.С.Грибов, П.С.Волегов
Научный руководитель: П.В.Трусов
Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Россия, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, 614990
E-mail: kotelnickova@gmail.com

В последние десятилетия широкое распространение для описания неупругого деформирования моно- и поликристаллических металлов и сплавов приобрели многоуровневые модели [1,2], основанные на физических теориях пластичности (ФТП) [3], позволяющие явным образом учитывать эволюционирующую микроструктуру материалов. Одним из важнейших компонентов при построении моделей ФТП является закон упрочнения для систем скольжения (СС) дислокаций, отражающий взаимодействие движущихся по той или иной СС дислокаций с дислокациями других СС и иными дефектами кристаллической решетки (границами зерен и субзерен, включениями вторичных фаз и т.д.). На мезоуровне (уровне кристаллитов) законы упрочнения связывают критическое напряжение течения на СС с некоторым набором параметров (сдвигами, температурой, энергией дефекта упаковки и т.д.) [4,5]. Известно [6–8], что наибольший вклад в упрочнение вносит взаимодействие дислокаций и дислокационных субструктур. В настоящей работе закон упрочнения записан в следующем виде:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = f^{(k)} + f_b^{(k)}, \;\; k = 1,\ldots,24, \tag{1}$$

где $\dot{\tau}_c^{(k)}$ – скорость изменения критических напряжений на k–й СС. Слагаемое $f^{(k)}$ описывает вклад в изменение критического напряжения за счет взаимодействия полных дислокаций с дислокациями леса. Рост сдвигов ведет к увеличению числа дислокаций и к учащению их пересечений и взаимодействий. Данная зависимость отражена в следующем соотношении:

$$f^{(k)} = \tau_{c0}^{(k)} \dot{\gamma}_0 \left(\sum_{i=1}^{24} a_i^{(k)} \left(\frac{\gamma^{(i)}}{\sum_{j=1}^{24} \gamma^{(j)}} \right)^{\psi} \left(\frac{\dot{\gamma}^{(i)}}{\dot{\gamma}_0} \right)^{\delta} \right), \tag{2}$$

где ψ и δ – параметры материала, $\gamma^{(k)}$ – накопленный сдвиг по k-й СС, $a_i^{(k)}$ – модули упрочнения. Соотношение (2) вносит основной вклад в упрочнение.

Второе слагаемое в соотношении (1) описывает так называемое барьерное упрочнение. Для записи этого слагаемого необходимо определить значения параметров, характеризующих дислокационные барьеры в исследуемом материале (в настоящей работе рассмотрение ограничено ГЦК–кристаллами). Известно, что в таких металлах существует шесть типов дислокационных барьеров. В работе рассматриваются 4 наиболее устойчивых типа.

Исходя из значений энергии дефекта упаковки (ЭДУ), а также из известного отношения между величиной расщепления барьеров (расстоянием между частичными дислокациями, ограничивающими дефект упаковки и фиксирующими барьер) шести типов и векторами Бюргерса, были получены численные значения величины расщепления барьеров (табл.1).

Таблица 1 - Характеристики наиболее значимых дислокационных барьеров для меди

№ барьера	l, величина расщепления (м), a – длина ребра тетраэдра Томпсона	E_b, энергия барьера (мДж/м)	$\tau_{разр}$, напряжение разрушения, МПа	Барьерное напряжение, МПа
1, 4	0,377 a	1,35*10^{-2}	293	5,817
2	1,626 a	1,12*10^{-2}	13	5,802
3	4,692 a	1,18*10^{-2}	1,6	5,818

Опираясь на формальную запись дислокационных реакций, были рассчитаны значения энергии барьеров (табл. 1). Под энергией барьера понимается величина энергии, которую необходимо подвести к барьеру для его обратной рекомбинации. Рассчитана величина напряжения, при котором данный барьер будет разрушен (3), по следующему соотношению:

$$\tau_{разр} = \frac{E_b}{\xi_b l^2}, \tag{3}$$

где ξ_b – материальная константа. Результаты вычислений приведены в табл.1. Формула (3) предложена, исходя из соображений размерности и физического обоснования.

В ходе работы была получена верхняя оценка величины напряжения, вызываемого дислокационным барьером, по отношению к движущимся по рассматриваемой СС дислокациям, которые останавливаются на известном расстоянии от барьера (табл.1).

Учитывая найденные характеристики, функцию $f_b^{(k)}$ из (1) можно представить в виде:

$$f_b^{(k)}\left(\gamma_{ЭДУ}, \dot{\gamma}^{(j)}, \gamma^{(j)}\right) = \xi_1 \sum_{j\neq k}^{N^*} \mathrm{B}_{(j)}^{(k)} \left(1 - \frac{\gamma_{ЭДУ}}{\gamma^*_{ЭДУ}}\right) H\left(1 - \frac{\gamma_{ЭДУ}}{\gamma^*_{ЭДУ}}\right) \times$$

$$\times \left(\int_0^1 f_b^{(k)} d\tau + f_0^{(k)}\right)^{-1} \dot{\gamma}^{(k)} \left(\sum_{j\neq k}^{N^*} \gamma^{(j)} + \gamma_0^b\right) H\left(f_b^{(k)} - \tau_{разр}\right),$$

где $\gamma_{ЭДУ}$ – ЭДУ, $\gamma^*_{ЭДУ}$ – критическая ЭДУ, при превышении которой барьеры не образуются, N^* – СС, сопряженные к данной (такие СС, дислокации которых могут образовать барьер с дислокациями данной СС), ξ_1 – материальная константа, γ_0^b –константа для учета наличия в исходном материале расщепленных дислокаций, $f_0^{(k)}$ – плотность барьеров, уже существующих в материале в начальном состоянии, $\tau_{разр}$ – напряжение разрушения барьера, $\mathrm{B}_{(j)}^{(k)}$ – компоненты матрицы барьерных напряжений.

Таким образом, в работе рассматривается закон упрочнения, учитывающий взаимодействие дислокаций как друг с другом, так и с дислокационными барьерами. Рассчитаны значения ключевых характеристик дислокационных барьеров, входящих в закон упрочнения. Результаты расчетов с использованием предложенной модели находятся в удовлетворительном соответствии с известными экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №17-19-01292).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. 2011. Т.14. №4. С. 17-28.
2. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. 2011. Т.14. №5. С. 5-30.
3. Трусов П.В., Волегов П.С., Кондратьев Н.С. Физические теории пластичности: учебное пособие. – Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2013. – 244 с.
4. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. О мере разориентации систем скольжения соседних кристаллитов в поликристаллическом агрегате// Вестник ПНИПУ. Механика. – 2012. – № 2. – С. 112-127.
5. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Описание упрочнения систем дислокационного скольжения за счет границ кристаллитов в поликристаллическом агрегате// Вестник ПНИПУ. Механика. – 2012. – № 3. – С. 78-97.
6. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 3: Теории упрочнения, градиентные теории// Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011. – № 3. – С. 146-197.
7. Trusov P.V., Volegov P.S. Internal variable constitutive relations and their application to description of hardening in single crystals// Physical Mesomechanics. – 2010. – Т. 13, № 3-4. – С. 152-158.
8. Волегов П.С., Янц А.Ю. Несимметричная физическая теория пластичности гцк-поликристаллов: особенности численной реализации некоторых схем деформирования// Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011.– № 1. – С. 121-137.