



## **ATOMISTISK MODELLERING AF UDMATTELSE**

Ole Bøcker Pedersen  
Afdelingen for Materialeforskning,  
Forskningscenter Risø, 4000 Roskilde

**Abstract.** *Quantitative atomistic modelling of the annihilation of screw dislocations of opposite sign leads to a semi-quantitative account of the slip lines causing damage in fatigue of ductile materials. The atomistic modelling provides a basis for cross-slip theories of fatigue and it is part of an experimentally related multiscale modelling approach to the fatigue of industrial materials.*

## INDLEDNING

Med kvantitative atomistiske modellering af krydsslip [1] har vi fået radikalt nye muligheder i modellering af industrielle materials opførsel. Dels er det nu endelig blevet muligt at give temperaturafhængige parametre i eksisterende modeller et egentlig fysisk indhold og dermed efterhånden blive istand til direkte at beregne dem, så man undgår dyre målinger. Dels kan vi begynde at udvikle helt ny atomistisk baserede udmattelsesteorier med interessante konsekvenser, som kan bekræftes eller afvises af eksperimenter.

For at realisere disse muligheder er det nødvendigt at arbejde over en bred front med karakterisering og modellering af udmattelsesmekanismer. Carstensen [2] beskriver udmattelsesmekanismerne i duktile materialer af stigende kompleksitet, fra de tilsyneladende simple enkrystaller af kobber og messing til polykrystaller i en udvikling, som går imod mere og mere komplekse industrielle materialer, såsom nitrogenhærdede duplex stål [3]. I moderne jargon er der tale om *multiskalaproblemer* [4] i cyklisk plasticitet og skademekanik, da processerne foregår på længde- og tidsskalaer, som strækker sig lige fra nm og ps skalaerne for krydsslip over mikrostrukturens og skadetilstandens  $\mu\text{m}$  og s skalaerne til makroskopisk vækst af revner i industrielle komponenter. Derfor kræver identifikation og effektiv modellering af udmattelsesmekanismer samarbejde henover traditionelt adskilte fagområder som materialefysik, -kemi, -mekanik og -teknologi. Ellers vil der selvfølgelig ikke blive "bygget bro over længdeskalaerne" [1], så man kan realisere de atomistisk baserede modelleres industrielle muligheder.

Her skal jeg især forsøge at illustrere, hvordan man kan kombinere materialefysikkens atomistiske modeller af krydsslip [1] med allerede eksisterende teoretiske ideer til en ny teori, som kan tjekkes med materialprøvning og mikrostrukturel karakterisering. De atomistiske modeller [1] refererer til rent kobber, så Carstensen's [2] fremstilling af "cyklisk mætning" og PSB-matrix strukturer i kobber enkrystaller er det naturlige udgangspunkt, når modellernes muligheder i udmattelsesforskning skal undersøges. Via multiskalamodellernes hierarki af skalaer og kompleksitet forventer vi, at modellerne for de simple modelsystemer i forskellige modificerede former kan anvendes på industrielle materialer som fx austenitiske og ferritiske stål, se [2-4].

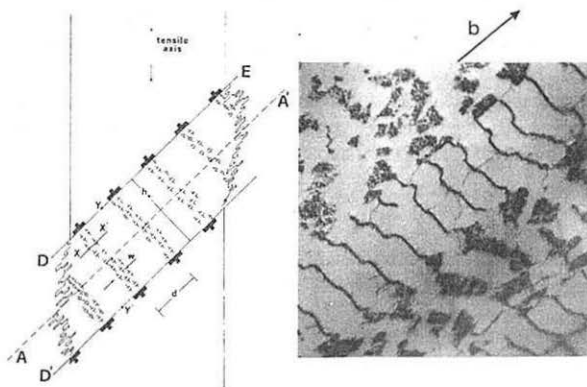


Fig. 1. Model af et PSBs struktur af kantdipoler organiseret i vægge med tykkelse  $w$  og gensidig afstand  $d$ . Fra [8]. Til højre for modellen ses et TEM billede af strukturen med nogle enkelte mobile skruedislokationer imellem væggene. Fra [5].

### KRYDSSLIPTEORIER FOR CYKLISK MÆTNING

Cyklisk mætning er en stærkt temperaturafhængig proces [5], som hele tiden producerer ny PSBer med den bemærkelsesværdigt velorganiserede struktur, som ses på Fig.1. Strukturen består af vægge af kantdipoler imellem hvilke skruedislokationer glider og frembringer plastisk deformation. Et PSB i kobber ved stuetemperatur er aktivt i måske  $N = 10^5$  træk-tryk cykler, svarende til en akkumuleret plastisk tøjning

$$\epsilon_{cum} = 4N\epsilon_{PSB} \quad (1)$$

på omkring 400000 %. Denne tilsyneladende reversibilitet er dog langt fra perfekt, da PSBet producerer intense overfladeskader og udvikler sig til skarpe revner, som resulterer i udmattelsesbrud. To-fase modellen, som beskrives af Carstensen [2]), viser således, at mætningsspændingen  $\sigma_{PSB}$  er en *udmattelsesgrænse*, hvorunder der aldrig sker udmattelsesbrud, hverken i en- eller polykrystaller. Basinski og Basinski [6] har målt, at revnerne vokser ind i kobber med fart på en Burgers vektor  $b = 0.256\text{nm}$  per træk-tryk cyklus.

Mott's klassiske krydsslipsteori [2] for vækst af korte revner giver tilsyneladende en simpel forklaring på revnernes væksthastighed, men hvis processen skal forstås til bunds er det nødvendigt at undersøge dens store temperaturafhængighed, som i de klassiske krydsslipsteorier [7,8] for mætning tilskrives den såkaldte *annihileringshøjde*  $y_S$  for skrue-dipoler. Med TEM [7] finder man, at den mindste observerede højde af skrue-dipoler i kobber cyklisk mættet ved stuetemperatur er ca. 50nm og det anses derfor at være værdien af  $y_S$ . De klassiske mætningsteorier er baseret på den simple ide at mætningen kan forklares ved at strømtætheden  $\rho_{dyn}$  af skrue-dislokationer i et PSB er *maksimal*, hvilket udtrykkes som

$$\rho_{dyn} = 1/L_S y_S \quad (2)$$

hvor  $L_S$  er dislokationernes gennemsnitlige sliplængde. Elementær dislokationsteori viser, at når  $\rho_{dyn}$  dislokationer glider til annihilation, så frembringes en plastisk forskydningsøjning på

$$e_p = 2pb/y_S \quad (3)$$

Da  $e_{PSB}$  er ca. 1% ved stuetemperatur får man [7,8] overensstemmelse imellem teori og måling når  $p = 1$ , men der er ikke nogen overbevisende forklaring på at  $p$  netop skal have denne værdi. Derfor findes der endnu ingen færdig model for udmattelse, selv for et så tilsyneladende simpelt system som kobber enkrystaller. Som et minimum må en begrundet forudsigtelse af  $e_{PSB}$  kræve, at man tager de forskydningsspændinger som koncentrerer på væggene i betragtning.

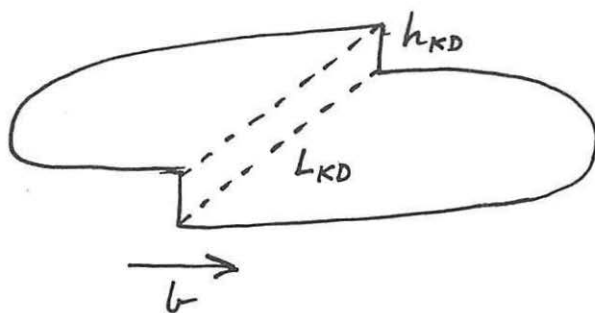


Fig. 2. Destabiliseret kantdipol i en PSB væg.

## INSTABILITETSTEORI FOR CYKLISK MÆTNING

Den statisk-dynamiske model [5] beskriver PSB væggene som et knaldhårdt tredimensionalt skelet, som er ustabil overfor forskydningsspændinger. I dette billede svarer den dynamiske strømtæthed af skrue-dislokationer til muskler. Det hårde skelet bygges op af krydsslipprocesser, som bestemmer højden  $h_{KD}$  og længden  $L_{KD}$  af skelettets kantdislokationer, se Fig. 1 og 2. Hårdheden skyldes at  $h_{KD}$  er på nanoskala, så den forskydningsspænding,  $\sigma_{KD}$ , der skal til for at destabilisere dipolen bliver meget høj. Kontinuumelastisk dislokationsteori viser, at for *uendeligt* lange dipoler er

$$\sigma_{KD} = \mu b / 8\pi(1-\nu)h_{KD} \quad (4)$$

hvor  $\mu$  er den elastiske forskydningsmodul og  $\nu$  er Poisson forholdet. Kvantitativ TEM viser at  $h_{KD}$  er nogle få nm, så man finder at *destabiliseringsspændingerne*  $\sigma_{KD}$  ligger i området 100 til 280MPa. Nye kontinuumelastiske dislokationsberegninger bekræfter disse høje værdier: korrektionen for den endelige dipol længde  $L_{KD}$  rapporteres [9] at være en forøgelse af  $\sigma_{KD}$  på kun omkring 30%. Selvom  $\sigma_{PSB}$  kun er 30MPa er det alligevel muligt at destabilisere væggenes kantdipoler, som illustreret på Fig.2, fordi der koncentrerer spændinger  $\sigma_{væg}$  med værdier på 37 til 300MPa på væggene [5]. Selv de hårdeste kantdipoler kan derfor destabiliseres ved fuldt udsving  $\epsilon_{PSB}$  af båndet til mætningsspændingen  $\sigma_{PSB}$ . Den koncentrerede spænding udtrykkes i den statisk-dynamiske model som

$$\sigma_{væg} = \sigma_{PSB} + \mu\gamma\epsilon_{PSB} \quad (5)$$

hvor  $\gamma$  er en elastisk akkommodationsfaktor, som pga. væggenes geometri ligger i området fra  $\gamma \cong 2/100$  til omkring 0.7. På den måde ser man at mætningsspændingen begrænses af væggenes ustabilitet overfor forskydningsspændinger, som den opsplittede kantdipol på Fig.2 skal illustrere. Hvis man skal modellere skelettets destabiliseringsproces, så bliver det nødvendigt at kende dets lokale dislokationstæthed  $\rho_{stat}$ , som svarer til en gennemsnitlig afstand imellem kantdislokationerne på

$$\bar{h} = 1/\rho_{stat}^{1/2} \quad (6)$$

Den statisk-dynamiske model viser, at denne afstand er proportional med vægafstanden  $d$ , som Fig.3 viser. Det ses at modellen bekræftes af eksperimentelle målinger af væggenes dislokationstæthed over et bredt interval, som omtrent svarer til intervallet fra stuetemperatur og helt ned til temperaturen af flydende helium, 4K.

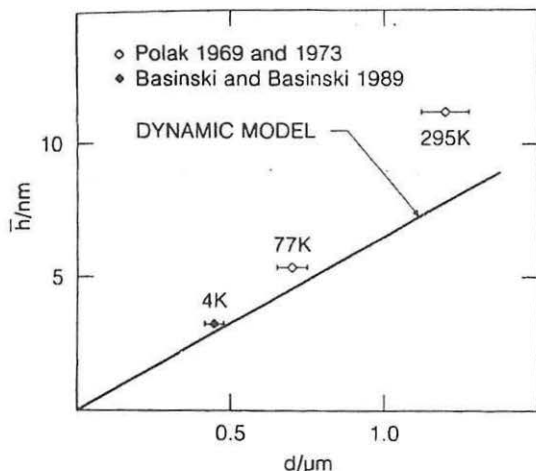


Fig. 3 Modelberegning og eksperimentelle målinger ved forskellige temperaturer af PSB væggenes lokale dislokationstæthed angivet ved parameteren  $\bar{h}$ . Fra [5].

### ATOMISTISK TEORI FOR UDMATTELSESGRÆNSEN

Mekanisk prøvning og kvantitativ mikrostrukturel karakterisering viser, at PSB vægafstanden er stærkt temperaturafhængig og omvendt proportional med metallens udmattelsesgrænse, dvs. med mætningsspændingen. De klassiske krydsslip teorier peger mod den mest sandsynlige forklaring på denne temperaturafhængighed ved at vise at

$$d - w = 4\pi\gamma_s \quad (7)$$

Med andre ord, bredden af de kanaler, som bærer strømtætheden af skruedislokationer imellem PSB væggene med tykkelse  $w$ , er proportional med annihilationsafstanden for skruedislokationer. Tilsvarende viser de atomistiske modeller, at annihilation af to skruedislokationer med modsat fortegn på tætliggende parallelle slipplaner er en termisk aktiveret proces, da den involverer reaktioner imellem (partielle) dislokationer over atomare afstande. Igangværende arbejde [1] med atomistisk modellering af effekten af hak eller jogs i dislokationerne skal vise om vi kan give den endnu rent fænomenologiske parameter  $\gamma_s$  i de klassiske krydsslip teorier et mere præcist fysisk indhold, så vi måske kan komme til at beregne den.

Udover problemet med at beregne den temperaturafhængige udmattelsesgrænse har vi problemet med at identificere selve den kontrollerende dislokationsmekanisme. Det forhold at mætning observeres ved temperaturer helt ned til 4K viser at der ikke kan være tale om en diffusionsproces. Ved så lave temperaturer må processen have en meget lavere aktiveringsenergi end den for selvdiffusion, som for kobber er  $E \cong 2\text{eV}$ . Basinski og Basinski [6] målte således aktiveringsenergien for mætning i eksperimenter med pludselige ændringer af temperatur eller tøjningshastighed under mætningsprocessen i kobber enkrystaller. De fandt en aktiveringsenergi (eller rettere: enthalpi) på

$$E = 25kT \quad (8)$$

hvor  $k$  er Boltzman's konstant og  $T$  er temperaturen. De klassiske krydsslip teorier har faktisk ikke beskæftiget sig med hvad dislokationsmekanismen bag aktiveringsenergien for mætning kunne være. Imidlertid er det er temmelig klart, at når PSB væggene destabiliseres må de frigjorte dislokationer glide imellem hinanden på parallelle meget tætliggende slipplaner. Den statisk-dynamiske model viser således (Fig.3), at de beregnede og målte gennemsnitlige slipplanafstande ved stuetemperatur er omkring 10nm og ved flydende helium omkring 3nm.

Fig.4 sammenstiller de målte aktiveringsenergier for mætningsprocessen med de atomistisk beregnede aktiveringsenergier for annihilation af jog-fri skruedipoler med forskellige højder. Vi ser , at for

$$h_c \cong 2\text{nm} \quad (9)$$

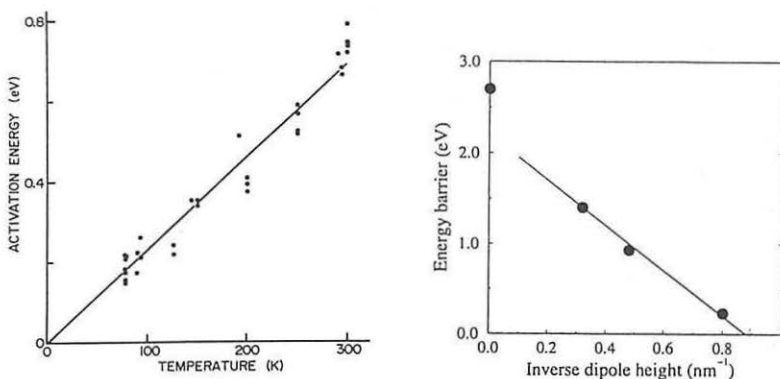


Fig. 4. Til venstre ses målinger af aktiveringsenergien for mætning fra [6] og til højre ses resultatet af atomistiske beregninger af energien for krydsslipaktiveret annihilation af skruedipoler [1].

annihilerer dipolerne med samme aktiveringsenergi som målt for mætningsprocessen. Det er derfor en fristende ny teori [4], at mætningsspændingen og dermed udmattelsesgrænsen simpelthen skyldes hvad man kunne kalde *nanoskala annihilering*: annihilering af perfekte (jog-fri) segmenter af skrue-dislokationer, som med modsat fortegn mødes mens de glider på parallelle sliplaner med gensidige afstande på nogle få nm. Teorien kan begrundes med at tilstedeværelsen af jogs reducerer aktiveringsenergien så stærkt, at kun jog-fri segmenter af skrue-dipoler behøver termisk aktivering for at krydsslippe til annihilation.

## TEORIENS KONSEKVENSER

De klassiske krydsslipmodeller viser, at når dislokationer glider til annihilation, så producerer de en plastisk forskydningstøjning, som er omvendt proportional med annihileringshøjden. Med nanoskala annihilering må der derfor være meget intense forskydningstøjninger

$$e_p = 2pb/h_C \cong 25.6\% \quad (10)$$

hvis  $p = 1$ . Man kan indvende, at de klassiske modeller er to-dimensionale og dermed ikke helt troværdige, samt at deres  $p$  værdi er ubegrundet. Imidlertid viser en mere detaljeret analyse [4], som er baseret på den statistisk-dynamiske model for dislokationstæthed i PSB væggene, at den gennemsnitlige sliplængde  $L_S$  er omtrent lig med længden  $L_{KD}$  af kantdipoler i PSB væggene. Derfor kan man forvente, at en mere detaljeret mikrostrukturelt baseret tredimensional model vil have omtrent de samme kvantitative konsekvenser. Det betyder, at den destabiliserede PSB væg formodentlig gendanner sig selv. På den måde fastfryses de fleste mobile dislokationer i stærke kantdipoler, som kun tillader en forskydning på  $e_{PSB} = 1\%$ . Man kan således forvente, at undgå den ubegrundede  $p$  værdi i en tredimensional model, hvor  $e_p$  bestemmes af at strukturen hærder ved at den simpelthen udtømmes for mobile dislokationer, på engelsk: *exhaustion hardening*.

Den atomistiske teori ser derfor ud til at have den konsekvens at sliplokalisering sker med en størrelsesorden højere intensitet end to-fase modellen og de klassiske krydsslip teorier har forudsagt. Den konsekvens er i overensstemmelse med at undersøgelser med optisk interferometri og SEM netop har vist [6] at der opstår meget intense sliplinier i PSB. De målte forskydningstøjninger udviser et spektrum af værdier  $e_{SL}$  med et gennemsnit på

$$\langle e_{SL} \rangle = 23.3 \quad (11)$$

De intense sliplinier bidrager til udviklingen af PSBernes overfladeprofil og dermed til selve revneinitiering. Der observeres en systematisk tendens til en større tæthed af sliplinier i PSB'er ved helt lave temperaturer. Den er eksperimentelt korreleret med en stigning i volumenandelen af PSB vægge når temperaturen reduceres, nøjagtigt som man ville forvente det ud fra den her beskrevne atomistisk baserede multiskalateori.

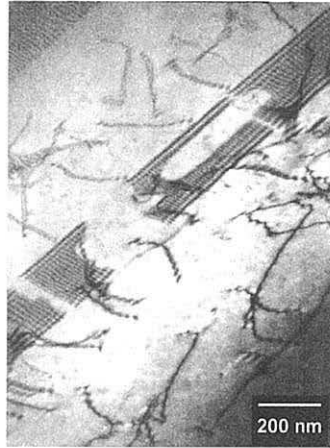


Fig. 5. TEM billede af "huller" i de plane kantdipolarrangementer, som kontrollerer den cykliske hærkning i planar slip materialer, her messing [2].

## ANDRE MULIGHEDER

Industrielle materialer omfatter både *wavy slip* materialer og *planar slip* materialer, og den her beskrevne analytiske dislokationsdynamik kan suppleres med mere komplekse numeriske simuleringer, som nævnt i [1]. Når vi også forventer, at ideerne i modificeret form kan overføres til modeller for planar slip materialer, så skyldes det, at krydsslip ifølge Gerold og Karnthaler's SRO teori [1,2], sagtens kan spille den afgørende rolle for udmattelse selv under planar slip, hvor krydsslip *tilsyneladende* sker med meget lav frekvens. Som beskrevet af Carstensen [2], ser mekanismen for cyklisk hærkning i messing faktisk ud til at være dannelse af plane kantdislokationsarrangementer med dipolhøjder på nanoskala ved en krydsslip mekanisme [10]. Fig. 5 illustrerer, at disse plane dipolarrangementer har "huller". Vi forestiller os at de opstår ved destabilisering af kantdipolerne og efterfølgende annihilation på nanoskala, omtrent som i PSBernes sliplinier. Cyklisk blødgøring og ISB dannelse i materialer som fx de austenitiske stål hænger sammen med disse processer.

## STØTTE

Arbejdet er udført inden for det Ingeniørvidenskabelige Center (IVC) på Risø for Materialestrukturer og Materialemodeller støttet af STVF. Det er del af et samarbejde mellem IVC og Center for Materialefysik på Atomar Skala (CAMP) på DTU.

## REFERENCER

1. T. Leffers, O.B. Pedersen, T. Rasmussen, T. Vegge og K.W. Rasmussen, i denne årbog.
2. J.V. Carstensen, i denne årbog.
3. O.B. Pedersen, *Mater.Sci.Forum* **318-320**(1999)733-742.
4. O.B. Pedersen, I: Multiscale Phenomena in Plasticity: from experiments to phenomenology, modelling & materials engineering, NATO Advanced Study Institute, Ouranoupolis, Greece, 8-19 September 1999. Vil fremkomme 2000 i NATO ASI bog serien.
5. O.B. Pedersen, *Phil.Mag.* **A73**(1996)829-858.
6. Z.S. Basinski og S.J. Basinski, *Prog.Mater.Sci.* **36**(1992)89-148.
7. U. Essmann og H. Mughrabi, *Phil Mag.* **A40**(1979)731-756.
8. L.M. Brown, I: Dislocation Modelling of Physical Systems (Eds. M.F. Ashby et al.), Pergamon Press, New York 1981, p. 51-68.
9. L.P. Kubin og B. Devincre, I: Deformation-Induced Microstructures, Proc. 20th Risø International Symposium on Materials Science (Eds. J.B.Bilde-Sørensen et al.), Risø National Laboratory, Roskilde 1999, p. 61-83.
10. P.J.Jackson, *Progress Mater.Sci.* **29**(1985)139-175.