Вестник УГАМД

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ

УДК 539.3:004.9

И. В. Александров, Р. Г. Чембарисова, М. И. Латыпов

АНАЛИТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕНИЯ ТЕЧЕНИЯ СПЛАВА AL 1570, ПОДВЕРГНУТОГО ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

В работе представлена развитая на основе уравнений дислокационной кинетики математическая модель, позволяющая описывать и анализировать прочностные характеристики металлов и сплавов. Составлены уравнения эволюции плотности дислокаций в сплаве AI 1570 с учетом его состояния и структурных особенностей, сформированных в результате интенсивной пластической деформации. Рассчитаны зависимости условного предела текучести от размера зерен в координатах Холла-Петча, а также интенсивности процессов динамического возврата от размера зерен. Ультрамелкозернистые материалы; закон Холла-Петча; моделирование деформационного поведения

введение

Механические свойства являются важным аспектом привлекательности объемных ультрамелкозернистых (УМЗ) материалов как нового поколения конструкционных материалов. Изначально надежды исследователей на высокую прочность УМЗ материалов связаны с широко известным законом Холла-Петча (ХП) [1], который предсказывает повышение прочности материала при уменьшении размера зерен:

$$\boldsymbol{\tau}_T = \boldsymbol{\tau}_{0\mathrm{XII}} + K d^{-1/2} \,, \tag{1}$$

где τ_T – предел текучести или напряжение течения, $\tau_0 X\Pi$ – сопротивление движению дислокаций, не зависящее от размера зерен, K – коэффициент XП, d – средний размер зерен.

Несмотря на то, что первоначально это соотношение устанавливало связь исключительно между нижним пределом текучести и размером зерен в стали, в литературе указывают на справедливость выражения (1) для широкого круга металлических материалов [2].

Более того, согласно работе [3] выражение (1) выполняется и для напряжения течения, значительно превышающего предел текучести.

1. ОТКЛОНЕНИЯ ОТ ЗАКОНА ХОЛЛА–ПЕТЧА

Начиная с 1989 г., в литературе активно обсуждаются отклонения от значений, предсказанных соотношением ХП [2, 4–10]. В работе [2] в зависимости от того, насколько применим закон ХП для различных материалов, в результате анализа экспериментальных данных выделены три области размеров зерен: а) область от монокристалла до зерен размером порядка 1 мкм, где соотношение (1) выполняется;

б) область зерен размером от 1 мкм до 30 нм, где закон XII грубо выполняется, но классический показатель –0,5 отклоняется к значению, близкому к нулю;

в) область зерен с очень мелким размером менее некоторого критического (порядка 20...30 нм), для которой характерен нулевой показатель с отсутствием повышения или даже понижением прочности при уменьшении размера зерен.

Тип (в) уменьшения прочностных характеристик с уменьшением размера зерен называют «обратным» соотношением ХП [5, 7, 11].

2. МЕХАНИЗМЫ И МОДЕЛИ

На сегодняшний день основным механизмом деформации материалов с размером зерен, соответствующим группам (а) и (б), общепринято считать дислокационный механизм [5]. При этом пластическая деформация поликристалла отличается от таковой, характерной для монокристалла, по двум причинам [12]:

• барьерный эффект – непроницаемость границ зерен (ГЗ) для дислокаций;

 усложнение деформации (для сохранения сплошности материала в ходе деформации при разной ориентировке плоскостей скольжения в каждом зерне должно действовать больше систем скольжения, чем в монокристалле той же ориентировки).

В рамках дислокационного механизма для объяснения возникновения соотношения типа (1) были разработаны две классические модели [3].

Контактная информация: 8(347)273-79-77

Модель скопления дислокаций. Так как ГЗ являются непроницаемыми барьерами для дислокаций, скольжение приводит к скоплению дислокаций у ГЗ, что вызывает появление концентрации напряжений и активизацию дислокационных источников в соседних зернах (эстафетный механизм деформации).

Модель деформационного упрочнения. В этой модели предполагается, что при данной степени деформации плотность дислокаций в образце с мелкими зернами выше, чем с крупными, что приводит к большему внутреннему напряжению и, следовательно, к большему напряжению течения у такого материала. Следовательно, величина зерен влияет на напряжение течения материала косвенно благодаря воздействию масштабного фактора на плотность дислокаций.

Относительно механизмов деформации материалов с наиболее мелкими зернами (менее 30 нм) мнения исследователей расходятся. В литературе имеются упоминания о действии таких механизмов, как скольжение дислокаций, скольжение частичных дислокации, двойникование, зернограничное проскальзывание, поворот зерен [13].

Несмотря на многообразие точек зрения, авторы приходят к единому мнению о возрастающей роли ГЗ при деформации УМЗ материалов [13, 5].

3. АЛЮМИНИЕВЫЕ СПЛАВЫ, ПОДВЕРГНУТЫЕ ИПД

Одним из привлекательных объектов исследований на сегодняшний день являются алюминиевые сплавы, в которых УМЗ состояния формируются в результате интенсивной пластической деформации (ИПД). Показатели прочности этих сплавов также обнаруживают отклонения от закона ХП, однако, в отличие от описанных ранее, – в большую сторону [9].

Авторы работ [9, 14] получили высокие значения предела текучести около 900 МПа в алюминиевых сплавах Al 1570 (Al–5,7Mg–0,32Sc–0,4Mn, вес. %) и Al 7475 (Al–5,7Zn–2,2Mg–1,6Cu–0,25Cr, вес. %), подвергнутых интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) при комнатной температуре (КТ).

Особенности структуры и механические свойства сплава Al 1570, подвергнутого ИПДК, подробно описаны в работе [14]. Образцы сплава, вырезанные из горячепрессованного прутка, нагревали до температуры 380 °C в течение 2 ч с целью получения предельной концентрации

магния в твердом растворе, достижения максимального эффекта твердорастворного упрочнения, а также обеспечения максимального измельчения зерен в процессе деформации. После ИПДК исходная крупнозернистая (КЗ) структура полностью трансформируется в УМЗ структуру со средним размером зерен 130 нм и преимущественно большеугловыми границами зерен. Были также получены свидетельства высокого уровня внутренних упругих напряжений в этом сплаве.

Выдающуюся прочность этих сплавов связывают, прежде всего, с выделением атомов магния из твердого раствора в области ГЗ в результате ИПДК. К выводу об образовании сегрегаций в области ГЗ авторы [9, 14] приходят, опираясь на полученные данные об изменении параметра решетки, и подтверждают этот факт результатами исследований методом пространственной атомной томографии.

Выделение растворенных атомов из твердого раствора будет приводить к уменьшению параметра решетки, в частности, для системы Al– Mg – на 0,0043 Å или на 0,0046 Å согласно [12] и [15] соответственно. Выделение атомов легирующих элементов из твердого раствора может быть связано с образованием сегрегаций или выделением частиц. В случае сплава Al 1570 полученное значение концентрации атомов магния в области шириной около 3 нм вдоль ГЗ, равное $\approx 1.8 \times 10^{28}$ м⁻³ (≈ 23.1 ат. %), намного ниже, чем характерное для частиц Al₃Mg₂ значение (40 ат. %), что исключает второй вариант.

Похожие данные об образовании сегрегации атомов легирующих элементов были получены при исследовании сплава Al 6061 системы Al-Mg-Si (Al-1,0Mg-0,6Si-0,3Cu-0,25Cr-0,15Mn-0,7Fe-0,25Zn-0,15Ti, вес. %) в работе [16]. Сплав нагревали до температуры 530 °С в течение 2 ч с последующим быстрым охлаждением в воде со льдом. В результате в сплаве была сформирована КЗ структура со средним размером зерен около 500 мкм. Механические испытания на растяжение показали существенное увеличение предела текучести с одновременным уменьшением пластичности до 5,5 %. Старение образцов сплава после ИПДК не способствовало дальнейшему увеличению предела текучести. Значение предела текучести (660 МПа) было намного выше, чем после традиционной обработки (≈ 270 МПа) – искусственного старения в течение 12 ч при 160 °С после закалки с температуры 530 °С. Оно было также выше, чем предел текучести этого же сплава, обработанного другими видами ИПД, такими как равноканально-угловое прессование (РКУП) (390 МПа [17]), РКУП с последующим старением (415 МПа [17]), РКУП с последующей холодной прокаткой (475 МПа), многоцикловая прокатка (363 МПа) или РКУП, использованное для консолидирования порошка [16].

Изучение структуры сплава после ИПДК показало, что равноосные зерна со средним размером около 100 нм с высокоугловыми ГЗ формируются как в центре, так и на середине радиуса образцов. Средний размер зерен около 100 нм наблюдался также в образцах алюминиевых сплавов систем Al-Mg-Li и Al-Zn-Mg, в то время как в технически чистом алюминии средний размер зерен достигал лишь порядка 800 нм, что может говорить о том, что наличие легирующих элементов играет ключевую роль в измельчении зеренной структуры [16]. К другим особенностям структуры сплава Al 6061, подвергнутого ИПДК, можно отнести высокий уровень внутренних упругих напряжений и искажений кристаллической решетки, связанный с наличием высокой плотности дислокаций, а также наличие дисперсных частиц Mg₂Si со средним размером 10...20 нм. Исследования методом 3D атомной томографии показали уменьшение концентрации атомов легирующих элементов в твердом растворе в результате ИПДК аналогично случаю атомов магния в сплаве Al 1570, но в менее выраженной степени. Авторы связывают это уменьшение также с образованием сегрегаций, удлиненная форма которых может свидетельствовать об их преимущественном зарождении вдоль дислокаций.

Таким образом, при исследовании структуры алюминиевых сплавов, обнаруживающих весьма (сплав Al 6061) или даже рекордно высокую (сплав Al 1570) прочность, выявлены сегрегации примесных атомов вдоль ГЗ. Авторы работ [9, 18] закономерно отводят этому явлению ключевую роль в формировании таких сверхпрочных состояний.

4. ДИСЛОКАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ

Одним из наиболее универсальных подходов к изучению деформационного поведения материалов является моделирование на основе уравнений дислокационной кинетики, которые позволяют получать зависимости средней плотности дислокаций и напряжения течения от степени деформации, размера зерен, температуры, и скорости деформации. Основное преимущество таких моделей состоит в том, что они способны описать большинство наблюдаемых эффектов, касающихся прочности и пластичности металлов в диапазоне от наноструктурных (HC) до K3 состояний [11].

Как следует из литературных данных, УМЗ и НС материалы являются интересными и перспективными объектами исследований как с исследовательской (с целью изучения физических механизмов на субмикронном и нано уровнях), так и с практической точек зрения. УМЗ и НС материалы претендуют на роль материалов нового поколения с уникальным сочетанием свойств. В то же время, остается множество нерешенных проблем, в том числе касающихся выяснения причин формирования механических свойств этих материалов. Среди них - причины отклонения уровня прочностных свойств от предсказываемого законом ХП в диапазоне от ультрамелких до нанометрических зерен. Целью настоящей работы является разработка и применение дислокационной модели для анализа экспериментальных данных, касающихся прочности сплава Al 1570, подвергнутого ИПД, обнаруживающей отклонения от закона ХП.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Учитывая представленные выше результаты экспериментальных исследований в развиваемой модели для анализа напряжения течения алюминиевых сплавов, подвергнутых ИПД, были учтены три возможных механизма деформационного упрочнения.

1. Закрепление дислокаций атмосферами примесных атомов

Поскольку, как показал эксперимент, ИПД может приводить к выделению сегрегаций в сплаве Al 1570, в развиваемой модели проведен учет закрепления дислокаций примесными атомами.

Скопление атомов примеси на дислокациях и дефектах упаковки (сегрегация) ограничивает возможности пластического течения. Отягощенная сегрегацией дислокация требует дополнительных усилий для своего перемещения σ_{ag} , а если такое напряжение σ_{ag} недостижимо, то это означает блокировку – исключение ее из числа подвижных. В обоих случаях сегрегации увеличивают сопротивление пластической деформации и упрочняют материал [12].

Напряжение закрепления τ_{ag} определяется временным законом изменения добавочного напряжения, связанного с накоплением приме-

сей в зависимости от времени в окрестности краевой дислокации в алюминиево-магниевых сплавах [19]:

$$\tau_{ag} = \Delta \tau_0 (1 - e^{-t/t_s}),$$

$$t_s = (6 \cosh(\Delta \overline{W} / 2kT) \Gamma_c)^{-1},$$

$$\Gamma_c = v_D e^{-\Delta H_c/kT},$$

$$\Delta \tau_0 = 2\alpha' c_0 \Delta \overline{W} \tanh(\Delta \overline{W} / 2kT) / \sqrt{3}b^3,$$
(2)

где $\Delta \tau_0$ – асимптотическое значение напряжения закрепления, $\Delta \overline{W} \approx 0,13$ эВ – разность средней энергий связи между областями сжатия и растяжения в окрестности ядра дислокации, $\Delta H_c \approx$ $\approx 0,97$ эВ – среднее значение энтальпии активации перехода из области растяжения в область сжатия, $\alpha' \approx 0,56$ – параметр, зависящий от термодинамической движущей силы $\Delta W \sim 0,13 \pm 0,02$ эВ и величины $\Delta \overline{W}$, c_0 – атомная концентрация раствора.

2. Торможение дислокаций при консервативном скольжении

На начальном этапе пластической деформации ИПД материалов с сегрегациями примесных атомов вдоль ГЗ дислокации могут оторваться от атмосфер примесных атомов и скользить в теле зерен. При этом дислокации при своем движении взаимодействуют друг с другом, а также с другими дефектами и препятствиями, которые затрудняют движение дислокаций. Для дальнейшего движения им требуется дополнительный подвод энергии, чему и соответствует упрочнение. В рамках развиваемой модели учтены как торможение дислокаций при их упругом взаимодействии, так и при их взаимодействии с твердым раствором.

Торможение дислокаций при их упругом взаимодействии. Между дислокациями существует упругое дальнодействие через поле напряжений [20]. По мере развития пластической деформации по разным причинам торможение дислокаций при их взаимодействии усиливается, что обусловливает наклеп. Экспериментальные данные и теоретический анализ с использованием разных моделей торможения дислокаций показал, что напряжение течения τ_d растет пропорционально корню квадратному из плотности дислокаций [21] согласно соотношению

$$\tau_d = \alpha G b \rho^{1/2} \,, \tag{3}$$

где α – коэффициент, учитывающий термическую активацию дислокационного взаимодействия, *G* – модуль сдвига, *b* – вектор Бюргерса. Упрочнение твердых растворов. В общем виде прирост предела текучести, благодаря твердорастворному упрочнению имеет вид

$$\sigma_c = K_c c^n,$$

где K_c – концентрационное упрочнение, c – весовая концентрация растворенного элемента, n – показатель степени.

В различных моделях *n* варьируется от 1/2 до 4/3 [12, 22, 23, 24]. Однако обычно прирост не настолько велик, чтобы отличить его от линейной зависимости с n = 1 [12].

Трение решетки. Для того чтобы продвинуть единственную прямолинейную дислокацию в совершенном кристалле, требуется приложить к нему некоторое конечное напряжение. Сила, препятствующая скольжению прямолинейной дислокации, называется силой Пайерлса–Набарро [21, 22]. Вычислить напряжение Пайерлса–Набарро очень трудно, а расчет ее величины, проведенный в литературе для конкретных структур [22, 25], является недостаточно строгим.

3. Упрочнение за счет эволюции плотности дислокаций

В развиваемой модели использована известная связь между напряжением течения τ_d , обусловленным взаимодействием дислокаций друг с другом, и плотностью дислокаций ρ (3) [3, 26].

Считалось, что увеличение плотности дислокаций в поликристалле (из-за наличия в нем ГЗ) происходит в результате ограничения свободного пробега дислокаций и несовместности деформации в различных зернах. Согласно работе [11], для учета влияния ГЗ на накопление дислокаций введем в уравнение эволюции плотности дислокаций слагаемое

$$\frac{d\rho^+}{d\gamma} = \frac{\beta}{bd}$$

с обобщенным коэффициентом β, который будет подгоночным.

Помимо влияния ГЗ дополнительно учитывалось возможное увеличение плотности дислокаций вследствие их размножения двойным поперечным скольжением. Этот процесс рассмотрен в работах [12, 25]. Различают размножение на препятствиях деформационного и недеформационного происхождения, в обоих случаях накопление дислокаций определяется длиной свободного пробега дислокаций между препятствиями – λ_d и λ_P соответственно [11]: И. В. Александров, Р. Г. Чембарисова, М. И. Латыпов • Аналитическое моделирование напряжения...

$$\frac{d\rho^+}{d\gamma} = \frac{1}{b\lambda_d} + \frac{1}{b\lambda_P}$$

Для расчета λ_P воспользуемся эмпирической зависимостью, представленной в работе [11],

$$\lambda_{P} = A_{P} \frac{Gb}{\tau_{P}}, \qquad (4)$$

где *A_P* – численный коэффициент, *τ_P* – упрочнение частицами выделений.

Известно, что сидячие дислокации являются эффективными барьерами для скользящих дислокаций (барьеры Ломера–Коттрелла) [21]. Поэтому их также учитываем как препятствия, на которых возможно размножение двойным поперечным скольжением. Расстояние между актами последнего λ_d определяли согласно выражению, полученному на основе экспериментальных данных [11]:

$$\lambda_d = A_d \frac{1}{\rho^{1/2}},\tag{5}$$

где *А*_{*d*} – численный коэффициент.

В то же время предполагали, что плотность дислокаций может уменьшаться во время деформации в результате динамического возврата [12].

В рамках данной модели считалось, что указанные процессы происходят независимо. Это приводит к их линейному сложению в уравнении эволюции плотности дислокаций, как и в работе [26]:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{\beta}{bd} + \frac{1}{b\lambda_p} + \frac{1}{b\lambda_d} - k\rho, \qquad (6)$$

где *k* – коэффициент, учитывающий всевозможные процессы динамического возврата.

Аннигиляция краевых дислокаций в ГЗ определяется временем их растворения в границе $t_1 = l^3 / \eta_1 b D_b$ [27, 11] и временем парной аннигиляции в них дислокаций противоположного знака $t_2 = l^2 / 4\eta_2 D_b$ [6, 11, 28, 29, 30], $\eta_1 \approx \eta_2 \approx G b^3 / kT$. Предполагая, что указанные процессы протекают независимо друг от друга, а их характерные времена зависят от максимального расстояния в границе l = d, коэффициент k в уравнении (6) был записан в виде $k = k_1 + k_2$, где

$$k_i = \frac{1}{\gamma t_i} \,. \tag{7}$$

В выражениях (7) присутствует коэффициент самодиффузии в ГЗ *D*_b:

$$D_b = D_{b0} \exp\left(-\frac{Q_b}{kT}\right),\tag{8}$$

где D_{b0} – предэкспоненциальный множитель зернограничной диффузии, Q_b – энергия активации самодиффузии в ГЗ.

Коэффициент аннигиляции винтовых участков дислокаций *k*_a, согласно [31], равен

$$k_a = \frac{\omega_s^{5/2}}{\pi^2 p} \left(\frac{G}{\tau_a} \right), \tag{9}$$

где ω_s — доля винтовых участков дислокационных петель, p — число систем скольжения; τ_a напряжение, определяющее критическое расстояние спонтанной аннигиляции винтовых дислокаций разного знака.

Напряжение т_а определяется суммой [31]

$$\tau_a = \tau_C + \tau_{III}, \qquad (10)$$

где τ_C – твердорастворное упрочнение.

Наличие слагаемого τ_C в выражении (10) обусловлено тем, что торможение дислокаций атомами растворенных элементов препятствует поперечному скольжению, так как примесь искривляет дислокацию, а для поперечного скольжения нужна абсолютно прямая дислокация [12].

Напряжение т_{III} зависит от температуры и ЭДУ [12, 31]. Необходимое для расчетов значение было получено из соотношения [31]:

$$\ln \frac{\tau_{III}}{G} = \ln \frac{\tau_{III}(0)}{G(0)} - \frac{k_B}{A(0)} \ln \left(\frac{\dot{\gamma}_0}{\dot{\gamma}}\right) \frac{T}{F(T)}, \quad (11)$$

где G(0) – модуль сдвига при T = 0, A(0) – константа, имеющая размерность энергии,

$$F(T) = \frac{G(T)b^{3}(T)}{G(0)b^{3}(0)} -$$
безразмерная функция тем-

пературы для исключения влияния температурной зависимости модуля сдвига *G* и вектора Бюргерса *b*.

Пренебрегая небольшой температурной зависимостью этих величин (т. е. приняв $F(T) \approx 1$) и потенциируя выражение (11), было получено

$$\frac{\boldsymbol{\tau}_{III}}{G} = \frac{\boldsymbol{\tau}_{III}(0)}{G(0)} \left(\frac{\boldsymbol{\cdot}}{\boldsymbol{\gamma}_0}\right)^{\frac{k_BT}{A(0)}}.$$

Используем зависимость $\tau_{III}(0)$ от ЭДУ γ_D [31], представленную выражением

$$\tau_{III}(0) = \frac{2G(0)}{n} \left(0.056 - \frac{\gamma_D}{Gb^3} \right),$$

119

где n – число дислокаций в скоплении. Формула для расчета критического напряжения τ_{III} , необходимого для поперечного скольжения, в зависимости от ЭДУ γ_D имеет вид:

$$\tau_{III} = \frac{2G}{n} \left(0,056 - \frac{\gamma_D}{Gb^3} \right) \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_0} \right)^{\frac{\kappa_B I}{A(0)}}, \quad (12)$$

где отношение $\frac{k_{\scriptscriptstyle B}T}{A(0)}$ определяется из графика

[31], а $\dot{\gamma_0}$ – из выражения [32]

$$\gamma_0 = b^2 \rho_m v_D,$$

где ρ_m – плотность подвижных дислокаций, v_D – частота Дебая, определенная из выражения [22]

$$\mathbf{v}_D = \frac{k_B T_D}{h},\tag{13}$$

где T_D – температура Дебая, h – постоянная Планка.

ЭДУ имеет «электронное» происхождение [20] и сильно зависит от состава твердых растворов, а в чистых непереходных металлах – от их валентности: высокая в поливалентных (Al, Zn, Mg), низкая – в одновалентных (Cu, Au, Ag). Растворение любой примеси замещения в любом чистом металле понижает ЭДУ [20]. В случаях ограниченной растворимости концентрационная зависимость ЭДУ чаще всего бывает нелинейной, затухающей до $\frac{d\gamma_D}{dc_A} \approx 0$ у границы

растворимости. Ее удачно аппроксимировали зависимостью [20]

$$\frac{\gamma_D(c_A)}{\gamma_D(0)} = \exp\left(-\frac{K_D x^2}{(1+x)^2}\right)$$

где $\gamma_D(c)$ – ЭДУ твердого раствора с концентрацией растворенного элемента c_A , $\gamma_D(0)$ – ЭДУ чистого металла, K_D – некоторый коэффициент,

 $x = \frac{C_A}{c_A^{\max}}$ – расстояние до границы растворимо-

сти c_A^{max} . Также в литературе встречается аппроксимация простой гиперболической зависимостью. В работе [33] подробно исследовано влияние концентрации основных легирующих элементов – Mg, Cu, Ag конкретно на ЭДУ алюминия, поэтому при расчетах воспользуемся результатами этой работы.

С учетом аннигиляции винтовых участков дислокаций k_a , коэффициент, учитывающий всевозможные процессы динамического возвра-

та *k* в уравнении (6), с учетом независимости всевозможных процессов динамического возврата принимает вид

$$k = k_1 + k_2 + k_a$$

СУПЕРПОЗИЦИЯ МЕХАНИЗМОВ УПРОЧНЕНИЯ

Наиболее общим и простым правилом сложения составляющих упрочнения является линейное сложение [12, 23, 34]:

$$\tau = \sum \tau_i , \qquad (14)$$

где τ – напряжение течения или предел текучести, τ_i – вклад *i*-го механизма упрочнения.

Линейная сумма дает лучшую аппроксимацию при наличии в материале небольшого количества прочных и большого числа мягких препятствий.

В рамках данной модели линейное сложение (14) можно считать удовлетворительным приближением, так как, например, при движении дислокаций и их взаимодействии на всю их длину действует сопротивление решетки и твердого раствора.

При определении эквивалентного одноосного напряжения течения поликристалла σ [23]:

$$\sigma = M\tau, \qquad (15)$$

где M — константа, называемая фактором Тейлора, использованы модель Тейлора [12, 23] и значение M = 3,07 [11]. Значения величин, использованных при расчетах, приведены в таблице.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сплав Al 1570 является термически неупрочняемым, следовательно, размножение дислокаций в результате двойного поперечного скольжения у препятствий недеформационного происхождения осуществляться не будет.

Плотность дислокаций в сплаве Al 1570, подвергнутом ИПДК, достигает порядка 10^{14} м⁻² [14]. Согласно выражению (5), длина свободного пробега дислокаций между сидячими дислокациями $\lambda_d \sim 10^{-5}$ м, что на два порядка превышает средний размер зерен *d* УМЗ материалов (порядка 10^{-7} м). Следовательно, этот механизм размножения дислокаций не будет вносить вклад в увеличение плотности дислокаций в УМЗ материале. Оценка величины λ_d для KЗ состояния сплава Al 1570 дает тот же результат, но с меньшей разницей: на один порядок.

	Значения в	еличин, использованнь	іх при расчетах	
Величина	Значение		Место использования	Источник
		Константы материала		
<i>Т</i> _{пл} , К	933			[20]
<i>Т</i> _{<i>D</i>} , К	0,46 T _{пл}		(12)	[20]
<i>G</i> , Па	26,8×10 ⁹		(3), (12)	[20]
<i>b</i> , м	$a\sqrt{2}/2$		(3), (6), (12)	[21]
	Значения,	принятые в рамках данн	ой работы	
М	3,07		(15)	[24]
$D_{b0}, { m M}^2/{ m c}$	$8,7 \times 10^{-5}$		(8)	[36]
Q_b , Дж	10,8 <i>k</i> _B <i>T</i> _{пл.}		(8)	[36]
п	10		(12)	[12]
k_BT/A	0,006		(12)	[37]
(0)				
A_p	75		(4)	[11]
A_d	100		(5)	[11]
ω _s	0,5		(9)	[11]
р	12		(9)	[11]
	Э	кспериментальные даннь	іе	
	КЗ сплав	УМЗ сплав		
<i>d</i> , м	60×10^{-6}	130×10 ⁻⁹	(6)	[14]
р ₀ , м ⁻²	10^{11}	$0,51 \times 10^{15}$	(17)	[14]
σ _{0.2} , Па	231×10^{6}	905×10 ⁶	(19)	[14]
γ _D , Дж	90×10 ⁻³		(12)	[33]
		Условия испытаний		
<i>Т</i> , К	298			[14]
$\mathbf{\hat{\epsilon}}$, \mathbf{c}^{-1}	1×10 ⁻⁴			[14]
	П	одгоночные коэффициен	ГЫ	
α	0,54		(3)	
β	1		(17)	

Таблица

В случае КЗ сплава считаем, что ГЗ находятся в равновесном состоянии, т. е. процессы уменьшения плотности дислокаций будут представлены только аннигиляцией винтовых дислокаций при поперечном скольжении: $k = k_a$.

Характеристическое время «возврата» ГЗ быстро возрастает при увеличении размера зерен: $t_1 \sim d^3$ и для КЗ материалов принимает огромные значения, а соответствующий коэффициент $k_i \sim 1 / t_i$ – ничтожно малые. Т. е. время t_i имеет эффективные значения и влияет на эволюцию плотности дислокаций только в материалах с очень мелкими зернами. С другой стороны, время t_i только для таких материалов и имеет физический смысл. Таким образом, несмотря на то, что в КЗ материалах ГЗ находятся в равновесном состоянии, в уравнение эволюции плотности дислокаций (6) можно внести коэффициент, учитывающий процессы «возврата» ГЗ для обеспечения единой формы этого

уравнения во всем диапазоне размеров зерен и построения в конечном счете зависимости вида ХП. С учетом вышесказанного уравнение эволюции плотности дислокаций для сплава Al 1570 во всем диапазоне размеров зерен принимает вид

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{\beta}{bd} - k\rho \,. \tag{16}$$

Интегрирование уравнения (16) позволяет получить выражение для эволюции плотности дислокаций в зависимости от степени деформации:

$$\rho = \rho_0 \exp(-k\gamma) + \frac{\beta}{bdk} (1 - \exp(-k\gamma)), \quad (17)$$

где ρ_0 – начальная плотность дислокаций в материале, т. е. плотность, имеющаяся в материале к началу испытаний на растяжение.

В общем случае условный предел текучести $\sigma_{0,2}$ получается в результате действия (3), упрочнения твердым раствором σ_C , сопротивления решетки σ_0 , упрочнения дисперсными частицами τ_f . Под дисперсными частицами будем подразумевать сегрегации атомов магния вдоль ГЗ

$$\sigma_{0,2} = \sigma_0 + \sigma_c + \sigma_f + M \ Gb \ . \tag{18}$$

Из-за недостаточной информации об упрочнении дисперсными частицами и твердым раствором, а также напряжении σ_0 в выражении (18) было принято

$$\sigma_n = \sigma_0 + \sigma_c$$
.

Значение напряжения σ_n оценивалось из экспериментальной зависимости предела текучести сплава в КЗ состоянии и состоянии после РКУП от значения размера зерна в степени -1/2 как предельное значение при $d^{1/2} \rightarrow 0$ (рис. 1), $\sigma_n \approx 200$ МПа.

Величину σ_f получали, вычитая другие составляющие упрочнения из экспериментально полученного предела текучести $\sigma_{0,2 \text{ эксп}}$

$$\sigma_f = \sigma_{0,23\kappa cn} - \sigma_n - M\alpha G b \rho^{1/2}.$$
(19)

КЗ состояние. В случае КЗ состояния сплава Al 1570, полученного с помощью нагрева до 380 °C [14], когда атомы легирующих элементов равномерно распределены в твердом растворе, а плотность дислокаций составляет 10^{11} м⁻², считаем, что

$$\sigma_{0,2} = \sigma_n + \sigma_{ag} + M \alpha G b \rho^{1/2} . \qquad (20)$$

УМЗ состояние. В этом случае помимо действия тех же упрочняющих механизмов, что и в КЗ состоянии сплава, учитывалось напряжение σ_f , а также дополнительное упрочнение атомами магния, концентрация которых повышена вдоль ГЗ (упрочнение в результате закрепления дислокаций примесными атомами τ_{ag}). В результате

$$\sigma_{0,2} = \sigma_n + \sigma_{ag} + \sigma_f + M \alpha G b \rho^{1/2}. \qquad (21)$$

При концентрации магния 23,1 (ат. %) (21,3 вес. %) в области ГЗ [14, 18] уравнение (2) предсказывает напряжение закрепления $\tau_{ag} \approx 121$ МПа. В исходном отожженном состоянии ($c_0 = 5,7$ вес. %, $\tau_{ag} \approx \Delta \tau_0 = 32,4$ МПа.)

Значения экспериментального и рассчитанного пределов текучести в зависимости от $d^{1/2}$ представлены на рис. 1.



Рис. 1. Зависимость условного предела текучести $d^{-1/2}$: от $\sigma_{0.2}$ экспериментальные точки. соответствующие модельные точки. рассчитанные согласно уравнениям (17), (20). 1 – экспериментальные данные о пределах текучести алюминиевых сплавов АІ 1560 и АІ 5083 без дополнительного упрочнения атомами магния [35]. Нижняя экспериментальная точка при d = 130 нм соответствует состоянию после ИПДК при 100° С, ♦ – соответствующая модельная точка

Составляющие предела текучести для КЗ и УМЗ состояний сплава А1 1570 представлены на рис. 2, из которого следует, что высокая прочность УМЗ сплава А1 1570 во многом обусловлена упрочнением сегрегациями атомов магния вдоль ГЗ, а также деформационным упрочнением благодаря повышенной плотности дислокаций, накопленной в процессе ИПДК.



Рис. 2. Зависимость вклада в условный предел текучести сплава Al 1570 дислокационного упрочнения σ_d (\blacklozenge) и упрочнения за счет взаимодействия дислокаций с растворенными атомами магния σ_{ag} (\diamondsuit) от $d^{-1/2}$

Варьирование размера зерен d в составленных уравнениях (17), (20), (21) позволяет проанализировать напряжение течения при степени истинной деформации $\varepsilon_m = 0,2$ % в координатах ХП. На рис. 3 видно, что оба состояния сплава Al 1570 попадают в область размеров зерен, где выполняется классический закон ХП, т.е. предел текучести возрастает при измельчении зерен. Ниже критического размера зерен $d_{kp} = 46$ нм, получено «обратное» соотношение ХП: предел текучести падает при уменьшении размера зерен.



Рис. 3. График зависимости предела текучести от размера зерен: 1 – данные о пределах текучести алюминиевых сплавов Al 1560 и Al 5083; 2 -теоретический предел УМЗ при текучести сплава Al 1570 без комнатной учета температуре дополнительного упрочнения атомами магния вдоль ГЗ

За такой вид кривой ответственно дислокационное упрочнение, пропорциональное квадратному корню из средней плотности дислокаций. Остальные составляющие предела текучести сдвигают вверх всю кривую, так как не зависят от размера зерен. Для контроля наклона кривой на график нанесены данные о пределах текучести сплавов A1 1560 и A1 5083 с размерами зерен около 400 нм, полученные в работе [35].

Ниспадающая часть кривой связана с ускорением процессов релаксации дислокаций в ГЗ [18]. В целом, вышесказанное согласуется с распространенными в литературе представлениями о причине возникновения «обратного» закона ХП – возрастающей роли ГЗ в деформационном поведении материала.

Отклонение от закона XII сплава Al 1570 в УМЗ состоянии, как и предложено в работах

[14, 9] и показано в работе [18], в значительной мере обусловлено влиянием сегрегаций атомов магния на процесс пластической деформации, концентрация которых в результате ИПДК повышена в области ГЗ, в свою очередь выполняющих основную роль «стоков» для дислокаций. Между точками, соответствующими условным пределам текучести сплава в КЗ и УМЗ состояниях, можно провести прямую, которая будет соответствовать классическому закону ХП, но с другими параметрами σ_0 _{ХП} и *К* (рис. 3). Несмотря на высокую прочность сплава Al 1570 с размером зерен d = 130 нм, согласно полученной модели, предел текучести может быть еще выше при достижении «зерна максимальной прочности», размер которого d_{kp} = = 46 нм.

Суммируя вышесказанное, можно заключить: говоря о сплавах, подвергнутых ИПД, упоминать закон ХП не совсем уместно. В таких сплавах, «накачанных» упрочняющими факторами, действуют специфические механизмы упрочнения, не характерные для КЗ материалов, в то время как закон ХП установлен для материалов, прочность которых определяется в основном ограничением ГЗ свободного пробега дислокаций.

выводы

1. Развита математическая модель, позволяющая анализировать деформационное поведение сплавов с учетом различных деформационных механизмов.

2. Составленные уравнения эволюции плотности дислокаций в рамках модели учитывают возможности:

 а) действия механизмов увеличения плотности дислокаций в результате ограничения свободного пробега дислокаций ГЗ и несовместности деформации, двойного поперечного скольжения;

б) протекания процессов, ведущих к уменьшению плотности дислокаций в результате аннигиляции винтовых дислокаций при поперечном скольжении и релаксации неравновесных ГЗ.

3. Проанализированы возможные причины формирования высокопрочных состояний в УМЗ промышленном алюминиевом сплаве Al 1570, подвергнутом ИПДК при КТ. При этом учтены высокие значения ЭДУ алюминия и ее уменьшение из-за наличия магния в сплаве, что оказывает существенное влияние на возможность протекания поперечного скольжения.

4. Рассчитаны составляющие условного предела текучести сплава Al 1570 в K3 и УМЗ состояниях с учетом их микроструктурных особенностей. Установлено, что решающую роль в высокой прочности УМЗ сплава играет дополнительное упрочнение благодаря высокой концентрации магния вдоль ГЗ и увеличенное значение дислокационного упрочнения вследствие накопления высокой плотности дислокаций. причины обусловлены применением Обе ИПДК. Показано, что в УМЗ сплаве действует ряд упрочняющих факторов, не характерных для КЗ состояния, что приводит к невозможности выполнения закона ХП для этих материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Hall E. O.** The deformation and ageing of mild steel: iii discussion of results // Proceedings of the Physical Society. Section B. 1951. V. 64. № 9. P. 749–752.

2. Masumura R. A., Hazzledine P. M., Pande C. S. Yield stress of fine grained matterials // Acta Materialia. 1998. V. 46, № 13. P. 4527–4534.

3. Конрад Х. Модель деформационного упрочнения для объяснения величины зерна на напряжение течения металлов // Сверхмелкое зерно в металлах. М.: Металлургия, 1973. С. 207–219.

4. **Meyers M. A., Mishra A., Benson D. J.** Mechanical properties of nanocrystalline materials // Progress in Materials Science. 2006. V. 51. P. 427–556.

5. Wolf D., Yamakov V. MD Simulation of deformation mechanisms in nanocrystalline // Bulk Nanostructured Materials. Weinheim: WILEY-VCH. 2009. P. 165–199.

6. **Малыгин Г. А.** Нарушение закона Холла-Петча в микро- и нанокристаллических материалах // Физика металлов и металловедение. 1995. Т. 37, № 8. С. 2281–2292.

7. Kim H. S., Estrin Y., Bush M. B. Plastic deformation behaviour of fine-grained materials // Acta Materialia. 2000. V. 48. P. 493–504.

8. Zehetbauer M. J., Estrin Y. Modeling of strength and strain hardening of bulk nanostructured materials // Bulk Nanostructured Materials. Weinheim: WILEY-VCH. 2009. P. 109–136.

9. On the origin of the extremely high strength of ultrafine-grained al alloys produced by severe plastic deformation / R. Z. Valiev [et al.] // Scripta Materialia. 2010. V. 63. P. 949–952.

10. **Pande C. S., Cooper K. P.** nanomechanics of hall-petch relationship in nanocrystalline materials // Progress in Materials Science. 2009. V. 54. P. 689–706.

11. **Малыгин Г. А.** Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов // Физика твердого Тела. 2007. Т. 49, № 6. С. 961–982.

12. Штремель М. А. Прочность сплавов. Часть II. Деформация: Учеб. для вузов. М.: МИСИС, 1997. 527 с.

13. Zhu Y. T., Han B. Q., Lavernia E. J. Deformation mechanisms of nanostructured materials // Bulk Nanostructured. Weinheim: WILEY-VCH, 2009. P. 89–108.

14. Мурашкин М. Ю., Кильмаметов А. Р., Валиев Р. З. Особенности структуры и механические свойства алюминиевого сплава 1570, подвергнутого интенсивной пластической деформации // Физика металлов и металловедение. 2008. Т. 106, № 1. С. 93–99.

15. Влияние легирования на распад алюминиево-магниевого твердого раствора / Л. Н. Гусева [и др.] // Известия АН СССР. Металлы. 1972. № 4. С. 208–213.

16. Nanostructure and related mechanical properties of an Al–Mg–Si Alloy Processed by severe plasric deformation / G. Nurislamova [et al.] // Philososphical Magazine Letters. 2008. V. 88, № 6. P. 459–466.

17. Enhancement of strength and superplasticity in a 6061 Al alloy processed by equal-channel-angular-pressing / W. J. Kim [et al.] // Metallurgical and Materials Transactions A. 2002. V. 33. P. 3155–3164.

18. Alexandrov I. V., Chembarisova R. G. The analysis of the effect of microstructure parameters on the ability to develop high – strength states and peculiarities of deformation states of Al 1570 alloy // Rev. Adv. Mater. Sci. 2010. V. 23, N° 3. P. 209–218.

19. Curtin W. A., Olmsted D. L., Hector L. G. A predictive mechanism for dynamic strain ageing in aluminum-magnesium alloys // Jr. Nature materials. 2006. V. 5, N_{2} 11. P. 875–880.

20. Штремель М. А. Прочность сплавов. Ч. І. Дефекты решетки: Учеб. пособие для вузов. М.: Металлургия, 1982. 280 с.

21. **Новиков И. И.** Дефекты кристаллического строения металлов: Учеб. пособие. М.: Металлургия, 1983. 232 с.

22. **Фридель Ж.** Дислокации. М.: Мир, 1967. 643 с.

23. Флейшер Р., Хиббард У. Упрочнение при образовании твердого раствора // Структура и механические свойства металлов: матер. конф., проведенной Науч. физ. лабораторией, Треддингтон, Мидлсекс, январь 1963 г. М.: Металлургия, 1967. 384 с.

24. **Yan J.** Strength modelling of Al-Mg-Cu type alloys: thesis for PhD. University of Southampton, 2006. 215 p.

25. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.

26. Kocks U. F., Mecking H. Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case // Progress in Materials Science. 2003. V. 48. P. 171–273.

27. Valiev R. Z., Gertsman V. Yu., Kaibyshev O. A. Non-equilibrium state and recovery of grain boundary structure. II. Energetics analysis // Phys. Stat. Sol. (a). 1983. V. 78. P. 177–186.

28. Alexandrov I. V., Chembarisova R. G. Development and application of the dislocation model for analysis of the microstructure evolution and deformation behavior of metals subjected to severe plastic deformation // Rev. Adv. Mater. Sci. 2007. V. 16, $N_{\rm P}$ 1/2. P. 51–72.

29. **Prinz F. B., Argon A. S.** The evolution of plastic resistance in large strain plastic flow of single phase subgrain forming metals // Acta Metall. 1984. V. 32, N_{0} 7. P. 1021–1028.

30. **Zehetbauer M.** Cold work hardening in stages IV and V of fcc metals II: Model fits and physical results // Acta mater. 1993. V. 41 P. 589–599.

31. **Малыгин Г. А.** Анализ структурных факторов, определяющих образование шейки при растяжении металлов и сплавов с ГЦК-решеткой // Физика твердого тела. 2005. Т. 47, №2. С. 236–241.

32. Дубинко В. И., Клепиков В. Ф. Влияние неравновесных флуктуаций на пластичность металлов под облучением // Вісник Харьківського университету. 2005. Т. 710. С. 87–92.

33. Systematic study of stacking fault energies of random Al-based alloys / T. C. Schulthess [et al.] // Acta Materialia. 1998. V. 46, № 6. P. 2215–2221.

34. **Мартин Д. У.** Микромеханизмы дисперсионного твердения сплавов. М.: Металлургия, 1983. 167 с.

35. Маркушев М. В., Мурашкин М. Ю. Прочность и трещиностойкость промышленных алюминиевых сплавов 1560 и 5083 системы Al-Mg-Mn после интенсивной пластической деформации угловым прессованием // Физика металлов и металловедение. 2004. Т. 98, № 2. С. 1–12.

36. **Чувильдеев В. Н.** Неравновесные границы зерен в металлах. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 304 с.

37. Бернер Р., Кронмюллер Г. Пластическая деформация монокристаллов. М.: Мир, 1969. 272 с.

ОБ АВТОРАХ

Александров Игорь Васильевич, проф., зав. каф. физики, гл. науч. сотр. НИЧ УГАТУ. Дипл. физик (БГУ, 1976). Д-р физ.-мат. наук по физике твердого тела (ИФМ УрНЦ РАН, 1997). Иссл. в обл. физики прочности и пластичности материалов.

Чембарисова Роза Галиевна, доц., ст. науч. сотр. НИЧ УГАТУ. Дипл. физик (БГУ, 1980). Канд. техн. наук (Азерб. Индустриальн. ун-т им. М. Азизбекова, 1992). Иссл. в обл. нелинейной динамики, физики прочности и пластичности материалов.

Латыпов Марат Ильдарович, дипл. инженерфизик (УГАТУ, 2011). Иссл. в обл. физики прочности и пластичности материалов.