

Моделирование зависимости предела текучести от размера зерна методом клеточных автоматов

Е. М. Борисовская

Проведено моделирование эволюции пластической деформации в поликристалле методом клеточных автоматов. Показано, что если пластическая деформация зарождается в каждом зерне независимо, то предел текучести обратно пропорционален размеру зерна, а в случае, если деформация передается от зерна к зерну по механизму эстафеты, предел текучести обратно пропорционален корню из размера зерна, то есть наблюдается зависимость Холла—Петча.

Ключевые слова: клеточные автоматы, предел текучести, размер зерна.

Известно, что предел текучести зависит от размера зерна как $\sigma_{0,2} = \sigma_0 + K_y d^{0,5}$ при больших зернах (закон Холла—Петча) и как $\sigma_{0,2} = \sigma_0 + K_y d^{0,1}$ — при малых [1—4]. В многочисленных экспериментальных работах, в частности в [5—7], показано, что с увеличением напряжения пластическая деформация сначала происходит в зернах с наиболее благоприятной ориентацией и дислокационной структурой, а затем по эстафетному механизму передается в соседние зерна. Постепенно пластическая деформация в образце локализуется и формируется так называемая полоса Людерса—Чернова. В этом случае предел текучести зависит от размера зерна по закону Холла—Петча. Однако при уменьшении размера зерен наблюдается изменение механизма распространения пластической деформации, что приводит к нарушению закона Холла—Петча. Дислокационные скопления становятся менее мощными, так как в них содержатся меньшие количества дислокаций, а следовательно, уменьшаются напряжения от головы скопления и пластическая деформация не может передаваться по эстафетному механизму, а развивается в каждом зерне отдельно.

Цель данной работы — методом клеточных автоматов исследовать зависимость предела текучести от механизмов зарождения пластической деформации в зерне.

Клеточные автоматы были предложены фон Нейманом в 1940 г. Клеточный автомат это дискретная динамическая система, представляющая собой набор одинаковых клеток, соединенных между собой. Эти клетки образуют решетку клеточного автомата. Решетки могут быть разных типов и отличаться как по размерности, так и по форме клеток. В настоящей работе использован набор из одномерных клеточных автоматов, то есть решетка состоит из цепочки клеток (одномерный массив), в которой для любой из них, кроме крайних, имеется по два соседа (для устранения краевых эффектов решетка “заворачивается” в тор).

Моделирование проводили следующим образом: сначала случайным образом задавались диаметр и углы плоскостей легкого скольжения зерен-клеток (рис. 1). Затем реализовывали следующий цикл (рис. 2): пошагово увеличивали напряжение и производили расчет, какие клетки перешли в пластическое состояние. Для этого требовалось, чтобы напря-

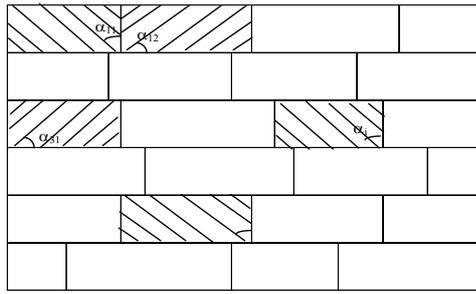


Рис. 1. Схема расчета пластической деформации методом клеточных автоматов.

жение в зерне было больше напряжения, необходимого для зарождения пластической деформации, то есть выполняется одно из двух условий:

текущее внешнее напряжение должно быть больше напряжения, необходимого для зарождения пластической деформации в данном зерне;

в случае, если один из соседей уже перешел в пластическое состояние, напряжение рассчитывали как сумму внешнего напряжения и напряжения от скопления в соседнем зерне (в его выражение входит “ширина стенки зерна” — расстояние от головы скопления до источника). Считалось, что дислокационные источники находятся на границах зерен (рис. 3).

Затем проводили проверку: прошла ли полоса пластической деформации (аналог полосы Людерса—Чернова) через весь образец. Если деформация прошла от одного края образца до другого, деформацию рассчитывали по формуле $\varepsilon = b\rho L = \sum \delta_i = \sum \frac{\pi(1-\nu)}{4G} \tau$, где b — вектор Бюргерса; G — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона; τ — приложенное касательное напряжение в данном зерне. Если деформация оказывалась малой, напряжение увеличивалось до тех пор, пока не дости-

жения в зерне было больше напряжения, необходимого для зарождения пластической деформации, то есть выполняется одно из двух условий:

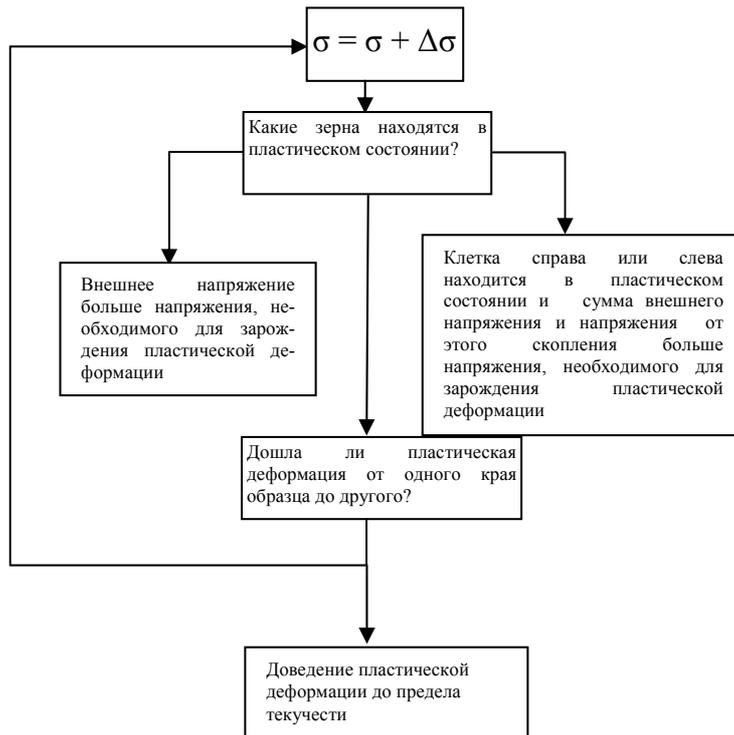


Рис. 2. Блок-схема расчета зависимости предела текучести от размера зерна методом клеточных автоматов.

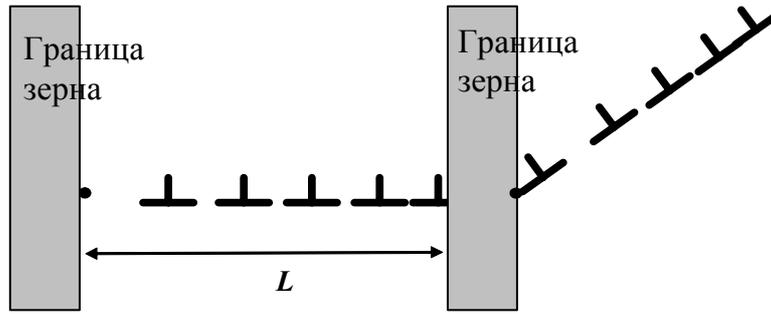


Рис. 3. Зарождение пластической деформации по эстафетному механизму.

гался предел текучести $\sigma_{0,02}$. Параметры модели брались для железа технической чистоты: $G = 90$ ГПа, $\nu = 0,28$, $\sigma_{0,02} = 30$ МПа. Напряжение от скопления в соседнем зерне рассчитывали по формулам [7]:

$$\begin{aligned}\sigma'_{12} &= -\sigma_{11} \cos \beta \sin \beta + \sigma_{22} \sin \beta \cos \beta + \sigma_{12} (\cos^2 \beta - \sin^2 \beta); \\ \sigma'_{11} &= \sigma_{11} \cos^2 \beta + \sigma_{22} \sin^2 \beta + 2\sigma_{12} \cos \beta \sin \beta; \\ \sigma'_{22} &= \sigma_{11} \sin^2 \beta + \sigma_{22} \cos^2 \beta - 2\sigma_{12} \cos \beta \sin \beta,\end{aligned}\quad (1a)$$

где β — угол между зернами, а

$$\begin{aligned}\sigma_{11} &= -\sigma_{\nu 12} G (-\xi [5(\eta-1)^2 + 3\xi^2] \cos \frac{\varphi}{2} - 2[(\eta+1)(\eta-1)^3 + (2\eta-1)(\eta-1)\xi^2 + \xi^4] \sin \frac{\varphi}{2}); \\ \sigma_{12} &= -\sigma_{\nu 12} - \sigma_{\nu 12} G (-\xi [3(\eta-1)^2 + \xi^2] \sin \frac{\varphi}{2} + [-(\eta+1)(\eta-1)^3 - 2(\eta-1)^2 \xi^2 - \xi^4] \cos \frac{\varphi}{2}); \\ \sigma_{11} &= -\sigma_{\nu 12} G (\xi [\xi^2 - (\eta-1)^2] \cos \frac{\varphi}{2} - 2(\eta-1)\xi^2 \sin \frac{\varphi}{2}).\end{aligned}\quad (1б)$$

Здесь $G = \frac{[(\eta^2 + \xi^2 - 1)^2 + 4\xi^2]^{1/4}}{[(\eta+1)^2 + \xi^2]^{1/2} [(\eta-1)^2 + \xi^2]^{1/2}}$; $\sigma_{\nu 12}$ — касательное внешнее

напряжение; $\varphi = \arctg\left(\frac{2\xi}{\xi^2 + \eta^2 - 1}\right)$, $\eta = \frac{2x}{d} + \frac{d}{2}$, $\xi = \frac{2y}{d} + \frac{d}{2}$, где x, y — координаты дислокационного источника; d — размер зерна.

Результаты расчета и обработка полученных данных

В результате моделирования получены зависимости предела текучести от размера зерна (рис. 4). Данные обработаны в координатах $\ln(d) - \ln(\sigma - \sigma_0)$, где σ_0 — напряжение, соответствующее пределу текучести модельного монокристалла. Поскольку $\sigma_{02} = \sigma_0 + K_y d^n$, то $\sigma_{02} - \sigma_0 = K_y d^n$ и получаем $\ln(\sigma_{02} - \sigma_0) = \ln(K_y d^n) = \ln(K_y) + n \ln(d)$. Таким образом, n является тангенсом угла наклона прямой в координатах $\ln(d) - \ln(\sigma - \sigma_0)$.

Меняя условие зарождения пластической деформации в зернах, получили данные при разном отношении числа зерен k , перешедших в пластическое состояние по механизму эстафеты и стохастически (под воздействием внешнего напряжения) (рис. 5). На рис. 5 видно, что при малом k число n близко к -1 , то есть в случае, если зерна деформируются стохастически (независимо друг от друга), предел текучести зависит от

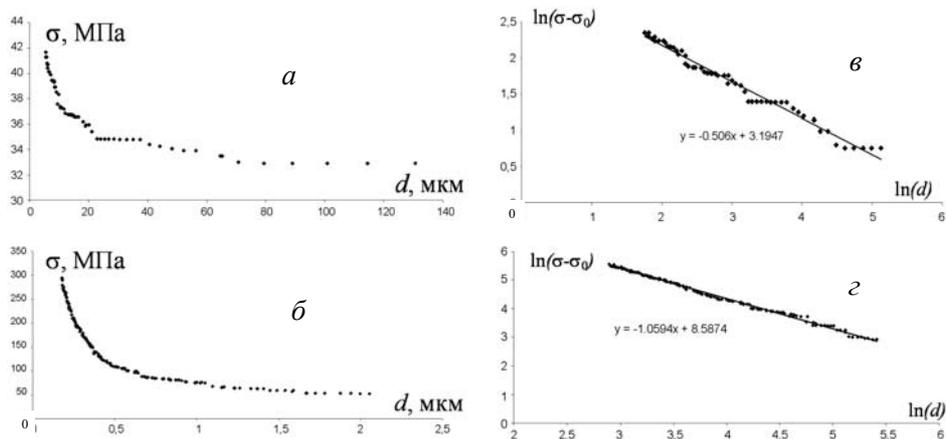


Рис. 4. Зависимости текущего напряжения от размера зерна при зарождении деформации по эстафетному механизму (*а*), стохастическом пластическом течении (*б*) и зависимости логарифмов указанных величин в этих двух случаях (*в*, *г*).

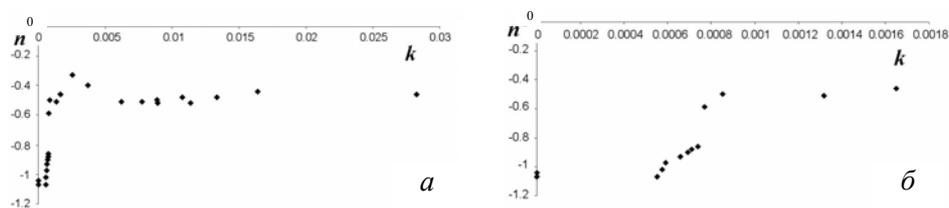


Рис. 5. Зависимость показателя степени n от отношения числа зерен k , перешедших в пластическое состояние по механизму эстафеты (*а*) и стохастически (*б*).

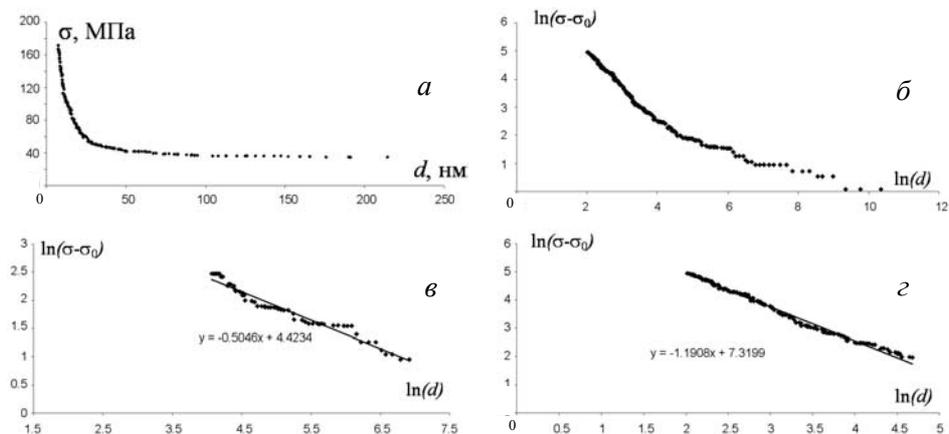


Рис. 6. Зависимость текущего напряжения от размера зерна (*а*) и зависимости логарифмов текущего напряжения от логарифмов размера зерна (*б*) при больших (то есть эстафета) (*в*) и малых зернах (пластическое течение происходит в каждом зерне отдельно) (*г*).

размера зерна по закону “антиХолла—Петча”. Однако чем больше зерен деформируется по механизму эстафеты (и, соответственно, k растет), тем ближе величина n к $-0,5$. Небольшой разброс полученных данных, по всей видимости, обусловлен тем, что для моделирования был взят достаточно малый кристалл всего с 10-ю зернами в поперечнике.

Результаты расчетов моделирования без изменения условий зарождения представлены на рис. 6. При большом размере зерен пластическое течение передавалось эстафетой. В случае, если деформация проходила по этому механизму в небольшом количестве зерен (хотя бы в 1%), предел текучести медленно нарастал по закону Холла—Петча (рис. 6, в). При некотором критическом размере зерна, в данном случае порядка 100 нм, эстафета исчезала и пластическое течение возникало в зернах стохастически, а величина n достаточно резко стремилась к -1 .

Выводы

Методами компьютерного моделирования рассчитаны зависимости предела текучести от размера зерна. Показано, что смена механизма распространения пластической деформации приводит к изменению зависимости предела текучести от размера зерна от закона Холла—Петча ($n \sim -0,5$) при достаточно больших зернах до “антиХолла—Петча” при малых ($n \sim -1$).

Показано, что при достаточно больших зернах пластическая деформация распространяется в основном по эстафетному механизму, то есть дислокационное скопление вызывает работу источника, расположенного в соседнем зерне. Однако при малых зернах мощность (число дислокаций в скоплении) достаточно резко падает, что приводит к смене механизма передачи пластической деформации, зерна начинают деформироваться независимо друг от друга.

Результаты компьютерного моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными и подтверждают гипотезу о влиянии механизма передачи пластической деформации на характер зависимости напряжения течения от размера зерна.

1. Андриевский Р. А., Глезер А. М. Размерные эффекты в нанокристаллических материалах II. Механические и физические свойства // Физика металлов и металловедение. — 2000. — **89**, № 1. — С. 91—112.
2. Gleiter H. Nanostructured materials // Progress in Materials Science. — 1989. — **33**. — P. 223—315.
3. Gryaznov V. G., Trusov L. I. Size effects in micromechanics of nanocrystals // Ibid. — 1993. — **37**. — P. 289—401.
4. Фирстов С. А., Роголь Т. Г., Свечников В. Л. и др. Структура, механическое поведение и нанотвердость поликристаллических хромовых и молибденовых покрытий, полученных методом магнетронного распыления // Металлофизика и новейшие технологии. — 2003. — **25**, № 9. — С. 1153.
5. Дударев Е. Ф. Микропластическая деформация и предел текучести поликристаллов. — Томск: изд-во Томского ун-та, 1988. — 256 с.
6. Tinder R. F., Washburn J. The initiation of plastic flow in copper // Acta Metallurgica. — 1964. — **12**, No. 1. — P. 129.
7. Хирт Дж., Лоте Н. Теория дислокаций. — М.: Атомиздат, 1972. — 599 с.

Моделювання залежності границі плинності від розміру зерна методом клітинних автоматів

К. М. Борисовська

Проведено моделювання еволюції пластичної деформації в полікристалі методом клітинних автоматів. Показано, що якщо пластична деформація зароджується в кожному зерні незалежно, то границя плинності обернено пропорційна розміру зерна, а в випадку, якщо деформація передається від зерна до зерна за механізмом естафети, то границя плинності обернено пропорційна кореню з розміра зерна, тобто спостерігається залежність Холла—Петча.

Ключові слова: клітинні автомати, границя плинності, розмір зерна.

Simulating grain size dependence of the yield point by cellular automations

K. M. Borysovska

The evolution of plastic flow in polycrystal is studied using cellular automations method. It is shown that if the plastic flow arises in each grain independently, then yield point is inversely proportional to the grain size, but if the plastic flow propagates from one grain to another ("relay race") then yield point is inversely proportional to the square root of grain size, i.e. it obeys Hall-Petch law.

Key words: cellular automations, yield point, grain size.