

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.9

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.011

К ВОПРОСУ О СООТНОШЕНИИ ВКЛАДОВ РАЗЛИЧНЫХ КАНАЛОВ РОЖДЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ ПРИ ЭВОЛЮЦИИ ДИСЛОКАЦИОННОГО АНСАМБЛЯ В ПРОЦЕССЕ ДЕФОРМАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО НИКЕЛЯ

Игорь Станиславович Ясников^{1†}, Эйнар Альбертович Аглетдинов²,
Алексей Валериевич Данюк³

^{1, 2, 3} Тольяттинский государственный университет, ул. Белорусская, 14, 445020, Тольятти, Россия

¹ yasnikov@phystech.edu[†], <https://orcid.org/0000-0002-6120-7836>

² aeinar7@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6956-941X>

³ alexey.danyuk@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7352-9947>

Аннотация. В работе рассматриваются некоторые аспекты описания эволюции дислокационного ансамбля в рамках феноменологии Кокса-Мекинга для крупнозернистых материалов или Мекинга-Эстрина для ультрамелкозернистых материалов. Аргументировано использование объединенной феноменологии Кокса-Мекинга-Эстрина в широком диапазоне изменения размеров зерна и на ее основе предложена оценка вкладов различных каналов рождения дислокаций (тело зерна и граница зерна) на примере экспериментальных данных по одноосной деформации образцов поликристаллического никеля с размером зерна в диапазоне от 0.7 до 100 мкм. Показано, что при увеличении размера зерна вклады различных каналов рождения дислокаций (тело зерна и граница зерна) могут не являться монотонными функциями, и существенным образом зависят от особенностей подготовки образцов, которая задает начальное упрочнение материала с точки зрения соотношения плотности дислокаций в теле зерна и на границе зерна.

Ключевые слова: дислокации, дефекты, дислокационный ансамбль, эволюция структуры, зерно, феноменологическое описание, поликристаллический никель, одноосная деформация.

Благодарности: Авторы (Ясников И.С. и Аглетдинов Э.А.) выражают благодарность Российскому Научному Фонду за финансовую поддержку в рамках проекта № 22-29-00143 «Универсальный, практико-ориентированный критерий потери устойчивости пластического течения в металлических материалах как прямое следствие коллективной динамики дислокационного ансамбля».

Для цитирования: Ясников И.С., Аглетдинов Э.А., Данюк А.В. К вопросу о соотношении вкладов различных каналов рождения дислокаций при эволюции дислокационного ансамбля в процессе деформации поликристаллического никеля // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 2. С. 227–232. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.011.

Original article

ON THE RELATIONSHIP OF THE CONTRIBUTIONS OF DIFFERENT CHANNELS FOR THE DISLOCATIONS STORAGE RATE DURING THE EVOLUTION OF A DISLOCATION ENSEMBLE IN THE PROCESS OF DEFORMATION OF POLYCRYSTALLINE NICKEL

Igor S. Yasnikov^{1†}, Einar A. Agletdinov², Alexey V. Danyuk³

^{1, 2, 3} Togliatti State University, Belorusskaya Str., 14, Togliatti, 445020, Russia

¹ yasnikov@phystech.edu[†], <https://orcid.org/0000-0002-6120-7836>

² aeinar7@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6956-941X>

³ alexey.danyuk@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7352-9947>

Abstract. Some aspects of the description of the dislocation ensemble evolution in the framework of the Kocks-Mecking phenomenology for coarse-grained materials or Mecking-Estrin for ultrafine-grained materials are considered. The use of the combined Kocks-Mecking-Estrin phenomenology in a wide range of grain sizes is argued and, on its basis, an assessment of the contributions of various dislocation storage channels (grain body and grain boundary) is proposed using the example of experimental data on uniaxial deformation of polycrystalline nickel samples with a grain size ranging from 0.7 up to 100 microns. It is shown that, as the grain size increases, the contributions of various dislocation production channels (grain body and grain boundary) may not be monotonic functions, and significantly depend on the characteristics of sample preparation, which determines the initial hardness of the material in terms of the ratio of dislocation density in the grain body and on grain boundary.

Keywords: dislocations, defects, dislocation ensemble, structure evolution, grain, phenomenological description, polycrystalline nickel, uniaxial deformation.

Acknowledgements: The authors (Yasnikov I.S. and Agletdinov E.A.) express their gratitude to the Russian Science Foundation for financial support in the framework of project No. 22-29-00143 «The universal, practice-oriented criterion for the loss of stability of plastic flow of metallic materials as a direct consequence of the collective dynamics of a dislocation ensemble».

For citation: Yasnikov, I. S., Agletdinov, E. A. & Danyuk, A. V. (2022). On the relationship of the contributions of different channels for the dislocations storage rate during the evolution of a dislocation ensemble in the process of deformation of polycrystalline nickel. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 2(19), 227–232. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.011.

Введение

Многочисленные экспериментальные факты по нагружению металлических материалов свидетельствуют о существенно различном поведении дислокационного ансамбля как при различных микроструктурных параметрах материала (размер зерна), так и при различных условиях эксперимента (скорость деформации и температура испытаний). В частности, эволюция дислокационного ансамбля в крупнозернистых материалах описывается наиболее точным образом феноменологическим уравнением Кокса-Мекинга [1-5]:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = k_1^{KM} \sqrt{\rho} - k_2^{KM} \rho, \quad (1)$$

где ρ – плотность дислокационного ансамбля, γ – относительная деформация сдвига, k_1^{KM} , k_2^{KM} – феноменологические коэффициенты. Первое слагаемое в правой части уравнения (1) описывает процесс размножения дислокаций за счет дислокаций в теле зерна, а второе – их аннигиляцию в процессе дислокационного возврата.

В свою очередь, эволюция дислокационного ансамбля в ультрамелкозернистых материалах описывается наиболее точным образом феноменологическим уравнением Мекинга-Эстрина [1-5]:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = k_0^{ME} - k_2^{ME} \rho, \quad (2)$$

где k_0^{ME} , k_2^{ME} – феноменологические коэффициенты. Первое слагаемое в правой части уравнения (2) описывает процесс размножения на границах зёрен, а второе – их аннигиляцию в процессе дислокационного возврата.

Таким образом, описание динамики дислокационного ансамбля базируется на том факте, что изменение его плотности в процессе нагружения лимитируется двумя процессами: размножением дислокаций на длине свободного пробега и их аннигиляцией в процессе дислокационного возврата. Поскольку длина свободного пробега Λ может лимитироваться как дислокациями внутри зерна ($\Lambda \sim 1/\sqrt{\rho}$), так и размером зерна D ($\Lambda \sim D$), то удобно объединять вышеуказанные частные случаи в рамках единого феноменологического уравнения. Это позволяет избежать вынужденного разделения металлических материалов на крупнозернистые и ультрамелкозернистые, однозначно выявить вклад каналов рождения и гибели дислокаций при изменении размера зерна, а также приближать экспериментально полученные данные в рамках обобщённой кинетики дислокационного ансамбля наиболее точным образом. Данное уравнение можно записать в следующем виде:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = k_0^{KME} + k_1^{KME} \sqrt{\rho} - k_2^{KME} \rho. \quad (3)$$

Уравнение (3) представляет собой феноменологическое уравнение Кокса-Мекинга-Эстрина, описывающее динамику дислокационного ансамбля в наиболее общем случае [3-11]. Первое слагаемое данного уравнения опи-

сывает размножение дислокаций на границах зёрен, второе – размножение за счет дислокаций внутри зерна, а третье – их аннигиляцию в процессе дислокационного возврата.

В силу вышесказанного ранее вполне естественно ожидать, что в крупнозернистых материалах вклад первого слагаемого уравнения (3) будет пренебрежимо мал, в то время как в ультрамелкозернистых материалах вклад второго слагаемого уравнения (3) можно считать пренебрежимо малым. При этом по мере увеличения размера зерна вклад первого слагаемого монотонно увеличивается, а вклад второго слагаемого монотонно уменьшается. Проверке данной гипотезы и посвящена настоящая работа.

Методология исследований

Проверка данной гипотезы была проведена с использованием данных по деформации поликристаллического никеля, которые представлены в работе [12]. Там же достаточно подробно описана методика проведения экспериментов. Здесь отметим лишь, что заготовки образцов ультрамелкозернистого никеля получали методом равноканального углового прессования (РКУП) до четырех проходов через матрицу 90° при температуре 150 °С. Заготовки после РКУП подвергали отжигу при различных температурах в вакууме в течение 1 ч для получения образцов с различным размером зерна примерно от 0,7 мкм до 100 мкм.

Использование соотношения Тейлора:

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha G M b \sqrt{\rho}, \quad (4)$$

где σ_0 – напряжение трения при взаимодействии движущихся дислокаций с дефектами решетки и различными препятствиями недеформационного происхождения, G – модуль сдвига, M – ориентационный фактор, $\alpha \sim 0.4$ (коэффициент, отражающий скоростную чувствительность материала к деформированию [13, 14]) позволяет в уравнениях (1)-(3) перейти от зависимости $\rho = \rho(\gamma)$ к зависимости $\sigma = \sigma(\varepsilon)$ и приближать соответствующие экспериментальные данные уравнениями (1)-(3).

Здесь стоит отметить следующее. Степень точности и коэффициент регрессии получаемых параметров динамического приближения экспериментальных данных уравнением (3) достаточно сильно зависит от выбора начального приближения. Это следствие решения практически любых типов многопараметриче-

ских уравнений с использованием известных методов оптимизации. Поэтому в качестве начального приближения нами было предложено использовать значения, полученные в результате нижеописанного подхода.

Предположим, мы приближаем экспериментальные данные уравнением Кокса-Мекинга-Эстрина в виде (3) и в качестве выходных параметров получаем k_0^{KME} , k_1^{KME} , k_2^{KME} и ρ_0 (начальную плотность дислокаций). Предварительно приблизим эти же экспериментальные данные в рамках двух различных феноменологий, являющихся частными случаями приближения Кокса-Мекинга-Эстрина. В приближении Кокса-Мекинга данное приближение будет выглядеть как уравнение (1), а в приближении Мекинга-Эстрина как уравнение (2). Выберем некоторое ξ ($0 < \xi < 1$), умножим почленно уравнение (1) на ξ , а уравнение (2) на $(1 - \xi)$ и сложим полученные уравнения. В результате получим:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = (1 - \xi)k_0^{ME} + \xi k_1^{KM} \sqrt{\rho} - (\xi k_2^{KM} + (1 - \xi)k_2^{ME})\rho, \quad (5)$$

что в точности повторяет уравнение (3) при следующих условиях:

$$\begin{aligned} k_0^{KME} &= (1 - \xi)k_0^{ME} \\ k_1^{KME} &= \xi k_1^{KM} \\ k_2^{KME} &= \xi k_2^{KM} + (1 - \xi)k_2^{ME} \end{aligned} \quad (6)$$

Соотношения (6) параметрически задают равномогущий континуум класс приближений с заданной точностью феноменологических коэффициентов уравнения (3). Далее, имея класс таких решений на основании теоремы о непрерывном изменении параметрической функции по отношению к изменениям параметра можно получить решения с точностью лучше заданной.

Однако, с физической точки зрения иметь параметрически заданный континуум решений уравнения (3) абсурдно. Из этого множества решений необходимо выделить одно на основе естественных физических ограничений на параметры модели. Таким ограничением, на взгляд авторов данной работы, может являться фиксированное значение феноменологического коэффициента k_0^{KME} . Поскольку в этом случае на длине свободного пробега Λ естественным препятствием является граница зерна размером

D , и, следуя результатам работ [1, 3] без ограничения общности можно полагать, что:

$$k_0^{KME} = \frac{1}{bM\Lambda} \sim \frac{1}{bMD}, \quad (7)$$

что позволяет вычислить из первого условия (6) с заданной точностью параметр ξ и по этому значению рассчитать остальные коэффициенты k_1^{KME} и k_2^{KME} . Полученные феноменологические коэффициенты определяют единственное, физически правильное решение уравнения (3) с заданной точностью. Более того, параметр ξ однозначно задает долю каналов рождения дислокаций в теле зерна и на границе зерна, которые равны ξ и $1-\xi$ соответственно ($0 < \xi < 1$) и является в некотором смысле ин-

дикатором механизмов размножения дислокаций для реализации кинетики, заданной уравнением (3).

Результаты и их обсуждение

Вышеописанный алгоритм динамического приближения был реализован для обработки экспериментально полученных кривых нагружения выбранных образцов поликристаллического никеля с различным размером зерна. Значения полученных значений параметра ξ , который описывает вклад канала рождения дислокаций в теле зерна по отношению к общему каналу (тело зерна + граница зерна), представлены в таблице 1.

Таблица 1. Значения параметра ξ при различных значениях среднего размера зерна D

Table 1. The values of the parameter ξ at different values of the average grain size D

Температура отжига T , °C	Средний размер зерна D , мкм	Параметр ξ
150	0.78	0.989
200	1.02	0.988
300	1.20	0.987
400	1.32	0.949
500	4.11	0.498
600	9.32	0.748
700	34.60	0.919
800	105.0	0.972

Визуализация результатов, представленных в таблице 1, представлена на рис.1, на котором показана зависимость параметра ξ от среднего размера зерна D . Как видно из рис.1, поведение параметра ξ с ростом размера зерна немонотонно, и мы связываем это с особенностью формирования начального упрочнения при подготовке образцов. Образец с минимальным размером зерна отжигался при малой температуре, и он остался насыщен дислокациями как в теле зерна, так и на границах зерна, и на длине свободного пробега дислокаций их размножение происходит преимущественно в теле зерна ($1/\sqrt{\rho} < D$). Повышение температуры отжига приводит как к увеличению размера зерна, так и к постепенному уходу дислокаций из тела зерна в границу зерна и это приводит к конкуренции двух возможных препятствий на длине свободного пробега дислокаций. Поскольку плотность дислокаций в теле зерна уменьшает-

ся (они уходят в границу зерна), то вероятность размножения дислокаций на дислокациях в теле зерна уменьшается, а на границе зерна увеличивается. Это приводит к тому, что параметр ξ начинает уменьшаться с ростом размера зерна вплоть до ~ 5 мкм. Далее параметр ξ начинает монотонно расти, поскольку при высоких температурах отжига существенно возрастает размер зерна и его граница уже не может рассматриваться как обязательное препятствие на длине свободного пробега дислокаций. Несмотря на то, что плотность дислокаций в теле зерна в процессе высокотемпературного отжига существенно уменьшилась, вероятность размножения на дислокациях внутри зерна с ростом размера зерна увеличивается по сравнению с размножением на границе зерна, которая при увеличивающихся размерах зерна перестает влиять на длину свободного пробега дислокаций. Таким образом, анализ конкуренции и вклада

двух возможных каналов размножения дислокаций при увеличении размера зерна рационально объясняет поведение графика на рис.1.

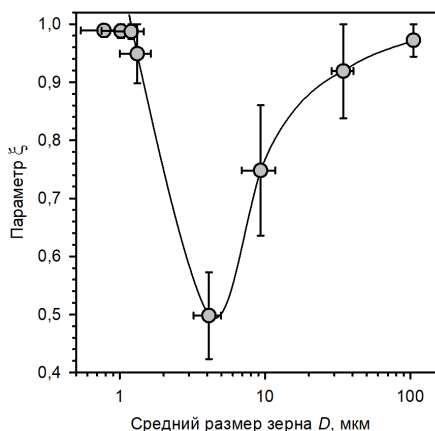


Рис.1. Выявленная зависимость параметра ξ при различных значениях среднего размера зерна D

Fig.1. The revealed dependence of the parameter ξ for different values of the average grain size D

Заключение

Проведенный анализ показывает, что говорить о монотонности различных вкладов размножения дислокаций в процессе роста зерна не представляется возможным. Вклад первого и второго слагаемого в уравнении Кокса-Мекинга-Эстрина при увеличении размера зерна существенным образом зависит от особенностей пробоподготовки, которая, в свою очередь, определяет упрочнение материала в соотношении плотности дислокаций в теле зерна и на границе зерна. Искусственно разделять эволюцию дислокационного ансамбля феноменологией Кокса-Мекинга (1) в случае крупнозернистого материала, и феноменологией Мекинга-Эстрина (2) в случае ультрамелкозернистого материала не всегда корректно. Наиболее корректным подходом в этом случае считается объединенная феноменология Кокса-Мекинга-Эстрина, которая эффективно учитывает размножение дислокаций как на границах зёрен, так и внутри зерна.

Список литературы

1. Klepaczko J. Thermally activated flow and strain rate history effects for some polycrystalline f.c.c. metals // *Mater. Sci. Eng.* 1975. V. 18. P. 121–135.
2. Kocks U.F. Laws for work-hardening and low-temperature creep // *J. Eng. Mater. Technol.* 1976. V. 98. P. 76–85.

3. Mecking H., Kocks U.F. Kinetics of flow and strain-hardening // *Acta Metall.* 1981. V. 29. P. 1865–1875.

4. Estrin Y., Mecking H. A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models // *Acta Metall.* 1984. V. 32. P. 57–70.

5. Kocks U.F., Mecking H. Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case // *Prog. Mater. Sci.* 2003. V. 48. P. 171–273.

6. Малыгин Г.А. Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов // *УФН.* 1999. Т. 169. С. 979–1010.

7. Малыгин Г.А. Прочность и пластичность нанокристаллических материалов и наноразмерных кристаллов // *УФН.* 2011. Т. 181. С. 1129–1156.

8. Kocks U.F., Argon A.S., Ashby M.F. Thermodynamics and kinetics of slip // *Prog. Mater. Sci.* 1975. V. 19. P. 1–281.

9. 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. P. 51–72.

10. Hariharan K., Barlat F. Modified Kocks-Mecking-Estrin model to account nonlinear strain hardening // *Metall. Mater. Trans.* 2019. V. 50. P. 513–517.

11. Vinogradov A., Yasnikov I.S., Estrin Y. Evolution of Fractal Structures in Dislocation Ensembles during Plastic Deformation // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 108. P. 205504.

12. Yasnikov I.S., Kaneko Y., Uchida M., Vinogradov A. The grain size effect on strain hardening and necking instability revisited from the dislocation density evolution approach // *Mater. Sci. Eng. A.* 2022. V. 831. P. 142330.

13. Mughrabi H. The α -factor in the Taylor flow-stress law in monotonic, cyclic and quasi-stationary deformations: dependence on slip mode, dislocation arrangement and density // *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* 2016. V. 20. P. 411–420.

14. Devincere B., Kubin L.P. Simulations of forest interactions and strain hardening in FCC crystals // *Model. Simulat. Mater. Sci. Eng.* 1994. V. 2. P. 559–570.

Информация об авторах

И. С. Ясников – доктор физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник научно-исследовательского института прогрессивных технологий Тольят-

тинского государственного университета, профессор кафедры «Общая и теоретическая физика» Тольяттинского государственного университета.

Э. А. Аглетдинов – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник научно-исследовательского института прогрессивных технологий Тольяттинского государственного университета.

А. В. Данюк – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник научно-исследовательского института прогрессивных технологий Тольяттинского государственного университета.

References

1. Klepaczko, J. (1975). Thermally activated flow and strain rate history effects for some polycrystalline f.c.c. metals. *Mater. Sci. Eng.*, 18(1), 121–135.
2. Kocks, U. F. (1976). Laws for work-hardening and low-temperature creep. *J. Eng. Mater. Technol.*, 98(1), 76–85.
3. Mecking, H. & Kocks, U. F. (1981). Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metall.*, 29(11), 1865–1875.
4. Estrin, Y. & Mecking, H. (1984). A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models. *Acta Metall.*, 32(1), 57–70.
5. Kocks, U. F. & Mecking, H. (2003). Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case. *Prog. Mater. Sci.*, 48(3), 171–273.
6. Malygin, G. A. (1999). Dislocation self-organization processes and crystal plasticity. *Phys. Usp.*, 42(9), 887–916. (In Russ.).
7. Malygin, G. A. (2011). Strength and plasticity of nanocrystalline materials and nanosized crystals. *Phys. Usp.*, 54(11), 1091–1116. (In Russ.).
8. Kocks, U. F., Argon, A. S. & Ashby M. F. (1975). Thermodynamics and kinetics of slip. *Prog. Mater. Sci.*, 19(1), 1–281.
9. Alexandrov, I. V. & Chembarisova, R. G. (2007). 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.*, 16(1-2), 51–72.
10. Hariharan, K. & Barlat, F. (2019). Modified Kocks-Mecking-Estrin model to account nonlinear strain hardening. *Metall. Mater. Trans.*, 50(2), 513–517.
11. Vinogradov, A., Yasnikov, I. S. & Estrin, Y. (2012). Evolution of Fractal Structures in Dislocation Ensembles during Plastic Deformation. *Phys. Rev. Lett.*, 108(20), 205504.
12. Yasnikov, I. S., Kaneko, Y., Uchida, M. & Vinogradov, A. (2022). The grain size effect on strain hardening and necking instability revisited from the dislocation density evolution approach. *Mater. Sci. Eng. A.*, 831, 142330.
13. Mughrabi, H. (2016). The α -factor in the Taylor flow-stress law in monotonic, cyclic and quasi-stationary deformations: dependence on slip mode, dislocation arrangement and density. *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, 20(6), 411–420.
14. Devincere, B. & Kubin, L. P. (1994). Simulations of forest interactions and strain hardening in FCC crystals. *Model. Simulat. Mater. Sci. Eng.*, 2(3A), 559–570.

Information about the authors

I. S. Yasnikov – Doctor of Physical and Mathematical Science, Assistant Professor, Leading Researcher of Research Institute for Advanced Technologies of Togliatti State University, Professor of the Department «General and Theoretical Physics» of Togliatti State University.

E. A. Agletdinov – Candidate of Physical and Mathematical Science, Junior Researcher of Research Institute for Advanced Technologies of Togliatti State University.

A. V. Danyuk – Candidate of Physical and Mathematical Science, Senior Researcher of Research Institute for Advanced Technologies of Togliatti State University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 25.04.2022; одобрена после рецензирования 02.05.2022; принята к публикации 10.05.2022.

The article was received by the editorial board on 25 Apr. 22; approved after reviewing on 02 May. 22; accepted for publication on 10 May.22.