



**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ОТ МЕЖДИСЛОКАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
ДО МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ**

монографии
ТГАСУ

Томск 2015

Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Томский государственный архитектурно-строительный университет»

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ОТ МЕЖДИСЛОКАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
ДО МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ**

Под редакцией В.А. Старенченко

Томск
Издательство ТГАСУ
2015

Авторы: В.А. Старенченко, Н.Н. Белов, Ю.В. Соловьёва, Я.Д. Липатникова, С.В. Старенченко, О.Д. Пантюхова, Д.Н. Черепанов, Т.А. Ковалевская, О.И. Данейко, С.Н. Колупаева, М.И. Слободской, Р.И. Куринная.

УДК 539.37:538.911

ББК 22.37:30.13

Математическое моделирование от междислокационных взаимодействий до макроскопической деформации [Текст] : монография / под ред. В.А. Старенченко. – Томск : Изд-во Том. гос. архит.-строит. ун-та, 2015. – 540 с.

ISBN 978-5-93057-657-3

В монографии излагается многоуровневый подход к моделированию макроскопической пластической деформации ГЦК-монокристаллов. Последовательно рассматриваются и моделируются следующие структурные уровни: уровень междислокационного взаимодействия, уровень зоны сдвига, уровень элемента деформационной среды и, наконец, макроуровень как совокупность множества элементов деформационной среды. Последовательно для каждого уровня построены математические модели. Проведены численная реализация моделей и сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными.

Для широкого круга специалистов: научных сотрудников, инженеров, работающих в области металловедения и физики конденсированных сред, аспирантов и студентов, специализирующихся в области материаловедения и математического моделирования процессов пластической деформации.

УДК 539.37:538.911

ББК 22.37:30.13

Рецензенты:

доктор физ.-мат. наук, профессор, директор Сибирского физико-технического института **А.И. Потекаев**;

доктор физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Национального исследовательского Томского государственного университета **С.А. Афанасьева**.

ISBN 978-5-93057-657-3

© Коллектив авторов, 2015

© Томский государственный архитектурно-строительный университет, 2015

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	3
Глава 1. Контактные взаимодействия индивидуальных дислокаций	6
1.1. Контактные взаимодействия дислокаций некомпланарных систем скольжения	6
1.2. Расчеты прочности дислокационных соединений в рамках простейшей модели	7
1.3. Моделирование процесса разрушения соединения	11
1.3.1. Геометрия дислокационного соединения в отсутствии приложенных напряжений	12
1.3.2. Геометрия дислокационного соединения в случае приложенных внешних сил	19
1.4. Равновесные реакции в отсутствии внешних напряжений	21
1.4.1. Дислокационные соединения, образованные при произвольном пересечении реагирующих дислокаций	21
1.4.2. Влияние наклона дислокации леса на длину соединения	24
1.4.3. Изменение длины дислокационного соединения в зависимости от длины сегмента дислокации леса	26
1.4.4. Изменение длины дислокационного соединения в зависимости от длины реагирующего сегмента скользящей дислокации, ее типа и угла наклона к линии соединения	27
1.5. Статистика длин дислокационных соединений	31
1.6. Изменение дислокационной конфигурации под действием приложенного напряжения	34
1.6.1. Разрушение дислокационного соединения под действием приложенного напряжения	34
1.6.2. Образование длинного дислокационного соединения под действием напряжения	37
1.6.3. Влияние геометрии пересечения реагирующих дислокаций на напряжение разрушения дислокационного соединения	39

1.7. Влияние ориентации реагирующих дислокаций на прочность соединений.....	43
1.7.1. Влияние ориентации скользящей дислокации на прочность дислокационного соединения	43
1.7.2. Влияние ориентации дислокации леса на прочность дислокационного соединения.....	45
1.8. Оценка параметров дислокационных соединений	46
1.9. Оценка размеров зоны сдвига	49
1.9.1. Различные методы оценки размеров зоны сдвига.....	50
1.9.2. Оценка параметров β_r и β_D для ГЦК-кристалла	54
Глава 2. Исследование явления скольжения в кристаллах	58
2.1. Исследование явления скольжения в кристаллах методами имитационного моделирования	58
2.1.1. Основные задачи исследований	58
2.1.2. Модель	67
2.1.3. Компьютерные эксперименты	91
2.1.4. Результаты моделирования	95
2.1.4.1. Поле однородных слабых препятствий.....	95
2.1.4.2. Зарождение и распространение элементарных кристаллографических скольжений в поле дислокаций некомпланарных систем скольжения.....	125
2.1.5. Обсуждение результатов моделирования	173
2.2. Математическое моделирование динамики движения дислокаций в континуальном приближении.....	180
2.2.1. Постановка вычислительных экспериментов.....	184
2.2.2. Математическое моделирование элементарного кристаллографического скольжения	186
2.2.3. Учет упругого взаимодействия между дислокациями при формировании зоны кристаллографического сдвига	193
2.2.4. Исследование формоизменения дислокационной петли при формировании зоны кристаллографического сдвига	198
Глава 3. Описание кинетики деформационных дефектов в рамках концепции упрочнения и отдыха	204

3.1. Физические представления о формировании субструктур деформации вследствие процессов упрочнения и отдыха	204
3.2. Динамическая локализация кристаллографического скольжения	212
3.3. Интенсивности генерации точечных дефектов при движении винтовых сегментов с порогами.....	218
3.3.1. Генерация в условиях термической активации	218
3.3.2. Генерация в условиях динамического движения	219
3.3.3. Генерация с учётом неоднородности поля препятствий	221
3.4. Генерация межузельных атомов путём диффузионного растворения диполей с малым плечом	225
3.5. Скорости аннигиляции и рекомбинации деформационных точечных дефектов	227
3.5.1. Дрейф точечных дефектов к стокам	230
3.5.2. Вакансионный механизм самодиффузии при высоких температурах	232
3.5.3. Скорости аннигиляции и рекомбинации деформационных точечных дефектов	233
3.5.4. Скорость аннигиляции межузельных атомов посредством краудионного механизма.....	234
3.5.5. Уравнения кинетики деформационных точечных дефектов	236
3.6. Генерация и аннигиляция дислокаций, формирующих границы неразориентированных ячеек	238
3.6.1. Интенсивности генерации дислокаций в динамических дипольных конфигурациях	239
3.6.2. Интенсивность генерации дислокационных обрывков ..	242
3.6.3. Скорости аннигиляции дислокаций в динамических дипольных конфигурациях	243
3.6.4. Оценка величины среднего плеча диполей в динамических дипольных конфигурациях	244
3.6.5. Распад динамических диполей на точечные дефекты	246
3.6.6. Уравнения кинетики обрывков и дислокаций в динамических дипольных конфигурациях	247

3.7. Генерация и аннигиляция сдвигообразующих дислокаций ...	247
3.7.1. Генерация сдвигообразующих дислокаций	248
3.7.2. Аннигиляция винтовых сегментов сдвигообразующих дислокаций	251
3.7.3. Аннигиляция невинтовых сегментов сдвигообразующих дислокаций	252
3.7.4. Интенсивность перестроения дислокационных скоплений в дислокационные стенки	254
3.7.5. Образование сдвигообразующих дислокаций при разрушении дислокационных стенок	259
3.7.6. Поглощение сдвигообразующих дислокаций дислокационными стенками	260
3.7.7. Уравнение кинетики сдвигообразующих дислокаций....	261
3.8. Формирование границ разориентировки.....	261
3.8.1. Уравнение кинетики дислокационных стенок	262
3.8.2. Изменение разориентировки стенок с увеличением степени пластической деформации.....	263

Глава 4. Роль точечных дефектов в формировании субструктур деформации.....	266
4.1. Модель генерации и накопления точечных дефектов в процессе сдвиговой пластической деформации	266
4.2. Генерация и накопление деформационных точечных дефектов	270
4.3. Формирование субструктур деформации.....	275

Глава 5. Дислокационная кинетика сплавов со сверхструктурой $L1_2$. Баланс дальнего порядка	287
5.1. Накопление дислокаций в сплавах со сверхструктурой $L1_2$..	287
5.1.1. Генерация сдвигообразующих дислокаций	287
5.1.2. Накопление дислокационных барьеров	289
5.1.3. Аннигиляция сдвигообразующих дислокаций	291
5.2. Накопление точечных дефектов в сплавах со сверхструктурой $L1_2$	294
5.2.1. Генерация точечных дефектов	295
5.2.2. Аннигиляция точечных дефектов на дислокациях	302

5.2.3. Взаимная аннигиляция точечных дефектов.....	303
5.3. Генерация антифазных границ в сплавах со сверхструктурой $L1_2$	304
5.3.1. Генерация антифазных границ вследствие перерезания скользящими сверхдислокациями термических антифазных границ	305
5.3.2. Генерация трубок антифазных границ	308
5.3.3. Генерация антифазных границ вследствие переползания краевых сверхдислокаций	310
5.3.4. Генерация антифазных границ вследствие накопления сверхдислокаций	312
5.3.5. Генерация антифазных границ вследствие движения одиночных дислокаций	314
5.4. Процессы разрушения дальнего атомного порядка в сплавах со сверхструктурой $L1_2$	315
5.4.1. Разрушение дальнего атомного порядка вблизи антифазных границ	318
5.4.2. Деформационное разрушение дальнего атомного порядка, обусловленное осаждением межузельных атомов на вакантные места	321
5.4.3. Диффузионное упорядочение	324
5.5. Формирование сопротивления деформированию в сплавах со сверхструктурой $L1_2$	326
5.6. Скорость пластической деформации сплавов со сверхструктурой $L1_2$	329
5.7. Математическая модель деформации сплавов со сверхструктурой $L1_2$ без учета разрушения дальнего атомного порядка.....	331
5.8. Математическая модель деформации сплавов со сверхструктурой $L1_2$ с учетом разрушения дальнего атомного порядка.....	334
5.9. Математическая модель деформации сплавов со сверхструктурой $L1_2$ с промежуточным состоянием порядка.....	336
5.10. Математическая модель ползучести сплавов со сверхструктурой $L1_2$	351
5.11. Результаты расчетов	352

5.11.1. Расчет концентрации деформационных точечных дефектов в сплавах со сверхструктурой $L1_2$	353
5.11.2. Расчет вклада механизмов генерации антифазных границ в деформационное упрочнение сплавов со сверхструктурой $L1_2$	355
5.11.3. Расчет вклада механизмов генерации антифазных границ и точечных дефектов в деформационное разрушение дальнего атомного порядка сплавов со сверхструктурой $L1_2$	358
5.11.4. Расчет кривых деформационного упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$ с промежуточным состоянием порядка	363
5.11.5. Расчет кривых ползучести сплавов со сверхструктурой $L1_2$	366

Глава 6. Математическое моделирование деформационного упрочнения и эволюции деформационной дефектной среды ГЦК-материалов с когерентными и некогерентными упрочняющими частицами.....

6.1. Математическая модель пластической деформации ГЦК-материалов с некогерентной упрочняющей фазой	375
6.1.1. Интенсивность генерации деформационных дефектов при кристаллографическом скольжении	375
6.1.2. Математическое моделирование аннигиляции деформационных дефектов.....	378
6.1.3. Уравнение, связывающее скорость пластической деформации, приложенное напряжение и плотность дислокаций.....	389
6.1.4. Результаты вычислительных экспериментов. Некогерентные упрочняющие частицы.....	393
6.2. Математическая модель пластической деформации ГЦК-материалов с когерентной упрочняющей фазой	404
6.2.1. Результаты вычислительных экспериментов. Когерентные упрочняющие частицы.....	406

6.3. Математическая модель пластической деформации ГЦК-материалов с когерентной упрочняющей фазой, упорядоченной по типу $L1_2$	408
6.3.1. Результаты вычислительных экспериментов. Когерентные упрочняющие частицы, упорядоченные по типу $L1_2$	413
6.4. Обсуждение результатов моделирования	416

Глава 7. Моделирование деформации макроскопических объектов и макроскопической локализации деформации в модели синтеза подходов дислокационной кинетики и механики деформируемого твердого тела	420
7.1. Экспериментальные наблюдения макролокализации пластической деформации монокристаллов	421
7.1.1. Суперлокализация деформации в монокристаллах Ni_3Ge при квазистатическом сжатии. Влияние оси деформации монокристалла	426
7.1.2. Кристаллогеометрия расположения полос суперлокализации	429
7.1.3. Структура и ширина полосы суперлокализации	436
7.1.4. Дислокационная структура	438
7.1.5. Схема развития пластической деформации монокристаллов Ni_3Ge , ориентированных вблизи оси $[001]$, при температурах 873–973 К	440
7.1.6. Потеря устойчивости однородной пластической деформации монокристаллов сплава Ni_3Ge в условиях ползучести	442
7.1.7. Дислокационная структура образцов после ползучести внутри области локализованного сдвига и вне ее	446
7.1.8. Условия наблюдения суперлокализации пластической деформации монокристаллов сплава Ni_3Ge	448
7.2. Физическая модель макроскопической локализации деформации в сплавах со сверхструктурой $L1_2$	449
7.2.1. Накопление дислокационных границ разориентации	450
7.3. Математическая модель механики деформируемого твердого тела	463

7.3.1. Универсальные уравнения механики сплошной среды..	463
7.3.2. Определяющие соотношения для упругопластического течения.....	465
7.3.3. Реализация синтеза моделей дислокационной кинетики сплавов с $L1_2$ сверхструктурой и механики деформируемого твердого тела.....	466
7.3.4. Уравнения состояния	467
7.3.5. Влияние упрочнения материалов на процессы деформирования и разрушения цилиндрических стержней при одноосном растяжении и сжатии	471
7.4. Исследование суперлокализации пластической деформации методом компьютерного моделирования.....	479
7.4.1. Расчет формоизменений образца для сценария монотонно возрастающего упрочнения элементарного объема деформационной среды.....	479
7.4.2. Залечивание концентраторов напряжений в условиях монотонного упрочнения элемента деформационной среды.....	482
7.4.3. Влияние уровня деформирующих напряжений на локализацию деформации в условиях немонотонного упрочнения элемента деформационной среды	483
Библиографический список.....	496