

УДК 548.4, 539.372

DOI: 10.32326/1814-9146-2024-86-1-5-14

О ВЛИЯНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ВАКАНСИЙ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ОБОРВАННЫХ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ГРАНИЦ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ*

© 2024 г.

Свирина Ю.В., Перевезенцев В.Н.

*Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального
исследовательского центра «Институт прикладной физики
им. А.В. Гапонова-Грехова РАН», Нижний Новгород, Российская Федерация*

j.svirina@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2023

Рассмотрено влияние пересыщения материала деформационными вакансиями на характеристики оборванных дислокационных границ, возникающих вблизи клиновых дисклинаций в результате аккомодационной пластической деформации. Проведен анализ упругих и осмотических сил, действующих на дислокации оборванной границы. С использованием метода динамики дискретных дислокаций проведено компьютерное моделирование неконсервативного движения (переползания) дислокаций в плоскости границы. В качестве исходных рассматривались оборванная граница, образованная в результате расщепления исходной дисклинации на две частичные дисклинации одинаковой мощности, и граница с неоднородным распределением дислокаций (с линейно спадающей разориентировкой). Показано, что в случае оборванной дислокационной границы, сформированной вблизи положительной клиновой дисклинации, переползание дислокаций приводит к ее неограниченному прорастанию через модельное зерно с одновременным уменьшением разориентировки. В случае границы, сформированной вблизи отрицательной дисклинации, осмотические силы, действующие на дислокации оборванной границы, могут при достаточно больших пересыщениях материала неравновесными вакансиями приводить к ее существенному сжатию с одновременным ростом плотности вектора Бюргерса. При этом выбор исходной конфигурации оборванной границы практически не влияет на характеристики равновесного распределения дислокаций. Рассчитаны распределения плотности вектора Бюргерса вдоль оборванной границы для случая малых и больших пересыщений материала неравновесными вакансиями. Рассчитана критическая величина пересыщения, выше которой происходит сжатие границы. Сжатие границы приводит к существенному росту растягивающих напряжений в ее окрестности. При этом максимум растягивающих напряжений в плоскости, совпадающей с плоскостью границы, достигается в точке обрыва границы. Полученные результаты представляют интерес при анализе возможных механизмов зарождения трещин и пор при вязком разрушении металлов.

* Выполнено в рамках госзадания ИПФ РАН на проведение фундаментальных научных исследований на 2024–2026 гг. (FFUF-2024-0031, НИОКТР №1023032800130-3-2.3.2).

Ключевые слова: пластическая деформация, неравновесные вакансии, стыковые дисклинации, оборванные дислокационные границы.

Введение

Неоднородное протекание пластической деформации по ансамблю зерен поликристалла и в теле зерен приводит к появлению на границах и в стыках зерен планарных сдвиговых мезодефектов и линейных мезодефектов ротационного типа – стыковых дисклинаций [1–4]. Мощность этих мезодефектов постепенно увеличивается в процессе пластического течения и при достаточно большой величине деформации ($\varepsilon > 0,2$) генерируемые ими неоднородные поля упругих напряжений активируют аккомодационную пластическую деформацию. Эти процессы приводят к формированию в окрестности мезодефектов специфических дислокационных структур. Так, вблизи стыковых дисклинаций в результате коллективного движения решеточных дислокаций в теле зерен формируются оборванные дислокационные границы [5]. Распространяясь от стыков и изломов зерен, они постепенно разбивают зерна поликристалла на взаимно разориентированные области. Экспериментальные исследования показали, что этот процесс лежит в основе явления фрагментации материала при больших пластических деформациях. Теоретические исследования механизмов и закономерностей формирования оборванных границ вблизи ротационных мезодефектов представлены в [6, 7]. Было показано, что оборванные дислокационные границы выстраиваются приблизительно перпендикулярно действующей плоскости скольжения решеточных дисклинаций, плотность вектора Бюргерса в них и локальная разориентировка спадают с расстоянием от дисклинации, а ее средняя разориентировка оказывается близка к половине мощности дисклинации.

В последние годы появилось значительное число публикаций, указывающих на то, что на поздних стадиях фрагментации материала такие границы могут быть местами зарождения несплошностей в виде субмикронных пор, расположенных преимущественно вблизи места обрыва одной или нескольких дислокационных границ со средними разориентировками порядка четырех-пяти градусов [8–14]. Природа их возникновения не совсем ясна. В статье [9] сделано предположение о диффузионном механизме происхождения этих пор за счет стока в них неравновесных деформационных вакансий [15], концентрация которых максимальна в местах протекания аккомодационной деформации, инициированной упругими полями мезодефектов.

Настоящая статья посвящена анализу влияния пересыщения материала неравновесными вакансиями деформационного происхождения на характеристики оборванных границ, формирующихся вблизи дисклинаций. Показано, что в случае отрицательной дисклинации осмотические силы, действующие на дислокации оборванной границы, могут при определенных условиях приводить к ее сжатию и существенному росту в ее окрестности растягивающих напряжений, облегчая тем самым зарождение трещин и пор.

Описание модели

Рассмотрим оборванные дислокационные границы, сформированные в процессе аккомодационной пластической деформации, осуществляемой скольжением дислокаций с вектором Бюргерса \mathbf{b} , ориентированным вдоль оси Ox , в упругом поле клиновой дисклинации мощностью ω , расположенной в центре нижней границы

модельного зерна (рис. 1). В зависимости от знака стыковой дисклинации возможны две конфигурации таких границ (рис. 1а, б). Согласно результатам компьютерного моделирования [16], распределение дислокаций в таких границах неоднородно, а их плотность уменьшается с расстоянием от дисклинации.

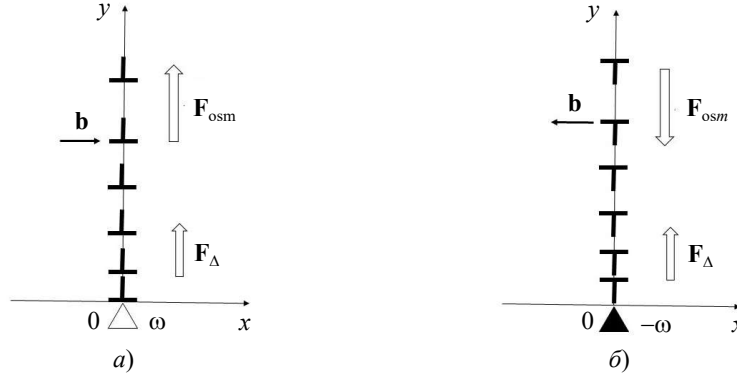


Рис. 1. Схематическое представление оборванной дислокационной границы, сформированной в поле клиновой дисклинации

В условиях пересыщения неравновесными деформационными вакансиями на дислокации действуют как сила Пича – Келлера, так и осмотическая сила $\sigma_{xx}^{osm} b$ [17]. Компонента силы, приходящаяся на единицу длины дисклинации, приводящая к перераспределению дислокаций в границе путем их неконсервативного движения (переползания) вдоль оси Oy , имеет вид:

$$F_y = \sigma_{xx}^{\Sigma} b = (\sigma_{xx}^{ext} + \sigma_{xx}^{\Delta} + \sigma_{xx}^{disl} + \sigma_{xx}^{osm}) b, \quad (1)$$

где σ_{xx}^{ext} – компонента поля внешних упругих напряжений; σ_{xx}^{Δ} – напряжение от дисклинации [18]; b – величина проекции вектора Бюргера на ось Ox ;

$$\sigma_{xx}^{\Delta} = D\omega \left(\ln \frac{r}{R} + \frac{y^2}{r^2} \right), \quad (2)$$

$D = G/(2\pi(1-\nu))$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона; $r = \sqrt{x^2 + y^2}$; R – радиус экранирования упругого поля дисклинации; $\sigma_{xx}^{disl} = \sum_i \sigma_{xx}^i(x_i, y_i)$ – суммарное напряжение от дислокаций границы; σ_{xx}^i – поле от дислокации с координатами x_i, y_i , создаваемое в точке с координатами x, y [17]. Величина σ_{xx}^{osm} имеет вид:

$$\sigma_{xx}^{osm} = \frac{kT}{\Omega} \ln \frac{C}{C_0}. \quad (3)$$

Здесь $C = C_0 + C_{vd}$ – концентрация вакансий, C_0 – термодинамически равновесная концентрация вакансий, C_{vd} – концентрация деформационных вакансий, k – постоянная Больцмана, T – температура, Ω – атомный объем. Вне зависимости от знака дисклинаций на каждую из дислокаций оборванных границ (см. рис. 1а, б) действуют силы отталкивания со стороны дисклинации. Нетрудно видеть, что осмотическая сила в случае, показанном на рис. 1а, действует сонаправленно с упругой силой дисклинации $\sigma_{xx}^{\Delta} b$, в то время как для конфигурации на рис. 1б она направлена в противоположную сторону. В результате этого переползание дислокаций, возможное при повышенных температурах, в случае положительной дис-

клинации будет приводить к расширению границы с одновременным уменьшением ее средней разориентировки, тогда как в случае отрицательной дисклинации (см. рис. 1б) при достаточно большом пересыщении вакансий возможно сжатие границы и увеличение ее средней разориентировки. Последний случай представляет наибольший интерес, поскольку сжатие границы может приводить к существенному увеличению растягивающих напряжений в окрестности дисклинации и способствовать зарождению трещин или пор. Рассмотрим этот случай подробно.

Величина осмотической силы зависит от температуры и пересыщения. В свою очередь, пересыщение является функцией температуры, скорости деформации и величины внешнего напряжения. Обобщая модели, предложенные в [19, 20], пересыщение можно записать в виде:

$$S = \chi \left(\frac{\dot{\epsilon} b^2}{D_s} \right) \left(\frac{G}{\sigma^{\text{ext}}} \right), \quad (4)$$

где $\dot{\epsilon}$ – скорость деформации, D_s – коэффициент объемной самодиффузии, χ – численный коэффициент. Из (3) и (4) следует, что концентрация деформационных вакансий растет с уменьшением температуры, а значит, растет и осмотическая сила. Однако влияние осмотической силы на конфигурацию равновесной дислокационной границы при температурах, меньших $0,4T_m$ (T_m – температура плавления), не представляет интереса в силу малой подвижности вакансий, вследствие чего переползанием дислокаций можно пренебречь. В то же время повышение температуры приводит к уменьшению концентрации неравновесных вакансий и уменьшению осмотической силы и при $T > 0,5T_m$ ею можно пренебречь по сравнению с остальными слагаемыми в формуле (1). В силу этого эффект сжатия границы под действием осмотической силы должен проявляться в достаточно узком температурном интервале $T \approx (0,4-0,5)T_m$.

Расчеты равновесной конфигурации оборванной дислокационной границы проводились в рамках модели динамики дискретных дислокаций [21, 22]. В качестве исходных конфигураций рассматривались однородная стенка дислокаций с разориентировкой ω_1 , образованная в результате расщепления исходной дисклинации на две частичные дисклинации одинаковой мощности $\omega_1 = \omega/2$, и стенка с неоднородным распределением дислокаций (с линейно спадающей разориентировкой). Движение дислокаций рассматривалось в квазивязком приближении. Для рассматриваемого случая уравнение движения дислокаций имеет вид

$$V_c = M_c F_y, \quad (5)$$

где V_c – скорость переползания, M_c – подвижность дислокаций при переползании.

Поиск равновесной конфигурации оборванной дислокационной границы сводился к итерационной процедуре, которая на каждом шаге включала в себя следующие операции: 1) рассчитывались силы, действующие на каждую дислокацию границы; 2) определялось расстояние Δu , на которое перемещается каждая дислокация за единицу времени при заданной величине подвижности; 3) все дислокации, для которых $\Delta u \geq a$ (a – межплоскостное расстояние), перемещались на новые позиции, поскольку при переползании дислокаций их перемещение возможно только на расстояние, большее или равное a , остальные считались неподвижными. Равновесной считалась конфигурация, когда все дислокации границы становились неподвижными.

Результаты моделирования и их обсуждение

Численные расчеты проводились при следующих значениях параметров: размер расчетной области 1×1 мкм, первоначальная длина оборванной дислокационной границы 0,5 мкм, $\omega = 0,04$, $T = 0,4T_m$, $\sigma^{\text{ext}} = 10^{-3}G$, $b = 2,5 \cdot 10^{-8}$ см, $M_c = 10^{-6}$ Па $^{-1}$ с $^{-1}$ и при четырех скоростях деформации $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-2}$ с $^{-1}$, $2 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$, $2 \cdot 10^{-4}$ с $^{-1}$ и $4 \cdot 10^{-4}$ с $^{-1}$. Соответствующие значения пересыщения $S = 100$, 10, 1 и 2 были определены согласно (4) при $D_x = D_0 e^{-Q/kT}$, где $Q = 18kT_m$, $D_0 = 10^{-2}$ см 2 с $^{-1}$, $\chi = 10^{-4}$.

Как показывают результаты моделирования, исходная конфигурация дислокационной границы (однородное или неоднородное распределение дислокаций) практически не влияет на характеристики равновесного распределения дислокаций. Распределение плотности вектора Бюргера дислокационной границы рассчитывалось по формуле $\rho(y) = b/(y_{i+1} - y_i)$, где $y = (y_{i+1} - y_i)/2$ (y_i и y_{i+1} – координаты соседних дислокаций). Интерполяционные кривые распределений плотности вектора Бюргера, полученные для случая малых ($S = 1$ и $S = 2$) и больших ($S = 100$ и $S = 10$) пересыщений, представлены на рис. 2а и 2б соответственно. Как видно из рис. 2, в случае $S = 1$ наблюдается небольшое удлинение границы по сравнению с исходной границей, в то время как во всех остальных случаях, начиная с $S = 2$, величина осмотической силы, действующей на дислокации исходной границы, превышает критическую величину, необходимую для сжатия границы. Эффект сжатия приводит к увеличению средней разориентировки оборванной границы и плотности содержащегося в ней дислокационного заряда, в результате чего в окрестности дислокационной границы повышается уровень растягивающих напряжений и создаются предпосылки для появления несплошностей в виде трещин и пор.

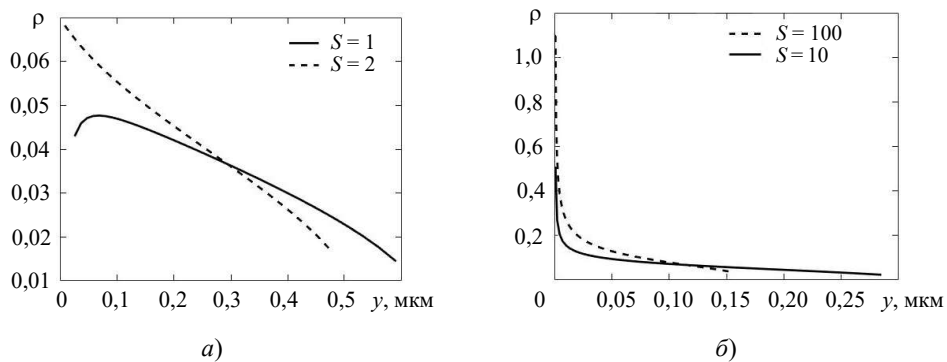


Рис. 2. Распределение плотности вектора Бюргера вдоль оборванной границы для случая малых (а) и больших (б) пересыщений

Отметим, что локализация несплошностей на оборванных границах деформационного происхождения наблюдалась экспериментально [10, 11, 13]. Представляет интерес оценка уровня этих напряжений в рассмотренных случаях. Для иллюстрации на рис. 3 приведены распределения гидростатической компоненты σ_{xx} тензора суммарного поля напряжений, создаваемых дисклинацией и дислокациями оборванной границы в плоскости, совпадающей с плоскостью залегания оборванной границы. Расчет напряжений σ_{xx} в точках с координатами $(0, y)$ проводился численно по формуле

$$\sigma_{xx} = - \int_{l_{\min}}^{l_{\max}} \frac{D}{y-y'} \rho(y') dy', \quad (6)$$

где l_{\min} и l_{\max} – ординаты начала и конца дислокационной границы, $\rho(y')$ – плотность вектора Бюргерса.

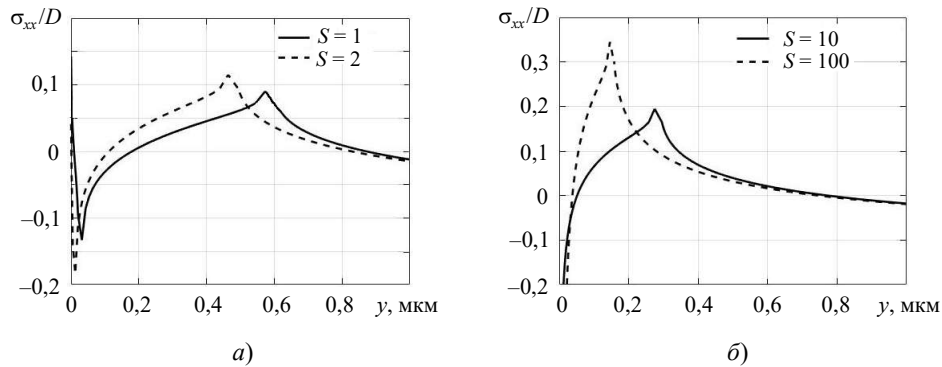


Рис. 3. Распределения гидростатической компоненты тензора суммарного поля напряжений в случае малых (а) и больших (б) пересыщений

Как показывают результаты расчета, максимальные растягивающие напряжения σ_{xx} для всех рассмотренных значений пересыщения возникают на конце оборванной дислокационной границы (см. рис. 3). Сжатие границы сопровождается ростом не только гидростатических, но и сдвиговых компонент поля напряжения σ_{xy} в окрестности оборванной границы, способных вызвать в окружающем объеме зерна срабатывание источников и аккомодационное скольжение дислокаций. Следует оговориться, что большие значения растягивающих напряжений достигаются при предельных сжатиях оборванной границы. Однако это положение равновесия достигается лишь в том случае, когда все возможности для релаксации упругих напряжений отсутствуют. В противном случае предельное сжатие границы может не достигаться вследствие того, что по мере сжатия границы может происходить релаксация напряжения от нее либо за счет дополнительной аккомодационной пластической деформации, либо за счет образования несплошности на границе в виде трещины или поры. Анализ этих релаксационных процессов требует рассмотрения кинетических аспектов эволюции оборванных границ в процессе деформирования, что выходит за рамки настоящей статьи.

Заключение

Результаты проведенного анализа показывают, что пересыщение материала деформационными вакансиями может существенно влиять на характеристики оборванных дислокационных границ, формирующихся в процессе аккомодационной пластической деформации в окрестности стыковых дисклинаций. Сток неравновесных вакансий на дислокации оборванной границы, формирующейся вблизи положительной дисклинации, способствует ее распространению через зерно с одновременным уменьшением ее разориентировки. Такие слабо разориентированные прямолинейные границы, распространяющиеся через всё зерно, наблюдаются экспериментально при больших пластических деформациях при повышенных температурах.

В случае границ, формирующихся вблизи отрицательных дисклинаций, сток неравновесных вакансий на дислокации границы может приводить при достаточно больших пересыщениях к ее сжатию с одновременным ростом плотности вектора Бюргерса и увеличению напряжений в окрестности границы. Последнее обстоятельство представляется весьма существенным при рассмотрении возможных механизмов зарождения трещин и пор. Как было показано, наиболее заметно этот эффект должен проявляться в температурном интервале $(0,4-0,5)T_m$.

Список литературы

1. Рыбин В.В. *Большие пластические деформации и разрушение металлов*. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
2. Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. Junction disclinations in plastically deformed crystals. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993. Vol. 41. Iss. 7. P. 2211–2217. DOI:10.1016/0956-7151(93)90390-E.
3. Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Application of disclination concept to solid structures. *Progress in Materials Science*. 2009. Vol. 54. Iss. 6. P. 740–769. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2009.03.002.
4. Кириков С.В., Перевезенцев В.Н., Пупынин А.С. Модель аккомодации сдвигового планарного мезодефекта. *Деформация и разрушение материалов*. 2022. №5. С. 2–10. DOI: 10.31044/1814-4632-2022-5-2-10.
5. Rybin V.V. Regularities of mesostructures development in metals in the course of plastic deformation. *Вопросы машиноведения*. 2003. №1 (33). С. 9–28.
6. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. The screening of meso defects stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation. *Reviews on Advanced Materials Science*. 2012. Vol. 30. No 1. P. 14–34.
7. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F., Svirina J.V. Computer simulation of the dislocation ensemble kinetics in the elastic fields of meso defects and fragmentation processes during plastic deformation. *Materials Physics and Mechanics*. 2014. Vol. 21. P. 78–98.
8. Noell P.J., Sills R.B., Benzerga A.A., Boyce B.L. Void nucleation during ductile rupture of metals: A review. *Progress in Materials Science*. 2023. Vol. 135. Article No 101085. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2023.101085.
9. Noell P.J., Sabisch J.E.C., Medlin D.L., Boyce B.L. Nanoscale conditions for ductile void nucleation in copper: Vacancy condensation and the growth-limited microstructural state. *Acta Materialia*. 2020. Vol. 184. P. 211–224. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.11.022.
10. Noell P., Carroll J., Hattar K., Clark B., Boyce B. Do voids nucleate at grain boundaries during ductile rupture? *Acta Materialia*. 2017. Vol. 137. P. 103–114. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.07.004>.
11. Meyers M.A., Traiviratana S., Lubarda V.A., Benson D.J., Bringa E.M. The role of dislocations in the growth of nanosized voids in ductile failure of metals. *JOM*. 2009. Vol. 61. Iss. 2. P. 35–41. DOI: 10.1007/s11837-009-0025-7.
12. Lim H., Noell P.J., Carroll J.D. Crystallographic orientation dependent fracture behavior in tantalum single crystals. *Scripta Materialia*. 2021. Vol. 191. P. 76–80. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2020.09.017.
13. Noell P.J., Sills R.B., Boyce B.L. Suppression of void nucleation in high-purity aluminum via dynamic recrystallization. *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*. 2020. Vol. 51. P. 154–166. <https://doi.org/10.1007/s11661-019-05457-w>.
14. Furukimi O., Kiattisaksri C., Takeda Y., Aramaki M., Oue S., Munetoh S., Tanaka M. Void nucleation behavior of single-crystal high-purity iron specimens subjected to tensile deformation. *Materials Science and Engineering: A*. 2017. Vol. 701. P. 221–225. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.06.084>.
15. Schafner E., Steiner G., Korznikova E., Kerber M., Zehetbauer M.J. Lattice defect investigation of ECAP-Cu by means of X-ray line profile analysis, calorimetry and electrical resistometry. *Materials Science and Engineering: A*. 2005. Vol. 410–411. P. 169–173. DOI: 10.1016/j.msea.2005.08.070.

16. Свирина Ю.В., Перевезенцев В.Н. Анализ влияния переползания дислокаций на формирование оборванной субграницы в упругом поле клиновой дисклинации. *Деформация и разрушение материалов*. 2015. №10. С. 10–13.
17. Хирт Дж., Лоте И. *Теория дислокаций*. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
18. Romanov A.E., Vladimirov V.I. Disclinations in crystalline solids. In: *Dislocations in Solids*. Ed. F.R.N. Nabarro. Vol. 9. Dislocations and Disclinations. Amsterdam: North-Holland, 1992. P. 191–402.
19. Detemple K., Kanert O., De Hosson J.Th.M., Murty K.L. In situ nuclear magnetic resonance investigation of deformation-generated vacancies in aluminum. *Physical Review B*. 1995. Vol. 52. No 1. P. 125–133. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.52.125>.
20. Mecking H., Estrin Y. The effect of vacancy generation on plastic deformation. *Scripta Metallurgica*. 1980. Vol. 14. Iss. 7. P. 815–819.
21. Van der Giessen E., Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 1995. Vol. 3. No 5. P. 689–735. DOI: 10.1088/0965-0393/3/5/008.
22. Deshpande V.S., Needleman A., Van der Giessen E. Finite strain discrete dislocation plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2003. Vol. 51. Iss. 11–12. P. 2057–2083. DOI: 10.1016/j.jmps.2003.09.012.

References

1. Rybin V.V. *Bolshie plasticheskie deformatsii i razrushenie metallov* [Large Plastic Deformation and Destruction of Metals]. Moscow. Metallurgiya Publ. 1986. 224 p. (In Russian).
2. Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. Junction disclinations in plastically deformed crystals. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993. Vol. 41. Iss. 7. P. 2211–2217. DOI:10.1016/0956-7151(93)90390-E.
3. Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Application of disclination concept to solid structures. *Prog. Mater. Sci.* 2009. Vol. 54. Iss. 6. P. 740–769. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2009.03.002.
4. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N., Pupynin A.S. Model akkomodatsii sdvigovogo planarnogo mezodefekta [Model of accommodation of planar shear mesodefekt]. *Deformatsiya i razrushenie materialov* [Deformation and Fracture of Materials]. 2022. No 5. P. 2–10. DOI: 10.31044/1814-4632-2022-5-2-10 (In Russian).
5. Rybin V.V. Regularities of mesostructures development in metals in the course of plastic deformation. *Voprosy mashinovedeniya* [Problems of Material Science]. 2003. No 1 (33). P. 9–28.
6. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. The screening of mesodefected stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation. *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2012. Vol. 30. No 1. P. 14–34.
7. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F., Svirina J.V. Computer simulation of the dislocation ensemble kinetics in the elastic fields of mesodefected and fragmentation processes during plastic deformation. *Materials Physics and Mechanics*. 2014. Vol. 21. P. 78–98.
8. Noell P.J., Sills R.B., Benzerga A.A., Boyce B.L. Void nucleation during ductile rupture of metals: A review. *Prog. Mater. Sci.* 2023. Vol. 135. Article No 101085. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2023.101085.
9. Noell P.J., Sabisch J.E.C., Medlin D.L., Boyce B.L. Nanoscale conditions for ductile void nucleation in copper: Vacancy condensation and the growth-limited microstructural state. *Acta Materialia*. 2020. Vol. 184. P. 211–224. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.11.022.
10. Noell P., Carroll J., Hattar K., Clark B., Boyce B. Do voids nucleate at grain boundaries during ductile rupture? *Acta Materialia*. 2017. Vol. 137. P. 103–114. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.07.004>.
11. Meyers M.A., Traiviratana S., Lubarda V.A., Benson D.J., Bringa E.M. The role of dislocations in the growth of nanosized voids in ductile failure of metals. *JOM*. 2009. Vol. 61. Iss. 2. P. 35–41. DOI: 10.1007/s11837-009-0025-7.
12. Lim H., Noell P.J., Carroll J.D. Crystallographic orientation dependent fracture behavior in tantalum single crystals. *Scripta Materialia*. 2021. Vol. 191. P. 76–80. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2020.09.017.

13. Noell P.J., Sills R.B., Boyce B.L. Suppression of void nucleation in high-purity aluminum via dynamic recrystallization. *Metall. Mater. Trans. A. Phys. Metall. Mater. Sci.* 2020. Vol. 51. P. 154–166. <https://doi.org/10.1007/s11661-019-05457-w>.
14. Furukimi O., Kiattisaksri C., Takeda Y., Aramaki M., Oue S., Munetoh S., Tanaka M. Void nucleation behavior of single-crystal high-purity iron specimens subjected to tensile deformation. *Mater. Sci. Eng. A.* 2017. Vol. 701. P. 221–225. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.06.084>.
15. Schafner E., Steiner G., Korznikova E., Kerber M., Zehetbauer M.J. Lattice defect investigation of ECAP-Cu by means of X-ray line profile analysis, calorimetry and electrical resistometry. *Materials Science and Engineering: A.* 2005. Vol. 410–411. P. 169–173. DOI: 10.1016/j.msea.2005.08.070.
16. Svirina Yu.V., Perevezentsev V.N. Analiz vliyaniya perepolzaniya dislokatsiy na formirovaniye oborvannoy subgranitsy v uprugom pole klinovoy disklinatsii [Influence analysis of dislocation climb on formation of broken sub-boundary in elastic field of wedge disclination]. *Deformatsiya i razrusheniye materialov [Deformation and Fracture of Materials]*. 2015. No 10. P. 10–13 (In Russian).
17. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations*. New York. McGraw-Hill Book Co. 1968. 780 p.
18. Romanov A.E., Vladimirov V.I. Disclinations in crystalline solids. In: *Dislocations in Solids*. Ed. F.R.N. Nabarro. Vol. 9. Dislocations and Disclinations. Amsterdam. North-Holland. 1992. P. 191–402.
19. Detemple K., Kanert O., De Hosson J.Th.M., Murty K.L. In situ nuclear magnetic resonance investigation of deformation-generated vacancies in aluminum. *Phys. Rev. B.* 1995. Vol. 52. No 1. P. 125–133. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.52.125>.
20. Mecking H., Estrin Y. The effect of vacancy generation on plastic deformation. *Scripta Metallurgica.* 1980. Vol. 14. Iss. 7. P. 815–819.
21. Van der Giessen E., Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Model. Simul. Mat. Sci. Eng.* 1995. Vol. 3. No 5. P. 689–735. DOI: 10.1088/0965-0393/3/5/008.
22. Deshpande V.S., Needleman A., Van der Giessen E. Finite strain discrete dislocation plasticity. *J. Mech. Phys. Solids.* 2003. Vol. 51. Iss. 11–12. P. 2057–2083. DOI: 10.1016/j.jmps.2003.09.012.

**ON THE INFLUENCE OF NON-EQUILIBRIUM VACANCIES
ON THE CHARACTERISTICS OF STRAIN
INDUCED BROKEN DISLOCATION BOUNDARIES***

Svirina J.V., Perevezentsev V.N.

*Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences –
Branch of Federal Research Center “Institute of Applied Physics
n.a. A.V. Gaponov-Grekhov of the RAS”, Nizhny Novgorod, Russian Federation*

j.svirina@mail.ru

Received by the Editor 2023/06/30

The influence of material supersaturation with deformation vacancies on the characteristics of broken dislocation boundaries that appear near wedge disclinations as a result of accommodative plastic deformation is considered. An analysis is made for the elastic and osmotic forces acting on the dislocations of the broken boundary. Using discrete dislocation dynamics method, computer simulation of the nonconservative motion (climb) of dislocations in the boundary plane has been carried out. The broken boundary formed as a result of the splitting of the original disclination into two partial with equal strengths and the boundary with an inhomogeneous distribution of dislocations (with a linearly decreasing misorientation) were considered as initial ones. It is shown that in the case of broken dislocation boundary formed near a positive wedge disclination, dislocation climb

*The work was carried out within the Russian state assignment for fundamental scientific research for 2024–2026 (FFUF-2024-0031, the topic No 1023032800130-3-2.3.2).

leads to its unlimited growth through the model grain with a simultaneous decrease of misorientation. In the case of a boundary formed near a negative disclination, the osmotic forces acting on the dislocations of the broken boundary can, at sufficiently large supersaturations of the material with nonequilibrium vacancies, lead to its significant compression with a simultaneous increase of the density of the Burgers vector. In this case, the choice of the initial configuration of the broken boundary has practically no effect on the characteristics of the equilibrium distribution of dislocations. The density distributions of the Burgers vector along the broken boundary are calculated for the case of small and large supersaturations of the material with nonequilibrium vacancies. The critical value of supersaturation above which the boundary compression occurs is calculated. The boundary compression leads to a significant increase in tensile stresses in its vicinity. In this case, the maximum tensile stresses in the plane coinciding with the plane of the boundary are reached at the boundary break point. The results obtained may be of interest in the analysis of possible mechanisms for the initiation of cracks and pores during ductile fracture of metals.

Keywords: plastic deformation, nonequilibrium vacancies, junction disclinations, broken dislocation boundaries.