

Використання методу дислокаційної динаміки для аналізу структурної чутливості тріщиностійкості ОЦК металів, схильних до квазікрихкого руйнування

М. І. Даниленко, Ю. М. Подрезов, К. М. Борисовська,
О. С. Коряк, С. О. Фірстов

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України,
Київ, e-mail: kmbv@ipms.kiev.ua

Методом дислокаційної динаміки промодельовано взаємодію тріщини з субструктурою. Розглянуто два випадки: вплив розміру зерна та деформаційної субструктури на закономірності розповсюдження тріщини в ОЦК металах. Показано, що аномальний характер залежностей тріщиностійкості від розміру зерна та ступеню пластичної деформації може бути пояснений з урахуванням особливостей взаємодії дислокацій, які емітуються з вершини тріщини, з границею зерна або комірковою структурою, що формується в деформованому стані. Результати розрахунків добре узгоджуються з експериментальними залежностями.

Ключові слова: дислокаційна динаміка, тріщиностійкість, розмір зерна, деформаційна субструктура.

Метод дислокаційної динаміки є перспективним для дослідження деформаційних процесів та встановлення зв'язку між поточними структурними змінами в деформованому матеріалі та його властивостями. Важливим елементом такого аналізу є можливість візуалізації процесів, що відбуваються під час навантаження за допомогою комп'ютерних програм. В попередніх роботах [1—3] нами продемонстровано можливості цього методу при дослідженні впливу параметрів деформування на структурні зміни та еволюції дислокаційної структури на стадії деформаційного зміцнення.

В запропонованій роботі ця методологія використовується для відображення дислокаційних перебудов, що відбуваються в пластичній зоні біля вершини тріщини. Відомо, що при квазікрихкому руйнуванні енергетичні витрати на розповсюдження тріщини в значній мірі зумовлені формуванням пластичної зони. В механічних моделях границя пластичної зони розраховується з урахуванням розподілу напружень біля вершини тріщини. Відстань від вершини тріщини, що відповідає границі зони, визначається, виходячи з умови зменшення напруження з відстанню від вершини до значення границі плинності. Розмір зони знаходять з рівняння

$$r_p = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_T} \right)^2, \quad (1)$$

де r_p — розмір пластичної зони; K_{Ic} — тріщиностійкість; σ_T — границя плинності. Така модель дозволяє врахувати фізичні явища, що викликані

© М. І. Даниленко, Ю. М. Подрезов, К. М. Борисовська, О. С. Коряк,
С. О. Фірстов, 2014

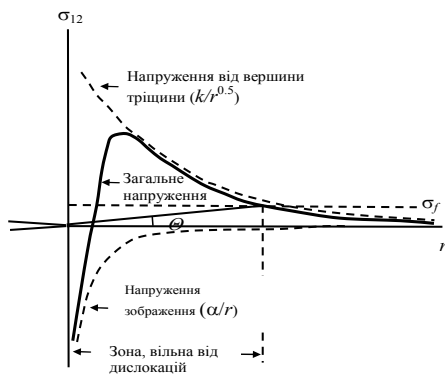


Рис. 1. Напруження, що діють на дислокацію поблизу вершини тріщини [5].

пластичною деформацію біля вершини та оцінити їх вплив на енергію руйнування та тріщиностійкість. Проте аналіз структурної чутливості зазначених характеристик ускладнюється, коли необхідно аналізувати взаємодію

дислокацій, що формують пластичну зону, з структурою матеріалу. В цьому випадку доцільно використовувати фізичне трактування пластичної зони, яке запропоновано Райсом і Томсоном в роботі [4] та розвинуто Ором [5].

Згідно з цією моделлю, загальне напруження, що діє на дислокацію, складається з трьох компонентів: відштовхуючого напруження, яке створюється зовнішньою силою, з урахуванням концентрації напружень біля вершини; притягуючого напруження, що створюється силами зображення, розмір яких зменшується з відстанню як $\sim 1/r$ [4], та сили тертя решітки, яка визначається напруженням Пайерлса (рис. 1). Дислокація може рухатися з вершини тріщини, якщо загальне напруження більше сили тертя σ_f . У кожен момент часу положення дислокацій може бути визначено з розрахунку напружень і швидкостей переміщення дислокацій під дією цих напружень.

У разі, коли поблизу вершини тріщини перебуває більше однієї дислокації, картина значно ускладнюється, оскільки на дислокацію починають діяти ще й напруження зображення інших дислокацій [6] та напруження інших дислокацій:

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

де

$$\begin{aligned}\sigma_{11} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{22} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{12} &= \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2},\end{aligned}\tag{2}$$

де β — кут між віссю x і лінією, що з'єднує дислокації 1 і 2.

Ця модель дозволяє моделювати в реальному часі формування та перебудову дислокаційних скупчень в пластичній зоні при навантаженні та взаємодію дислокацій, що імітуються з вершини тріщини, з елементами структури матеріалу, в якому відбувається руйнування.

В даній роботі розглянуто два приклади аналізу структурної чутливості тріщиностійкості K_{Ic} ОЦК металів, схильних до квазікрихкого руйнування.

Механічні властивості молібдену при різних температурах відпалу

Температура відпалу, К	d , мкм	$2r_p$, мкм	σ_T , МПа	K_{Ic} , МПа·м ^{1/2}	
				293 К	77 К
1673	42	385	1179	15,5	5,3
1773	82	383	820	13,0	5,2
1873	165	379	377	12,5	5,1
1973	200	375	316	12,0	5,0
2023	280	350	208	7,2	4,9
2073	400	80	202	7,0	4,8
2223	600	55	187	6,5	4,7

В першому випадку досліджували структурну чутливість тріщиностійкості малолегованого сплаву молібдену ЦМ10 (0,15% (мас.) Zr, 0,003% (мас.) С). Плоскі зразки шириною 5 мм з двома боковими надрізами глибиною 1 мм з радіусом заокруглення 0,05 мм піддавали одновісному розтягу зі швидкістю 10^{-3} с^{-1} при температурах 77 і 293 К. Листовий матеріал, отриманий прокаткою, відпалювали при різних температурах (1673—2223 К). Форма і розмір зразків, а також розрахунок тріщиностійкості виконані у відповідності до рекомендацій по вимірюванню тріщиностійкості. Роль вихідних тріщин виконував надріз розміром 1 мм з електроіскровою тріщиною в вершині довжиною 20—50 мкм. Зміну розміру зерна d від температури T відпалу представлено в таблиці, де також наведено результати механічних випробувань зразків з різним розміром зерна.

По результатах механічних випробувань побудовано залежність тріщиностійкості від розміру зерна, яка представлена на рис. 2, а. Залежність K_{Ic} від розміру зерна при $-196 \text{ }^\circ\text{C}$ описується слабо зростаючою лінійною функцією. В цей же час ця залежність при кімнатній температурі має особливість: спостерігається різке підвищення тріщиностійкості для зразка з розміром зерна 280 мкм, такий характер зміни K_{Ic} не узгоджується з класичними підходами до аналізу структурної чутливості цієї величини і потребує додаткового дослідження. Однією з можливих причин знайденого ефекту є взаємодія пластичної зони у вершині тріщини зі структурою матеріалу.

Для аналізу пластичної зони нами додатково проведено експерименти по визначенню механічних властивостей при випробуванні на розтяг, зокрема визначено значення границі текучості і його структурна чутливість. Дані про границю текучості при кімнатній температурі для різних розмірів зерен представлені в таблиці. На основі цих даних побудовано залежність границі текучості від розміру зерна, що являє класичну залежність, яка описується рівнянням Холла—Петча (рис. 2, б).

В таблиці представлено також значення тріщиностійкості для кожного з досліджуваних зразків. За даними таблиці побудовано залежність розміру пластичної зони від розміру зерна (рис. 2, в), яка носить S-подібний характер і перегин приходиться на розмір зерна 280 мкм. На рис. 2, в наведено лінію, що відповідає умові $d = 2r_p$. На графіку видно, що скачок тріщиностійкості відповідає розміру зерна, при якому розмір пластичної

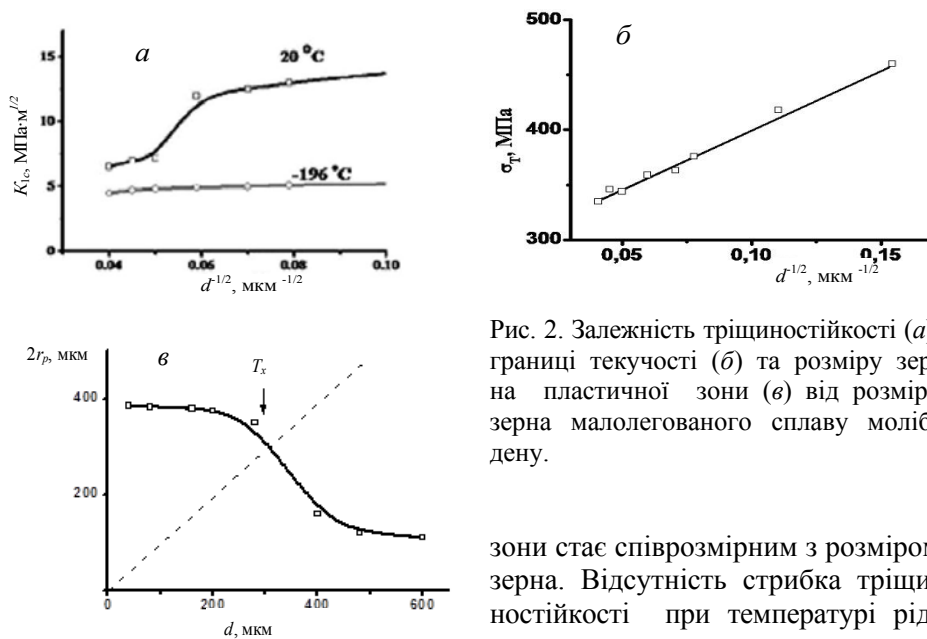


Рис. 2. Залежність тріщиностійкості (а), границі текучості (б) та розміру зерна пластичної зони (в) від розміру зерна малолегованого сплаву молібдену.

зони стає співрозмірним з розміром зерна. Відсутність стрибка тріщиностійкості при температурі рідкого азоту можна пояснити тим, що

пластична зона має настільки малий розмір, що він виявляється значно менше зерна навіть при самих малих його розмірах. На жаль, побудувати структурну залежність границі текучості при 77 К не вдається, оскільки всі зразки при цій температурі руйнувались повністю крихко. Однак оцінити розмір пластичної зони можна, скориставшись даними Трефілова зі співробітниками [7], де границя текучості молібдену при 77 К отримана перерахунком по даних про твердість, і її значення оцінюється величиною 1000 МПа. Підставляючи у формулу для розрахунку розміру пластичної зони значення K_{Ic} , отримуємо величину $r_p \sim 3\text{—}5$ мкм.

Проаналізувавши залежність тріщиностійкості від розміру зерна, можна стверджувати, що при переході через певний розмір (співрозмірний з розміром зерна) величина пластичної зони повинна збільшуватись стрибком. Такий результат є наслідком тлумачення пластичної зони з точки зору механіки. Фізичне трактування цього ефекту базується на тому, що зростання тріщиностійкості, яке спостерігається в експерименті, зумовлено не стільки різким збільшенням розміру пластичної зони, скільки перерозподілом дислокацій в пластичній зоні при їх взаємодії з границею зерна.

Грунтуючись на розробленому Райсом і Томсоном критерії [2], можна передбачити, чи буде руйнування матеріалу абсолютно крихким або воно буде супроводжуватися утворенням пластичної зони поблизу вершини тріщини. Емісія дислокацій відбувається за умови, що прикладена напруга досягає певного критичного рівня. Емітована дислокація покидає вершину тріщини, що призводить до зростання напруги, яка діє на джерело дислокацій у вершині тріщини і може призвести або до розкриття тріщини, або до спрацьовування джерела. Таким чином, з часом поблизу вершини тріщини утворюється дислокаційне скупчення.

Існує досить багато теоретичних робіт [8—10], присвячених проблемі взаємодії тріщини з дислокаціями, проте в більшості з них поставлені завдання вирішуються без детального обліку напружень, що діють на вершину тріщини і дислокації ансамблю. Комп'ютерне моделювання

дозволяє в реальному часі слідкувати за поведінкою дислокаційного ансамблю, що випускається джерелом поблизу вершини тріщини, та проаналізувати вплив розподілу дислокацій біля вершини тріщини на тріщиностійкість полікрісталічного молібдену.

Пластичну зону моделювали двома смугами ковзання з кутом нахилу 45° , що виходять із вершини тріщини. Вважалося, що тріщина навантажена по типу I — нормальний відрив. Дислокації емітуються джерелом, розташованим на відстані $40b$ (b — вектор Бюргерса) від вершини тріщини. Емісія відбувається, якщо напруга на джерелі перевершує напругу Пайерлса. Вважалося, що дислокації не можуть вийти за межі зерна. Еволюція дислокаційної структури відбувається в часі, зовнішня напруга залишається постійною (30 МПа).

Швидкість дислокацій лінійно залежить від напруги [11]:

$$v = v_c \sigma, \quad (3)$$

$$v_c = D_s b / kT, \quad (4)$$

де D_s — коефіцієнт самодифузії. Вважалося, що дислокації не переовзають і можуть рухатися тільки на своїй площині ковзання.

Моделювання проводили методом дислокаційної динаміки. У кожен момент часу розраховували напруги, що діють на дислокації ансамблю, потім з цих напруг розраховували швидкості переміщення дислокацій. Крок за часом вибирали таким чином, щоб дислокація, на яку діє максимальна напруга, пройшла відстань у два вектора Бюргерса. Потім розраховували напругу на джерелі дислокацій. Для цього проводили розрахунок напружень на двох віртуальних дислокаціях на відстані $40b$ від вершини тріщини, і якщо напруги перевищували напруги Пайерлса, то вважалося, що джерело спрацювало і емітувало дві дислокації.

Одночасно розраховували поточний коефіцієнт інтенсивності напружень K і енергію руху E як добуток діючої напруги на пройдений шлях (приріст енергії руху за крок часу dt — $\sigma b v dt$) всіх рухомих дислокацій (v — швидкість дислокації, dt — часовий крок) і дотичного напруження поблизу границі зерна σ_g . В якості об'єкту для моделювання вибраний молібден: $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $G = 230$ ГПа, $E = 329$ ГПа, $v_c = 7 \cdot 10^{-6}$ м·с/кг [9], $T = 20$ °С, напруження Пайерлса 50 МПа [11], довжина тріщини $a = 0,2$ см.

В результаті чисельного моделювання отримано залежність коефіцієнта інтенсивності напружень K (рис. 3) від часу з урахуванням напруження від дислокацій, що імітуються з вершини під дією постійного напруження. Як видно на рисунку, інтенсивність напруження залежить від часу немономонно. В початковий момент часу екранування вершини тріщини відбувається переважно за рахунок першої, тільки що випущеної джерелом пари дислокацій через їхню близькість до вершини. Потім дислокаційна пара, що зародилась, відходить від вершини тріщини, і напруга поблизу вершини тріщини знову починає рости до моменту зародження наступної пари. Цей процес повторюється декілька разів. Результуючий коефіцієнт інтенсивності напружень достатньо швидко падає через велику кількість дислокацій, які швидко утворюються через нескінчену швидкість навантаження для зерен розміром 1 мкм (рис. 3, а, в) і 10 мкм (рис. 3, б, г). Значення K при малому часі не залежить від розмірів зерна, оскільки дислокації не відразу "відчувають" границю. З часом

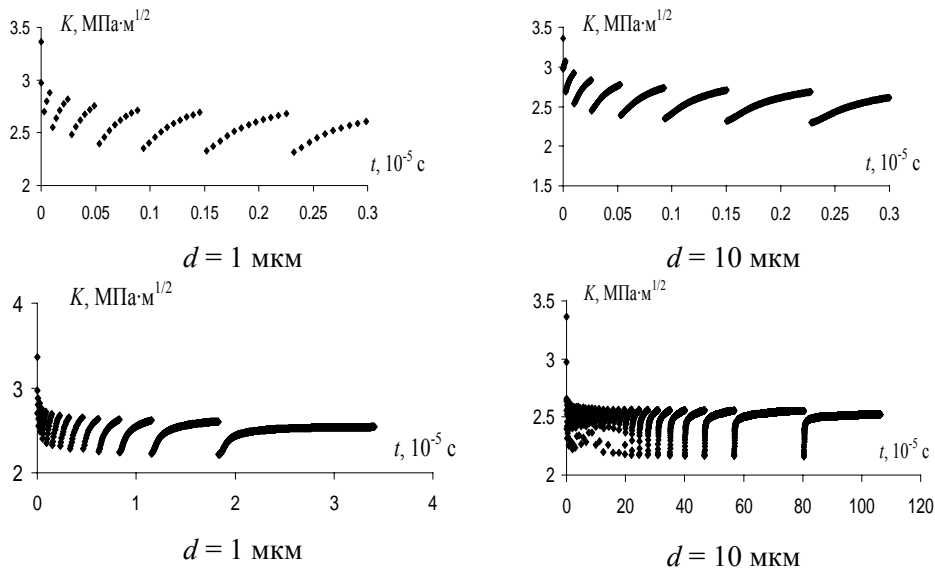


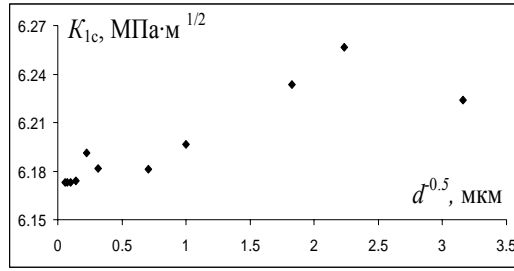
Рис. 3. Коефіцієнт інтенсивності напружень в залежності від часу.

значення коефіцієнта інтенсивності напруження прямує до константи, оскільки дислокаційне джерело виявляється заблокованим, а сама система повільно прямує до рівноваги. Рівноважне значення K більше для малих зерен, оскільки границя не дає відійти дислокаціям від вершини тріщини.

Наступним кроком моделювання було дослідження впливу прикладеного напруження на коефіцієнт інтенсивності напруження та тріщиностійкість. Методом дислокаційної динаміки вивчено поведінку дислокаційного ансамблю поблизу вершини тріщини при змінному зовнішньому напруженні для зразків з різним розміром зерна. Зовнішнє напруження в комп'ютерному експерименті збільшується з часом по лінійному закону зі швидкістю 500 МПа/с. Величину тріщиностійкості визначали по значенню критичного коефіцієнта інтенсивності напруги вершини тріщини, коли з врахуванням екранування воно досягало $5 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$ (як у випадку абсолютно крихкого зразка молібдену).

Результати моделювання дозволили отримати залежність критичного коефіцієнта інтенсивності напруження K_{1c} від розміру зерна (рис. 4). Як видно на рисунку, характер залежності немонотонний. В області великих розмірів зерен (більше 100 мкм) розрахункове значення тріщиностійкості молібдену є сталою величиною, яка слабо залежить від розміру зерна. Її значення сягає $6,5 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$, що достатньо добре співпадає з експериментальним значенням тріщиностійкості крупнозеренного молібдену ($7 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$). При зменшенні розміру зерна розрахункове значення тріщиностійкості збільшується до $9 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$, що зумовлено взаємодією пластичної зони з границею зерна. При подальшому зменшенні розміру зерна K_{1c} залишається сталою величиною. Визначене розрахункове значення дещо поступається експериментально визначеному значенню тріщиностійкості дрібнозеренного молібдену ($12 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$). Виявлену відмінність можна пояснити тим, що в використаній нами розрахунковій моделі не розглядається перехід пластичної зони через границю зерна, який обмежує кількість дислокацій, котрі приймають участь у екрануванні.

Рис. 4. Розрахункова залежність тріщиностійкості від розміру зерна.



В другому випадку з позицій дислокаційної динаміки аналізували експериментальні результати про вплив попередньої деформації на тріщино-

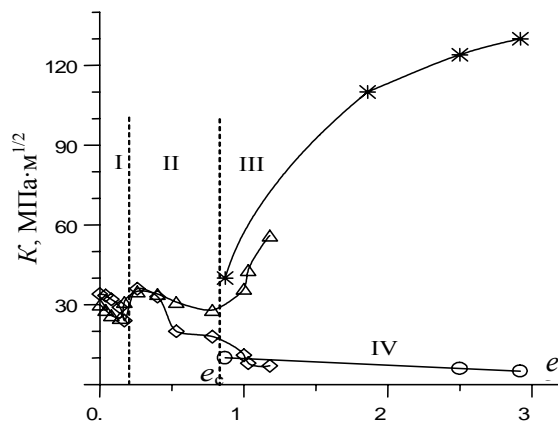
стійкість заліза, що руйнується за квазікрихким механізмом. Дослідження з визначення тріщиностійкості армко-заліза, продеформованого до різних ступенів деформації прокаткою або рівноканальним кутовим пресуванням (РККП) [12—17], продемонстрували її структурну чутливість. Результати, представлені на рис. 5, показують, що особливу поведінку кривої тріщиностійкість—ступінь деформації зумовлено зміною структурних станів деформованого матеріалу. В інтервалі малих ступенів деформації, який характеризується хаотичним розподілом дислокацій, тріщиностійкість зменшується з ростом деформації.

При утворенні слабзорієнтованих комірок спостерігається різке підвищення тріщиностійкості. В інтервалі стійкого існування малокутових границь комірок в'язкість руйнування знову падає. Нарешті, коли виникають розорієнтовані комірки, тріщиностійкість зростає в зразках, де тріщина введена в площину, перпендикулярну напрямку прокатки, і різко падає, коли тріщина введена в площину прокатки.

Феноменологічна модель базується на аналізі сил взаємодії між дислокаціями, емітованими з вершини тріщини, і деформаційною субструктурою, яка була сформована в матеріалі при різних ступенях деформації. Розвиток цієї моделі передбачає розробку комп'ютерної програми, яка дозволяє в реальному часі враховувати ці взаємодії. Модель базується на припущенні, що деформаційна субструктура являє собою або структуру лісу дислокацій (це характерно для початкових стадій деформації), або слабзорієнтовані комірки, які представляють собою рухливі дислокаційні стінки (це характерно для середніх ступенів деформації), або сильнорозорієнтовані комірки, обмежені жорсткими дислокаційними стінками, котрі залежно від умов деформації можуть бути або прозорими, або непрозорими (як у випадку великокутових границь полікристалу) для дислокацій, що емітуються вершиною.

Пластична зона створюється дислокаціями, що емітуються з вершини тріщини. Вона моделюється

Рис. 5. Тріщиностійкість деформованого заліза: \triangle, \diamond — прокатка; $*, \circ$ — РККП ($\triangle, *$ — тріщина лежить перпендикулярно до площини прокатки, \diamond, \circ — тріщина знаходиться в площині прокатки).



двома смугами ковзання (кут нахилу 45°), що виходять з вершини тріщини, дислокації емітуються джерелом, розташованим поблизу вершини тріщини. Емісія відбувається, якщо пробні дислокації, розташовані на відстані $2b$ від вершини тріщини, починають рухатися від вершини тріщини. Еволюція дислокаційної структури відбувається в часі. При цьому час між двома послідовними спрацюваннями джерела вибирається з умови: $2b/v_r = 3 \cdot 10^{-13}$ с, де v_r — швидкість Релея. В даній роботі розглядали такі конфігурації: відсутність структури, хаотичний розподіл дислокацій, рухому дислокаційну стінку і нерухому і непрозору стінку (рис. 6, $a-g$ відповідно). Зовнішнє напруження вважали рівним 1000 МПа.

Алгоритм:

1 крок: розрахунок загальних напруг на кожній рухомій дислокації.

2 крок: розрахунок швидкості кожної рухомої дислокації.

3 крок: розрахунок нового положення кожної рухомої дислокації.

4 крок: розрахунок напруги σ_{22} всіх дислокацій і їх напружень зображення на відстані $2b$ від вершини тріщини (K_d).

5 крок: розрахунок енергії E руху всіх рухомих дислокацій (приріст енергії руху за крок часу $\sigma b v dt$) (v — швидкість дислокації, dt — часовий крок).

6 крок: розрахунок напруження на джерелі у разі, якщо це напруження дозволяє пробним дислокаціям рухатися від вершини тріщини, вважається, що емітація сталася.

7 крок \Rightarrow 1 крок. $T = t + dt$ ($dt = 3 \cdot 10^{-13}$ с).

В даній роботі моделювали дислокаційну стінку з 100 дислокацій, що стоїть на відстані $100b$ від вершини тріщини і завдовжки $500b$ в монокристалі заліза ($G = 84$ ГПа, $b = 2,8 \cdot 10^{-10}$ м, $\nu = 0,29$).

Розрахунок енергії руху всіх рухомих дислокацій (приріст енергії руху за крок часу — $\sigma b v dt$) показав, що найбільш сильне зростання цієї характеристики спостерігається у разі відсутності стінки. В даному випадку стінка не заважає просуванню дислокацій, які емітуються, що і призводить до зростання енергії. У разі випадкового розкиду субструктура погано блокує емітовані дислокації, тому зростання енергії в даному випадку вище, ніж за наявності впорядкованої стінки. При даних параметрах (велика зовнішня напруга) основний вплив на енергію будуть надавати емітовані дислокації, оскільки вони знаходяться поблизу вершини тріщини. Тому між енергією для випадку з рухомою стінкою і випадку з нерухомою непрозорою стінкою немає суттєвої різниці. Найбільш низька енергія фіксується у випадку з нерухомою прозорою стінкою, оскільки тут обмежено рух емітованих дислокацій.

Зміну поточного значення коефіцієнта інтенсивності напруження K_d представлено на рис. 7. Як видно, найбільш низьке зростання K_d спостерігається у разі відсутності стінки, оскільки вона не екранує емітовані дислокації, і вони можуть знаходитися далеко від вершини тріщини. У випадках хаотичного розкиду, рухомої і непрозорої рухомої стінки значення K_d суттєво відрізняються. Це пояснюється тим, що стінка не може загальмувати емітовані дислокації і не сильно впливає на них при такому великому зовнішньому напруженні. Найбільш різке зростання K_d відбува-

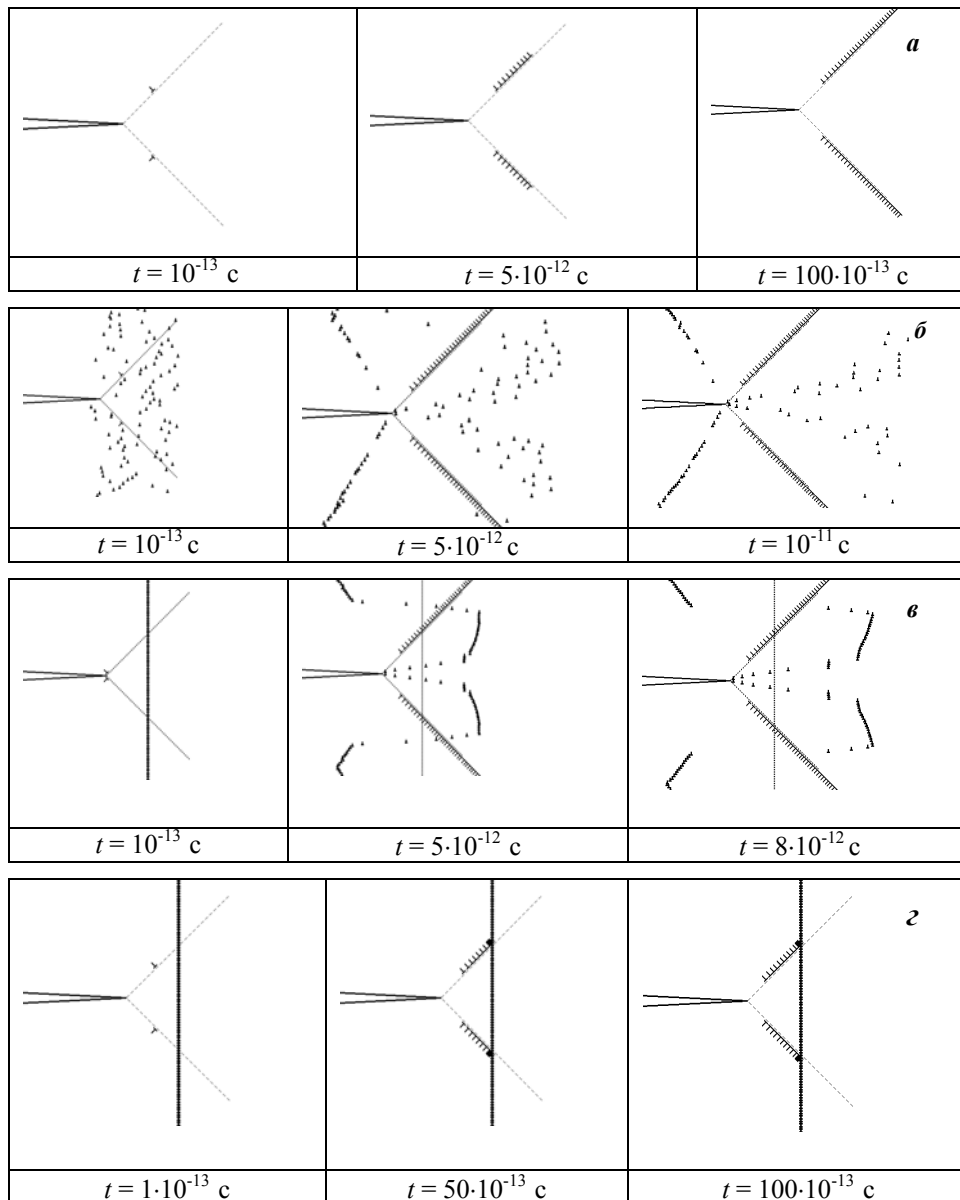
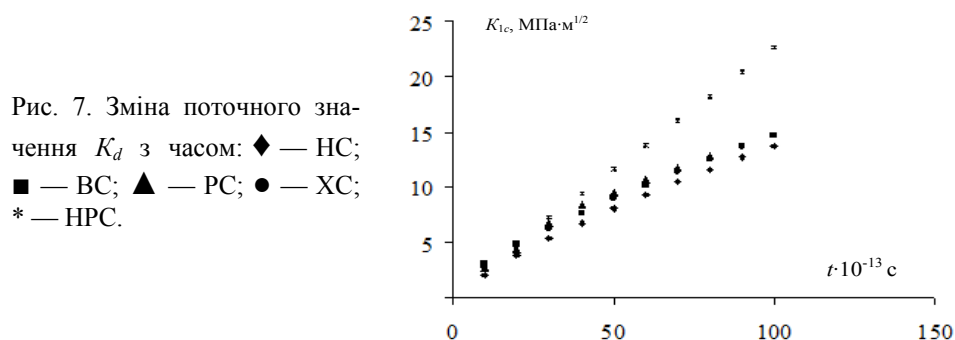


Рис. 6. Рух дислокацій від вершини тріщини при відсутності деформаційної субструктури (BC) (а), з хаотичним розподілом дислокацій (XC) (б), з рухомою стінкою (PC) (в), з нерухомою непрозорою стінкою (HPC) (г).



ється у випадку непрозорої нерухокої стінки, оскільки емітовані дислокації гальмуються стінкою і притискаються до вершини тріщини.

Таким чином, збільшення екрануючого напруження з боку дислокаційних скупчень поблизу нерухомих і непрозорих дислокаційних стінок сприяє різкому збільшенню тріщиностійкості в матеріалах з деформаційною наноструктурою при руйнуванні за механізмом квазісколу.

Висновки

Результати моделювання взаємодії дислокацій в пластичній зоні з границею зерна дозволили отримати залежність критичного коефіцієнта інтенсивності напруження K_{Ic} від розміру зерна, яка добре узгоджується з експериментом.

Наявність пластичної зони біля вершини тріщини суттєво змінює розподіл дислокацій в деформованому матеріалі, що докорінним чином впливає на енергетичні витрати при розповсюдженні тріщини в деформованому матеріалі.

В рамках моделі взаємодії тріщини квазісколу із субструктурою проаналізовано особливості впливу субструктури на розподіл напружень, структурні перебудови, енергетичні витрати на переміщення дислокацій поблизу вершини тріщини. Показано, що характер деформаційної субструктури суттєво впливає на силові та енергетичні параметри руйнування. При цьому впливає не стільки кількість дислокацій у субструктурі, скільки власне їх розташування і властивості. Встановлено, що наявність непрозорих дислокаційних стінок сприяє різкому збільшенню тріщиностійкості матеріалів з наноструктурою деформаційного походження при їх руйнуванні по механізму квазісколу.

Отримані результати мають важливе практичне значення для моделювання поведінки тріщини в напівкрихких матеріалах, таких як кремній, германій або метали, поблизу в'язко-крихкого переходу.

Робота виконана в рамках договору № 42-08-14 спільних наукових проєктів НАН України та Російського фонду фундаментальних досліджень.

1. *Борисовская Е. М.* Анализ условий аннигиляции дислокационных скоплений / Е. М. Борисовская, Ю. Н. Подрезов // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. — 2005. — Вып. 7. — С. 99—106.
2. *Борисовская Е. М.* Влияние параметров дислокационной структуры на скорость деформационного упрочнения железа и титана / [Е. М. Борисовская, Д. Г. Вербило, В. И. Даниленко и др.] // Наноструктурное материаловедение. — 2007. — № 1. — С. 52—65.
3. *Борисовская Е. М.* Компьютерное моделирование нелинейного поведения кривой нагружения / Е. М. Борисовская, Ю. Н. Подрезов // Ceramika. — 2007. — **101**. — Р. 159—166.
4. *Rice J. R.* Ductile versus brittle behaviour of crystals / J. R. Rice, R. Thomson // Phil. Mag. — 1974. — **29**. — Р. 73—97.
5. *Ohr S. M.* An electron microscopy study of crack tip deformation and its impact on the dislocation theory of fracture // Mater. Sci. and Engineering. — 1985. — **72**. — Р. 1—35.
6. *Ferney B. D.* The influence of multiple slip systems on the brittle-ductile transition in silicon / B. D. Ferney, K. J. Hsia // Mater. Sci. and Engineering. — 1999. — **A272**. — Р. 422—430.

7. *Lackshmanan V.* Edge dislocations emitted along inclined planes from a mode I crack / V. Lackshmanan, J. C. M. Li // *Mater. Sci. and Engineering.* — 1988. — **A104**. — P. 95—104.
8. *Трефилов В. И.* Физические основы прочности тугоплавких металлов / В. И. Трефилов, Ю. В. Мильман, С. А. Фирстов. — К. : Наук. думка, 1975. — 315 с.
9. *Wang T. C.* Dislocation behaviours ahead of crack tip // *Int. J. Solids and Structures.* — 1998. — **35**. — P. 5033—5050.
10. *Хирт Дж.* Теория дислокаций / Дж. Хирт, Н. Лоте. — М. : Атомиздат, 1972. — 599 с.
11. *Higashida K.* Analyzing crack-tip dislocations and their shielding effect on fracture toughness // *Mater. Sci. and Engineering. A.* — 2008. — **483—484**. — P. 13—18.
12. *Трефилов В. И.* Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических материалов / [В. И. Трефилов, В. Ф. Моисеев, Э. П. Печковский и др.]. — Киев : Наук. думка, 1989. — 256 с.
13. *Подрезов Ю. Н.* О структурной чувствительности механических свойств предварительно деформированных ОЦК металлов / Ю. Н. Подрезов, Н. И. Даниленко, Д. Г. Вербило // *Электронная микроскопия и прочность материалов.* — К. : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 1996.
14. *Подрезов Ю. Н.* Влияние пластической деформации на энергию разрушения порошкового и литого железа / Ю. Н. Подрезов, Н. И. Даниленко, А. Н. Демидик // *Порошковая металлургия.* — 1991. — № 9. — С. 74—79.
15. *Podrezov Yu.* Structural sensitivity of the mechanical properties of Fe-Armco high deformed by the equal-channel angular pressure / [Yu. Podrezov, V. Kopylov, S. Firstov, M. Danylenko] // *Физика и техника высоких давлений.* — 2001. — **11**, № 2. — С. 34—46.
16. *Podrezov Yu.* Effect of dislocation structure on fracture toughness of strained BCC-metals / Yu. Podrezov, S. Firstov // *Theor. and Appl. Fracture Mechanics.* — 1999. — **32**.
17. *Подрезов Ю. Н.* Влияние структуры на механические свойства арможелеза, продеформированного РКУ-прессованием до больших деформаций / [Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов, В. И. Копылов и др.] // *Электронная микроскопия и прочность материалов.* — Киев : Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 1995.
18. *Подрезов Ю. Н.* Влияние структуры на механические свойства деформированных ОЦК металлов / Ю. Н. Подрезов, С. А. Фирстов, В. И. Копылов // *Физика и техника высоких давлений.* — 2001. — **11**, № 1. — С. 137—140.

**Использование метода дислокационной динамики
для анализа структурной чувствительности трещиностойкости
ОЦК металлов, склонных к квазихрупкому разрушению**

Н. И. Даниленко, Ю. Н. Подрезов, К. М. Борисовская, О. С. Коряк,
С. А. Фирстов

Методом дислокационной динамики промоделировано взаимодействие трещины с субструктурой. Рассмотрены два случая: влияние размера зерна и деформационной субструктуры на закономерности распространения трещины в ОЦК

металлах. Показано, что аномальный характер зависимостей трещиностойкости от размера зерна и степени пластической деформации может быть объяснен с учетом особенностей взаимодействия дислокаций, которые эмитируются с вершины трещины, с границей зерна или ячеистой структурой, которая формируется в деформированном состоянии. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными зависимостями.

Ключевые слова: дислокационная динамика, трещиностойкость, размер зерна, деформационная субструктура.

Use of the method of dislocation dynamics for the analysis of the structural sensitivity of fracture toughness of BCC metals tend to quasigroups destruction

N. I. Danilenko, Yu. N. Podrezov, K. M. Borysovska, O. S. Koryak,
S. A. Firstov

Method for dislocation dynamics is simulated by the interaction of cracks with the substructure. We considered two cases: the influence of grain size and influence deformational substructure on the patterns of spreading cracks in BCC metals. It is shown that the anomalous nature of the dependency of fracture toughness from grain size and degree of plastic deformation can be explained with regard to the interaction of dislocations, which are emitting from the crack tip, with the grain boundary or cell structure, which is formed in a deformed state. The results of calculations are in good agreement with the experimental dependencies.

Keywords: *dislocation dynamics, fracture strength, grain size, deformation substructure.*