УДК 539.3

Н.С. Кондратьев, П.В. Трусов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Пермь, Россия

О МЕРЕ РАЗОРИЕНТАЦИИ СИСТЕМ СКОЛЬЖЕНИЯ СОСЕДНИХ КРИСТАЛЛИТОВ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ АГРЕГАТЕ

Рассматривается задача описания упрочнения скольжения дислокаций за счет границ кристаллитов в поликристаллическом агрегате. Излагается один из физически возможных механизмов взаимодействия дислокации с границей кристаллита. Поставлена вспомогательная задача, появляющаяся при описании упрочнения скольжения дислокаций за счет границ кристаллитов, – определение системы скольжения в соседнем кристаллите, по которой продолжится скольжение; обсуждаются физические аспекты взаимодействия дислокаций с границами. Предлагается критерий определения указанной системы скольжения, основанный на минимизации скорости приращения внутренней энергии соседних кристаллитов в текущий момент деформирования.

Ключевые слова: скольжение, упрочнение, физические теории пластичности, неупругое деформирование.

N.S. Kondratev, P.V. Trusov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

DISORIENTATION MEASURE OF NEIGHBORING CRYSTALLITES SLIP SYSTEMS IN A POLYCRYSTALLINE AGGREGATE

The paper consider the problem of describing hardening of slip dislocations through the boundaries of the crystallites in a polycrystalline aggregate. The possible physical mechanisms of interaction between dislocations and crystalline boundaries is accepted. Not individual dislocations, but slip in the neighboring crystallites (continuum approach), which results in the dislocation glide for some slip system are studied. The problem appeared to describe the hardening of slip dislocations through the boundaries of crystallites – the definition of the slip system in neighboring crystals, which will continue to slip is treated. In the general case such slip system in neighboring crystals, can’t be arbitrary, as a result of slip in the slip system neighboring crystallites, the boundary will be formed voids (overlay) and the torsion of the boundary, there is incompatibility of "surface deformations". Proposed criteria for the slip system, based on minimizing the rate of increment of internal energy of the neighboring (incompatibility of "surface deformations") crystallites at the moment of deformation.

Keywords: inelastic deformation, slipping, hardening, crystal plasticity.

Введение

При построении физических многоуровневых моделей неупругого деформирования, основанных на явном введении внутренних переменных [2, 5, 6], достаточно остро проявляется проблема описания упрочнения, поскольку именно оно в значительной мере определяет поведение материала на макроуровне при моделировании. Заметим, что основной модой неупругого деформирования в физических теориях пластичности не без основания считается скольжение краевых дислокаций [12]. В связи с этим под законами упрочнения вслед за авторами работы [11] будем понимать эволюционные уравнения для критических сдвиговых напряжений на системах скольжения (СС), определяющих их изменение в зависимости от некоторого набора параметров (в качестве которых могут выступать сдвиги, скорости сдвигов, температура, энергия дефекта упаковки и т.д.).

Следует отметить весьма разнообразные физические причины, обусловливающие упрочнение [14–16]. В данной работе будем учитывать только аспекты, связанные с взаимодействием дислокаций друг с другом и с границей кристаллита. Для описания упрочения, связанного с взаимодействием дислокаций с барьерами дислокационного типа, будем использовать стандартный вид закона упрочнения, используемого в большинстве работ по моделям типа Тейлора–Бишопа–Хилла [7–9]. Описание упрочнения за счет границ кристаллита является основной целью данной работы. Под границей будем понимать двумерную специфическую область, отделяющую различные однородные части кристалла. Отметим, что решеточные дислокации могут либо проходить через границу в соседний кристаллит, либо полностью поглощаться границей (в изломах границ и тройных стыках). При прохождении дислокации через границу образуется дислокация ориентационного несоответствия (ДОН), которая своими упругими полями препятствует движению дислокаций, что способствует увеличению критического напряжения СС.

Используя подход, предложенный в [1, 10, 11], будем считать рассматриваемые механизмы упрочнения независимыми, т.е. примем гипотезу об аддитивности скоростей критических напряжений сдвига, связанных с различной физической природой упрочнения.

Целью работы является построение и анализ закона упрочнения в части учета влияния границ кристаллитов (фаз, двойников) с использованием внутренних переменных модели. Предлагаемое соотношение должно быть приемлемо для многофазных материалов, и в его окончательную форму должны войти параметры мезо- и макромасштаба, имеющие явный физический и/или геометрический смысл (для упрощения последующей процедуры идентификации).

В поставленной задаче построения соотношения для описания упрочнения за счет границ кристаллитов выделим несколько вспомогательных этапов: первый – определение СС в соседнем кристаллите, по которой продолжится скольжение; при этом необходимо предложить некоторый критерий, согласно которому будет определяться указанная СС в соседнем кристаллите. Второй этап носит физический характер и заключается в определении ДОН, остающейся в границе при акте прохождения дислокации через границу, и оценке напряжений, действующих со стороны ДОН на плоскость скольжения краевых решеточных дислокаций. Следует заметить, что скорость возрастания этих напряжений и будет характеризовать скорость изменения критического напряжения сдвига.

Предлагаемая статья посвящена первому вспомогательному этапу решения поставленной задачи – определению СС в соседнем кристаллите, по которой продолжится скольжение (определение ДОН).

1. Прохождение дислокации через границу

Проанализируем процесс прохождения дислокации через границу. Рассмотрим фиксированную активную СС (с единичным вектором направления скольжения $\mathbf{b}^{(j)}$ и единичной нормалью $\mathbf{n}^{(j)}$) анализируемого кристаллита и все СС ($\mathbf{b}^{(l)}$, $\mathbf{n}^{(l)}$) соседнего кристаллита, разделенные плоским участком границы (фасеткой границы), определяемым нормалью $\mathbf{N}_k$.

В литературе [например, 3] рассматриваются механизмы прохождения решеточных дислокаций через различные типы границ (симметричные/несимметричные) для наиболее простых случаев. Предложенные механизмы основываются на рассмотрении ДОН, являющейся полной зернограничной дислокацией (ЗГД), и могут быть описаны в терминах перестроек частичных ЗГД, по векторам которых раскладываются векторы $\mathbf{b}^{(j)}$, $\mathbf{b}^{(l)}$ и $\Delta\mathbf{b}= \mathbf{b}^{(j)}-\mathbf{b}^{(l)}$. Вдали от границы данное разложение будет формальным и не имеет физического смысла; на границе разложение представляет описание ядра дислокации в виде суперпозиции ЗГД (трех), что позволяет анализировать перестройки ядра дислокации как перестройки соответствующих ЗГД. С помощью такого подхода можно показать, что для трансформации дислокации данного кристаллита с вектором Бюргерса $\mathbf{b}^{(j)}$ в дислокацию соседнего кристаллита с вектором Бюргерса $\mathbf{b}^{(l)}$ нет необходимости зарождать новую петлю полной дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b}^{(l)}$ – достаточно образовать дислокацию с разностным вектором Бюргерса $\Delta\mathbf{b}= \mathbf{b}^{(j)}–\mathbf{b}^{(l)}$, что является энергетически более выгодным.

Интересным представляется вывод, приведенный в работе [3]. Рассчитанный на единицу длины краевой решеточной дислокации дополнительный энергетический барьер $\Delta E_б/2l_k$, преодоление которого необходимо для ее перехода через границу, с хорошей точностью равен

$$\Delta E_б / 2l_k \approx \beta\Big(G\big(\Delta\mathbf{b}\big)^2 / 2\Big), \tag{1}$$

где β – «геометрический» параметр порядка единицы; G – модуль сдвига; l_k – длина краевой дислокации. Этот вывод отражает тот факт, что при переходе через границу решеточной дислокации необходимо преодолеть энергетический барьер, равный энергии образующейся ДОН $\Delta E_б$. Как отмечают авторы [3], данный вывод справедлив не только для симметричных границ наклона, но и для любых других границ.

Заметим, что фактором, лимитирующим переход решеточной дислокации из одного зерна в другое, может быть также силовое или термически активируемое зарождение во втором зерне петли решеточных дислокаций.

2. Мера взаимной разориентации СС соседних кристаллитов

Перейдем к первому вспомогательному этапу решения поставленной задачи – определению СС в соседнем кристаллите, по которой продолжится скольжение согласно указанному выше механизму. При этом необходимо сформулировать критерий для установления указанной СС в соседнем кристаллите. Математическим описанием этого критерия является мера взаимной разориентации СС соседних кристаллитов.

Заметим, что СС в соседнем кристаллите, по которой продолжится скольжение, не может быть произвольной, поскольку в результате сдвигов по СС соседних кристаллитов в общем случае на границе будут образовываться пустоты (наложения) и кручения границы, т.е. возникает несовместность «поверхностных деформаций». Отметим, что такая несовместность приводит к увеличению энергии общей границы двух кристаллитов. Полагая, что любая система стремится к минимуму своей внутренней энергии, будем считать, что в результате такого процесса несовместность «поверхностных деформаций» должна быть минимальна. Заметим, что такой континуальный критерий является (в терминах сдвигов кристаллитов) аналогом дискретного критерия (в терминах дислокаций), который может быть получен с помощью (1).

Мера взаимной разориентации может быть построена различными способами. Например, можно рассматривать отдельные дислокации (дискретный подход) и, учитывая их кристаллогеометрию, с использованием соотношения (1) записать соответствующие выражения для меры разориентации. Данный подход представляется не совсем удачным, поскольку:

– требует дополнительной физической гипотезы при построении меры разориентации, так как в соотношении (1) не учитывается вся полнота картины залегания СС (нормали плоскостей скольжения, фасетки границы);

– необходимо «ранжировать» промежуточные значения меры разориентации между максимальным и минимальным, которые соответствуют наилучшей и наихудшей взаимной ориентации СС соседних кристаллитов. Заметим, что учет кристаллогеометрических параметров (векторов Бюргерса, нормалей СС, фасеток границ) и ориентаций соседних кристаллитов делает такую задачу весьма трудоемкой;

– при введении дополнительных внутренних переменных модели, влияющих на прохождение дислокации через границу, например скоростей сдвигов СС, необходимо проводить комплексный физический анализ одновременно всех факторов, определяющих значение меры, что достаточно затруднительно.

Поэтому далее будем рассматривать не отдельные дислокации, а сдвиги в соседних кристаллитах (континуальный подход), к которым приводит скольжение дислокаций по тем или иным СС. В результате такой деформации на фасетке границы соседних кристаллитов будут образовываться пустоты (наложения) и кручения, т.е. появляется несовместность «поверхностных деформаций». Дальнейшее построение меры взаимной разориентации сформулируем как критерий определения конкретного индекса СС соседнего зерна, для которого скорость приращения внутренней энергии соседних кристаллитов в текущий момент деформирования будет минимальной. Данный критерий является аналогом энергетического барьера (1).

Примем, что направление движения дислокации совпадает с ее вектором Бюргерса, т.е. удвоим число СС кристаллита. Рассмотрению с точки зрения упрочнения за счет границы кристаллита подлежат только те j-е СС текущего кристаллита, дислокации которых подходят к фасетке границы с единичной внешней нормалью $\mathbf{N}_k$, т.е. выполняется условие

$$\mathbf{b}^{(j)}\cdot\mathbf{N}_k>0. \tag{2}$$

Кроме того, исключим l-е СС соседнего кристаллита, в которых сдвиг «противоположен» сдвигу данной j-й СС текущего кристаллита, т.е. системы соседнего кристаллита, для которых выполняется условие

$$\mathbf{n}^{(l)}\cdot\mathbf{n}^{(j)}\mathbf{b}^{(j)}\cdot\mathbf{b}^{(l)}=\mathbf{n}^{(j)}\mathbf{b}^{(j)}:\mathbf{b}^{(l)}\mathbf{n}^{(l)}<0. \tag{3}$$

Определим геометрический смысл компонент градиента скорости перемещений. Для этого рассмотрим движение частицы M с малой ε-окрестностью. Положение произвольной частицы M' из ε-окрестности относительно частицы M определяется в K_0 радиус-вектором $\mathrm{d}\mathbf{R}_0$, в K_t – радиус-вектором $\mathrm{d}\mathbf{r}=\mathrm{d}\mathbf{R}_0\cdot\overset{\circ}{\nabla}\mathbf{r}$. Скорость $\mathbf{v}^{\mathrm{r}}$ частицы M' относительно поступательно движущейся вместе с M системы отсчета есть $\mathbf{v}^r=\mathrm{d}\dot{\mathbf{r}}$. Тогда

$$\begin{gathered}\mathbf{v}^r=\mathrm{d}\dot{\mathbf{r}}=\mathrm{d}\mathbf{R}_0\cdot\overset{\circ}{\nabla}\mathbf{v}=\mathrm{d}\mathbf{R}_0\cdot\overset{\circ}{\nabla}\mathbf{r}\cdot\hat{\nabla}\mathbf{v}=\mathrm{d}\mathbf{r}\cdot\hat{\nabla}\mathbf{v},\\ \mathbf{v}^r=\mathrm{d}\mathbf{R}_0\cdot\overset{\circ}{\nabla}\mathbf{v}=\mathrm{d}\mathbf{r}\cdot\hat{\nabla}\mathbf{v}.\end{gathered} \tag{4}$$

Таким образом, градиенты скорости перемещений, определенные для произвольной частицы M в отсчетной K_0 или текущей конфигурации, характеризует относительные (по отношению к системе координат, поступательно перемещающейся вместе с M) скорости частиц из малой окрестности M в соответствующей конфигурации [4].

Установим геометрический смысл компонент градиента скорости перемещений $\mathbf{l} = \hat{\nabla}\mathbf{v}$. Для этого рассмотрим скалярное произведение скорости $\mathrm{d}\dot{\mathbf{r}}'$ частицы M' относительно поступательно движущейся вместе с M системы отсчета и материального бесконечно малого отрезка $\mathrm{d}\mathbf{r}''$:

$$\mathrm{d}\dot{\mathbf{r}}' \cdot \mathrm{d}\mathbf{r}'' . \tag{5}$$

Используя соотношения (4), перепишем (5) в следующем виде:

$$\mathrm{d}\dot{\mathbf{r}}' \cdot \mathrm{d}\mathbf{r}'' = \mathrm{d}\mathbf{r}' \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v} \cdot \mathrm{d}\mathbf{r}'' . \tag{6}$$

Введем в рассмотрение длины и единичные векторы вдоль материальных волокон рассматриваемых бесконечно малых векторов в K_t и найдем их скорости:

$$\begin{aligned} &\mathrm{d}\mathbf{r}' = \mathrm{d}\hat{s}'\hat{\mathbf{q}}', && \mathrm{d}\mathbf{r}'' = \mathrm{d}\hat{s}''\hat{\mathbf{q}}'', \\ &\mathrm{d}\dot{\mathbf{r}}' = \mathrm{d}\dot{\hat{s}}'\hat{\mathbf{q}}' + \mathrm{d}\hat{s}'\dot{\hat{\mathbf{q}}}', && \mathrm{d}\dot{\mathbf{r}}'' = \mathrm{d}\dot{\hat{s}}''\hat{\mathbf{q}}'' + \mathrm{d}\hat{s}''\dot{\hat{\mathbf{q}}}''. \end{aligned} \tag{7}$$

Далее, представим скалярное произведение (6), используя (7) в виде

$$\mathrm{d}\dot{\hat{s}}'\,\mathrm{d}\hat{s}''\hat{\mathbf{q}}' \cdot \hat{\mathbf{q}}'' + \mathrm{d}\hat{s}'\,\mathrm{d}\hat{s}''\dot{\hat{\mathbf{q}}}' \cdot \hat{\mathbf{q}}'' = \mathrm{d}\hat{s}'\,\mathrm{d}\hat{s}''\hat{\mathbf{q}}' \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{q}}'' , \tag{8}$$

или

$$\frac{\mathrm{d}\dot{\hat{s}}'}{\mathrm{d}\hat{s}''}\hat{\mathbf{q}}' \cdot \hat{\mathbf{q}}'' + \dot{\hat{\mathbf{q}}}' \cdot \hat{\mathbf{q}}'' = \hat{\mathbf{q}}' \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{q}}'' . \tag{9}$$

Будем использовать текущий лагранжев подход: в качестве системы координат (СК) в текущей конфигурации K_t выберем ортонормированный материальный базис $\mathbf{k}_i$. Направим материальные волокна вдоль векторов $\mathbf{k}_i$ и перепишем соотношение (9):

$$\frac{\mathrm{d}\dot{\hat{s}}_i'}{\mathrm{d}\hat{s}_i'}\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_j + \dot{\mathbf{k}}_i \cdot \mathbf{k}_j = l_{ij}. \tag{10}$$

Заметим, что первая составляющая соотношения (10) описывает изменение длины материального вектора, а вторая – изменение его направления. Скорость изменения направления конца единичного вектора $\mathbf{k}_i$ можно записать следующим образом:

$$\dot{\mathbf{k}}_i = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{k}_i , \tag{11}$$

где $\mathbf{\Omega}$ – антисимметричный тензор, описывающий изменение ориентации $\mathbf{k}_i$, которому в соответствие можно поставить ассоциированный вектор $\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\epsilon} : \mathbf{\Omega}$, где $\boldsymbol{\epsilon}$ – тензор Леви-Чивиты 3-го ранга. Тогда (11) запишется в виде

$$\dot{\mathbf{k}}_i = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{k}_i = \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k}_i = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{k}_i . \tag{12}$$

Разложим вектор $\boldsymbol{\omega}$ вдоль материальных волокон ($\mathbf{k}_i$,$\mathbf{k}_j$,$\mathbf{k}_l$) (правая тройка векторов) и запишем (12) в виде

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{k}}_i &= \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{k}_i = \left(\boldsymbol{\omega}_i + \boldsymbol{\omega}_j + \boldsymbol{\omega}_l\right) \times \mathbf{k}_i = \left(\omega_i \mathbf{k}_i + \omega_j \mathbf{k}_j + \omega_l \mathbf{k}_l\right) \times \mathbf{k}_i = \\ &= \omega_i \mathbf{k}_i \times \mathbf{k}_i + \omega_j \mathbf{k}_j \times \mathbf{k}_i + \omega_l \mathbf{k}_l \times \mathbf{k}_i = -\omega_j \mathbf{k}_l + \omega_l \mathbf{k}_j , \end{aligned} \tag{13}$$

где $\omega_i, \omega_j, \omega_l$ – компоненты вектора $\boldsymbol{\omega}$ в базисе ($\mathbf{k}_i$, $\mathbf{k}_j$, $\mathbf{k}_l$).

Для определения геометрического смысла диагональных компонент выберем материальные отрезки совпадающими, $i = j$, тогда из (10) получим

$$\frac{\mathrm{d}\,\dot{\hat{s}}'_i}{\mathrm{d}\,\hat{s}'_i} + \dot{\mathbf{k}}_i \cdot \mathbf{k}_i = l_{ii}. \tag{14}$$

Второе слагаемое с помощью (13) может быть представлено в виде

$$\dot{\mathbf{k}}_i \cdot \mathbf{k}_i = \left(-\omega_j \mathbf{k}_l + \omega_l \mathbf{k}_j\right) \mathbf{k}_i = -\omega_j \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{k}_i + \omega_l \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{k}_i = 0.$$

Тогда в (14) останется только первое слагаемое, а само соотношение (14) преобразуется к виду

$$\frac{\mathrm{d}\,\dot{\hat{s}}'_i}{\mathrm{d}\,\hat{s}'_i} = l_{ii} . \tag{15}$$

Приходим к следующему геометрическому смыслу диагональных компонент градиента скорости перемещений в декартовой ортогональной системе координат: диагональные l_{ii} компоненты тензора $\mathbf{l}$ характеризуют отношение скорости изменения длины материального отрезка, направленного вдоль $\mathbf{k}_i$ в K_t к длине этого отрезка, направленного вдоль $\mathbf{k}_i$ в K_t (относительная скорость удлинения материальных отрезков, направленных вдоль $\mathbf{k}_i$ в K_t). Первое слагаемое (20) можно записать следующим образом: $\left(\ln\left(\mathrm{d}\,\hat{s}'\right)\right)^{\cdot}=\dfrac{\mathrm{d}\,\dot{\hat{s}}_i'}{\mathrm{d}\,\hat{s}_i'}$ – скорость изменения логарифма длины материального отрезка, направленного вдоль $\mathbf{k}_i$.

Установим смысл недиагональных компонент. Для этого рассмотрим ортогональные векторы $\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_j$. Из соотношения (10) получаем

$$\dot{\mathbf{k}}_i\cdot\mathbf{k}_j=l_{ij}\,. \qquad (16)$$

Запишем левую часть (16), используя (13):

$$\dot{\mathbf{k}}_i\cdot\mathbf{k}_j=\left(-\omega_j\mathbf{k}_l+\omega_l\mathbf{k}_j\right)\mathbf{k}_j=-\omega_j\mathbf{k}_l\cdot\mathbf{k}_j+\omega_l\mathbf{k}_j\cdot\mathbf{k}_j=\omega_l.$$

Тогда получим

$$\omega_l=l_{ij}. \qquad (17)$$

Приходим к следующему геометрическому смыслу недиагональных компонент градиента скорости перемещений l_{ij} тензора $\mathbf{l}$, которые характеризуют скорость вращения единичного вектора, направленного вдоль материального волокна $\mathbf{k}_i$, вокруг материального волокна $\mathbf{k}_l$.

Введем базис, связанный с фасеткой границы, и рассмотрим несовместность «поверхностных деформаций» в этом базисе. Определим декартов ортогональный базис следующим образом: первый базисный вектор определяется внешней нормалью фасетки границы, $\mathbf{N}=\mathbf{N}_k$, второй $\mathbf{L}$ направим вдоль линии пересечения плоскости фасетки границы $\mathbf{N}_k$ и рассматриваемой плоскости скольжения дислокации текущего кристаллита $\mathbf{n}^j$. Третий вектор $\mathbf{B}$ расположен вдоль линии пересечения плоскости границы и плоскости, построенной на векторах $\mathbf{N}$ и $\mathbf{n}^j$:

$$\mathbf{B}=\mathbf{N}\times\mathbf{L}.$$

Необходимо отметим, что базисная тройка векторов ($\mathbf{B}$, $\mathbf{N}$, $\mathbf{L}$) является правой и векторы $\mathbf{L}$ и $\mathbf{B}$ лежат в плоскости границы.

Напомним, что рассматриваются фиксированная активная СС данного кристаллита (с единичным вектором направления скольжения $\mathbf{b}^{(j)}$ и единичной нормалью $\mathbf{n}^{(j)}$) и все СС соседнего ($\mathbf{b}^{(l)}$, $\mathbf{n}^{(l)}$), разделенные плоским участком границы (фасеткой границы), определяемым нормалью $\mathbf{N}_k$. Для данной j-й СС текущего кристаллита и l-й СС соседнего кристаллита можно определить пластические градиенты скоростей перемещений сдвига $\mathbf{l}^{in}_{(j)}$ и $\mathbf{l}^{in}_{(l)}$ в актуальной конфигурации K_t, используя (11). Геометрический смысл последних аналогичен смыслу, установленному выше. Поскольку необходимо проанализировать скорость приращения внутренней энергии соседних кристаллитов в текущий момент деформирования, перейдем к компонентам тензоров $\mathbf{l}^{in}_{(j)}$ и $\mathbf{l}^{in}_{(l)}$ в базисе (**B**, **N**, **L**). Для определения меры взаимной разориентации введем тензор, характеризующий несовместность пластических деформаций соседних кристаллитов текущей j-й СС текущего кристаллита и соседней l-й СС

$$\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)} = \mathbf{l}^{in}_{(j)} - \mathbf{l}^{in}_{(l)} = \left(\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{pq} - \left[\mathbf{l}^{in}_{(l)}\right]_{pq}\right)\mathbf{k}^p\mathbf{k}^q = \left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(l,j)}\right]_{pq}\mathbf{k}^p\mathbf{k}^q, \qquad (18)$$

где $\mathbf{k}^1$=**B**, $\mathbf{k}^2$=**N**, $\mathbf{k}^3$=**L**. Поскольку $\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}$ является тензором, то обладает свойством инвариантности относительно СК и базиса. Компоненты этого тензора будут иметь установленный ранее смысл в любой ортонормированной системе координат, однако для решения поставленной задачи – определения индекса СС соседнего кристаллита, для которого скорость приращения внутренней энергии соседних кристаллитов в текущий момент деформирования будет минимальной, необходимо знать компоненты этого тензора в СК (**B**, **N**, **L**).

Отдельно отметим, что речь идет о системах из двух материальных волокон, направленных вдоль одних и тех же векторов базиса (**B**, **N**, **L**), но в разных кристаллитах. В случае равенства скорости изменения углов между системой материальных векторов и их длин соседних кристаллитов можно говорить о совместности «поверхности деформаций» между ними, в противном случае – нет. Используя геометрический смысл компонент градиента скорости перемещений, полученный ранее, придадим смысл компонентам тензора $\Delta\mathbf{l}^{in}_{(l,j)}$ в СК (**B**, **N**, **L**). Диагональные компоненты тензора $\Delta\mathbf{l}^{in}_{(l,j)}$ характеризуют «несовместность» скорости удлинения материального отрезка, направленного вдоль волокна $\mathbf{k}_i$, определяемой разностью относительных скоростей удлинения этого материального отрезка в результате пластических сдвигов соседних кристаллитов. Поэтому диагональные компоненты определяют пустоты и наложения на границе или ее изгиб. Недиагональные компоненты $\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(l,j)}\right]_{pq}$ тензора $\Delta\mathbf{l}^{in}_{(l,j)}$ характеризуют «несовместность» скорости вращения материального волокна $\mathbf{k}_p$ вокруг волокна $\mathbf{k}_l$, определяемой разностью скоростей вращения этого волокна вокруг $\mathbf{k}_l$ в результате пластических сдвигов соседних кристаллитов (компоненты кручения границы). Заметим, что недиагональные компоненты $\Delta\mathbf{l}^{in}_{(l,j)}$ можно представлять сдвигами в базисе (**B**, **N**, **L**). Например, если в текущем кристаллите данной j-й СС происходит сдвиг в направлении **B** по плоскости **N** со скоростью $\dot{\gamma}^{(j)}$, а в соседнем кристаллите происходит сдвиг в направлении **B** по плоскости **N** со скоростью $\dot{\gamma}^{(l)}$, тогда тензор $\Delta\mathbf{l}'^{in}_{(l,j)}$ будет иметь одну компоненту, отличную от нуля $\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{NB} = \dot{\gamma}^{(j)} - \dot{\gamma}^{(l)}$ (в случае совпадения скоростей сдвигов соседних кристаллитов кручений границы нет). Все компоненты тензора $\Delta\mathbf{l}^{in}_{(l,j)}$ в СК (**B**, **N**, **L**) будут описывать изменение скорости приращения внутренней энергии соседних кристаллитов. Мера взаимной разориентации, характеризующая минимальность указанной энергии, для текущего i-го кристаллита данной j-й СС, взаимодействующей с m-м кристаллитом k-ю фасетку границы, определяется следующим образом:

$$\begin{aligned}\xi^{(i,m)}_{(j,k)} = \min_l\left\{\xi_{(j,l)}, l=\overline{1,K}\right\} = \min_l\Big\{&\left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{BB}\right| + \left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{BN}\right| + \\ &+\left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{BL}\right| + \left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{NB}\right| + \left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{NN}\right| + \left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{NL}\right| + \\ &+\left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{LB}\right| + \left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{LN}\right| + \left|\left[\Delta\mathbf{l}^{in}_{(j,l)}\right]_{LL}\right|\Big\},\end{aligned} \qquad (19)$$

где l – номера СС в соседнем m-м кристаллите.

Заметим, что полученную меру необходимо нормировать таким образом, что $\xi^{(i,m)}_{(j,k)}$ находился в отрезке [0, 1]. Нулевое значение меры разориентации соответствует совпадению СС соседних кристаллитов и их скоростей сдвигов и не зависит от ориентации фасетки границы, что следует напрямую из соотношения (19). Для определения нормы меры разориентации учтем, что согласно (3) не учитываются «противоположные» сдвиги, поэтому наихудшим вариантом будет являться условие непроницаемости через фасетку границы кристаллитов («жесткая стенка»):

$$\begin{aligned}\alpha^{(j)} = \Big\{&\left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{BB}\right| + \left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{BN}\right| + \left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{BL}\right| + \left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{NB}\right| + \left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{NN}\right| + \left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{NL}\right| + \\ &+\left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{LB}\right| + \left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{LN}\right| + \left|\left[\mathbf{l}^{in}_{(j)}\right]_{LL}\right|\Big\}^{-1}.\end{aligned} \qquad (20)$$

Мера разориентации (19) с условием нормировки (20) примет вид

$$\xi_{(j,k)}^{(i,m)} = \alpha^{(j)} \min_l \left\{ \xi_{(j,l)}, l = \overline{1,K} \right\} = \alpha^{(j)} \min_l \left\{ \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{BB} \right| + \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{BN} \right| + \right.$$
$$+ \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{BL} \right| + \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{NB} \right| + \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{NN} \right| + \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{NL} \right| + \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{LB} \right| + \quad (21)$$
$$\left. + \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{LN} \right| + \left| \left[\Delta \mathbf{l}_{(j,l)}^{in} \right]_{LL} \right| \right\}.$$

Заключение

В работе рассматривается возможный механизм взаимодействия дислокации с границами кристаллитов. Решается вспомогательная задача описания упрочнения скольжения дислокаций за счет границ кристаллитов – определение СС в соседнем кристаллите, по которой продолжится скольжение. Предложен критерий определения СС, основанный на минимизации скорости приращения внутренней энергии соседних кристаллитов в текущий момент деформирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 10-08-96010-р_урал_а, 10-08-00156_а, 12-08-01052-а).

Библиографический список

1. Волегов П.С., Никитюк А.С., Янц А.Ю. Геометрия поверхности текучести и законы упрочнения в физических теориях пластичности// Вестник ПГТУ. Математическое моделирование систем и процессов. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2009. – Т. 17. – С. 25–33.

2. Нечаева Е.С., Трусов П.В. Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации модели мезоуровня // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011. – Т. 4, № 1. – С. 74–89.

3. Орлов А.Н., Перезвенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. – М.: Металлургия, 1980. – 156 с.

4. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.

5. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры / П.В. Трусов, В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12, № 3. – С. 61–71.

6. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. –Т. 15, № 3. – С. 327–344.

7. Трусов П.В., Волегов П.С. Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12, № 5. – С. 65–72.

8. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 1: Жесткопластические и упругопластические модели // Вестник ПНИПУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2011. – № 1. – С. 5–45.

9. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 2: Вязкопластические и упруговязкопластические модели // Вестник ПНИПУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2011. – № 2. – С. 101–131.

10. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 3: Теории упрочнения, градиентные теории // Вестник ПНИПУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2011. – № 3. – С. 146–197.

11. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Описание внутризеренного и зернограничного упрочнения моно- и поликристаллов // Научно-технические ведомости С.-Петерб. гос. политехн. ун-та. Физико-математические науки. – СПб., 2010. – № 98. – С. 110–119.

12. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. национ. исслед. политехн. ун-та, 2011. – 419 с.

13. Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Волегов П.С. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 33–56.

14. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.

15. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.

16. Trusov P.V., Volegov P.S. Internal variable constitutive relations and their application to description of hardening in single crystals // Physical Mesomechanics. – 2010. – Vol. 13, Is. 3–4. – Pp. 152–158.

References

1. Volegov P.S., Nikitjuk A.S., Janc A.Ju. Geometrija poverhnosti teku-chesti i zakony uprochnenija v fizicheskih teorijah plastichnosti [Geometry of the surface of yield and laws hardening in crystal plasticity]. *Vestnik Permskogo gosudarstvennogo tehnicheskogo universiteta. Matematicheskoe modelirovanie sistem i processov*, 2009. Vol. 17, pp. 25–33.

2. Nechaeva E.S., Trusov P.V. Konstitutivnaja model' chastichno kristallicheskogo polimernogo materiala. Algoritm realizacii modeli mezourovnja [Constitutive model of semicrystalline polymer material implementation algorithm for macro level represantative volume]. *Computational Continuum Mechanics*, 2011, Vol 4, no. 1, pp. 74–89.

3. Orlov A.N., Perezvencev V.N., Rybin V.V. Granicy zeren v metallah [Grain boundaries in metals]. Moscow: Metallurgija, 1980, pp. 156.

4. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Niashin Y.I. Bolshie uprugoplasticheskie deformacii: teoria, algoritmi, prilojenia [Large elastoplastic deformation: theory, algorithms, and applications]. Moscow: Nauka, 1986, pp. 232.

5. Trusov P.V., Ashihmin V.N., Volegov P.S., Shvejkin A.I. Opredeljajuwie sootnoshenija i ih primenenie dlja opisanija jevoljucii mikrostruktury [Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution]. *Physical Mesomechanics*, 2009, Vol. 12, no. 3, pp. 61–71.

6. Trusov P.V., Ashihmin V.N., Shvejkin A.I. Dvuhurovnevaja model' uprugoplasticheskogo deformirovanija polikristallicheskih materia-lov [Two-level model of elastic-plastic deformation of polycrystalline materials]. *Mehanika kompozicionnyh materialov i konstrukcij*, 2009, Vol. 15, no. 3, pp. 327–344.

7. Trusov P.V., Volegov P.S. Opredeljajuwie sootnoshenija s vnutrennimi peremennymi i ih primenenie dlja opisanija uprochnenija v monokristallah [Internal variable constitutive models and their application to description of hardening in single crystals]. *Physical Mesomechanics*, 2009, Vol. 12, no. 5, pp. 65–72.

8. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskie teorii plastichnosti: teorija i prilozhenija k opisaniju neuprugogo deformirovanija materialov [Crystal plasticity: theory and applications to the description of inelastic deformation

of materials. Part 1: Rigid plastic and elastoplastic models]. *Vestnik Permskogo nacional'nogo issledovatel'skogo politehnicheskogo univer-siteta. Mehanika*, 2011, Vol. 1, pp. 5–45.

9. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskie teorii plastichnosti: teorija i prilozhenija k opisaniju neuprugogo deformirovanija materialov [Crystal plasticity: theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 2: Viscoplastic and elastoviscoplastic models]. *Vestnik Permskogo nacional'nogo issledovatel'skogo politehnicheskogo universiteta. Mehanika*, 2011, Vol. 2, pp. 101–131.

10. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskie teorii plastichnosti: teorija i prilozhenija k opisaniju neuprugogo deformirovanija materialov [Crystal plasticity: theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 3: Viscoplastic Model and elastoviscoplastic]. *Vestnik Permskogo nacional'nogo issledovatel'skogo politehnicheskogo universiteta. Mehanika*, 2011, Vol. 3, pp. 146–197.

11. Trusov P.V., Volegov P.S., Yanz A.Yu. Opisanie vnutrizerennogo i zernogranichnogo uprochnenija mono- i polikristallov [Description of intragrain and grain boundary hardening of mono-and polycrystals]. *Nauchno-tehnicheskie vedomosti Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo politehnicheskogo universiteta. Fiziko-matematicheskie nauki*, 2010, no. 98, pp. 110–119.

12. Trusov P.V., Shvejkin A.I. Teoria plastichnosti [Crystal plasticity] Perm: Izd-vo Perm. gos. theh. un-ta, 2011, 419 p.

13. Trusov P.V., Shvejkin A.I., Nechaeva E.S., Volegov P.S. Mnogourovnevye modeli neuprugogo deformirovanija materialov i ih primenenie dlja opisanija jevoljucii vnutrennej struktury [Multilevel model of inelastic deformation of materials and their application for description of internal structure evolution]. *Physical Mesomechanics*, 2012, Vol. 15, no. 1. pp. 33–56.

14. Hirt D., Lote I. Teorija dislokacij [Theory of Dislocations]. Moscow: Atomizdat, 1972, 600 p.

15. Honikomb R. Plasticheskaja deformacija metallov [Plastic deformation of metals]. Moscow: Mir, 1972, 408 p.

16. Trusov P.V., Volegov P.S. Internal variable constitutive relations and their application to description of hardening in single crystals. *Physical Mesomechanics*, Vol. 13, Is. 3–4, pp. 152–158.

Об авторах

Кондратьев Никита Сергеевич (Пермь, Россия) – аспирант кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: KondratevNS@gmail.com).

Трусов Петр Валентинович (Пермь, Россия) – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru).

About the authors

Kondratev Nikita Sergeevich (Perm, Russian Federation) – Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm, Perm National Research Polytechnic University (614990, 29, Komsomolsky prospect, Perm, Russian Federation, e-mail: KondratevNS@gmail.com).

Trusov Peter Valentinovich (Perm, Russian Federation) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm, Perm National Research Polytechnic University (614990, 29, Komsomolsky prospect, Perm, Russian Federation, e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru).

Получено 15.05.2012