

ИССЛЕДОВАНИЕ АККОМОДАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ТРОЙНЫХ СТЫКАХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Р. Т. Мурзаев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
г. Уфа, Россия

Одним из основных механизмов деформации мелкозернистых поликристаллов при высоких температурах является зернограничное проскальзывание (ЗГП). При деформации поликристаллов получают в основном усредненные характеристики ЗГП. Экспериментальные исследования особенностей и механизмов ЗГП проводят на модельных бикристаллах. Однако деформационное поведение поликристаллов зависит не только от собственно проскальзывания по границам зерен, но и от степени аккомодации ЗГП в тройных стыках (ТС) зерен. Для изучения роли ТС в развитии деформационных процессов используют модельные трикристаллы [1-3]. Для выявления общих закономерностей влияния тройных стыков при деформации нанокристаллических структур неопределимую роль играет компьютерное моделирование. Метод молекулярной динамики позволяет моделировать поликристаллические структуры металлов на атомном уровне, также можно качественно оценить процессы, которые происходят при пластической деформации как в двумерной [4], так и в квазидвумерной постановках задачи [5].

В настоящей работе методом молекулярной динамики была исследована самоорганизация наноструктуры при деформации и проведен ее сравнительный анализ с развитием характерных аккомодационных процессов при высокотемпературной ползучести модельных трикристаллов.

Описание модели и методики компьютерного эксперимента

Для компьютерного моделирования в качестве исходной структуры рассматривался двумерный гексагональный кристалл, который представляет собой отдельную плоскость $\{111\}$ ГЦК металла. Расчетная ячейка состояла из четырех зерен правильной шестиугольной формы с размером $243a$ (a – па-

раметр решетки), имеющих одинаковые размеры, но с различными кристаллографическими ориентациями. На расчетную ячейку были наложены периодические граничные условия. Деформация осуществлялась в режиме ползучести при разных постоянных сдвиговых напряжениях и при постоянной температуре $T=0,75T_{пл}$ ($T_{пл}$ – температура плавления). При этом исследовались эволюция микроструктуры и системы тройных стыков ГЗ.

Обсуждение результатов

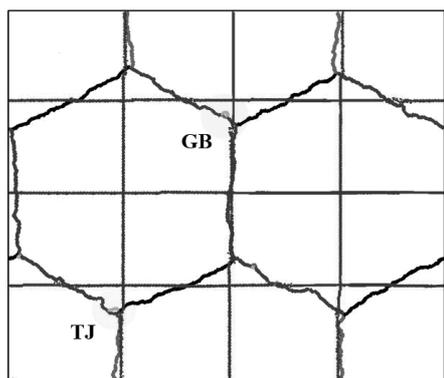
На рисунке 1а показана микроструктура при значении деформации 1%, полученная моделированием при постоянной нагрузке. Видно, что на одном из тройных стыков зерен и на «смежной» с ним границе в локальной области появились первые признаки аккомодации в виде «петли» неустойчивости положений атомов, которые представляют собой разворот небольшого участка зерна. Данные «смежные» области расположены вдоль направления действия максимальных сдвиговых напряжений. Сдвиговые уступы в тройных стыках зерен и ступеньки микроскопического масштаба на несовершенствах границы являются эффективными концентраторами напряжений. На рисунке 1б, в крупном плане показаны области зарождения субзерен на границе «GB» и в тройном стыке «TJ». Образование новых зерен способствует релаксации локальных внутренних напряжений на отдельных участках границ зерен и тройных стыков.

На рисунке 2 показана структура системы тройных стыков ГЗ, полученная моделированием при пластической деформации на 3%. Тройные стыки, в которых проявляется согласованный механизм миграции ГЗ, имеют общую границу и являются смежными по отношению друг к другу. В данной структуре наблюдается «закручивание» тройного стыка,

которое проявляется в виде направленной (кооперированной) миграции всех границ, образующих тройной стык. На рисунке 2 обозначены типы «пропеллерообразной» миграции ГЗ относительно линии тройного стыка как TC(-) и TC(+). Это соответствует вращению против и по часовой стрелке, соответственно. Таким образом, наблюдается согласованная кооперативная миграция ГЗ в системе тройных стыков зерен по типу диполь-

ного взаимодействия.

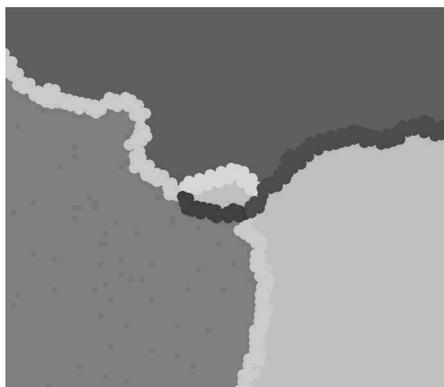
Увеличение степени деформации до 4% привело к испусканию решеточных дислокаций из тройного стыка и уступов ГЗ в аккомодационные зерна (см. рисунке 3). Данный процесс связан с тем, что в процессе пластической деформации происходит накопление внутренних напряжений в области ГЗ вследствие захвата решеточных дислокаций ГЗ и образование на тройных стыках дисклиний.



а)



б)



в)

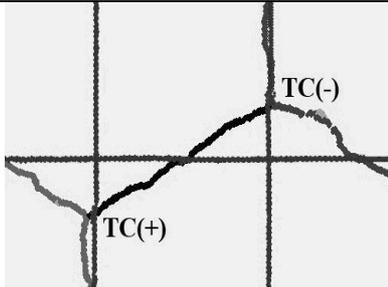
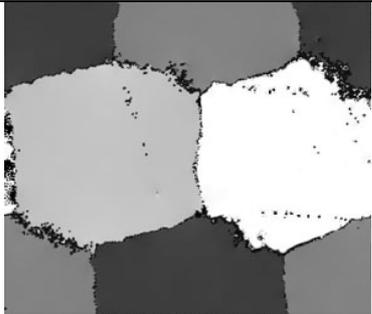
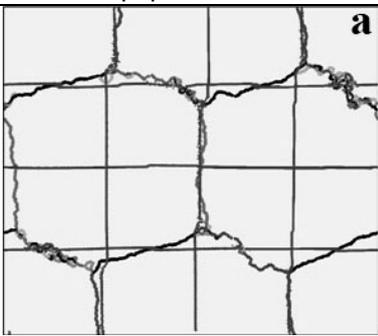
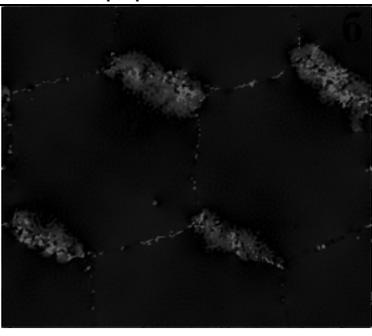
Рисунок 1 – Микроструктура при значении пластической деформации 1%: (а) система ГЗ и тройных стыков. В увеличенном масштабе показано зарождение субзерен б) на ГЗ и в) в тройном стыке.

Испускание дислокаций из тройных стыков дает возможность релаксации дальнедействующих внутренних напряжений. Для уступов как концентраторов напряжений при данных условиях происходит дополнительная релаксация внутренних напряжений. В обоих случаях релаксация внутренних напряжений представляется в виде появления дислокационной стенки. Увеличение степени деформации приводит к расширению области неустойчивости положений атомов в зернах вблизи ГЗ, «пропеллерообразной» миграции ГЗ и испусканию решеточных дислокаций у тройных стыков.

На рисунке 4 показана структура системы тройных стыков ГЗ при пластической де-

формации 5%. Наибольшие неустойчивости в виде отклонения положений атомов и области локальной миграции ГЗ наблюдаются в основном на ГЗ перпендикулярных оси растяжения. Сопоставляя с картой гидростатических напряжений, видно (см. рисунок 4б), что на данных ГЗ образуются области растяжения. В областях повышенного свободного объема подвижность атомов возрастает, и вследствие этого границы легко изменяют свое положение. При этом образуются зародыши новых зерен в виде отдельных субзерен вдоль всей ГЗ. Т.е. запускается дополнительный механизм аккомодации деформации в виде начала фрагментации зерна вдоль ГЗ.

ИССЛЕДОВАНИЕ АККОМОДАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ТРОЙНЫХ СТЫКАХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

	
<p>Рисунок 2 – Кооперированная миграция ГЗ в системе ТС зерен, где ТС(-) и ТС(+) соответствует «пропеллерообразному» вращению при пластической деформации на 3%..</p>	<p>Рисунок 3 – Образование дефектов в структуре в виде испускания решеточных дислокаций из тройного стыка и уступов ГЗ при пластической деформации на 4%.</p>
	
<p>Рисунок 4 – Структура системы тройных стыков ГЗ (а) и карта гидростатических напряжений (б), полученная моделированием при пластической деформации на 5%.</p>	

Выводы

Полученные в данной работе результаты компьютерного моделирования показывают хорошее качественное совпадение с аккомодационными процессами, наблюдаемыми в прямых экспериментах на трикристаллах алюминия [1-3]. Данное исследование позволило выявить на атомном уровне особенности начальной стадии зарождения аккомодационных процессов при деформации нанозерен. Установлено, что ЗГП и аккомодационные моды деформации развиваются одновременно в поле напряжений. Испускание решеточных дислокаций из тройного стыка и уступов ГЗ в зерна происходит не только при аккомодации накопленной несовместности пластической деформации из-за сдвигов на границах, но и при релаксации внутренних напряжений. Также выявлена кооперативная «пропеллерообразная» миграция ГЗ в системе тройных стыков зерен.

Автор признателен Сисанбаеву А.В. за идею данного исследования и плодотворные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герцман В.Ю., Сисанбаев А.В., Валиев Р.З. Физика металлов и металловедение 1989; Т. 68, № 3, С. 590.
2. Sisanbaev A.V., Valiev R.Z. Acta Metall Mater 1992; 40: 3349.
3. Astanin V.V., Sisanbaev A.V., Pshenichnyuk A.I., Kaibyshev O.A. Scripta Metall Mater 1997; 36: 1: 117.
4. Баимова Ю.А., Дмитриев С.В. Динамика мезоуровневых структур в двумерном поликристалле при активной пластической деформации // Физическая мезомеханика. Т.13, №16, с.47-51, 2010.
5. Shimokawa T., Kinari T., Shintaku S. and Nakatani A. // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. V. 14 2006 P. S63-S72.