

МОДЕЛИРОВАНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ДЕФОРМИРОВАННОМ ПОЛИКРИСТАЛЛЕ

*Д. В. Бачурин, Р. Т. Мурзаев**

*Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук
450001, Уфа, Россия*

Поступила в редакцию 18 ноября 2025 г.,
после переработки 27 марта 2026 г.
Принята к публикации 17 апреля 2026 г.

С использованием дискретно-дислокационного моделирования исследована релаксация неупорядоченной системы дислокаций в колончатом поликристалле с неравновесными границами зерен под воздействием ультразвуковых колебаний. Неравновесное состояние границ моделировалось с помощью стенок краевых зернограницных дислокаций, эквивалентных квадруполью клиновых дисклинаций, расположенных в углах центрального зерна. Комбинированное действие ультразвуковых и внутренних напряжений вызывает интенсивную перестройку дислокационной структуры: дислокации смещаются к границам зерен и поглощаются ими, что приводит к снижению упругой энергии и формированию более однородного поля напряжений. Релаксация протекает в два этапа — быстрый, характеризующийся активным дрейфом и поглощением дислокаций, и медленный, сопровождающийся незначительной дислокационной активностью. Установлено, что степень релаксации существенно зависит от амплитуды ультразвукового воздействия: при малых амплитудах формируются устойчивые дислокационные замки, при больших — происходит их разрушение и более полное очищение зерен. Определена оптимальная амплитуда ультразвука, при которой достигается максимальный релаксационный эффект.

Ключевые слова: ультразвуковая обработка, неупорядоченные дислокационные структуры, неравновесные границы зерен, перестройка дислокаций, колончатый поликристалл

DOI: 10.31857/S0044451026060044

1. ВВЕДЕНИЕ

Ультразвуковая обработка (УЗО) является эффективным инструментом модификации структуры и свойств материалов. В зависимости от условий она может вызывать как упрочнение (формирование мелкозернистой или нанокристаллической структуры), так и размягчение (акустопластический эффект) [1–7]. Основным механизмом воздействия связан с действием знакопеременных сдвиговых напряжений на дислокации, что может приводить к их колебаниям, генерации или дрейфу и, как следствие, к релаксации внутренних напряжений [8, 9].

Особый интерес представляет применение УЗО к ультрамелкозернистым материалам, полученным

методами интенсивной пластической деформации. Эти материалы обладают высокой прочностью, но характеризуются высокими внутренними напряжениями, связанными с высокой плотностью решеточных дислокаций и дислокаций, захваченных границами зерен, а также пониженной термостабильностью [10–18]. Экспериментальные исследования показали, что воздействие ультразвука приводит к снижению плотности дислокаций, стабилизации структуры границ зерен и повышению пластичности без заметного роста зерен, при сохранении или даже увеличении прочности [19, 20]. Таким образом, УЗО может рассматриваться как альтернатива низкотемпературному отжигу для управления структурой ультрамелкозернистых материалов. Под низкотемпературным отжигом понимается термическая обработка при температурах, существенно меньших температуры рекристаллизации, используемая для релаксации внутренних напряжений, частичной ан-

* E-mail: murzaevrt@gmail.com

нигиляции дефектов и стабилизации микроструктуры без существенного роста зерен [21].

Изучение механизмов взаимодействия ультразвука с дефектами решетки проводилось методами дислокационной динамики. Несмотря на упрощения, двумерные модели систем краевых дислокаций, где последние считаются бесконечными прямыми линиями, позволяют адекватно описывать коллективное поведение дислокаций и предсказывать их эволюцию под действием ультразвуковых напряжений [22–28]. Это связано с тем, что в двумерной дислокационной динамике учитываются дальнедействующие взаимодействия, которые, по сути, определяют коллективное поведение дислокаций, что позволяет предсказывать поведение реальных материалов.

В работах [29, 30] моделировалось поведение дислокаций в квадратном зерне с непроницаемыми для дислокаций границами и дисклинационным квадруполем в его углах. Наличие таких неравновесных границ приводит к принципиально иному поведению дислокаций по сравнению с монокристаллом [23, 24, 31, 32]: дислокации преимущественно смещаются к границам и поглощаются ими, а дислокационные субструктуры (диполи, мультиполи, стенки) формируются лишь при высокой плотности дислокаций. Под действием ультразвука наблюдается снижение внутренних напряжений и частичная компенсация полей дисклинационного квадруполя. Недостатком указанных моделей [29, 30] является наличие только одной системы скольжения с максимальным фактором Шмида. В последующих работах [33, 34] модель была усовершенствована введением двух дополнительных, непараллельных систем скольжения. Было установлено, что пересечение дислокаций на разных плоскостях приводит к образованию дислокационных замков: при малых амплитудах колебаний они формируются, а при высоких — разрушаются, что способствует очищению зерна от дислокаций. Тем не менее эта модель остается неполной, поскольку рассматривает одно изолированное зерно в недеформированной матрице.

Целью настоящей работы является исследование колончатого поликристалла, включающего девять квадратных зерен с тремя системами скольжения. В углах центрального зерна находится квадруполь клиновых дисклинаций, моделирующий неравновесное состояние границ зерен, а дислокации в трех системах скольжения случайным образом распределены по каждому зерну. Численное моделирование выполняется в рамках дискретно-дислокационного подхода, что позволяет проанализировать эволю-

цию внутренних напряжений и избыточной упругой энергии системы в процессе УЗО.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделируемый поликристалл состоит из 3×3 зерен (рис. 1). Зерна имеют квадратную форму и бесконечно вытянуты вдоль дислокационных линий (ось z), что фактически соответствует квазидвумерному колончатому кристаллу. Девять зерен рассматриваются как часть бесконечного поликристалла и окружены эффективной средой, которая не деформируется пластически и не содержит дислокаций, но воспринимает упругие поля, создаваемые дефектами внутри зерен.

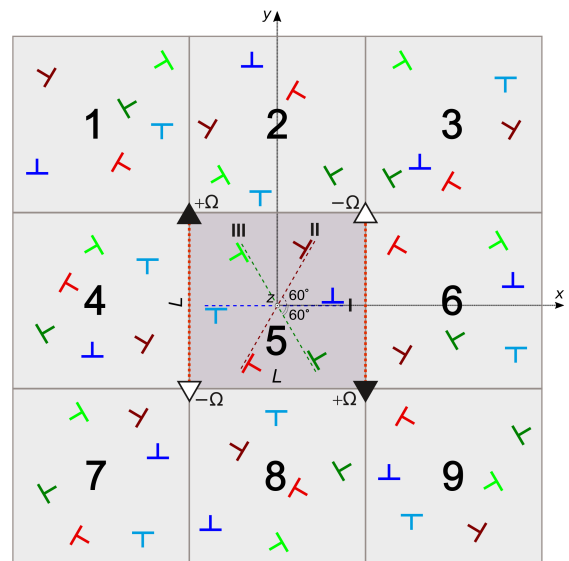


Рис. 1. Модель колончатого поликристалла, состоящего из 9 квадратных зерен, окруженных эффективной средой. Каждое зерно содержит три непараллельные системы скольжения, обозначенные разными цветами: система скольжения I (синяя), II (красная) и III (зеленая). Положительные и отрицательные дислокации, случайно распределенные в пределах одной системы скольжения, показаны различными оттенками соответствующего цвета. Две стенки краевых дислокаций с противоположными по знаку векторами Бюргерса, эквивалентные квадруполю клиновых дисклинаций с плечом L и мощностью $\pm\Omega$, расположенных в углах зерна 5, моделируют неравновесное состояние границ зерна. Черный треугольник обозначает положительную клиновую дисклинацию, белый — отрицательную. Вертикальные красные пунктирные линии указывают на неравновесные границы в зерне 5. Все остальные границы зерен в столбчатом поликристалле изображены сплошными серыми линиями

Неравновесные границы присутствуют только в центральном зерне 5, где они моделируются двумя конечными стенками, состоящими из 60 краевых дислокаций с вектором Бюргера b_{gb} . В континуальном приближении такие стенки эквивалентны квадрупольно клиновых дисклинаций, расположенных в углах квадратного зерна. Подобные мезодефекты формируются при пластической деформации и считаются характерным элементом неравновесной структуры ультрамелкозернистых материалов, полученных методами интенсивной пластической деформации [10].

Все зерна содержат три непараллельные системы скольжения. В модели приняты следующие допущения. В каждой системе скольжения содержится одинаковое число краевых дислокаций, случайно распределенных в начальный момент времени. Все дислокации имеют одинаковую величину вектора Бюргера. Суммарный вектор Бюргера положительных и отрицательных дислокаций в каждой системе скольжения равен нулю. Каждая дислокация движется по своей плоскости скольжения, т. е. аннигиляция дислокаций с противоположным вектором Бюргера на одной плоскости исключена. Реакции между дислокациями разных систем не учитываются. Все 24 границы зерен в модельном поликристалле являются большеугловыми, непроницаемыми и неподвижными при комнатной температуре. Рассматривается только скольжение дислокаций, процессы переползания исключены. Сдвиговые напряжения от ультразвуковой волны однородны в пределах девяти зерен, поскольку длина волны (0.1–0.3 м при 20 кГц) значительно превышает их размер. Амплитуда ультразвуковых напряжений ниже динамического предела текучести, поэтому генерация новых дислокаций в рассматриваемой модели невозможна. Скорость движения дислокаций меньше скорости звука. Начальные скорости дислокаций равны нулю.

Для описания движения прямолинейной краевой дислокации под действием ультразвука используется эмпирическая степенная зависимость скорости v_i от касательных напряжений [35]:

$$v_i = B \tau_i^m, \tag{1}$$

где B — коэффициент подвижности дислокаций, τ_i — результирующее касательное напряжение в плоскости скольжения, направленное вдоль вектора Бюргера.

Уравнение движения i -й дислокации в модельном поликристалле имеет вид

$$v_i = B \left[\tau_i^{\text{ext}} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \tau_{ij}^{\text{disl}}(x_i - x_j, y_i - y_j) + \tau_i^{\text{disc}}(x_i, y_i) \right]^m, \tag{2}$$

где $\tau_i^{\text{ext}} = \sigma_{xy,i}^{\text{ext}} \sin \omega t$ — однородное внешнее знакопеременное напряжение, действующее в плоскости скольжения i -й дислокации, вызванное действием ультразвука с амплитудой $\sigma_{xy,i}^{\text{ext}}$ и частотой ω ; $\tau_{ij}^{\text{disl}}(x_i, y_i)$ — касательное напряжение от всех остальных N решеточных дислокаций в моделируемом поликристалле; $\tau_i^{\text{disc}}(x_i, y_i)$ — касательное напряжение от ансамбля дислокаций, формирующих квадруполь клиновых дисклинаций с мощностью $\pm \Omega$ и плечом L [36]. Касательное напряжение в плоскости скольжения дислокации, наклоненной под углом θ к оси x , определяется выражением

$$\tau^{\text{disc}} = \sigma_{x'y'} = \frac{1}{2}(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}) \sin 2\theta + \sigma_{xy} \cos 2\theta, \tag{3}$$

где σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{xy} — компоненты тензора напряжений в декартовой системе координат xy . Эти компоненты для прямолинейной краевой дислокации с вектором Бюргера b в точке с координатами (x_i, y_i) имеют следующий вид [37]:

$$\sigma_{xx}(x_i, y_i) = -Db \frac{y_i(3x_i^2 + y_i^2)}{(x_i^2 + y_i^2)^2}, \tag{4}$$

$$\sigma_{yy}(x_i, y_i) = Db \frac{y_i(x_i^2 - y_i^2)}{(x_i^2 + y_i^2)^2}, \tag{5}$$

$$\sigma_{xy}(x_i, y_i) = Db \frac{x_i(x_i^2 - y_i^2)}{(x_i^2 + y_i^2)^2}, \tag{6}$$

а для дисклинационного квадруполь, который моделируется с помощью двух стенок краевых зернограничных дислокаций с противоположным вектором Бюргера, расположенных в точках $x = L/2$ и $x = -L/2$:

$$\sigma_{xx}^{\text{disc}}(x_i, y_i) = -Db_{gb} \sum_{k=1}^{60} \left[\frac{(y_i - y_k) (3(x_i - \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)}{((x_i - \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)^2} - \frac{(y_i - y_k) (3(x_i + \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)}{((x_i + \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)^2} \right], \quad (7)$$

$$\sigma_{yy}^{\text{disc}}(x_i, y_i) = Db_{gb} \sum_{k=1}^{60} \left[\frac{(y_i - y_k) ((x_i - \frac{L}{2})^2 - (y_i - y_k)^2)}{((x_i - \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)^2} - \frac{(y_i - y_k) ((x_i + \frac{L}{2})^2 - (y_i - y_k)^2)}{((x_i + \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)^2} \right], \quad (8)$$

$$\sigma_{xy}^{\text{disc}}(x_i, y_i) = Db_{gb} \sum_{k=1}^{60} \left[\frac{(x_i - \frac{L}{2}) ((x_i - \frac{L}{2})^2 - (y_i - y_k)^2)}{((x_i - \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)^2} - \frac{(x_i + \frac{L}{2}) ((x_i + \frac{L}{2})^2 - (y_i - y_k)^2)}{((x_i + \frac{L}{2})^2 + (y_i - y_k)^2)^2} \right]. \quad (9)$$

Здесь коэффициент D вычисляется как

$$D = \frac{G}{2\pi(1 - \nu)}, \quad (10)$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.

Показатель степени m для различных металлов и сплавов в уравнении (2) может изменяться от единицы до нескольких десятков [35]. В общем случае различают линейную ($m = 1$) и нелинейную ($m > 1$) зависимости, причем ряд эффектов в ультразвуковых полях напряжений возникает только при нелинейности, что ранее было показано для дрейфового движения дислокационных триполей [38, 39]. В рамках данной модели выбор m носит произвольный характер и влияет лишь количественно на скорость дислокаций, не изменяя качественных особенностей движения. Для обеспечения автоматической смены направления скорости при изменении знака касательного напряжения удобно использовать нечетные значения m . В расчетах принято минимальное нечетное значение $m = 3$. Численное решение уравнений (2) выполнялось методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Использованы следующие параметры для α -Fe: $B = 10^{-5}$ (м/с)/Па³, $b = 2.5 \text{ \AA}$, $G = 82$ ГПа, $\nu = 0.3$ [40]; мощность дисклинаций $\Omega = 1-2^\circ$ [41]; частота внешних напряжений $\omega/2\pi = 22$ кГц.

В качестве интегральной характеристики релаксации дислокационной структуры используется энергия упругого взаимодействия, вычисляемая по всем парным взаимодействиям между дислокациями, включая дислокации, составляющие дисклинационный квадруполь [42]. В работе используется относительное значение энергии взаимодействия, нормированное на энергию в начальной конфигурации, и поэтому изменяющееся в интервале от 0 до 1.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Изначально конфигурация случайно распределенных дислокаций находится в механически неравновесном состоянии, поэтому дислокации начинают движение сразу после начала моделирования. Для анализа влияния начальной конфигурации дислокаций на релаксацию при ультразвуковой обработке рассмотрены два случая: 1) предварительная самопроизвольная релаксация дислокационной структуры (в течение 0.5 с) с последующим воздействием ультразвука и 2) непосредственное ультразвуковое воздействие без предварительной релаксации. Моделирование показало, что в случае 1) энергия системы быстро снижается, а затем снижение замедляется, что свидетельствует о достижении системой метастабильного состояния. Последующая ультразвуковая обработка приводит к дальнейшему снижению энергии; затем снижение замедляется, и при дальнейшей обработке энергия практически не изменяется, что говорит о том, что в системе происходят только незначительные локальные дислокационные перестройки. В случае 2) также происходит быстрое снижение упругой энергии, после чего, как и в случае 1), энергия практически не изменяется, и начиная с момента действия циклических напряжений значения энергии в обоих случаях практически совпадают. Последний факт означает, что эффект, достигаемый за счет предварительной релаксации, воспроизводится значительно быстрее под действием ультразвука. Поэтому в дальнейшем все конфигурации рассматриваются без предварительной релаксации — сразу после генерации случайного распределения дислокаций в девяти зернах.

УЗО приводит к значительной перестройке случайного распределения дислокаций, характер которой зависит от амплитуды внешних приложенных знакопеременных напряжений. На рис. 2 показаны конфигурации дислокаций до и после ультразвукового воздействия. Под действием знакоперемен-

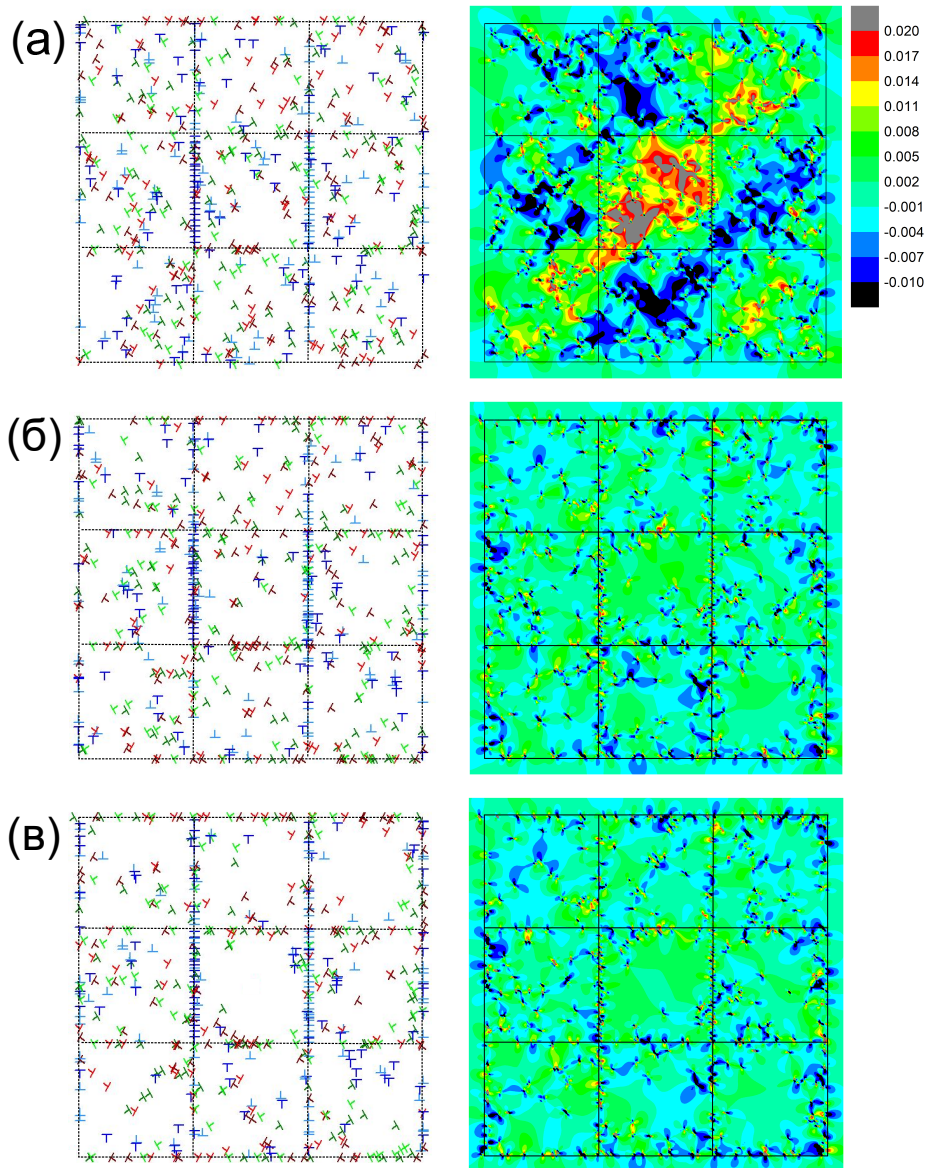


Рис. 2. Дислокационные конфигурации в модельном колончатом поликристалле: до обработки ультразвуком (а), после ультразвукового воздействия продолжительностью 0.5 с (б) и 1.0 с (в). Каждое зерно размером 150 нм содержит 60 краевых дислокаций, по 20 в каждой системе скольжения. Амплитуда ультразвуковых воздействий равна 100 МПа. Справа от каждой дислокационной конфигурации показана соответствующая ей карта сдвиговой компоненты поля напряжений σ_{xy} , выраженных в единицах Db , определяемых выражением (10). Границы зерен обозначены тонкими сплошными линиями

ных напряжений дислокации начинают смещаться к границам зерен, при этом направление движения определяется знаком вектора Бюргерса дислокации. Уже после приблизительно 1100 периодов колебаний значительная часть дислокаций поглощается границами (рис. 2 б). При малых ультразвуковых амплитудах внутри зерен сохраняется большое число дислокационных кластеров (диполи, триполи, мультиполи, фрагменты стенок дислокаций [38, 39]); при

высоких — их количество снижается и зерна становятся более свободными от дислокаций. Как видно на рис. 2 б, если плоскость скольжения входящей дислокации близка к плоскости дислокации, уже захваченной границей, то ее движение останавливается на некотором расстоянии от границы из-за отталкивающих напряжений, и поглощения не происходит. Поскольку внешние сдвиговые напряжения действуют вдоль оси x , вдоль которой фак-

тор Шмида максимален, движение дислокаций наиболее активно происходит в системе скольжения I, тогда как в системах II и III оно выражено слабее, что подтверждается сравнением числа дислокаций, захваченных горизонтальными и вертикальными границами. Внутри зерен наблюдаются неподвижные дислокационные диполи [38, 39], а также дислокационные замки, аналогичные узлам Ломера–Коттрелла [43–45], которые представляют собой устойчивые дислокационные соединения, возникающие в результате взаимодействия двух скользящих дислокаций, пересекающихся на разных плоскостях скольжения. В результате их реакции формируется несмещаемая дислокация, лежащая в другой кристаллографической плоскости, которая эффективно блокирует дальнейшее движение исходных дислокаций. Такие замки способствуют образованию дислокационной субструктуры и являются источниками внутренних напряжений в деформированных поликристаллах. Дальнейшая ультразвуковая обработка не вызывает существенной перестройки дислокационной структуры, однако способствует более эффективному очищению центрального зерна от дислокаций (см. рис. 2 в).

В правой половине рис. 2 представлена эволюция сдвиговой компоненты поля напряжений, соответствующая дислокационным конфигурациям, показанным в левой части рисунка. Исходное состояние (рис. 2 а) с неупорядоченным распределением решеточных дислокаций характеризуется высокими и сильно неоднородными далекодействующими напряжениями, что типично для ультрамелкозернистых и наноструктурированных материалов, полученных методами интенсивной пластической деформации [10]. Наибольшие напряжения сосредоточены в зерне 5 с двумя неравновесными границами, тогда как в зернах 2, 4, 6 и 8 наблюдаются области пониженных напряжений. Поля напряжений распространяются и за пределы моделируемой ячейки, что указывает на их далекодействующий характер. Под действием ультразвука происходит перестройка дислокационной структуры, в результате чего часть дислокаций поглощается границами, что приводит к более однородному сдвиговому напряжению внутри зерен, а средний уровень напряжений заметно снижается по сравнению с исходным состоянием (см. рис. 2 б и 2 в). При этом вблизи вертикальных границ центрального зерна 5 возникают локальные высокие напряжения короткодействующего характера. Таким образом, поглощение дислокаций границами зерен приводит к релаксации упругой энергии взаимодействия дефектов и устранению далекодействую-

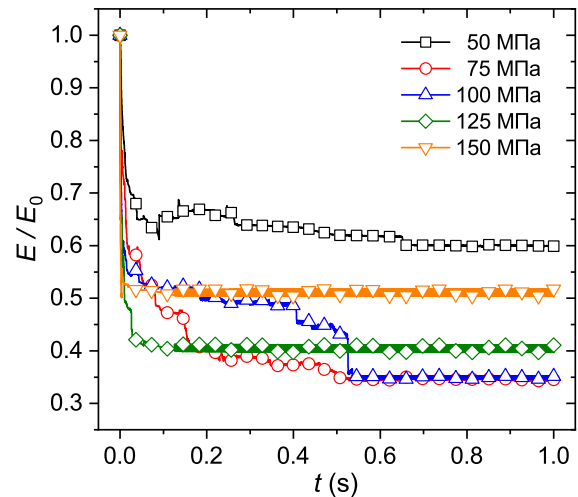


Рис. 3. Относительная (нормированная на начальное значение) энергия упругого взаимодействия как функция времени моделирования, рассчитанная для различных амплитуд ультразвуковых колебаний. Каждое зерно размером 150 нм содержит 60 краевых дислокаций, по 20 на каждой системе скольжения

ющих полей напряжений в моделируемом колончатом поликристалле.

Временная зависимость относительной упругой энергии одной и той же дислокационной конфигурации при пяти значениях амплитуды внешнего ультразвукового воздействия показана на рис. 3. Для всех амплитуд воздействие ультразвука приводит к снижению энергии упругого взаимодействия, что соответствует релаксации дислокационной структуры. Наиболее интенсивное уменьшение энергии наблюдается в начальный момент УЗО, после чего ее изменение становится существенно меньшим. При амплитуде 50 МПа имеет место значительная перестройка структуры, что хорошо видно на рис. 4 а. Энергия быстро уменьшается приблизительно на 35 % за первые 0.1 с ультразвукового воздействия, а далее — приблизительно на 5 % за оставшиеся 0.9 с. Увеличение амплитуды до 75 МПа обеспечивает более глубокую релаксацию, сопровождающуюся перераспределением дислокаций и дальнейшим уменьшением упругой энергии приблизительно до 35 % от начального значения (см. рис. 4 б). При более высокой амплитуде 100 МПа наблюдается еще более выраженное очищение центрального зерна (рис. 4 в). Однако в этом случае относительная упругая энергия остается несколько выше, чем при воздействии с амплитудой 75 МПа. Дальнейшее повышение амплитуды ультразвукового воздействия до 150 МПа не приводит к полной релакса-

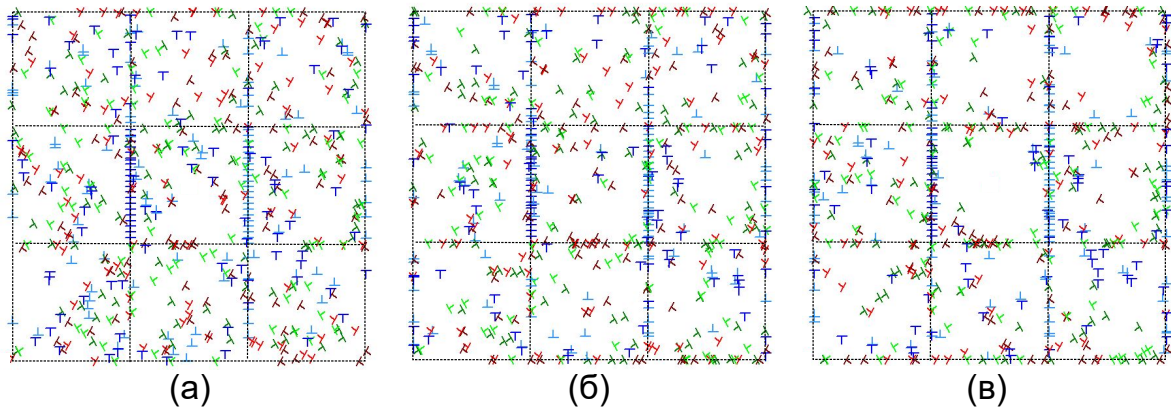


Рис. 4. Дислокационные конфигурации в колончатом поликристалле после ультразвуковой обработки при амплитудах 50 МПа (а), 75 МПа (б) и 100 МПа (в). Границы зерен обозначены тонкими сплошными линиями. Каждое зерно размером 150 нм содержит 60 краевых дислокаций, по 20 в каждой системе скольжения. В центральном зерне неравновесное состояние моделируется путем введения двух дислокационных стенок на вертикальных границах

ции дислокационной структуры, т. е. энергия упругого взаимодействия в момент времени 1 с оказывается выше, чем при воздействии с более низкими амплитудами 75 и 100 МПа. Таким образом, из сказанного выше можно заключить, что существует оптимальная амплитуда ультразвуковой обработки, которая в рассматриваемом случае находится в интервале между 75 и 100 МПа, когда достигается максимальный релаксирующий эффект, связанный с уменьшением числа дислокаций внутри зерен. При высоких амплитудах ультразвукового воздействия амплитуды дислокационных смещений существенно возрастают, что вызывает разрушение ранее сформированных дислокационных структур и образование новых, а также сопровождается заметным изменением уровня упругой энергии.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В настоящей работе рассмотрена модель поликристалла, состоящего из девяти зерен, окруженных эффективной средой, моделирующей остальные зерна макроскопического поликристалла. Две границы центрального зерна находятся в неравновесном состоянии из-за присутствия специально введенных в них дислокаций. Преимущество предложенной в настоящей работе модели по сравнению с ранее рассмотренными [33, 34] заключается в учете взаимодействия с дислокациями в соседних зернах. Несмотря на экранирование полей квадрупольных клиновидных дисклинаций в масштабах порядка размера зерна [36], их влияние на движение дислокаций в соседних зернах остается существенным. Как видно из

рис. 2, вблизи центрального зерна сохраняется высокий уровень дальнодействующих сдвиговых напряжений. Действие ультразвука вызывает направленное движение решеточных дислокаций, в результате чего дислокации противоположных знаков дрейфуют к различным границам зерна и частично компенсируют суммарный вектор Бюргера внесенных дислокаций. Это объясняет релаксационный эффект в неравновесных границах, вызванный УЗО.

Расчеты упругой энергии взаимодействия позволили выяснить, что процесс релаксации дефектной структуры поликристалла под действием ультразвука протекает в две стадии: быстрая — связанная с поглощением дислокаций границами зерен, и медленная — обусловленная незначительными перестройками и малым изменением энергии. Даже при максимальной амплитуде 125 МПа зерна не освобождаются полностью от дислокаций: остаются неподвижные дислокационные комплексы и фрагменты дислокационных стенок, аналогичные ранее наблюдавшимся в моделях одного зерна [30, 31, 33, 34, 38, 46]. Возможность релаксации определяется соотношением плотностей решеточных дислокаций и внесенных зернограницных дислокаций (мощностью клиновидных дисклинаций). Если плотность решеточных дислокаций низкая, то они полностью поглощаются границами, но не компенсируют внутренние напряжения; при высокой плотности решеточных дислокаций часть дислокаций остается в зерне и дальнейшая релаксация возможна только за счет образования субструктуры. В обоих описанных выше случаях реализуется лишь частичная релаксация.

Сравнение с экспериментальными данными осложнено отсутствием количественных данных о начальной структуре материала, а именно плотности решеточных дислокаций и мощности клиновых дисклинаций. Тем не менее качественное сравнение возможно. В работе [47] было установлено, что при амплитуде ультразвукового воздействия 60 МПа избыточная энергия границ зерен в ультрамелкозернистом никеле снижается приблизительно на 30%. Дальнейшее увеличение амплитуды не приводит к уменьшению избыточной энергии, что хорошо согласуется с результатом, полученным при моделировании в настоящей работе. Сравнение с результатами публикации [48] демонстрирует хорошее согласие по характеру и величине снижения плотности дислокаций и упругой энергии. При этом также наблюдается наличие оптимальной амплитуды, при которой релаксационный эффект максимален [30, 34]. Отметим, что проведенное выше сравнение носит приблизительный характер, поскольку размеры зерен в экспериментах значительно превосходят те, которые использованы в настоящей модели.

5. ВЫВОДЫ

С использованием дискретно-дислокационного подхода была изучена релаксация неупорядоченной системы дислокаций в колончатом поликристалле с неравновесными границами зерен под воздействием ультразвука. Неравновесное состояние двух границ моделировалось при помощи двух стенок краевых зернограницных дислокаций, эквивалентных квадруполю клиновых дисклинаций, расположенных в стыках центрального квадратного зерна. Зерна содержали три непараллельные системы скольжения с двумя различными факторами Шмида. Основные выводы можно сформулировать следующим образом.

Комбинация внешних ультразвуковых и внутренних напряжений вызывает значительную перестройку дислокаций во всех зернах, соседствующих с неравновесными границами. Дислокации смещаются к границам и поглощаются ими, что приводит к снижению внутренних напряжений и формированию более однородного поля напряжений внутри зерен. Релаксация дислокационной структуры проходит в два этапа: быстрый — дрейф дислокаций с их последующим поглощением границами, что сопровождается значительным уменьшением упругой энергии системы, и медленный, включающий незначительную дислокационную активность. Амплитуда ультразвука существенно влияет на сте-

пень релаксации. При малых амплитудах внутри зерен формируются дислокационные замки; при больших амплитудах они разрушаются, обеспечивая более полное очищение зерен от дислокаций. Максимальный эффект релаксации достигается при определенной (оптимальной) амплитуде ультразвука, в то время как отклонение амплитуды в меньшую или большую сторону приводит к неполной релаксации напряжений.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Института проблем сверхпластичности металлов РАН, финансируемого Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, регистрационный номер 124022900108-3.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ЛИТЕРАТУРА

1. O. V. Abramov, *High-Intensity Ultrasonics: Theory and Industrial Applications*, CRC Press, Boca Raton (1999).
2. A. V. Kulemin, *Ultrasound and Diffusion in Metals*, Metallurgia, Moscow (1978) [А. В. Кулемин, *Ультразвук и диффузия в металлах*, Metallurgia, Москва (1978)].
3. Y. Yao, Y. Pan, and S. Q. Liu, *Ultrason. Sonochem.* **62**, 104722 (2020).
4. V. O. Abramov, O. V. Abramov, F. Sommer, O. M. Gradov, and O. M. Smirnov, *Ultrasonics* **36**, 1013 (1998).
5. A. V. Panin, M. S. Kazachenok, A. I. Kozelskaya, R. R. Balokhonov, V. A. Romanova, O. B. Perevalova, and Y. I. Pochivalov, *Mater. Des.* **117**, 371 (2017).
6. J. Hu, T. Shimizu, T. Yoshino, T. Shiratori, and M. Yang, *Ultrasonics* **107**, 106107 (2020).
7. Q. Mao, N. Coutris, H. Rack, G. Fadel, and J. Gibert, *Ultrasonics* **102**, 106005 (2020).
8. Q. L. Zhang, L. Yu, X. F. Shang, and S. Zhao, *Ultrasonics* **107**, 106164 (2020).
9. F. Djavanroodi, H. Ahmadian, K. Koohkan, and R. Naseri, *Ultrasonics* **53**, 1089 (2013).
10. A. A. Nazarov and R. R. Mulyukov, *Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology*, CRC Press, Boca Raton (2003).

11. A. P. Zhilyaev and T. G. Langdon, *Prog. Mater. Sci.* **53**, 893 (2008).
12. R. Valiev, A. P. Zhilyaev, and T. G. Langdon, *Bulk Nanostructured Materials: Fundamentals and Applications*, Wiley, Hoboken (2013).
13. A. A. Mukhametgalina, A. A. Samigullina, S. N. Sergeev, A. P. Zhilyaev, A. A. Nazarov, Y. R. Zagidullina, N. Y. Parkhimovich, V. V. Rubanik, and Y. V. Tsarenko, *Letters on Materials* **7**, 85 (2017).
14. A. A. Nazarov, *Letters on Materials* **8**, 372 (2018).
15. A. A. Nazarova, R. R. Mulyukov, V. V. Rubanik, Y. V. Tsarenko, and A. A. Nazarov, *Phys. Met. Metallogr.* **110**, 5741 (2010).
16. R. N. Asfandiyarov, D. A. Aksenov, M. A. Shishkunova, and A. G. Raab, *Letters on Materials* **13**, 260 (2023).
17. R. N. Asfandiyarov, D. A. Aksenov, M. A. Shishkunova, A. G. Raab, and Y. R. Sementeeva, *Letters on Materials* **14**, 183 (2024).
18. E. R. Shayakhmetova, M. A. Murzinova, A. A. Mukhametgalina, and A. A. Nazarov, *Letters on Materials* **14**, 91 (2024).
19. A. A. Samigullina, A. A. Nazarov, R. R. Mulyukov, Y. V. Tsarenko, and V. V. Rubanik, *Rev. Adv. Mater. Sci.* **39**, 48 (2014).
20. G. A. Malygin, *Phys. Solid State* **42**, 72 (2000).
21. I. I. Novikov, *Theory of Heat Treatment of Metals*, Metallurgiya, Moscow (1986) [И. И. Новиков, *Теория термической обработки металлов*, Metallurgiya, Москва (1986)].
22. S. B. Biner and J. R. Morris, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **10**, 617 (2002).
23. G. V. Bushueva, G. M. Zinenkova, N. A. Tyapunina, V. T. Degtyarev, A. Y. Losev, and F. A. Plotnikov, *Crystallogr. Rep.* **53**, 474 (2008).
24. B. Bako and W. Hoffelner, *Phys. Rev. B* **76**, 214108 (2007).
25. S. Lefebvre, B. Devincere, and T. Hoc, *J. Mech. Phys. Solids* **55**, 788 (2007).
26. N. Ahmed and A. Hartmaier, *J. Mech. Phys. Solids* **58**, 2054 (2010).
27. S. M. H. Haghghat, G. Eggeler, and D. Raabe, *Acta Mater.* **61**, 3709 (2013).
28. R. T. Murzaev, M. A. Idrisova, and A. A. Nazarov, *Letters on Materials* **14**, 45 (2024).
29. R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, and A. A. Nazarov, *Phys. Met. Metallogr.* **118**, 621 (2017).
30. D. V. Bachurin, R. T. Murzaev, and A. A. Nazarov, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **25**, 085010 (2017).
31. R. J. Amodeo and N. M. Ghoniem, *Phys. Rev. B* **41**, 6968 (1990).
32. A. N. Gulluoglu and C. S. Hartley, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **1**, 1 (1992).
33. R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, and A. A. Nazarov, *Phys. Met. Metallogr.* **119**, 993 (2018).
34. D. V. Bachurin, R. T. Murzaev, and A. A. Nazarov, *Int. J. Solids Struct.* **156**, 1 (2019).
35. D. Hull and D. J. Bacon, *Introduction to Dislocations*, Butterworth-Heinemann, Oxford (2011).
36. A. E. Romanov and V. I. Vladimirov, *Disclinations in Crystalline Solids*, in *Dislocations in Crystals*, ed. by F. R. N. Nabarro, North Holland, Amsterdam (1992), p. 191.
37. J. P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations*, Wiley, New York (1982).
38. R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, and A. A. Nazarov, *Phys. Met. Metallogr.* **116**, 1057 (2015).
39. R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, and A. A. Nazarov, *Ultrasonics* **64**, 77 (2016).
40. H. E. Boyer and T. L. Gall, *Metals Handbook (Desk Edition)*, ASM, Metals Park (1984).
41. V. V. Rybin, *Large Plastic Deformations and Fracture of Metals*, Metallurgiya, Moscow (1986) [В. В. Рыбин, *Большие пластические деформации и разрушение металлов*, Metallurgiya, Москва (1986)].
42. R. Fournet and J. M. Salazar, *Phys. Rev. B* **53**, 6283 (1996).
43. W. M. Lomer, *Philos. Mag.* **42**, 1327 (1951).
44. A. H. Cottrell, *Philos. Mag.* **43**, 645 (1952).
45. J. H. Lee, T. B. Holland, A. K. Mukherjee, X. H. Zhang, and H. Y. Wang, *Sci. Rep.* **3**, 1061 (2013).
46. A. N. Gulluoglu, D. J. Srolovitz, R. Lesar, and P. S. Lomdahl, *Scr. Metall. Mater.* **23**, 1347 (1989).
47. A. A. Samigullina, A. A. Mukhametgalina, S. N. Sergeev, A. P. Zhilyaev, A. A. Nazarov, Y. R. Zagidullina, N. Y. Parkhimovich, V. V. Rubanik, and Y. V. Tsarenko, *Ultrasonics* **82**, 313 (2018).
48. M. Zohrevand, M. Aghaie-Khafri, F. Forouzan, and E. Vuorinen, *Mater. Sci. Eng. A* **815**, 141290 (2021).

Modeling of Ultrasonic Relaxation of Non-Equilibrium Grain Boundaries in a Deformed Polycrystal

*D. V. Bachurin, R. T. Murzaev**

Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences
450001, Ufa, Russia

*E-mail: murzaevrt@gmail.com

Received November 18, 2025

Revised March 27, 2026

Accepted April 17, 2026

Abstract

Using discrete dislocation modeling, we investigate the relaxation of a disordered dislocation system in a columnar polycrystal with non-equilibrium grain boundaries subjected to ultrasonic vibrations. The non-equilibrium state of the grain boundaries was modeled by walls of edge grain-boundary dislocations equivalent to a quadrupole of wedge disclinations located at the corners of the central grain. The combined action of ultrasonic and internal stresses induces an intensive rearrangement of the dislocation structure: dislocations move toward grain boundaries and are absorbed by them, which leads to a reduction in elastic energy and the formation of a more homogeneous stress field. The relaxation proceeds in two stages — a fast stage characterized by active drift and absorption of dislocations, and a slow stage accompanied by weak dislocation activity. It is established that the degree of relaxation strongly depends on the amplitude of ultrasonic excitation: at low amplitudes stable dislocation locks are formed, whereas at higher amplitudes they are destroyed, resulting in more complete grain cleaning. An optimal ultrasonic amplitude at which the maximum relaxation effect is achieved was determined.

Keywords: ultrasonic treatment, disordered dislocation structures, non-equilibrium grain boundaries, dislocation rearrangement, columnar polycrystal

Funding. This work was carried out within the framework of a state assignment of a state assignment from the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences, funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, registration number 124022900108-3.

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflict of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.