

На правах рукописи



Кулаева Надежда Александровна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПЛАСТИЧЕСКОЙ  
ДЕФОРМАЦИИ ГЕТЕРОФАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ГЦК МАТРИЦЕЙ,  
УПРОЧНЕННОЙ НЕКОГЕРЕНТНЫМИ, КОГЕРЕНТНЫМИ И  
ИМЕЮЩИМИ СВЕРХСТРУКТУРУ  $L_1$  ЧАСТИЦАМИ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

**Автореферат**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2016

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор  
**Ковалевская Татьяна Андреевна**

Научный консультант: кандидат физико-математических наук, доцент  
**Данейко Ольга Ивановна**

Официальные оппоненты: **Дмитриев Сергей Владимирович**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности металлов РАН», заведующий лабораторией нелинейной физики и механики материалов;

**Маркидонов Артем Владимирович**,  
кандидат физико-математических наук, доцент  
ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева»,  
доцент кафедры автомобилей и автомобильных перевозок.

Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Сибирский физико-технический институт имени академика В.Д. Кузнецова»,  
г.Томск

Защита состоится «30» июня 2016 г. в 13<sup>00</sup> часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46., e-mail: [veronika\\_65@mail.ru](mailto:veronika_65@mail.ru).

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

<http://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/2862/>

Автореферат разослан «\_\_\_» апреля 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук,  
доцент



Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим присылать в 2-х экз. на адрес университета и e-mail: [veronika\\_65@mail.ru](mailto:veronika_65@mail.ru)

## **Общая характеристика работы**

### **Актуальность темы**

Современное материаловедение требует использования материалов все более сложных фазовых и компонентных составов, надежно работающих в разных температурных условиях, при активных деформациях и прочих воздействиях. Для решения таких задач эффективно используются дисперсно-упрочненные материалы, которые имеют высокую прочность и пластичность. Спектр свойств таких сплавов предоставляет возможность создавать принципиально новые материалы.

Одним из видов таких материалов являются сплавы, в которых основным несущим элементом является металлическая матрица, упрочнённая распределёнными в ней частицами. Эффективность упрочнения зависит от свойств частиц, их объемной доли, масштабных характеристик, а также от типа их распределения в матрице. Необходимость исследования механизмов формирования высокой прочности дисперсно-упрочнённых материалов для управления их прочностными и пластическими свойствами сохраняет свою научную и практическую значимость.

Одной из фундаментальных проблем физики прочности и пластичности является исследование взаимовлияния деформационной дефектной структуры и макроскопического пластического поведения деформируемых материалов. При изучении этой проблемы математическое моделирование приобретает особо важное значение, поскольку многие элементарные процессы пластического сдвига происходят настолько быстро, либо в таких условиях, что становятся практически недоступными исследованию экспериментальными методами. Помимо этого, экспериментальные исследования зачастую не дают возможности проследить динамику процесса, выявить механизмы, преобладающие на разных стадиях структурообразования и деформации. Построение математических моделей в традициях физической кинетики является наиболее эффективным и перспективным направлением в математическом моделировании процессов пластической деформации.

Наиболее эффективным математическим аппаратом для построения моделей кинетики пластической деформации являются уравнения баланса деформационных дефектов различного типа. В настоящей работе проведено исследование процесса пластической деформации дисперсно-упрочнённых материалов с наноразмерными упрочняющими частицами, в том числе с частицами со сверхструктурой  $L1_2$ . Исследовано влияние дисперсности и типа упрочняющих частиц, в частности, когерентных, некогерентных, когерентных упорядоченных, а также их совместного влияния на дефектную структуру и прочностные свойства сплавов в широком спектре пластических деформаций, температур и скоростей деформаций. Задача исследования влияния упорядоченных частиц со сверхструктурой  $L1_2$  на прочностные свойства материала сохраняет свою научную значимость в связи с широким использованием жаропрочных сплавов в промышленности и технике.

### **Цели и задачи работы**

**Целью** диссертационной работы является исследование механизмов де-

формационного упрочнения и прочностных свойств дисперсно-упрочненных ГЦК материалов с нано- и микроразмерными некогерентными, когерентными частицами и частицами со сверхструктурой  $L1_2$  при различных температурах и скоростях деформации в материалах на основе алюминиевой, медной и никелевой матриц с использованием методов математического моделирования.

Для реализации цели исследования были поставлены следующие **задачи**:

1. Провести последовательный анализ совокупности механизмов пластической деформации посредством кристаллографического скольжения монокристаллов дисперсно-упрочненных сплавов с ГЦК-матрицей.
2. Исследовать влияние когерентных, некогерентных частиц и упорядоченных частиц со сверхструктурой  $L1_2$  на закономерности генерации, аннигиляции и релаксационной трансформации линейных и точечных деформационных дефектов, характерных для дисперсно-упрочненных сплавов.
3. Теоретическое изучение физических особенностей механизмов пластической деформации ГЦК-материалов, упрочненных некогерентными, когерентными частицами, а также упорядоченными частицами со сверхструктурой  $L1_2$ , построение общей модели формирования прочностных свойств дисперсно-упрочненных сплавов. Численная реализация модели, ее анализ и верификация. Анализ прогностических возможностей модели.
4. Выявление физических причин температурной аномалии напряжения течения в материалах, упрочнённых упорядоченными частицами со сверхструктурой  $L1_2$ .
5. Выявить посредством вычислительного эксперимента динамику изменения дислокационной дефектной структуры дисперсно-упрочненных материалов с когерентными, некогерентными частицами и частицами со сверхструктурой  $L1_2$ , в зависимости от масштабных характеристик упрочняющей фазы и провести сравнение с имеющимися экспериментальными данными.
6. Исследовать влияние температуры, скорости деформации, масштабных характеристик упрочняющей фазы на эволюцию деформационных дефектов и закономерности поведения гетерофазных материалов с упрочняющими частицами различного типа.
7. Исследовать деформационное поведение ГЦК-материалов с некогерентными упрочняющими частицами и частицами, упорядоченными по типу  $L1_2$ , при одинаковой объемной доле упрочняющей фазы, имеющей разные масштабные характеристики.

#### **Научная новизна**

Создана математическая модель, описывающая физические процессы пластической деформации гетерофазных сплавов. В рамках модели исследованы прочностные свойства дисперсно-упрочнённых материалов с недеформируемой упрочняющей фазой, с когерентной второй фазой, с упрочняющей упорядоченной фазой со сверхструктурой  $L1_2$ . Впервые показано, что в процессе деформации часть упорядоченных упрочняющих частиц со сверхструктурой  $L1_2$  становятся неперерезаемыми для скользящих дислокаций. Впервые теоретически выявлена температурная аномалия механических свойств сплавов, содержащих упорядоченные частицы.

Исследовано влияние характеристик упрочняющих фаз, температуры и скорости деформации на кривые деформационного упрочнения и кинетику составляющих дефектной подсистемы в материалах, упрочненных когерентными, некогерентными частицами и частицами со сверхструктурой  $L1_2$ , имеющие нано- и микрогабаритные масштабные характеристики.

Исследована роль различных механизмов и процессов пластической деформации в деформационном упрочнении гетерофазных материалов с ГЦК матрицей и частицами второй фазы (когерентными, некогерентными, а также их сочетанием в разных долях), а также проанализированы вклады дислокаций различного типа в среднюю плотность дислокаций при различных температурах, скоростях и степенях деформации.

Выявлены особенности прочностных свойств дисперсно-упрочненных материалов с одинаковой объемной долей, но различной степенью дисперсности упрочняющей фазы. Установлено, что упрочнение материала значительно выше, если вторая фаза является наноразмерной.

**Теоретическая и практическая значимость диссертации** определяется тем, что полученные в работе результаты вносят вклад в построение теории пластичности и прочности материалов. Полученные результаты можно использовать в разработке эффективных подходов для прогнозирования механических характеристик дисперсно-упрочненных материалов или для создания материалов с заданными физико-механическими свойствами. Физическое и математическое моделирование аномальных прочностных свойств в сплаве с упорядоченными частицами со сверхструктурой  $L1_2$  даст возможность прогнозировать эти свойства в зависимости от масштабных характеристик упорядоченной фазы, температуры и скорости деформации.

#### **Методология и методы исследования**

Для теоретических исследований использовался метод математического моделирования с использованием теории дислокационной кинетики.

#### **Положения, выносимые на защиту**

1. Комплексное теоретическое исследование пластической деформации монокристаллов дисперсно-упрочненных материалов с ГЦК-матрицей и распределенными внутри неё когерентными, некогерентными и упорядоченными частицами со сверхструктурой  $L1_2$ .
2. Результаты исследования в рамках разработанной модели влияния масштабных характеристик упрочняющих фаз на формирование дефектной структуры и на прочностные свойства сплавов, содержащих дисперсные частицы различного типа.
3. Результаты исследования температурной аномалии прочностных свойств жаропрочных кристаллических материалов, содержащих упорядоченные упрочняющие частицы со сверхструктурой  $L1_2$ .
4. Закономерности влияния температуры и скорости деформации на деформационное поведение дисперсно-упрочненных кристаллических материалов с разным типом упрочняющих частиц: некогерентных, когерентных, и упорядоченных со сверхструктурой  $L1_2$ .

#### **Степень достоверности**

Достоверность работы обеспечивается корректностью постановки задач исследования, математической и физической обоснованностью предложенного метода, использованием современных методов решения поставленных задач и устойчивой воспроизводимостью полученных расчетов, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными.

#### **Личный вклад автора**

Заключается в участии в постановке задач, выборе средств достижения цели, получении результатов численного эксперимента, сравнении результатов с экспериментальными данными, формулировке научных положений и выводов, подготовке к публикации научных статей с полученными результатами совместно с научным руководителем и научным консультантом по теме диссертационной работы.

#### **Апробация работы**

Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: Fifteenth International Conference on the Strength of Materials ICSMA-15 (Dresden, Germany, 2009); XLVIII Международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Тольятти, 2009); VI Международной конференции студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук» (Томск, 2009); Международной конференции «Первые Московские Чтения по проблемам прочности материалов» (Москва, 2009); VIII Всероссийской научно-практической конференции с международным участием «Информационные технологии и математическое моделирование» (Анжеро-Судженск, 2009); X Международной научно-технической Уральской школе-семинаре металловедов – молодых ученых (Екатеринбург, 2009); V (XXXVII) Международной конференции «Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей» (Кемерово, 2010); Шестнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (Волгоград, 2010); 50 Международном научном симпозиуме «Актуальные проблемы прочности» (Витебск, Беларусь, 2010); VI и VII Международных конференциях «Фазовые превращения и прочность кристаллов» (Черноголовка, 2010, 2012); XVIII Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (Самара, 2012); I и II Всероссийских научных конференциях молодых учёных с международным участием «Перспективные материалы в технике и строительстве» (Томск, 2013, 2015); Научном семинаре с международным участием «Структура и свойства металлов при различных энергетических воздействиях и технологических обработках» (Томск, 2014); Международной научной конференции молодых ученых «Перспективные материалы в строительстве и технике» (Томск, 2014); I и II Международных научных конференциях студентов и молодых ученых «Молодежь, наука, технологии: идеи и перспективы» (Томск, 2014, 2015).

#### **Публикации**

Основные результаты диссертации опубликованы в 34 работах, из них 12 в журналах, входящих в перечень ВАК РФ. Список основных публикаций приведен в конце автореферата.

#### **Структура и объем диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав и списка литературы. Объем диссертации составляет 191 страницу, включая 117 рисунков и 2 таблицы. Список литературы включает 160 наименований.

### Содержание работы

Во введении определена цель работы, поставлены задачи исследования, обоснована актуальность темы диссертации, научная новизна и практическая ценность, сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** диссертационной работы содержит обзор литературы, посвященной исследованию эволюции деформационной дефектной структуры материалов, упрочненных недеформируемыми частицами, особенностям пластического поведения материалов в условиях пластической деформации и математическому моделированию процессов пластической деформации в гетерофазных материалах. Представлена информация о развитии теоретических представлений о процессах пластической деформации гетерофазных материалов, используемых при математическом моделировании механизмов и процессов пластической деформации 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** приведено описание физических процессов и механизмов генерации дислокаций

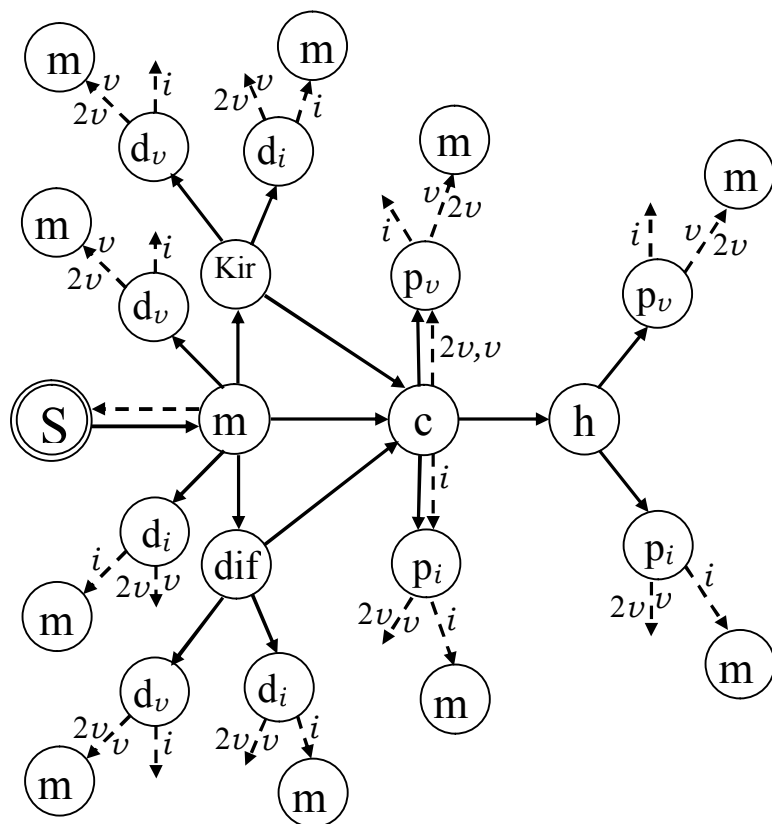


Рис. 1. Схема дислокационных превращений. Механизмы релаксации: диффузионное переползание дислокаций в результате осаждения на них межузельных атомов ( $i$ ), бивакансий ( $2v$ ) и моновакансий ( $v$ ).

в ГЦК материалах с различным типом упрочняющих частиц, приведены и описаны механизмы аннигиляции дислокаций и точечных дефектов.

Проведён подробный анализ последовательности превращений, испытываемых скользящими дислокациями при взаимодействии с частицами с учетом силовых и диффузионных процессов. Для наглядности последовательность дислокационных превращений приведена на схеме (рис. 1).

При движении скользящей дислокации через когерентные частицы со сверхструктурой  $L1_2$  частицы либо перерезаются, сдвигаясь на расстояние

удвоенного вектора Бюргера, либо дислокации захватываются частицей вследствие образования внутри неё дислокационного барьера по механизму Кира-Вильсдорф или диффузионному механизму. Энергетические аспекты формирования барьеров Кира-Вильсдорф детально исследованы в работе [1]. Экспериментально механические свойства упорядоченных сплавов со сверхструктурой  $L1_2$  были рассмотрены [2]. Упорядоченная частица со сверхструктурой  $L1_2$  становится неперерезаемой (рис. 2) и преодолевается скользящей дислокацией по механизму Орована с оставлением вокруг частицы колец Орована (рис. 3). Такие частицы становятся недеформируемыми, хотя сохраняют когерентную связь с матрицей. В результате, вблизи таких частиц при движении скользящих дислокаций формируются так называемые, «геометрически необходимые» дислокации – кольца Орована и призматические петли.

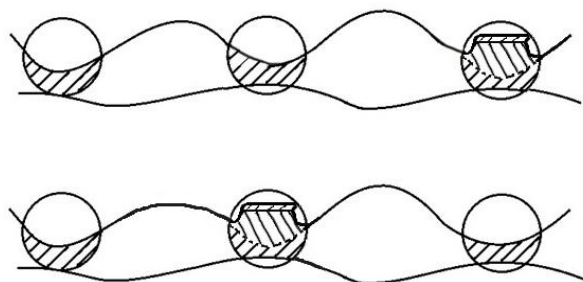


Рис. 2. Схема преодоления упорядоченных частиц со сверхструктурой  $L1_2$  при формировании в некоторых частицах дислокационных барьеров.

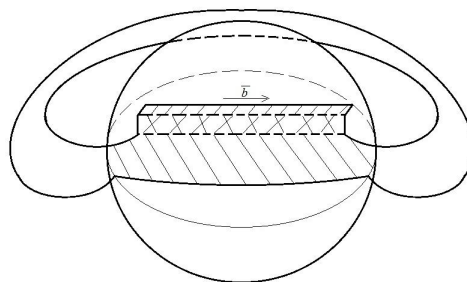


Рис. 3. Схема образования колец Орована вокруг упорядоченной частицы со сверхструктурой  $L1_2$  после формирования в ней дислокационного барьера Кира-Вильсдорф.

**В третьей главе** на основе результатов анализа существующих математических моделей деформационного структурообразования в процессе формирования зоны сдвига, а также релаксационных процессов в деформационной дефектной подсистеме деформируемого дисперсно-упрочненного материала сформулирована математическая модель пластической деформации скольжения в гетерофазных материалах с недеформируемыми и деформируемыми частицами упрочняющей фазы в различных долях. В модели учитывается, что при достижении критической плотности дислокаций, величина которой определяется масштабными характеристиками упрочняющей фазы, начинается генерация дислокаций в дипольных конфигурациях.

Математическая модель включает уравнения баланса сдвигообразующих дислокаций, призматических дислокационных петель межузельного и вакансионного типа, дислокаций в дипольных конфигурациях вакансионного и межузельного типа, межузельных атомов, моно- и бивакансий, а также уравнение, определяющее скорость деформации и уравнение, описывающее внешнее воздействие на деформируемый материал. Сочетание процессов генерации и аннигиляции каждого деформационного дефекта определяет интенсивность его накопления, что может быть выражено следующим образом:

$$\frac{d\bar{X}}{da} = G(\bar{X}, \bar{Y}, a, t) - A(\bar{X}, \bar{Y}, a, t) - R(\bar{X}, \bar{Y}, a, t), \quad (1)$$



где  $\bar{X}$  – вектор переменных, характеризующих дефектную среду,  $\bar{Y}$  – вектор переменных, характеризующих внешнее воздействие,  $a$  – степень деформации,  $t$  – время,  $\bar{G}$ ,  $\bar{A}$ ,  $\bar{R}$  – функции генерации, аннигиляции и релаксации деформационных дефектов, соответственно.

При дисперсном упрочнении частицы затрудняют процессы скольжения дислокаций в матрице. Присутствие в материале только когерентных упрочняющих частиц выявляет слабую зависимость механических свойств от масштабных характеристик (размера частиц, расстояния между ними) упрочняющей когерентной фазы при различных температурах деформации.

Если частицы второй фазы являются некогерентными, то их преодоление скользящей дислокацией сопровождается образованием геометрически необходимых дислокаций на частицах, что существенно увеличивает плотность дислокаций и деформационное упрочнение материала.

При достижении критической плотности дислокаций начинают формироваться дислокационные диполи, что существенно увеличивает плотность дислокаций и напряжение течения в материале. Так как критическая плотность дислокаций достигается в материалах при разных степенях деформации, это может привести к тому, что напряжение течения в материале с меньшей объемной долей упрочняющей фазы превысит напряжение течения в материале с большей объемной долей упрочняющей фазы при некоторой температуре и степени деформации (рис.4).

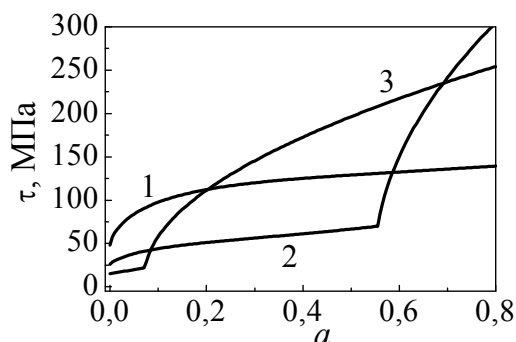


Рис. 4. Зависимость напряжения течения от степени деформации. Материал на основе меди, упрочнен некогерентными частицами. Диаметр частиц 10 нм. Расстояние между частицами, нм: 1 – 400, 2 – 1000, 3 – 4000. Скорость деформации  $10^{-4}$  с $^{-1}$ . Температура деформации 293К.

В дисперсно-упрочненных материалах с нанодисперсной упрочняющей фазой напряжение течения (рис. 5, б) значительно выше, чем в материалах с более крупными частицами (рис. 5, а) при одинаковой объемной доле упрочняющей фазы. Это особенно заметно при небольших степенях деформации и

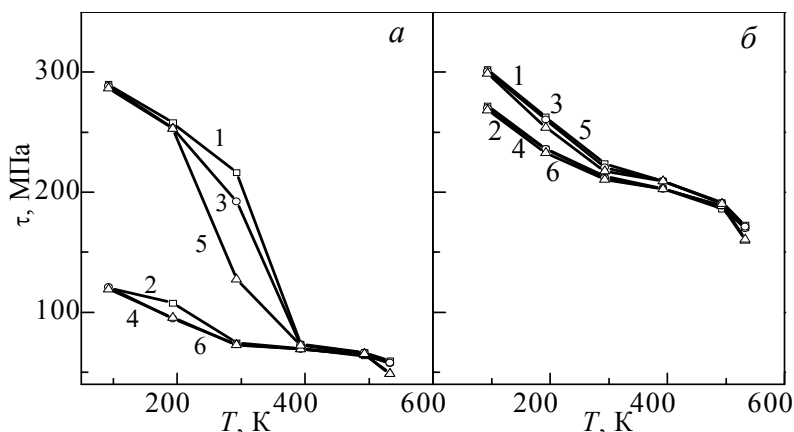


Рис.5. Температурная зависимость напряжения течения в дисперсно-упрочнённых материалах на основе алюминия с некогерентными частицами при степенях деформации: 2, 4, 6 – 0,15; 1, 3, 5 – 0,4. Размер частиц, нм: а – 50, б – 10; расстояние между частицами, нм: а – 400, б – 80. Скорость деформации, с $^{-1}$ : 1, 2 –  $10^{-2}$ ; 3, 4 –  $10^{-3}$ ; 5, 6 –  $10^{-4}$ .

при температурах, выше комнатной. В материалах с крупными частицами наблюдается более сильная скоростная зависимость кривых деформационного упрочнения в области низких и средних температур (93 К – 393 К).

В сплавах с одинаковой объёмной долей упрочняющей фазы, но с разными

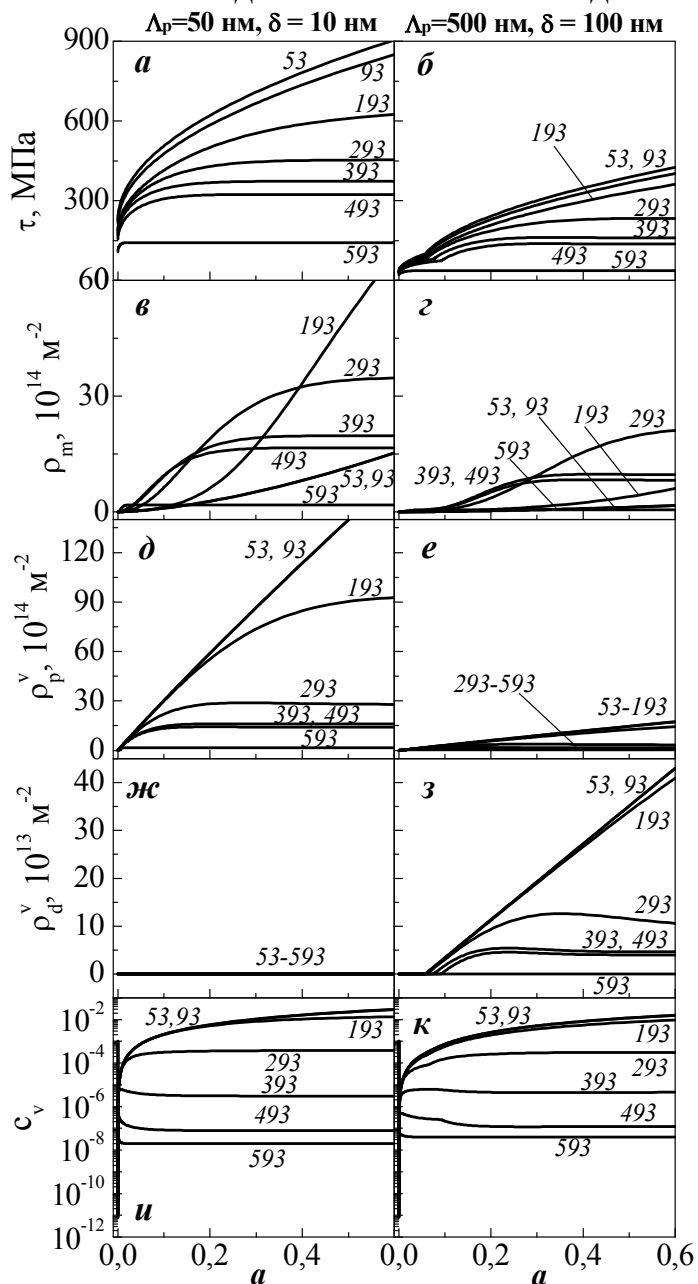


Рис. 6. Зависимость от степени деформации напряжения течения (*а, б*), плотности сдвигообразующих дислокаций (*в, в*), призматических петель (*д, д*), дислокационных диполей (*ж, з*), концентрации вакансий (*и, к*). Алюминий, упрочнен некогерентными частицами. Расстояние между частицами, их диаметр, температура деформации указаны на рисунке. Скорость деформации  $10^{-2} \text{ с}^{-1}$ .

масштабными характеристиками наблюдаются более высокие прочностные свойства в сплавах с наноразмерной упрочняющей фазой за счет формирования в процессе деформации существенно более высоких плотностей призматических петель (рис. 6, *д*). При этом дипольные дислокационные конфигурации в таких материалах не формируются (рис. 6, *ж*). Плотность сдвигообразующих дислокаций при изменении температуры меняется сложным образом (рис. 6, *в, з*). Причиной является сложный характер баланса между аннигиляционными и релаксационными процессами для сдвигообразующих дислокаций. С одной стороны, сдвигообразующие дислокации могут аннигилировать поперечным скольжением винтовых компонент или переползанием невинтовых дислокаций, с другой стороны, плотность сдвигообразующих дислокаций растет за счет перехода в разряд сдвигообразующих дислокаций призматических петель в процессе их релаксации.

Включение в ансамбль когерентных частиц некоторой доли некогерентных ча-

стиц приводит к усилению прочностных свойств, и чем больше доля некогерентных частиц, тем напряжение течения больше (рис. 7, *а-в*). Состав дислокационной подсистемы зависит от масштабных характеристик упрочняющей фазы. В дисперсно-упрочнённых материалах с микроразмерной упрочняющей

фазой доминирующим элементом дислокационной структуры становятся дислокационные дипольные конфигурации. Формирование дислокационных диполей (рис. 7к-м) оказывает качественное влияние на кривые течения (рис. 7а-в). Причем, чем больше доля некогерентных частиц в материале, тем раньше достигается критическая плотность дислокаций, и начинают формироваться диполи (рис. 7, к, л, м). При увеличении доли некогерентных частиц в материале увеличивается плотность дислокационных диполей и призматических петель.

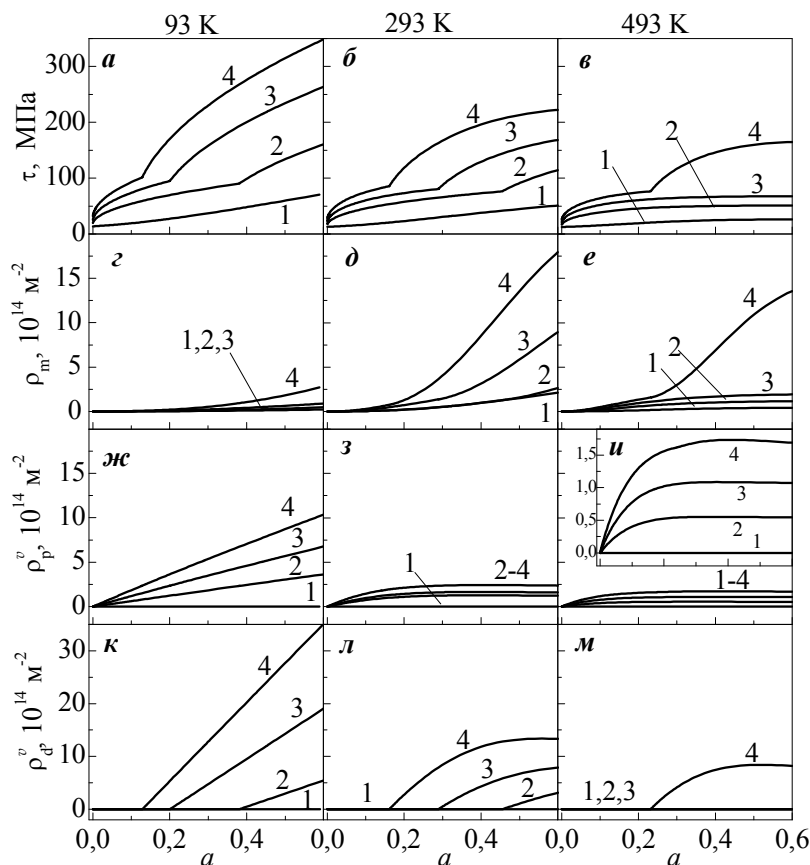


Рис. 7. Зависимость напряжения течения (а, б, в) и плотности составляющих дислокационной подсистемы от степени деформации (г, д, е – сдвигообразующие дислокации, ж, з, и – призматические петли, к, л, м – дислокационные диполи). Дисперсно-упрочненный материал на основе алюминия. Скорость деформации  $10^{-2} \text{ с}^{-1}$ . Температура деформации указана на рисунке. Доля некогерентных частиц: 1 – 0%, 2 – 25%, 3 – 50%, 4 – 75. Размер частиц 50 нм, расстояние между ними 400 нм.

При средних температурах деформации призматические петли и дипольные конфигурации разрастаются, достигают критических размеров и при дальнейшем увеличении степени деформации двигаются согласно механизмам, свойственным сдвигообразующим дислокациям. В силу чего, при средних температурах деформации наблюдается снижение плотности призматических петель и дислокаций в дипольных конфигурациях, и при этом происходит увеличение плотности матричных дислокаций (рис. 7г-е). С дальнейшим ростом температуры деформации в аннигиляционные и релаксационные процессы активно вступают равновесные точечные дефекты, которые с ростом температуры активизируют аннигиляционные процессы.

В материалах с наноразмерными частицами (рис. 8) дипольные конфигурации не формируются при любых соотношениях когерентных и некогерентных частиц, кривые деформационного упрочнения гладкие, что подтверждается экспериментально [3]. При моделировании варьировалась доля некогерентных частиц.

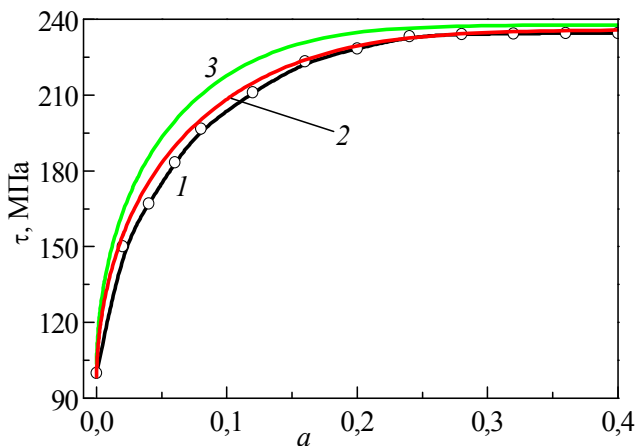


Рис. 8. Зависимость напряжения течения от степени деформации дисперсно-упрочненного материала с когерентными и некогерентными частицами. Кривые: 1 – экспериментальные данные для сплава Al-Zn-Mg [3], режим старения: 100 °С, 24 ч, затем 170 °С, 3 ч., 2, 3 – модельные кривые, доля некогерентных частиц  $\mu = 70\%$ ; 2 –  $\Lambda_p = 140$  нм,  $\delta = 40$  нм, 3 –  $\Lambda_p = 130$  нм,  $\delta = 40$  нм. Скорость деформации  $10^{-2} \text{ с}^{-1}$ .

В четвертой главе сформулирована математическая модель пластической деформации дисперсно-упрочненных ГЦК материалов с частицами, имеющими сверхструктуру  $L1_2$ . Система дифференциальных уравнений баланса деформационных дефектов в гетерофазном сплаве, содержащем упорядоченные частицы со сверхструктурой  $L1_2$ , а также некогерентные частицы, записана в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_m}{da} &= (1 - \omega_s P_{as}) \frac{F}{Db} - \frac{2}{a} (1 - \omega_s) \rho_m^2 b \min(r_a, \rho_m^{-1/2}) (c_v Q_{2v} + c_{1v} Q_{1v} + c_i Q_i) + \\ &+ \frac{2\alpha}{a} b \sqrt{\rho} (\rho_p^v (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v}) + \rho_p^i c_i Q_i) + \frac{2b}{\dot{a} r_a} (\rho_d^i c_i Q_i + \rho_d^v (c_{1v} Q_{1v} + c_{2v} Q_{2v})), \\ \frac{d\rho_p^i}{da} &= \frac{[\mu + (1 - \mu)(\lambda_1 \exp(-u_{Kir}/kT) + \lambda_2 \exp(-u_{dif}/kT))] <\chi> \delta}{2\Lambda_p^2 b} - \frac{2\alpha}{a} \sqrt{\rho} \rho_p^i b (2c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + 2c_{1v} Q_{1v}) \\ \frac{d\rho_p^v}{da} &= \frac{[\mu + (1 - \mu)(\lambda_1 \exp(-u_{Kir}/kT) + \lambda_2 \exp(-u_{dif}/kT))] <\chi> \delta}{2\Lambda_p^2 b} - \frac{2\alpha}{a} \sqrt{\rho} \rho_p^v b (c_{2v} Q_{2v} + 2c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}) \\ \frac{d\rho_d^v}{da} &= \frac{[\mu + (1 - \mu)(\lambda_1 \exp(-u_{Kir}/kT) + \lambda_2 \exp(-u_{dif}/kT))]}{\Lambda_p b} - \frac{2b}{\dot{a} r_a} \rho_d^v (c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}) \\ \frac{d\rho_d^i}{da} &= \frac{[\mu + (1 - \mu)(\lambda_1 \exp(-u_{Kir}/kT) + \lambda_2 \exp(-u_{dif}/kT))]}{\Lambda_p b} - \frac{2b}{\dot{a} r_a} \rho_d^i (c_{2v} Q_{2v} + c_i Q_i + c_{1v} Q_{1v}) \\ \frac{dc_i}{da} &= q \frac{\tau_{dyn}}{G} - \frac{c_i}{a} [((1 - \omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 Q_i + Q_{1v} c_{1v} + Q_{2v} c_{2v} + Q_i (c_{1v} + c_{2v})], \\ \frac{dc_{2v}}{da} &= \frac{5q\tau_{dyn}}{6G} - \frac{1}{a} [(((1 - \omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 + c_i) Q_{2v} c_{2v} + Q_i c_i c_{2v} - Q_{1v} c_{1v}^2], \\ \frac{dc_{1v}}{da} &= \frac{q\tau_{dyn}}{6G} - \frac{1}{a} [(((1 - \omega_s) \rho_m + \rho_p + \rho_d) b^2 + c_i + c_{1v}) Q_{1v} c_{1v} + Q_i c_i c_{1v} - (Q_{2v} + Q_i) c_i c_{2v}], \end{aligned}$$

где  $D$  – диаметр зоны сдвига;  $F$  – параметр, определяемый формой дислокационных петель и их распределением в зоне сдвига;  $\tau_{dyn}$  – напряжение, избыточное над статическим сопротивлением движению дислокаций;  $\omega_s$  – доля винтовых дислокаций;  $Q_j = Z_j \nu_D \exp(-U_j^{(m)}/kT)$ ;  $U_j^{(m)}$  – энергия активации миграции точечных дефектов  $j$ -го типа;  $Z_j$  – число мест, возможных для прыжка дефекта  $j$ -го типа ( $j=i, v$ );  $\nu_D$  – частота Дебая;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура деформирования;  $<\chi>$  – средняя величина параметра, характеризующего “геометрию” дислокаций на частицах;  $q$  – параметр, определяющий интенсивность генерации точечных дефектов;  $G$  – модуль сдвига,  $b$  – модуль

вектора Бюргера,  $\rho$  – плотность дислокаций,  $\rho_p = \rho_p^i + \rho_p^v$  – плотность призматических дислокационных петель,  $\rho_d = \rho_d^i + \rho_d^v$  – плотность дислокаций в дипольных конфигурациях;  $\tau_f$  – напряжение трения,  $\alpha$  – параметр междислокационных взаимодействий;  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  – весовые коэффициенты,  $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ ,  $u_{Kir}$  – энергия образования барьера Кира-Вильсдорф,  $u_{dif}$  – энергия образования барьера диффузионного типа,  $\mu$  – доля некогерентных частиц в материале.

Система уравнений модели дополнена уравнением, которое связывает скорость деформации  $\dot{\epsilon}$  с приложенным напряжением  $\tau$  и плотностью дислокаций в деформируемом материале:

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

Здесь  $B$  – параметр, определяемый вероятностью образования дислокационных барьеров, ограничивающих зону сдвига;  $\xi$  – доля дислокаций леса;  $\beta_r$  – доля реагирующих дислокаций;  $\Lambda$  – средняя длина свободного дислокационного сегмента.

При исследовании температурной зависимости напряжения течения материалов, упрочненных когерентными частицами, имеющими сверхструктуру  $L1_2$ , выявлены немонотонность поведения напряжения течения с изменением температуры (рис. 9) при разных степенях деформации, т.е. наблюдается температурная аномалия, которая связана с формированием барьеров Кира-Вильсдорф и барьеров диффузионного типа. Увеличение степени деформации

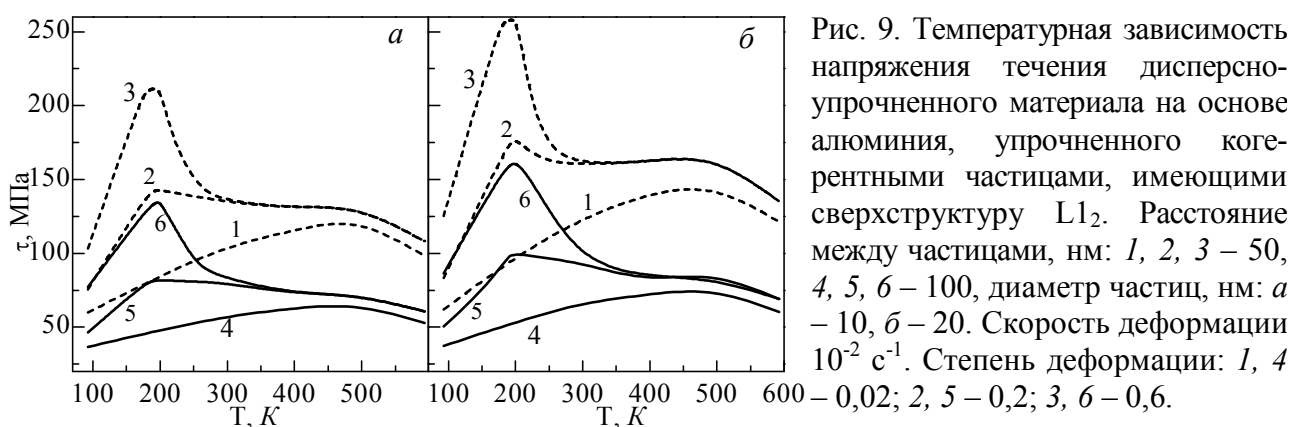


Рис. 9. Температурная зависимость напряжения течения дисперсно-упрочненного материала на основе алюминия, упрочненного когерентными частицами, имеющими сверхструктуру  $L1_2$ . Расстояние между частицами, нм: 1, 2, 3 – 50, 4, 5, 6 – 100, диаметр частиц, нм: а – 10, б – 20. Скорость деформации  $10^{-2} \text{ с}^{-1}$ . Степень деформации: 1, 4 – 0,02; 2, 5 – 0,2; 3, 6 – 0,6.

приводит к уменьшению температуры пика аномалии. Увеличение объемной доли частиц способствует включению все большего количества упорядоченных частиц в процесс формирования в них дислокационных барьеров и, соответственно, переходу их в разряд неперерезаемых. Однако такое поведение проявляется в области достаточно низких температур (до 200 К). При повышении температуры значительно возрастает аннигиляция накопленных в матрице дислокаций, как сдвигообразующих, так и призматических петель, сформированных вблизи частиц, в которых образовались барьеры. При повышении степени деформации ( $a \geq 0,2$ ) при температурах выше 200 К наблюдается нормальное поведение кривых напряжения течения.

Присутствие наномасштабных частиц  $\gamma'$ -фазы формируют более высокие

прочностные свойства за счет формирования в процессе деформации существенно более высоких плотностей призматических петель (рис. 10 ж). При увеличении расстояния между частицами меняется состав дислокационной подсистемы – добавляются диполи (рис. 10, л, м), что является причиной появления на кривых течения излома (рис. 10, б, в).

Анализ температурной зависимости плотности составляющих дислокационной подсистемы в рассматриваемых материалах в процессе деформации показывает немонотонное влияние температуры на эволюцию элементов дислокационной подсистемы в процессе деформации (рис. 11). При увеличении температуры растёт число частиц, которые необходимо преодолеть по механизму

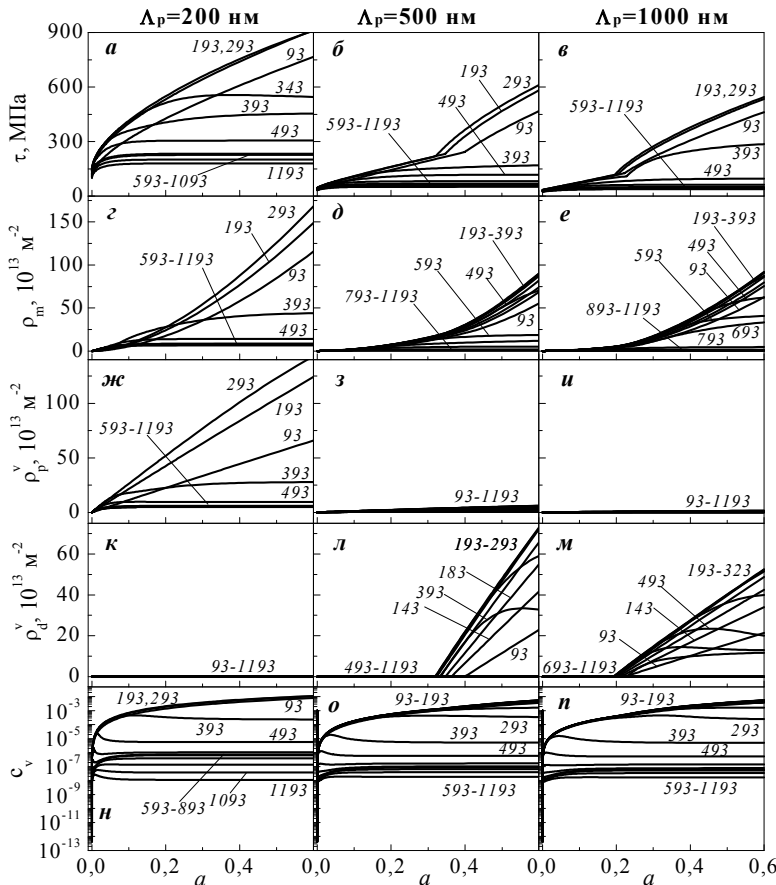


Рис. 10. Зависимость напряжения течения (а-в), плотности сдвигообразующих дислокаций (г-е), плотности призматических петель вакансионного типа (ж-и), плотности дислокационных диполей вакансионного типа (к-м), концентрации вакансий (н-п) от степени деформации. Материал на основе никеля, упрочнен частицами со сверхструктурой  $L1_2$ . Расстояние между частицами указано на рисунке. Диаметр частиц 20 нм. Температура деформации указана на рисунке. Скорость деформации  $10^{-3} \text{ c}^{-1}$ .

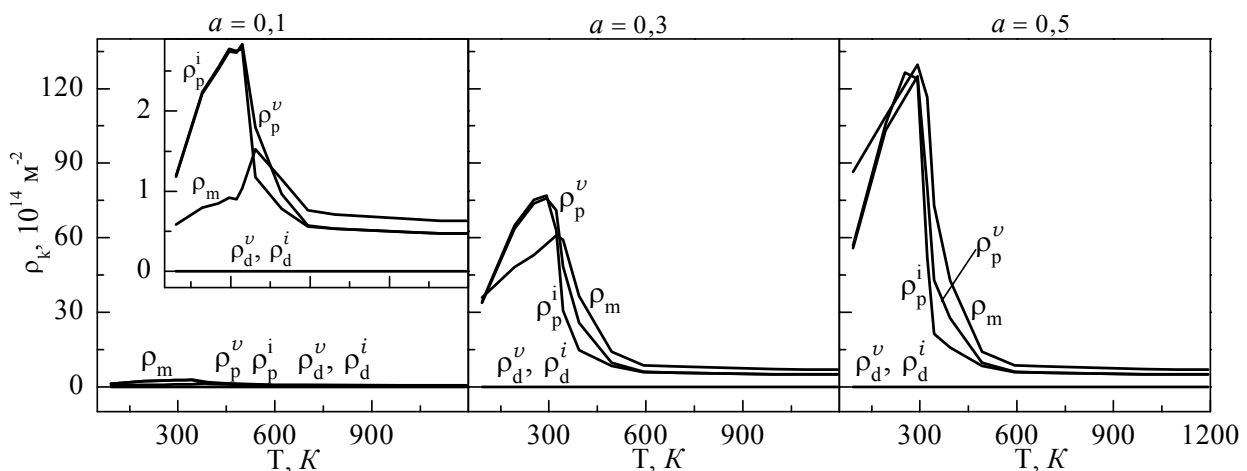


Рис. 11. Температурная зависимость составляющих дислокационной подсистемы дисперсно-упрочненного материала на основе никеля, упрочненного частицами, имеющими сверхструктуру  $L1_2$ . Расстояние между частицами 100 нм, диаметр частиц 10 нм. Скорость деформации  $10^{-2} \text{ c}^{-1}$ .

Орована с образованием на них геометрически необходимых дислокаций – колец Орована, призматических петель (рис. 11), что влечет за собой увеличение напряжения течения в материале. В материалах с наномасштабными упрочняющими частицами со сверхструктурой  $L1_2$  наибольший вклад в общую плотность дислокаций вносят призматические петли (рис. 11).

В материале с наноразмерными частицами (рис. 12, б) напряжение течения и аномалия механических свойств значительно выше при всех

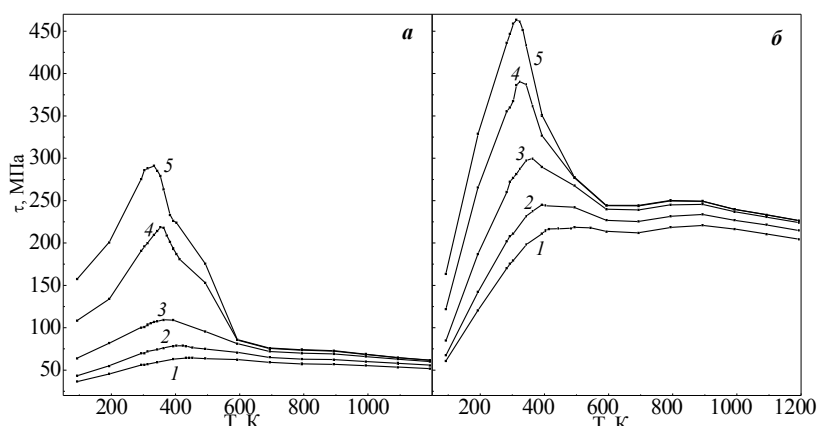


Рис.12. Температурная зависимость напряжения течения. Материал на основе никеля. Скорость деформации  $10^{-3} \text{ с}^{-1}$ . Диаметр упрочняющих частиц, нм: а – 100, б– 10; расстояние между частицами, нм: а – 1000, б – 100. Степень деформации: 1 – 0,03; 2– 0,05; 3 – 0,1; 4 – 0,2; 5 – 0,3.

степенях деформации, чем в материале с более крупными частицами (рис. 12, а) при одинаковой объёмной доле упрочняющей фазы. Однако при низких температурах (93 К) влияние размера упрочняющих частиц и расстояния между ними на напряжение течения материала

незначительно. Моделирование показывает, что в исследуемых гетерофазных материалах с одинаковой объёмной долей, но с разными масштабными характеристиками упорядоченной упрочняющей фазы наблюдается заметно большее упрочнение материала, содержащего наноразмерные частицы (рис. 12). Моделирование позволяет прогнозировать, что присутствие в ГЦК материале нанодисперсных частиц создаёт условия для формирования более интенсивного деформационного и температурного упрочнения дисперсно-упрочнённых сплавов.

Показано, что прирост аномалии  $\Delta\tau = \tau_{\max} - \tau_{\min}$  растёт с увеличением раз-

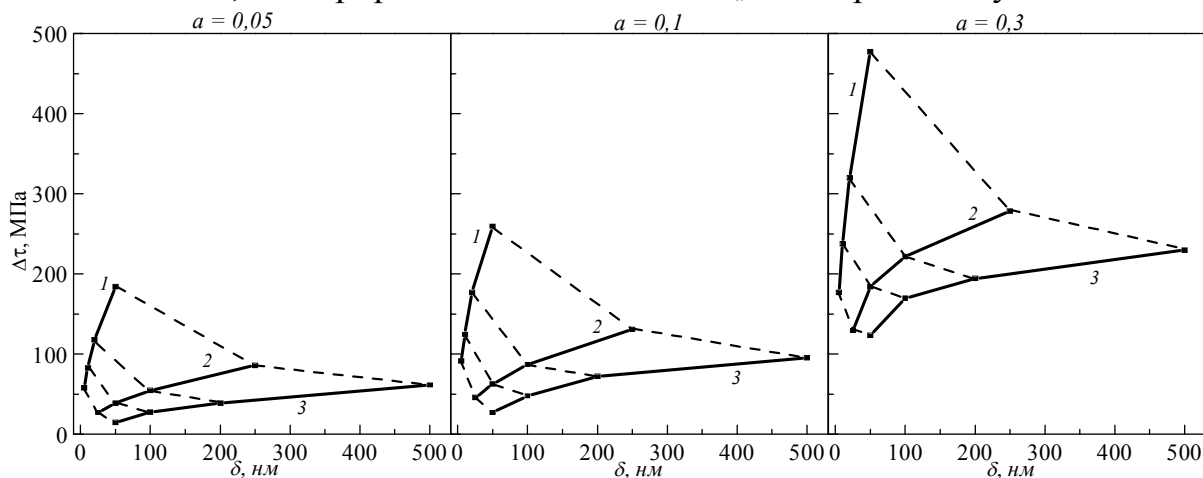


Рис. 13. Зависимость величины аномалии  $\Delta\tau$  от размера  $\delta$  упрочняющих частиц. Материал на основе меди, упрочнен когерентными частицами, имеющими сверхструктуру  $L1_2$ . Расстояние между частицами, нм: 1 – 100, 2 – 500, 3 – 1000. Скорость деформации  $10^{-3} \text{ с}^{-1}$ . Степень деформации указана на рисунке.

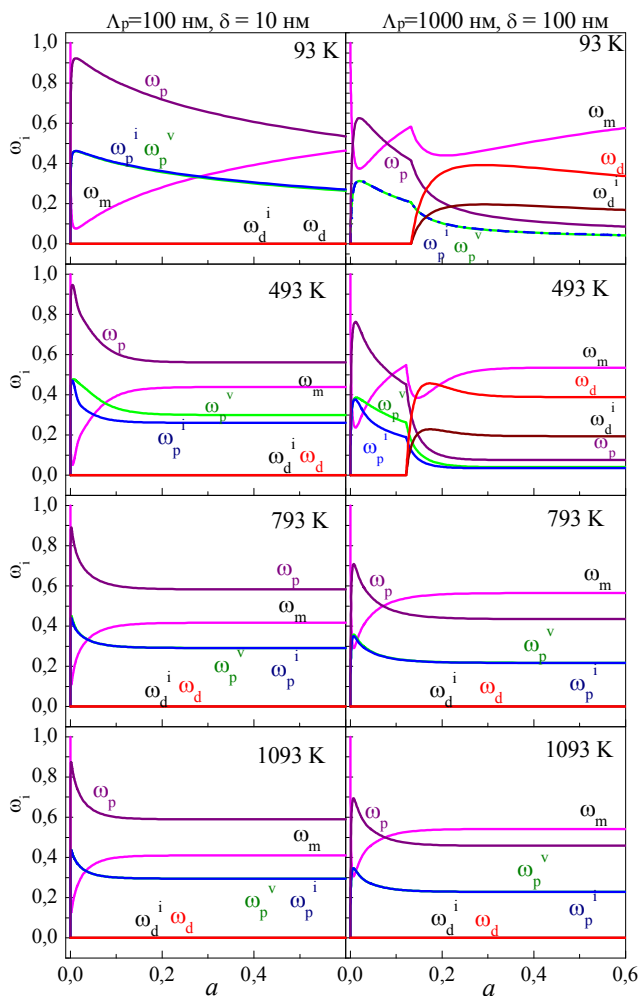


Рис. 14. Вклад дислокаций различного типа в общую плотность дислокаций при разных температурах деформации. Материал на основе никеля, упрочнен когерентными частицами, имеющими сверхструктуру  $L1_2$ . Расстояние между частицами, диаметр частиц – указаны на рисунке. Скорость деформации  $10^{-3} \text{ c}^{-1}$ .

формации.

Аномальная температурная зависимость предела текучести наблюдается для всех исследуемых материалов, упрочнённых упорядоченными частицами со сверхструктурой  $L1_2$ . Причем степень аномалии тем большая, чем выше объемная доля частиц упрочняющей фазы. Эти результаты согласуются с экспериментальными данными [4] для монокристалла сплава системы  $Ni-Al$  (рис. 15).

Если в материале, помимо упорядоченных частиц, изначально присутствуют некогерентные недеформируемые частицы, то моделирование прогнозирует значительное увеличение деформационного упрочнения по

меров частиц со сверхструктурой  $L1_2$  и степени деформации (рис. 13).

Из рис. 13 видно, что как для материалов с микроразмерными частицами (кривые 2, 3), так и с наноразмерными (кривые 1) прирост аномалии механических свойств увеличивается с увеличением объемной доли упрочняющей фазы. Вместе с этим наноразмерные частицы со сверхструктурой  $L1_2$  вносят существенно более высокий вклад в термическое упрочнение (рис. 13, кривые 1).

Масштабные характеристики упрочняющей фазы оказывают определяющее влияние на вклад различных типов дефектов в общую плотность дислокаций (рис. 14). В материале, упрочненном наноразмерными частицами, имеющими сверхструктуру  $L1_2$ , определяющий вклад в общую плотность дислокаций вносят призматические петли, дислокационные диполи не образуются. Вклад сдвигообразующих дислокаций в общую плотность дислокаций возрастает с ростом температуры де-

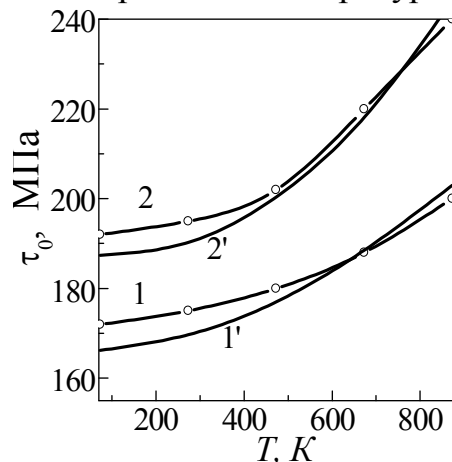
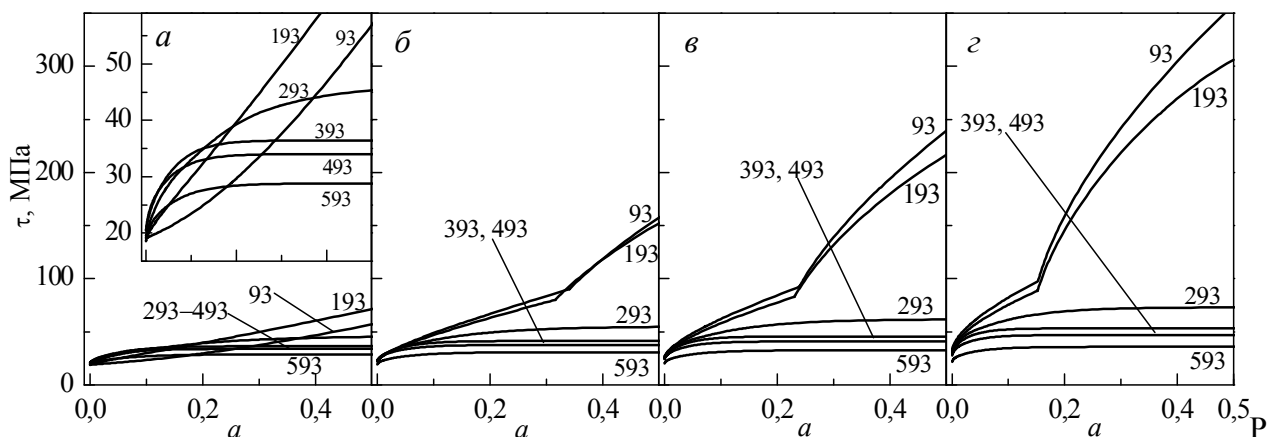


Рис. 15. Температурная зависимость предела текучести сплавов  $Ni-Al$  с объемной долей  $\gamma'$  фазы: 1, 1' – 20%, 2, 2' – 60% (1, 2 – эксперимент [4], 1', 2' – модельные кривые).



сравнению с материалом, в котором присутствуют только когерентные частицы с  $L1_2$  сверхструктурой. Причем, чем больше доля некогерентных частиц, тем выше напряжение течения (рис. 16). Вместе с тем происходит подавление



ис. 16. Зависимость напряжения течения от степени деформации. Материал на основе алюминия, упрочнен ансамблем некогерентных и сверхструктурных  $L1_2$  когерентных частиц. Доля некогерентных частиц в материале: а – 0 %, б – 25 %, в – 50 %, г – 100 %. Диаметр частиц 20 нм, расстояние между частицами 400 нм. Цифры на рисунках – температура в Кельвинах. Скорость деформации  $10^{-2} \text{ с}^{-1}$ .

температурной аномалии механических свойств материала.

Сопротивление деформированию является многофакторной проблемой. Тип упрочняющих частиц является немаловажным фактором, который определяет механизмы преодоления частиц дислокациями, соответственно, в материалах, упрочненных частицами различного типа, формируется различная дислокационная система.

В результате проведенного детального теоретического исследования выявлено, что наибольшее напряжение течения имеет материал, упрочненный некогерентными частицами (рис. 17 кривые 1). При увеличении объемной доли упрочняющей фазы напряжение течения возрастает в результате увеличения генерации геометрически необходимых дислокаций на частицах, а следо-

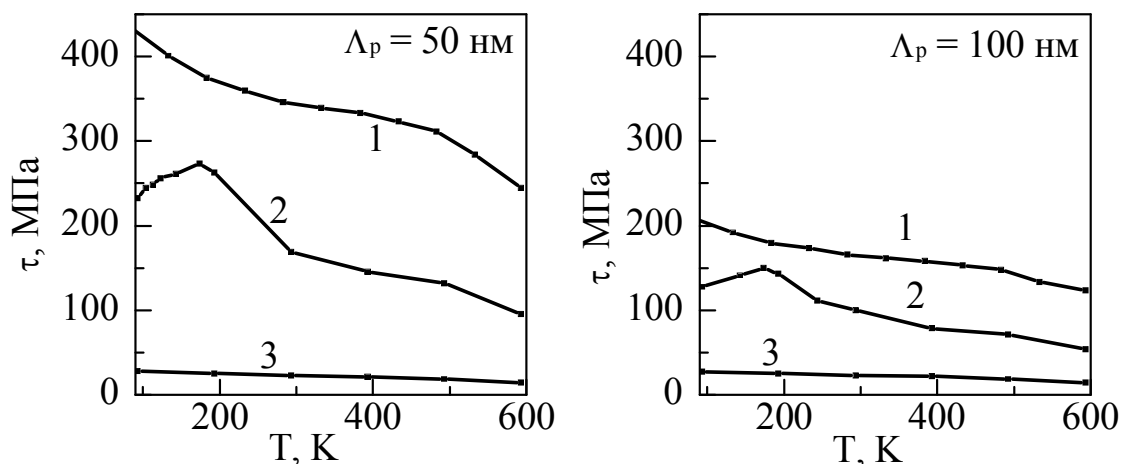


Рис. 17. Зависимость напряжения течения от температуры деформации. Материал на основе алюминия. Расстояние между частицами указано на рисунке, диаметр частиц 10 нм. Тип упрочняющих частиц: 1 – некогерентные частицы, 2 – частицы со сверхструктурой  $L1_2$ , 3 – когерентные частицы. Степень деформации 0,2. Скорость деформации  $10^{-2} \text{ с}^{-1}$ .

вательно, значительном увеличении плотности дислокаций.

В материале, упрочненном частицами со сверхструктурой  $L1_2$ , наблюдается аномальная температурная зависимость механических свойств. При уменьшении расстояния между частицами напряжение течения возрастает (рис. 17 кривые 2), температурная аномалия прочностных свойств становится более выражена. В материале, упрочненном когерентными частицами, напряжение течения самое низкое среди всех исследуемых материалов (рис. 17 кривые 3).

### **Основные результаты и выводы**

1. В диссертационной работе представлено исследование закономерностей процессов пластической деформации гетерофазных сплавов на основе ГЦК-матрицы с частицами различного типа: некогерентными, когерентными и упорядоченными когерентными частицами со сверхструктурой  $L1_2$ .
2. Представлен новый подход к описанию процессов пластической деформации в присутствии упрочняющих упорядоченных частиц со сверхструктурой  $L1_2$ . Показано, что часть упорядоченных частиц в результате формирования в них дислокационных барьеров (барьеры Кира-Вильсдорф для винтовых дислокаций и диффузионные барьеры для краевых дислокаций) могут переходить в процессе скольжения дислокаций в разряд неперерезаемых дислокациями частиц. С ростом температуры деформации число таких частиц возрастает. Такой подход позволил провести теоретические исследования температурной аномалии механических свойств сплавов, упрочненных упорядоченными частицами со сверхструктурой  $L1_2$ .
3. Выявлено посредством численной реализации модели, что увеличение размеров упорядоченных частиц (или уменьшение расстояния между частицами) усиливает аномальный прирост напряжения течения. Показано, что при фиксированной объемной доле упрочняющей фазы со сверхструктурой  $L1_2$ , аномальный прирост напряжения течения возрастает при уменьшении размеров частиц (при усилении дисперсности частиц).
4. Установлено, что с ростом степени деформации интенсивность температурной аномалии напряжения течения увеличивается, пик аномалии смещается в область более низких температур.
5. Показано, что при одинаковой объемной доле упрочняющей фазы присутствие в ГЦК материале наноразмерных некогерентных упрочняющих частиц или упорядоченных частиц со сверхструктурой  $L1_2$  (или ансамбля тех и других) создает условия для более интенсивного деформационного упрочнения по сравнению с материалом, содержащем более крупные (микроразмерные) частицы.
6. Теоретически прогнозируется эффект повышения интенсивности деформационного упрочнения дисперсно-упрочненного сплава с некогерентными частицами в условиях более низких значений объемной доли упрочняющих частиц. Такой эффект связан с появлением в дислокационном ансамбле на ранних стадиях деформации дипольных структур.
7. Показано, что в сплаве с некогерентными упрочняющими частицами влияние скорости деформации на напряжение течения заметно выражено при умеренных температурах ( $0,2 T_{пл} - 0,4 T_{пл}$ ), при которых подвижность точечных

дефектов (вакансий и бивакансий) возрастает. В сплаве с упорядоченными по типу  $L1_2$  частицами обнаружено, что температурная аномалия механических свойств более выражена при деформации с более высокими скоростями, что усиливается при увеличении степени деформации.

8. Выявлено, что в материалах с нанодисперсной упрочняющей фазой доминирующим элементом дислокационной подсистемы являются призматические петли. Дислокационные структуры формируются, в основном, в материалах с более крупными (микроразмерными) частицами и становятся преобладающими в дислокационном ансамбле. Появление дипольных структур зависит от температуры и скорости деформации: при высокотемпературной деформации ( $T \geq 0,5 T_{пл}$ ) диполи не формируются; уменьшение скорости деформации подавляет эффект появления дипольных структур в ансамбле дислокаций.

#### **Цитируемая литература**

1. Гринберг Б.А., Иванов М.А. Интерметаллиды  $Ni_3Al$  и  $TiAl$ : микроструктура, деформационное поведение. Екатеринбург: УрО РАН, 2002.
2. Старенченко В.А., Соловьёва Ю.В., Старенченко С.В., Ковалевская Т.А. Термическое и деформационное упрочнение монокристаллов сплавов со сверхструктурой  $L1_2$ . – Томск: Изд-во НТЛ, 2006. – 292 с.
3. Козлов Э.В., Попова Н.А., Григорьева Н.А. и др. Стадии пластической деформации, эволюция субструктуры и картина скольжения в сплавах с дисперсным упрочнением // Изв. вузов. Физика – 1991. № 3. С. 112-128.
4. Травина Н.Т., Никитин А.А. // Исследование механизма пластической деформации стареющих сплавов никель-алюминий с большой объемной долей  $\gamma'$ -фазы. ФММ. – 1973, том 35, вып. 5, с. 1052-1063.

#### **Основные публикации по теме диссертации**

1. Kovalevskaya T.A., Daneyko O.I., Melkozyorova (Kulaeva) N.A., Kolupaeva S.N. Mathematical modelling of plastic deformation of materials with strengthening nanophase / Book of abstract Fifteenth International Conference on the Strength of Materials, ICSMA-15, August 16-21, 2009, Dresden, Germany. - p. 93.
2. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н., Семенов М.Е., Мелкозерова (Кулаева) Н.А. Влияние скорости деформации на деформационное упрочнение и эволюцию дефектной подсистемы в гетерофазных материалах с ГЦК матрицей / Изв. вузов. Физика. – 2009. – т. 52. – № 9/2. – С. 125-131.
3. С.Н. Колупаева, Т.А. Ковалевская, О.И. Данейко, М.Е. Семенов, Н.А. Кулаева. Моделирование температурной и скоростной зависимости напряжения течения и эволюции деформационной дефектной среды в дисперсно-упрочненных материалах / Известия РАН. Серия физическая, 2010, том 74, № 11, С. 1588-1593.
4. Т.А. Ковалевская, С.Н. Колупаева, О.И. Данейко, М.Е. Семенов, Н.А. Кулаева. Математическое моделирование процессов деформационного упрочнения гетерофазных материалов с наноразмерными упрочняющими частицами / Деформация и разрушение материалов, 2010, № 12, С. 5-10.
5. Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н., Данейко О.И., Кулаева Н. А., Семенов М.Е. Влияние масштабных характеристик упрочняющей фазы на эволюцию

дефектной подсистемы в гетерофазных материалах с ГЦК матрицей // Материаловедение. – 2011. – № 8. - С. 6-11.

6. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н., Кулаева Н.А., Семенов М.Е. Влияние температуры и скорости деформации на эволюцию дислокационной структуры дисперсно-упрочненного материала с ГЦК-матрицей / Изв. вузов. Физика. – 2011. – т. 54. - № 9. – С. 37-40.

7. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н., Кулаева Н.А., Старенченко В.А. Математическое моделирование пластической деформации материала с ГЦК матрицей и упрочняющими частицами со сверхструктурой  $L1_2$  / Известия РАН. Серия физическая, 2014, том 78, № 3, С. 351-356.

8. Данейко О.И., Ковалевская Т.А., Кулаева Н.А., Колупаева С.Н., Шалыгина Т.А., Старенченко В.А. Влияние типа фазовой границы на деформационное упрочнение и эволюцию дефектной подсистемы гетерофазных сплавов с ГЦК матрицей, упрочнённых микро- и наночастицами / Изв. вузов. Физика. 2014. Т. 57. - № 2. – С. 21-29.

9. Olga Daneyko, Tatiana Kovalevskaya, Nadezhda Kulaeva, Svetlana Kolupaeva Influence of Hardening Phase of Coherent and Incoherent Coupling with FCC Matrix on Evolution of Deformation Defect Subsystem and Strain Hardening of Heterophase Alloys/ Advanced Materials Research Vol. 1013 (2014) pp 287-294 © (2014) Trans Tech Publications, Switzerland.

10. Daneyko O.I., Kovalevskaya T.A., Kolupaeva S.N., Kulaeva N.A. Mathematical modeling of the deformation behavior of heterophase alloys at various characteristics of the strengthening phase / IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 71 (2015).

11. Данейко О.И., Кулаева Н.А., Ковалевская Т.А., Колупаева С.Н. Исследование термического упрочнения ГЦК-материала, содержащего упрочняющие частицы со сверхструктурой  $L1_2$  / Изв. вузов. Физика. 2015. Т. 58. - № 3. – С. 46-51.

12. Ковалевская Т.А., Данейко О.И., Кулаева Н.А., Колупаева С.Н. Пластическое поведение гетерофазных сплавов с ГЦК-матрицей, упрочнённых частицами со сверхструктурой  $L1_2$  / Изв. вузов. Физика. 2015. Т. 58. - № 3. – С. 52-57.

13. Daneyko O.I., Kovalevskaya T.A., Kulaeva N.A., Kolupaeva S.N. Mathematical modeling of plastic behavior of fcc alloys containing strengthening particles with superstructure  $L1_2$  / Effect of external influences on the strength and plasticity of metals and alloys / Book of the International seminar articles. Edition in Chief: Professor Sc. D., Starostenkov M.D. 2015. С. 133-134.

14. Tatiana Kovalevskaya, Olga Daneyko, Nadezhda Kulaeva, Svetlana Kolupaeva Influence of the scale characteristics of the hardening phase with  $L1_2$  superstructure on the evolution of deformation point defects /AIP Conf. Proceedings: Advanced Materials in Technology and Construction (AMTC-2015) 1698, 010001 (2016).

---

Подписано в печать 02.05.16.

Формат 60×84 1/16. Бумага офсет. Тираж 100 экз. заказ № 310

Изд-во ТГАСУ. 634003, г. Томск, пл. Соляная, 2.