УДК 539.3

Ю. О. Мотузко (Запорожская нац. инженерная академия)

О ВЛИЯНИИ ЛИНИЙ СТЫКОВ ЗЕРЕН НА ДЕФОРМИРОВАНИЕ РЕАЛЬНОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА ПРИ ОТСУТСТВИИ ДИФФУЗИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ

The influence lines of the junctions of grain boundaries, among which mainly the triple joints, strength, ductility, internal friction and other mechanical properties of solids with defects. The effect of triple junctions were identified by comparison of polycrystalline and parquet from a bamboo structures in which the triple junctions are absent. On the basis of the results examines the role of triple junctions in the process of plastic deformation of polycrystals in the absence of diffusion mobility.

Розглянуто вплив ліній стиків границь зерен, серед яких переважно потрійні стики, на міцність, пластичність, внутрішнє тертя, інші механічні властивості твердого тіла з дефектами. Вплив потрійних стиків виявлявся шляхом співставлення полікристалічних и паркетних з бамбуковыми структурами, в яких потрійні стики відсутні. На основі одержаних результатів аналізується роль потрійних стиків у процесі пластичної деформації поликристалів при відсутності дифузійного руху.

Введение. В проблемах деформирования твердого тела представление его в виде однородной изотропной среды возможно лишь в весьма ограниченном круге задач, не требующих детализации этого процесса. Для реального твердого тела, имеющего дефекты кристаллического строения, процесс деформации локализован и сводится, в основном, к перемещению и взаимодействию этих дефектов, а также появлению новых дефектов. А усредненные прочностные макроскопические характеристики не могут дать истинной картины реального процесса деформации и возможностях воздействия на него.

Механизмы деформирования реального твердого тела весьма многообразны и далеко не все достаточно известны. И, конечно, теоретическое и экспериментальное изучение деформации реального твердого тела с учетом дефектов его микроскопического строения значительно сложнее, чем в случае представления его изотропным, однородным веществом. Но результаты исследований при этом могут дать много полезного для практических задач.

Метод исследования. При низких температурах $T < 0, 3T_{\text{плавления}}$ диффузионная подвижность практически отсутствует и не дает вклада в деформацию твердого тела. В таких условиях процесс пластической деформации монокристалла осуществляется путем скольжения решеточных дислокаций и достаточно хорошо изучен. Однако, если в этот монокристалл вставить межкристаллитную границу раздела и тем самым превратить его в бикристалл, то к скольжению в объеме решеточных дислокаций добавится еще один путь реализации деформации - зернограничное проскальзывание (рис. 1). О таком пути деформации уже накоплено много сведений [1–3]. В реальном же поликристалле границ зерен очень много и они неизбежно объединяются стыками зерен. Фактически, ребра зерен – это и есть эти стыки.

Легко понять, что стыковка различным образом ориентированных относительно внешнего напряжения зерен, осуществляется дополнительным искажением структуры в границе этих зерен. Это и вызывает особые свойства границ зерен по сравнению с монокристаллическим объемом зерна. В стыках же зерен необходимо объединить в единую структуру несколько границ зерен. Такое объединение приводит к дополнительному искажению структуры уже этих границ зерен. Область стыков зерен, поэтому будет обладать особыми свойствами относительно стыкующихся границ.



Рис. 1. *а* – скольжение решетчатых дислокаций, *б* – зернограничное проскальзывание в бикристалле

Следует отметить, что повышение искажения в линии стыка приведет к созданию концентратора напряжений. Такой концентратор будет стремиться релаксировать, сводя до трех количество стыкующихся границ. Меньше нельзя, т.к. это будет уже бикристалл. По этой причине наиболее распространенными в реальном поликристалле будут именно тройные стыки зерен (рис. 2). Множественных же стыков мало по сравнению с тройными.



Рис. 2. a – множественный стык границ зерен, $\mathbf{\delta}$ – тройной стык

Деформация трикристалла еще систематически не изучалась и атомный механизм пластического сдвига через тройной стык рассмотрен теоретически лишь для некоторых частных случаев [1,4]. Важность этой задачи очевидна, т. к. это случай реального поликристалла.

Результаты исследований и их анализ. Для деформации поликристалла без разрывов сплошности необходимо согласованное формоизменение составляющих его зерен. Различие в смещении центров тяжести смежных кристаллов вызовет сдвиговое напряжение по границе их раздела, которое релаксирует при аккомодационном зернограничном проскальзывании. Строгое решение задачи совместимости деформации поликристаллического агрегата получено И. М. Лифшицем для случая высоких температур и малых напряжений, когда различие деформации зерен путем переноса вакансий через их объем устраняется проскальзыванием [5]. Однако в этой работе не учитываются тройные стыки, которые неизбежно ограничивают и регулируют аккомодационное зернограничное проскальзывание.

При низких температурах диффузионный перенос массы отсутствует и согласованность деформации обеспечивается взаимной аккомодацией внутризеренного скольжения решеточных дислокаций и зернограничного проскальзывания. Представляется, что в таких условиях особую роль в пластической деформации должны играть тройные стыки зерен. Для неизотропного напряженного состояния они могут быть наиболее существенным препятствием для зернограничного проскальзывания.

Так как все три границы стыка не могут одновременно быть благоприятно ориентированы относительно внешней нагрузки, упругие напряжения у тройного стыка неизбежно концентрируются по мере нагружения. Релаксация напряжений такого концентратора выберет наиболее целесообразный путь с минимальной энергией либо испусканием в объем зерна решеточных дислокаций, либо образованием трещины. Поэтому естественно предполагать, что тройные стыки оказывают существенное влияние на прочность и пластичность, и задача заключается в выделении этого влияния.

Суждение о роли тройных стыков в формировании механических свойств высказано в этой работе на основе анализа изменения прочности, пластичности, внутреннего трения, а также характера релаксации напряжений при переходе от поликристаллической или паркетной к бамбуковой структуре без рекристаллизационного отжига. При таких переходах остаются неизменными структура границ и внутризеренное строение, химический состав материала, а наиболее существенное изменение заключается в уменьшении плотности тройных стыков вплоть до нуля при их исчезновении в бамбуковой структуре. Легко понять при этом, что плотность тройных стыков $\rho_{\rm TC}$ (их количество в единице объема) обратно пропорционально среднему размеру зерна, т. е. $\rho_{\rm TC} \sim d_3^{-2}$.

Временное сопротивление разрыву у поликристаллических нитей меди со средним размером зерна $d_3 = 1$ мкм и вольфрама с $d_3 = 0, 3$ мкм при T = 300 K, утоняемых электролитической полировкой от диаметра 100 мкм, остается неизменным (рис. 3a) при выполнении условия трехмерной поликристалличности $(d > d_3)$, т. е. постоянной плотности тройных стыков $\rho_{\rm TC}$ [6–8]. Уровень внутреннего трения Q^{-1} медных нитей также не меняется в этом диапазоне диаметров. Это позволяет сделать важный вывод о том, что в условиях сохранения идентичности внутренней структуры масштабный эффект практически отсутствует. Рост прочности монокристаллических тонких кристаллов (так называемых "усов") в этом диапазоне диаметров обусловлен изменением внутренней структуры их.

Картина резко меняется при наличии перехода к бамбуковой структуре (рис. 3б). Временное сопротивление разрыву возрастает, а уровень фона внутреннего трения Q^{-1} снижается. Такой переход реализовался электролитиче-

ским утонением медных нитей с исходным диаметром d = 100 мкм, в которых предварительно рекристаллизационным отжигом был получен средний размер зерна $d_3 = 30$ мкм (на рис. Зб показан пунктирной вертикальной линией).



Рис. 3. Зависимость напряжения разрыва σ и внутреннего трения Q^{-1} от диаметра d поликристаллических нитей при комнатной температуре

В нитях с бамбуковой структурой при T = 300 К прочность оказывается выше, а уровень фона внутреннего трения Q^{-1} ниже, чем в поликристаллических. Переход к бамбуковой структуре приводит к повышению скорости и степени релаксации напряжений в поликристаллических нитях меди.

Из диаграмм растяжения, представленных на рис. 4, видно, что рост прочности с переходом к бамбуковой структуре сопряжен с увеличением коэффициента деформационного упрочнения. В нитях со структурой бамбука появляется скачкообразность развития пластической деформации (показано пунктиром). Металлографическое наблюдение полос скольжения выявило гораздо более развитое множественное скольжение в нитях с бамбуковой структурой.



Рис. 4. Диаграммы растяжения нитей меди ($d_3 = 30$ мкм, T = 300 K): I – 10; II – 20; III – 50; IV – 73; V – 100 мкм

Зависимость внутреннего трения от деформации $Q^{-1}(\varepsilon)$ имеет максимум, который в нитях с бамбуковой структурой выявляется при меньших степенях пластической деформации (рис. 5). Обычно этот максимум объясняется ростом Q^{-1} при увеличении плотности дислокаций (ρ) и последующим снижением Q^{-1} вследствие укорочения действующих длин дислокаций (ι) из-за развития множественного скольжения и сильного влияния ι на Q^{-1} ($Q^{-1} \sim \rho \iota^4$). Данные металлографического анализа полос



Рис. 5. Диаграммы внутреннего трения деформации при растяжении нитей меди: I – 20; II – 100 мкм

скольжения и характер диаграмм $Q^{-1}(\varepsilon)$ позволяют заключить, что при переходе к бамбуковой структуре в нитях меди возрастает коэффициент деформационного упрочнения вследствие более интенсивного развития множественного скольжения.

Наиболее важным результатом сопоставления диаграмм растяжения нитей меди при переходе к бамбуковой структуре представляется более высокая пластичность (общее удлинение) поликристаллических нитей (сравните кривые I и V на рис. 4). Главная часть изменения пластичности наблюдается в диапазоне диаметров нитей, сопоставимых с размером зерна $d \approx d_3$, то есть в диапазоне интенсивного уменьшения плотности тройных стыков $\rho_{\rm TC}$.

Для подтверждения корреляции между величиной пластичности и плотностью тройных стыков $\rho_{\rm TC}$, а также выявления зависимости пластичности от количества тройных стыков были сопоставлены диаграммы растяжения при комнатной температуре алюминиевых фольг с паркетной и бамбуковой структурой. С этой целью из исходной фольги (толщиной h = 0, 3 мм, чистотой 99,96 ат процентов) приготовлялись образцы с паркетной структурой (толщина 0,3 мм, ширина 20 мм, длина 100 мм), из которых вырезались полоски шириной $\delta = 2 \div 3$ мм без тройных стыков, то есть имеющих бамбуковую структуру. В исходной ("широкой") фольге количество тройных стыков $N_{\rm TC}$ изменялось от 460 до 0, а соответственно плотности тройных стыков $\rho_{\rm TC}$ – от 23 до 0 см⁻² (мы уже отмечали, что $\rho_{\rm TC} \approx d_3^{-2}$). Такое изменение плотности тройных стыков достигалось увеличением d_3 от 2 до 20 мм предварительным рекристаллизационным отжигом при температуре 500 — 600°C в течении 6 часов.

Типичные диаграммы растяжения алюминиевой фольги с паркетной структурой (1) и вырезанной из нее полоски с бамбуковой структурой (2) показаны на рис. 6. Пластичность (общее удлинение) всегда больше в "широких" фольгах с паркетной структурой. Величина эффекта возрастает с увеличением исходной плотности тройных стыков. Это показано на рис. 7, где приведена зависимость отношения общего удлинения "широких" ε_{Π} и "узких" ε_{\bullet} фольг от исходной плотности тройных стыков ρ_{TC} , то есть размера зерна d_3 .



Рис. 6. Диаграммы растяжения фольг алюминия с паркетной (1) и бамбуковой (2) структурой: $N_{\rm TC} = 220, T = 300$ К

Отношение $\varepsilon_{\Pi}/\varepsilon_{\tilde{6}}$ меняется от единицы при отсутствии тройных стыков $N_{TC} = 0$ ($d_3 = 20$ мм) до 3,6 при $N_{TC} = 460$ ($d_3 = 2$ мм). Равенство $\varepsilon_{\Pi} = \varepsilon_{\tilde{6}}$ при бамбуковой структуре ($d_3 = 20$ мм) "широкой" фольги и вырезанной из нее полоски указывает на отсутствие размерного эффекта. Для предела текучести



Рис. 7. Зависимость отношения общего удлинения образцов с паркетной структурой ε_{Π} к общему удлиненю в бамбуковой структуре $\varepsilon_{\breve{0}}$ от количества тройных стыков $N_{\rm TC}$

 $\sigma_{0,2}$ выполняется закон Холла-Петча, однако во всех случаях его значение меньше для паркетной структуры, чем для бамбуковой при одном и том же размере зерна. Сопоставление диаграмм растяжения фольг с одинаковым размером зерна и шириной δ , изменяемой от 20 до 2 мм, показало неравномерное снижение пластичности по мере уменьшения ширины δ . Величина пластичности незначительно меняется при $\delta > d_3$ и резко уменьшается при сопоставимости ширины полоски δ и размера зерна d_3 , то есть в том диапазоне δ/d_3 , где наиболее существенно изменяется плотность тройных стыков $\rho_{\rm TC}$. Это показано на рис. 8.

Проведенное сопоставление механических свойств поликристаллических и паркетных структур в процессе постепенного перехода к бамбуковой структуре без изменения состояния границ и объема позволяет выявить роль тройных стыков границ. Это основано на представлении об изменении плотности тройных стыков как основном факторе при переходе к бамбуковой структуре. Среди других факторов, влияние которых на механические свойства следует проанализировать, необходимо отметить следующие изменения: 1) распределения нор-



Рис. 8. Зависимость величины общего удлинения ε от ширины полоски δ при постоянном d_3 . Количество тройных стыков $N_{\rm TC} = 220, T = 300$ К

малей границ к главным осям тензора напряжений; 2) площади поверхности границ в единице объема; 3) степени стесненности, так как на деформацию зерен, выходящих на свободную поверхность, накладывается меньше ограничений.

Влияние на величину пластичности первого и второго факторов, вероятно, незначительно, так как при низких температурах в отсутствие диффузионной подвижности зернограничное проскальзывание мало. Уменьшение же степени стесненности при переходе к бамбуковой структуре должно увеличивать пластичность, а не снижать. Поэтому наблюдаемый эффект повышенной пластичности поликристаллической (или паркетной) структуры по сравнению с бамбуковой связывается с тройными стыками.

Наиболее существенное изменение $\rho_{\rm TC}$ происходит при уменьшении диаметра нити в области $d \approx d_3$, а для перехода от паркетной к бамбуковой структуре в фольге при $\delta \approx d_3$. Легко показать, что для шестиугольной призматической формы зерна в паркетной структуре (ось призмы нормальна к плоскости фольги) при $\delta > d_3$ плотность тройных стыков остается постоянной по мере уменьшения δ , а при изменении δ/d_3 примерно от 1,5 до 0,5 плотность тройных стыков $\rho_{\rm TC}$ уменьшается от 100 до 0 процентов. Очевидно, что диапазон перехода от поликристаллической структуры при реальных зернах к бамбуковой определяется формой зерен и их положением относительно свободной поверхности. Важно отметить, что именно в области резкого изменения $\rho_{\rm TC}$ при $d > d_3$ или $\delta > d_3$ наблюдаются наиболее значительные изменения прочности и пластичности, внутреннего трения, характера диаграмм растяжения $\sigma(\varepsilon)$ и $Q^{-1}(\varepsilon)$, деформационного рельефа и других механических свойств. Вследствие этого закономерно предполагать существенный вклад во все эти изменения тройных стыков границ.

Обнаруженное повышение пластичности и снижение прочности при переходе от бамбуковой к поликристаллической или паркетной структуре противоречит традиционным представлениям о тройных стыках, как о центрах жесткости [9]. Из полученных в работе результатов следует, что тройные стыки снижают эффективную жесткость, то есть при одинаковом уровне напряжений пластическая деформация при наличии тройных стыков больше, чем без них. Такой вывод справедлив при усреднении по большому числу зернен, то есть когда размер образца значительно превышает d_3 . Влияние размера зерна на пластичность еще недостаточно изучено [10]. Наблюдаемая тенденция к повышению пластичности с уменьшением d_3 , возможно связана с ростом плотности тройных стыков $\rho_{\rm TC}$, а не только со снижением вероятности образования больших скоплений дислокаций и трансформацией их в трещины. Представляется, что дальнейшая детализация возможна при сопоставлении хорошо аттестованных трикристалла и бикристалла.

Выводы. Можно предложить следующее объяснение наблюдаемого эффекта повышения пластичности за счет тройных стыков границ, близких к специальным, когда зернограничные дислокации реально существуют. У тройных стыков в результате зернограничного проскальзывания, являющегося собственным или наведенным, образуются скопления зернограничных дислокаций. Релаксация таких скоплений в процессе развития деформации и перехода зернограничного проскальзывания через тройной стык в смежную границу может произойти различными способами. Наиболее простым представляется случай, когда вектор Бюргерса зернограничной дислокации кратен вектору Бюргерса решеточной дислокации и в зерно от тройного стыка уходит решеточная дислокация, составленная из нескольких зернограничных дислокаций [11]. Может реализовываться и ситуация, рассмотренная в [4]. В наиболее общем случае, когда нет простого соотношения между векторами Бюргерса зернограничных дислокаций трех границ и вектором Бюргерса решеточной дислокации, возможна перестройка и смещение стыка. Экспериментальным подтверждением подобных гипотез можно считать наблюдение скоплений зернограничных дислокаций у тройных стыков, а также испускание от тройных стыков решеточных дислокаций (явление "факела") [1]. В реальном поликристалле сравнительно небольшую часть (10 процентов) границ, отклоненных от специальных не более чем на 5÷6°, можно описать с привлечением понятия зернограничной дислокации. Однако приведенную модель можно распространить на произвольные границы, если не конкретизировать тонкую структуру концентратора напряжений в тройном стыке. Важно только то, что по мере неизотропного нагружения тройной стык становится концентратором напряжения вследствие различного строения входящих в него границ и их ориентировки относительно внешнего напряжения. А образовавшийся концентратор при благоприятных условиях для скольжения разрядится испусканием в зерно дислокаций. Подобный концентратор может срелаксировать также путем образования трещины, если это энергетически выгоднее испускания дислокаций. Возникновение трещин у тройных стыков отмечается экспериментально. Поэтому обнаруженный в работе эффект повышения пластичности для алюминия и меди, возможно, присущ только металлам с гранецентрированной кубической решеткой. Переход к бамбуковой структуре устраняет тройные стыки, и роль стопоров выполняют уже внутризеренные препятствия. При близости осей зерен к симметричным ориентировкам интенсивно развивается множественное скольжение, которое приводит к росту коэффициента деформационного упрочнения и повышению прочности. В испытанных рекристаллизованных нитях меди текстура была близка к ориентации $\langle 111 \rangle$, особенно благоприятной для образования сидячих дислокаций Ломер-Коттрелла. Повышение пластичности в случае фольг алюминия не сопровождается снижением коэффициента деформационного упрочнения. Предел текучести так же, как и в случае нити меди, остается неизменным при переходе к бамбуковой структуре. Это легко объяснить сохранением постоянной плотности дислокаций в объеме ρ , а следовательно, и эффективной длины источника дислокаций. В заключение следует отметить, что развитие пластической деформации в напряженном реальном твердом теле происходит локализовано под воздействием ряда факторов, среди которых тройные стыки границ зерен играют важнейшую роль, а иногда, и определяющую.

Список использованной литературы

- 1. *Орлов А. Н.* Границы зерен в металлах / А. Н. Орлов, В. Н. Перевезенцев, В. Н. Рыбин. М.: Металлургия, 1996. 180 с.
- 2. Косевич В. М. Структура межкристаллитных и межфазных границ / В. М. Косевич и др. М.: Металлургия, 1994. 256 с.
- 3. Глейтер Г., Чалмерс Б. Большеугловые границы зерен; пер. с англ. / Г. Жалдак, Б. Чалмерс. М.: Мир, 1985. 375 с.
- 4. *Перевезенцев В. Н., Щербань М. Ю.* Прохождение зернограничных дислокаций через тройные стыки зерен / В. Н. Перевезенцев, М. Ю. Щербань // Поверхность. Физика, химия, механика. 1997.– № 11. С. 116–122.
- 5. Лифшиц И. М. Перераспределение напряжений в зернах поликристалла в поле внешних напряжений / И. Н. Лифшиц // ЖЭТФ. 1963.– № 44, вып. 4. С. 1349–1367.
- Рабухин В. Б. Влияние поверхностей раздела на пластическую деформацию и внутреннее трение металлических нитей / В. Б. Рабухин // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1995.– № 10. – С. 5–21.
- 7. *Рабухин В. Б.* Влияние поверхностей раздела на пластическую деформацию и внутреннее трение металлических нитей : автореф. док. дис. / В. Б. Рабухин. М.: МИСиС, 1984. 48 с.
- Рабухин В. Б. Роль тройных стыков границ в зернограничной неупругости / В. Б. Рабухин // ФММ. – 1997.– № 55, вып. 1. – С. 176–183.
- Bure W. Sterss redistribution due to grain Boundary sliding during greep / W. Bure // Met. Sci. - 2008.- Nom. 16. - P. 223-227.
- 10. *Полухин П. И.* Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. М.: Металлургия, 2002. 584 с.
- 11. *Орлов А. Н.* Введение в теорию дефектов в кристаллах / А. Н. Орлов. М.: Высшая школа, 1999. 144 с.