

ХИМИЯ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

УДК 669:539.67 + 620.22

ФОРМИРОВАНИЕ УПРАВЛЯЕМЫХ СТРУКТУР СТАЛЕЙ И СПЛАВОВ

© 2005 г. В.И. Бутенко¹

Рассмотрены вопросы создания управляемых структур сталей и сплавов путем технологического воздействия на дислокации и свободные электроны кристаллической решетки и определены пути его практического осуществления.

Важнейшим направлением современного машиностроения является повышение работоспособности деталей машин за счет совершенствования процессов получения и обработки материалов. При этом особую значимость приобретают эксплуатационно-технологические воздействия на процессы формирования качественного состояния материала поверхностного слоя деталей на всех стадиях “жизненного пути” изделия.

Современное состояние технологии машиностроения и материаловедения указывает на необходимость разработки принципиально новых подходов к решению вопросов формирования поверхностного слоя деталей, связанных, например, с управлением субмикроструктурой материалов на уровне атомно-молекулярного и электронного строения [1]. Разработаны физико-технологические основы формирования таких структур, базирующиеся на поведении дислокаций кристаллического строения материалов, их взаимодействия с примесями, атомами, свободными электронами и между собой [2].

Рассмотрим совокупность большого числа одинаковых прямолинейных дислокаций, расположенных параллельно друг другу в одной и той же плоскости скольжения (рис. 1), и выведем уравнение, определяющее их равновесное распределение в кристалле. При этом будем считать, что ось Z параллельна дислокациям, а плоскость XOY совпадает с плоскостью их скольжения. Для определенности примем, что вектор Бюргерса дислокаций b_k также направлен вдоль оси Z . Тогда сила, действующая в плоскости скольжения на единицу длины дислокации, равна $b_k \sigma_{xy}$, где σ_{xy} – текущее напряжение в точке нахождения дислокаций.

Напряжения, создаваемые одной прямолинейной дислокацией, убывают обратно пропорционально расстоянию от нее. Поэтому напряжение, создаваемое в точке x дислокацией, находящейся в точке x' , имеет вид $bD/(x - x')$, где D – постоянная порядка величины упругих модулей кристалла [2]. Эта постоянная $D > 0$, т.е. две одинаковые дислокации для изотропной среды в одной и той же плоскости скольжения отталкиваются друг от друга [3].

Обозначим через $\rho(x)$ текущую линейную плотность дислокации, распределенную на отрезке (a_1, a_2) оси x ; тогда $\rho(x)dx$ есть сумма векторов Бюргерса дислокации, проходящих через точки интеграла dx . Полное напряжение, создаваемое в произвольной точке вдоль оси x всеми дислокациями, запишется в виде интеграла

$$\sigma_{xy}(x) = -D \int_{a_1}^{a_2} \frac{\rho(\xi)d\xi}{\xi - x}. \quad (1)$$

Если в кристалле имеет место плоское (в плоскости x, y) поле напряжений $\sigma_{xy}^{(e)}(x, y)$, созданное заданными внешними нагрузками, то каждая дислокация будет находиться под действием силы $b(\sigma_{xy} + p(x))$, где для краткости принято $p(x) = \sigma_{xy}^{(e)}(x, 0)$. Тогда условие равновесия дислокации заключается в обращении этой силы в нуль: $\sigma_{xy} + p = 0$, т.е.

$$\int_{a_1}^{a_2} \frac{\rho(\xi)d\xi}{\xi - x} = \frac{p(x)}{D} \equiv \omega(x), \quad (2)$$

где главное значение обозначено, как это принято, перечеркнутым знаком интеграла.

Выражение (2) представляет собой интегральное уравнение для определения равновесного распределения плотности дислокаций $\rho(x)$ в ма-

¹ Таганрогский государственный радиотехнический университет, г. Таганрог.

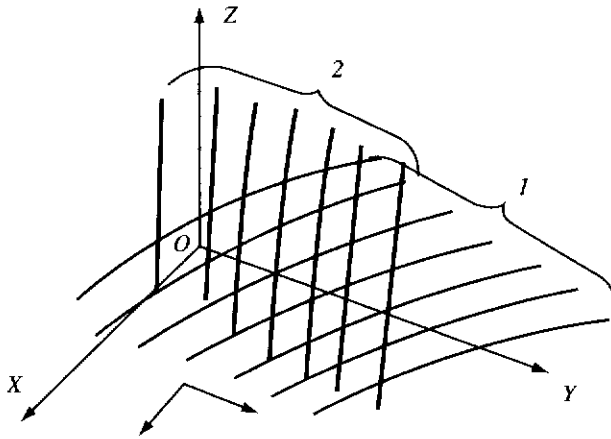


Рис. 1. Схема расположения прямолинейных дислокаций в кристалле: 1 – границы блоков мозаики; 2 – дислокации

териале. Оно относится к типу сингулярных интегральных уравнений с ядром Коши. Решение такого уравнения сводится к задаче теории функции комплексного переменного, формулируемой следующим образом.

Обозначим через $\Omega(z)$ функцию, определенную во всей плоскости комплексного параметра z (по длине отрезка (a_1, a_2)), как интеграл

$$\Omega(z) = \int_{a_1}^{a_2} \frac{\rho(\xi)d\xi}{\xi - z}. \quad (3)$$

Посредством $\Omega^+(x)$ и $\Omega^-(x)$ обозначим предельные значения функции $\Omega(z)$ на верхней и нижней границах разреза. Они равны таким же интегралам, взятым по отрезку (a_1, a_2) с обходом точки $z = x$ соответственно снизу или сверху по бесконечно малой полуокружности, т.е.

$$\Omega^+(x) = \int_{a_1}^{a_2} \frac{\rho(\xi)d\xi}{\xi - x} \pm i\pi\rho(x). \quad (4)$$

Если $\rho(\xi)$ удовлетворяет уравнению (3), то главное значение интеграла равно $\omega(x)$, так что имеем

$$\Omega^+(x) + \Omega^-(x) = 2\omega(x), \quad (5)$$

$$\Omega^+(x) - \Omega^-(x) = 2i\pi\rho(x). \quad (6)$$

Таким образом, условие равновесия (2) эквивалентно задаче об отыскании аналитической функции $\Omega(z)$ со свойством (5), после чего $\rho(x)$ определяется по уравнению (6). При этом физические условия рассматриваемой задачи требуют также, чтобы значение $\Omega(\infty) = 0$. Это следует из того, что вдали от действующей системы дис-

локации при $z \rightarrow \pm\infty$ напряжения σ_{xy} должны обращаться в нуль (по определению интеграла (3) вне отрезка (a_1, a_2) : $\sigma_{xy}(x) = -D\Omega(x)$).

Пусть внешние напряжения в материале отсутствуют ($p(x) \equiv 0$), а дислокации сдерживаются какими-либо препятствиями (например, примесями кристаллической решетки) на концах отрезка (a_1, a_2) . При $\omega(x) = 0$ из условия (5) имеем $\Omega^+(x) = -\Omega^-(x)$, т.е. функция $\Omega(z)$ должна менять знак при обходе каждой из двух точек a_1 и a_2 . Этому условию удовлетворяет любая функция вида

$$\Omega(z) = \frac{P(z)}{\sqrt{(a_2 - z)(z - a_1)}}, \quad (7)$$

где $P(z)$ – некоторый известный полином.

Условие $\Omega(\infty) = 0$ фиксирует (с точностью до постоянного коэффициента) выбор $P(z) = 1$, так что

$$\Omega(z) = \frac{1}{\sqrt{(a_2 - z)(z - a_1)}}. \quad (8)$$

Такой же вид согласно выражению (3) будет иметь и искомая функция $\rho(x)$. Определив коэффициент в ней согласно условию

$$\int_{a_1}^{a_2} \rho(\xi)d\xi = B_k \quad (9)$$

(B_k – сумма векторов Бюргерса всех дислокаций), получим

$$\rho(x) = \frac{P(x)}{\pi\sqrt{(a_2 - x)(x - a_1)}}. \quad (10)$$

Из представленных рассуждений видно, что дислокации скапливаются по направлению к препятствиям (границам отрезка) с плотностью, обратно пропорциональной корню из расстояний до них. По такому же закону возрастают напряжения σ_{xy} при приближении к a_1 или a_2 вне отрезка (a_1, a_2) . Так, при $x > a_2$ получается

$$\sigma_{xy} \approx \frac{B_k D}{\sqrt{(x - a_2)(a_1 - a_1)}}. \quad (11)$$

Следовательно, концентрация дислокации у границы приводит к такой же концентрации напряжений в материале по другую сторону границы.

Предположим теперь, что в тех же условиях (препятствия в заданных концах отрезка сохраняются) имеется внешнее поле напряжений сплошной среды $p(x)$. Обозначим посредством $\Omega_0(z)$ функцию вида (7) и перепишем равенство

(5), разделив его на $\Omega_0^+ = -\Omega_0^-$, в виде следующего выражения:

$$\frac{\Omega^+(x)}{\Omega_0^+(x)} - \frac{\Omega^-(x)}{\Omega_0^-(x)} = \frac{2\omega(x)}{\Omega_0^+(x)}.$$

Сравнивая это равенство с выражениями (6) и (7), можно сделать вывод о том, что

$$\frac{\Omega(x)}{\Omega_0(x)} = \frac{1}{i\pi} \int_{a_1}^{a_2} \frac{\omega(\xi)}{\Omega_0^+(\xi)} \frac{d\xi}{\xi - z} + i\pi P(z), \quad (12)$$

где $P(z)$ – некоторый полином.

Решение, удовлетворяющее условию $\Omega(\infty) = 0$, получается, если выбрать в качестве $\Omega_0(z)$ функцию (8) и положить $P(z) = C$ (C – константа). Отсюда искомая функция $\rho(x)$ находится по формуле (6) и равна

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi^2 \sqrt{(a_2 - x)(x - a_1)}} \times \\ \times \int_{a_1}^{a_2} \omega(\xi) \sqrt{(a_2 - \xi)(\xi - a_1)} \frac{d\xi}{\xi - x} + \frac{C}{\sqrt{(a_2 - x)(x - a_1)}}. \quad (13)$$

Постоянная C в формуле (13) определяется условием (7), из которого следует, что плотность дислокаций в материале $\rho(x)$ возрастает при $x \rightarrow a_2$ (или $x \rightarrow a_1$) по закону $(a_2 - x)^{-1/2}$.

Если препятствие имеется только с одной стороны (скажем, в точке a_2), то искомое решение должно удовлетворять условию конечности напряжений при всех $x < a_2$, включая точку $x = a_1$, и формула (13) может быть преобразована в следующее выражение [2]:

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi^2} \sqrt{\frac{x - a_1}{a_2 - x}} \int_{a_1}^{a_2} \sqrt{\frac{a_2 - \xi}{\xi - a_1}} \frac{\omega(\xi) d\xi}{\xi - x}. \quad (14)$$

Пусть препятствия отсутствуют в обоих концах отрезка и дислокации сдерживаются лишь внешними напряжениями $p(x)$.

Тогда искомая функция $\rho(x)$, описывающая управляющее воздействие на плотность дислокаций сталей и сплавов, может быть задана формулой [2]

$$\rho(x) = \\ = -\frac{1}{\pi^2} \sqrt{(a_2 - x)(x - a_1)} \int_{a_1}^{a_2} \frac{\omega(\xi)}{\sqrt{(a_2 - \xi)(\xi - a_1)} (\xi - x)} d\xi, \quad (15)$$

причем координаты a_1, a_2 концов отрезка определяются условиями (7) и (8).

Существенный вклад в физико-механические свойства движущихся сплошных сред и формирование их структур вносят внутренние поверхности разделов: границы зерен, блоков, двойников доменов, межфазных страниц и т.д. Характер поведения дислокаций и рассеяние энергии внутри сплошной среды в этом случае будут обусловлены различным движением поверхностей раздела под действием приложенных внешних напряжений.

Для выявления роли границ зерен и блоков на процесс формирования управляемых структур сталей и сплавов был использован механизм, согласно которому внутренние сдвиговые напряжения, возникающие в материале на границе между соседними зернами, могут с течением времени полностью релаксировать. Однако из-за наличия других зерен, ограничивающих возможность сдвига по границе, внешние напряжения при этом могут релаксировать только частично. В этом случае величина сдвига по границам зерен при заданном напряжении, а, следовательно, и время релаксации возрастают с увеличением размера зерна [2]. Степень релаксации будет пропорциональна величине сдвига вдоль границы зерен при данном напряжении, умноженном на полную площадь этих границ в единице объема. Смещение вдоль границ прямо пропорционально, а полная площадь обратно пропорциональна размеру зерен, вследствие чего их произведение не зависит от этого параметра.

Была решена двумерная задача расчета дефекта модуля упругости Δ_G в случае зернограницной релаксации, который для отношения релаксированного и нерелаксированного модулей сдвига имеет выражение

$$\Delta_G = \frac{3 - \nu}{3 + 3\nu}. \quad (16)$$

Если принять коэффициент Пуассона $\nu = 1/3$, то формула (16) дает $\Delta_G = 0.66$, что совпадает с экспериментальными значениями Δ_G , приведенными в работе [4] (например, для алюминия $\Delta_G = 0.51$).

Для оценки времени релаксации вязкого скольжения по границам зерен было получено следующее выражение [2]:

$$\tau = \frac{aq}{dD_u} = \tau_\infty \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \quad (17)$$

где a – средний размер зерна; d – эффективная толщина границы зерна; η – коэффициент вяз-

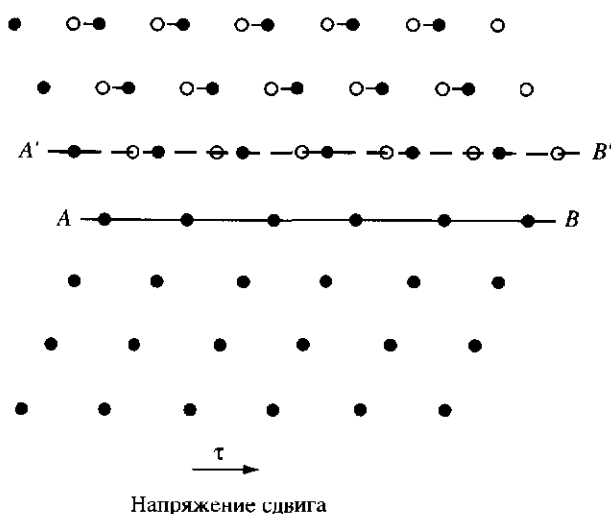


Рис. 2. Схема движения двойниковых границ при действии сдвигового напряжения

кости зернограницной прослойки; U – энергия активации процесса.

Предложена модель границы зерна кристаллического материала сплошной среды, в которой граничный слой рассматривается состоящим из большого числа несовершенств кристаллической решетки или беспорядочных групп атомов. Между ними находятся участки совершенной решетки. Эта модель позволяет дать качественное объяснение влиянию предварительной деформации сплошной среды и примесей на величину и форму пика внутреннего трения исследуемого металла при фиксированной частоте [2, 4]. Однако она не может объяснить изменения внутреннего трения материала при увеличении частоты колебаний или повышении температуры движущейся сплошной среды, что особенно наглядно проявляется в тех случаях, когда материал (например, монокристалл) предварительно подвергнут термической обработке, т.е. изменить его дислокационную структуру. По-видимому, при термоциклической обработке материалов дислокации так перестраиваются, что образуется особая пространственная сетка, очень напоминающая сетку границ зерен. При этом размер зерна стали или сплава, вероятно, является видимым признаком размеров дислокационной сетки. Релаксация сдвиговых напряжений по границам образовавшейся при термоциклической обработке сетки дислокаций и обуславливает изменение внутреннего трения у монокристаллов.

Из теории металлов и сплавов известно [5, 6], что перемещение границ зерен сопровождается релаксацией приложенных напряжений. Это пе-

ремещение может быть обусловлено различной кристаллографической ориентацией отдельных областей по обе стороны границы, различием их модулей упругости и другими причинами. Примером такой релаксации могут служить движения границ двойников под действием внешних сдвиговых напряжений τ . Как видно из рис. 2, приложенное к движущейся сплошной среде сдвиговое напряжение вдоль поверхности τ стремится привести в движение границу раздела кристаллических решеток разных типов. В этом случае плоскость раздела двойников будет стремиться занять такое положение, при котором действующие на них напряжения сдвига τ становятся минимальными. Это в свою очередь приводит к тому, что плоскость раздела двойника перемещается от положения AB к положению A'B' (рис. 2), т.е. в направлении, перпендикулярном ее поверхности. При смене знака напряжения сдвига τ границы разделов перемещаются в обратном направлении. Такое перемещение двойников границы будет сопровождаться процессами диффузии атомов и возникновением локальных электропотенциалов в результате движения свободных электронов [2]. При совпадении скорости перемещения двойниковых границ с частотой колебаний кристаллической решетки в сплошной среде обычно наблюдается пик внутреннего трения.

Затухание внутреннего напряжения в материале сплошной среды, обусловленное релаксацией напряжений на границе раздела фаз, может быть обусловлено движением межфазных границ вследствие изменения условия фазового состояния в напряженном моно- и поликристалле. Изменения упругих напряжений и температуры, связанные с колебаниями нагрузки в движущейся сплошной среде, нарушают условия фазового равновесия и вызывают фазовые превращения в сплавах. При этом время релаксации определяется скоростью движения двойниковой границы, которая может лимитироваться как скоростью фазового превращения, так и скоростью подвода к границам зерен тепла. На скорость движения границ существенное влияние могут оказывать и концентрационные напряжения. При совпадении периода колебания кристаллической решетки со временем релаксации и будет наблюдаться максимальное рассеяние межфазных границ в структуре материала.

Выполненные теоретические исследования структурного состояния поликристаллических материалов и роли в нем поведения дислокаций, их взаимодействия с примесями, свободными электронами и между собой предопределили

технологические направления формирования управляемых структур в движущихся сплошных средах с целью улучшения их эксплуатационных свойств. Так, одним из наиболее перспективных направлений по совершенствованию существующих и разработке новых технологических методов в машино- и приборостроении, направленных на формирование управляемых структур сталей и сплавов, является концепция, основанная на рассмотрении единства процессов обработки и эксплуатации деталей машин [7–9]. В основе этой концепции лежит принцип идентичности поведения дислокаций и фазовых превращений, как при формировании структур конструкционных материалов, так и в условиях эксплуатации деталей.

Несмотря на большой объем исследований, выполненных в области материаловедения, существует много проблем, связанных с поведением дислокаций и свободных электронов в структурах движущихся сплошных сред. При этом подлежат пересмотру и уточнению многие теории прочности и износостойкости при широком использовании новых взглядов на структурную самоорганизацию материала в процессе эксплуатации деталей [8, 9]. Нет сомнения в том, что дальнейшее развитие синергетических представлений о строении и поведении материалов открывает новые возможности в решении многих ме-

талловедческих проблем, в частности, создания высокопрочных и сверхпрочных конструкционных материалов повышенной износостойкости, способов их обработки и эффективного управления их свойствами в процессе эксплуатации деталей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бутенко В.И., Дуров Д.С., Гончаренко В.В., Косов В.И. // Известия ТРТУ. 2004. № 8. С. 225–228.
2. Бутенко В.И. Физико-технологические основы формирования управляемых структур сталей и сплавов. Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2004. 264 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.
4. Постников В.С. Внутреннее трение в металлах. М.: Металлургия, 1969. 332 с.
5. Ермаков С.С. Физика металлов и дефекты кристаллического строения. М.: Изд-во МГУ, 1989. 280 с.
6. Френкель Я.И. Введение в теорию металлов. М.: ГИТТЛ, 1950. 548 с.
7. Сулов А.Г. // Инженерный журнал. Справочник. 1998. № 9 (18). С. 9–13.
8. Бутенко В.И. Износ деталей трибосистем. Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2002. 236 с.
9. Бутенко В.И. Высокопрочные и сверхпрочные состояния металлов и сплавов. Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2003. 219 с.

FORMING OF THE CONTROLLED STRUCTURES OF STEELS AND ALLOYS

V.I. Butenko

The questions of creating controlled structures of steels and alloys are considered by technological influence on dislocations and free electrons in crystal lattice and determined the ways of his practical realization.

REFERENCES

1. Butenko V.I., Durov D.S., Goncharenko V.V., Kosov V.I. 2004. *Izvestiya TRTU*. (8): 225–228. (In Russian).
2. Butenko V.I. 2004. *Fiziko-tekhnologicheskie osnovy formirovaniya upravlyaemykh struktur staley i splavov*. [Physical and technological bases of the formation of the control structures of steels and alloys]. Taganrog, TRTU [TSURE] Publ.: 264 p. (In Russian).
3. Landau L.D., Lifints E.M. 1987. *Teoriya uprugosti*. [Theory of elasticity]. Moscow, Nauka Publ.: 248 p. (In Russian).
4. Postnikov V.S. 1969. *Vnutrennee trenie v metallakh*. [Internal friction in metals]. Moscow, Metallurgiya Publ.: 332 p. (In Russian).
5. Ermakov S.S. 1989. *Fizika metallov i defekty kristallicheskogo stroeniya*. [Physics of metals and defects in the crystal structure]. Moscow, Moscow State University Publ.: 280 p. (In Russian).
6. Frenkel' Ya.I. 1950. *Vvedenie v teoriyu metallov*. [Introduction to the theory of metals]. Moscow, GITTL [State publishing technical and theoretical literature]: 548 p. (In Russian).
7. Suslov A.G. 1998. *Inzhenernyy zhurnal. Spravochnik*. 9(18): 9–13. (In Russian).
8. Butenko V.I. 2002. *Iznos detaley tribosistem*. [Wear of parts tribosystems]. Taganrog, TRTU [TSURE] Publ.: 236 p. (In Russian).
9. Butenko V.I. 2003. *Vysokoprochnye i sverkhprochnye sostoyaniya metallov i splavov*. [High-strength, and heavy-duty state of metals and alloys]. Taganrog, TRTU [TSURE] Publ.: 219 p. (In Russian).