

Н.С. Кондратьев

Пермский национальный исследовательский политехнический университет

МОДЕЛЬ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ОЦК-ПОЛИКРИСТАЛЛОВ С УЧЕТОМ ДВОЙНИКОВОЙ МОДЫ ДЕФОРМИРОВАНИЯ

Рассматривается двухуровневая физическая модель упруговязкопластического деформирования поликристаллических тел. Наряду с основным механизмом неупругого деформирования (скольжение краевых дислокаций) рассматривается двойникование. Дислокационный механизм двойникования позволяет рассматривать его подобно скольжению дислокаций. Предлагаемая модель позволяет описывать технологические процессы поликристаллических тел, таких как осадка, стесненная осадка, чистый сдвиг и т.д.

Ключевые слова: скольжение, двойникование, упруговязкопластичность, неупругое деформирование, ОЦК-кристаллы.

Введение

В настоящее время актуальным является построение моделей неупругого деформирования моно- и поликристаллов, основанных на физических теориях пластичности; в основе формулировок определяющих соотношений, гипотез и основных положений которых лежит рассмотрение в явной форме механизмов деформирования на мезо- и микромасштабах. Для описания структуры и механизмов деформирования на мезо- и микромасштабах используются параметры, называемые внутренними переменными, которые характеризуют эволюционирующую микроструктуру материала и содержат информацию об истории воздействий на материал [1].

Для описания деформирования представительного объема (ПО) поликристалла обычно применяют прямые или статистические модели, основанные на физических теориях пластичности. В прямых моделях, как правило, используют метод конечных элементов, который позволяет более точно находить распределение напряжений и деформаций, но требует больших вычислительных затрат. Наиболее часто используемыми являются статистические модели как менее затратные по вычислительным ресурсам, хотя несколько менее точные.

В моделях, основанных на физических теориях, обычно рассматривается один механизм деформирования – внутризеренное скольжение краевых дислокаций. Несмотря на то, что двойникование не является преобладающим видом неупругого деформирования в металлах с большим числом систем скольжения (ГЦК- и ОЦК-кристаллы), экспериментально установлено, что деформирование двойникованием происходит также в ОЦК-, (ГЦК)-металлах при низких гомологических температурах и в материалах с низкой энергией дефекта упаковки. Двойниковые прослойки служат препятствиями для движения дислокаций и приводят к существенному изменению отклика материала.

1. Кинематика деформирования

Для описания кинематики деформирования вводятся четыре конфигурации: отсчетная K_0 , две промежуточные K_t^* , K_t^{**} и текущая (актуальная) K_t . Градиент места \mathbf{f}_s^{in} описывает неупругое деформирование материала скольжением дислокаций и переводит отсчетную конфигурацию K_0 в промежуточную K_t^* . Градиент места \mathbf{f}_{tw}^{in} описывает неупругое деформирование двойникованием, переводит промежуточную конфигурацию K_t^* в промежуточную K_t^{**} . Градиент места \mathbf{f}^e отражает упругое деформирование и переводит промежуточную конфигурацию K_t^{**} в текущую K_t . Используется мультипликативное разложение транспонированного градиента места («градиента деформации») $\mathbf{f} = \overset{об}{\nabla} \mathbf{r}^T$ на упругую \mathbf{f}^e и неупругие \mathbf{f}_s^{in} , \mathbf{f}_{tw}^{in} составляющие:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in} \cdot \mathbf{f}_s^{in}. \quad (1)$$

Определение градиента скорости перемещения и разложение (1) позволяют показать справедливость следующего разложения:

$$\begin{aligned} \mathbf{l} &= \dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{e-1} + \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}_{tw}^{in} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1} + \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in} \cdot \dot{\mathbf{f}}_s^{in} \cdot \mathbf{f}_s^{in-1} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1} = \\ &= \mathbf{l}^e + \mathbf{l}_{tw}^{in} + \mathbf{l}_s^{in}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\mathbf{f}^e = \dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{e-1}, \mathbf{l}_{tw}^{in} = \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}_{tw}^{in} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1}, \mathbf{l}_s^{in} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in} \cdot \dot{\mathbf{f}}_s^{in} \cdot \mathbf{f}_s^{in-1} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1}.$$

Введем обозначения

$$\mathbf{I}_{tw}^{**in} = \dot{\mathbf{f}}_{tw}^{in} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in-1}, \mathbf{I}_s^{**in} = \mathbf{f}_{tw}^{in} \cdot \dot{\mathbf{f}}_s^{in} \cdot \mathbf{f}_s^{in-1} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in-1}.$$

Тогда соотношение (1) запишется следующим образом:

$$\mathbf{I} = \mathbf{I}^e + \mathbf{f}^e \left(\mathbf{I}_{lw}^{**in} + \mathbf{I}_s^{**in} \right) \mathbf{f}^{e-1}.$$

2. Механизмы неупругого деформирования кристаллита

Основным механизмом неупругого деформирования монокристаллов является внутризеренное скольжение краевых дислокаций по известным системам скольжения (СС). Скольжение в ОЦК-кристаллах всегда происходит в наиболее плотных упакованных направлениях $\langle 111 \rangle$, а плоскостями скольжения могут быть плоскости $\{110\}$, $\{112\}$, $\{123\}$.

Для описания каждой системы скольжения вводится ориентационный тензор

$$\mathbf{m}_0^k = \frac{1}{2} \left(\mathbf{b}_0^k \mathbf{n}_0^k + \mathbf{n}_0^k \mathbf{b}_0^k \right), \quad k = 1, \dots, 48, \quad (3)$$

где $\mathbf{b}_0^k, \mathbf{n}_0^k$ – единичные направления скольжения и нормали k -й системы скольжения в отсчетной конфигурации.

В физических теориях не рассматривается движение отдельных дислокаций, их распределение предполагается однородным по элементу мезоуровня (зерну, субзерну), что дает возможность рассмотрения неупругой составляющей тензора деформации скорости в виде

$$\mathbf{d}^{in} = \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k \mathbf{M}^k, \quad (4)$$

где $\dot{\gamma}_s^k$ – скорость сдвига по k -й системе скольжения.

Условием активации k -й системы скольжения является достижение касательного напряжения в ней некоторого критического напряжения τ_{cs}^k ; данное условие называется законом Шмида:

$$\tau_{cs}^k = \mathbf{M}^k : \boldsymbol{\sigma}, \quad (5)$$

$\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши (однородный по рассматриваемому зерну).

Отметим, что двойникование может не вносить большой вклад в неупругую деформацию, но играет весьма важную роль в процессе скольжения краевых дислокаций – основного механизма неупругого деформирования. Процесс двойникования будем рассматривать аналогично скольжению краевых дислокаций. Используя две конфигурации зерна: отсчетную конфигурацию (монокристалл находится в недеформированном состоянии) и актуальную (в монокристалле появляются несколько двойниковых прослоек), можно показать, что осредненный

(на зерно) градиент места, описывающий формоизменение двойникованием, имеет следующий вид:

$$\mathbf{f}_{tw}^{in} = f \gamma \mathbf{b}^{tw} \mathbf{n}^{tw} + \mathbf{E}, \quad (6)$$

где \mathbf{E} – единичный тензор; \mathbf{b}^{tw} – направление сдвига двойника; \mathbf{n}^{tw} – нормаль к плоскости двойникования; f – представляет собой безразмерную величину, равную отношению объемов двойниковых прослоек, в которых произошел сдвиг, к объему всего зерна (объемная доля двойников); γ – величина постоянного сдвига двойника, равная для ОЦК-кристалла 0,707.

Полагая, что двойникование происходит непрерывно, \dot{f} существует и конечно, осредненный градиент скорости перемещений двойникования для монокристалла можно записать в виде [2]

$$\mathbf{f}_{tw}^{**in} = \dot{\mathbf{f}}_{tw}^{in} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{in-1} = \dot{f} \gamma \mathbf{b}^{tw} \mathbf{n}^{tw} = \dot{f} \gamma \mathbf{t}. \quad (7)$$

Таким образом, двойникование может рассматриваться как «псевдоскольжение» со скоростью «двойникового» сдвига $\dot{f} \gamma$ и ориентационным тензором $\mathbf{t} = \mathbf{b}^{tw} \mathbf{n}^{tw}$.

3. Модель упруговязкопластического деформирования мезоуровня

Двухуровневый подход предполагает использование структурного элемента мезоуровня – кристаллита (зерен, субзерен, фрагментов). На мезоуровне в качестве определяющего соотношения используется закон Гука, при этом учитывается анизотропия кристаллической решетки [3]:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^r &= \mathbf{c} : \mathbf{d}^e = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in}), \\ \boldsymbol{\sigma}^r &= \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши; $\boldsymbol{\sigma}^r$ – коротационная производная тензора напряжения Коши; \mathbf{c} – тензор четвертого ранга упругих свойств ОЦК-кристалла (кубическая симметрия); \mathbf{d} , \mathbf{d}^e , \mathbf{d}^{in} – тензор деформации скорости, его упругая и неупругая составляющие; $\boldsymbol{\omega}$ – тензор спина, характеризующий скорость вращения кристаллической решетки, в данной работе тензор спина определен в соответствии с моделью Тейлора [4]. Отметим, что напряжения характеризуют именно упругие связи в зерне, связанные с изменением расстояний между соседними атомами.

Система разрешающих уравнений для зерна в скоростях имеет следующий вид [3]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\tau}_{cs}^{\alpha} = (1-f) \sum_{\beta} H_s^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_s^{\beta}| + f \sum_{\beta} H_{tw}^{\alpha\beta} \gamma_{tw}^{\beta} \dot{f}^{\beta}, \quad \dot{\tau}_{ctw}^k = \psi f \sum_{i=1}^{12} \gamma_{tw}^i \dot{f}^i, \\ \dot{\gamma}_s^k = H \left(|\tau_s^k| - \tau_{cs}^k \right) \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_s^k}{\tau_{cs}^k} \right|^{1/m} \text{sign}(\tau_s^k), \quad \dot{f}^k = \begin{cases} H \left(|\tau_{tw}^k| - \tau_{ctw}^k \right) \frac{\dot{\gamma}_0}{\gamma_{tw}^k} \left| \frac{\tau_{tw}^k}{\tau_{ctw}^k} \right|^{1/m}, & \tau_{tw}^k \geq 0, \\ 0, & \tau_{tw}^k < 0 \end{cases} \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in}) + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \\ \mathbf{d}^{in} = \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k \mathbf{m}^k + \sum_k^{N^{tw}} \dot{f}^k \gamma_{tw}^k \mathbf{t}^k, \\ \mathbf{d} = \mathbf{D}, \\ \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} (\overline{\nabla \mathbf{v}} - \overline{\nabla \mathbf{v}}^T) - \frac{1}{2} \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k (\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} - \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}). \end{array} \right. \quad (9)$$

Здесь (9)₁ – соотношения для скоростей критических напряжений сопротивления сдвигу и двойникованию;

(9)₂ – упруговязкопластические соотношения для скоростей сдвига и изменения объемной доли двойников;

(9)₃ – закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности;

(9)₄ – кинематическое соотношение.

(9)₅ – гипотеза Фойгта (\mathbf{D} – тензор деформации скорости макроуровня);

(9)₆ – соотношение модели поворота Тейлора.

4. Модель макроуровня

В качестве элемента макроуровня выступает представительный макрообъем, содержащий значительное число (от нескольких сотен до тысяч) структурных элементов мезоуровня. В данной работе связь элементов мезо- и макроуровня осуществляется с помощью гипотезы Фойгта (равенство в каждый момент процесса тензора деформации скорости в элементах макро- и мезоуровней).

На макроуровне используется анизотропный закон Гука с учетом согласования соседних уровней (мезо- и макроуровня) [5], постановка задачи для представительного объема макроуровня выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \dot{\Sigma} = \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in}) + \mathbf{\Omega} \cdot \Sigma - \Sigma \cdot \mathbf{\Omega}, \\ \mathbf{D}^{in} = \langle \mathbf{d}^{in} \rangle + \mathbf{C}^{-1} : \langle \mathbf{c}' : \mathbf{d}^{in'} \rangle, \\ \mathbf{\Omega} = \langle \mathbf{\omega} \rangle + \Sigma^{-1} \cdot \langle \mathbf{\sigma}' \cdot \mathbf{\omega}' \rangle, \end{cases} \quad (10)$$

где \mathbf{C} – тензор упругих свойств макроуровня; \mathbf{D} – тензор деформации скорости макроуровня; \mathbf{D}^{in} – неупругая составляющая тензора деформации скорости макроуровня; \mathbf{D}^e – упругая составляющая тензора деформации скорости макроуровня; $\mathbf{\Omega}$ – тензор спина макроуровня; $\Sigma, \dot{\Sigma}$ – тензор напряжений Коши и его коротационная производная. $\mathbf{c}', \mathbf{d}^{in'}, \mathbf{\sigma}', \mathbf{\omega}'$ – отклонения от среднего тензора упругих свойств, неупругой составляющей тензора деформации скорости, тензора напряжений Коши и спина решетки соответственно, $\langle \cdot \rangle$ – оператор осреднения по представительному макрообъему.

Ниже в качестве примера приведены результаты моделирования стесненной осадки ПО поликристалла, представляющего собой совокупность различно ориентированных элементов мезоуровня (зерен). Процесс стесненной осадки реализуется следующим образом: две компоненты тензора деформации скорости являются предписанными (используется гипотеза Фойгта). Одна компонента задает фиксированное перемещение торцов образца; перемещения вдоль другого равны нулю. Остальные четыре компоненты находятся из соответствующих условий для напряженного состояния при стесненной осадке.

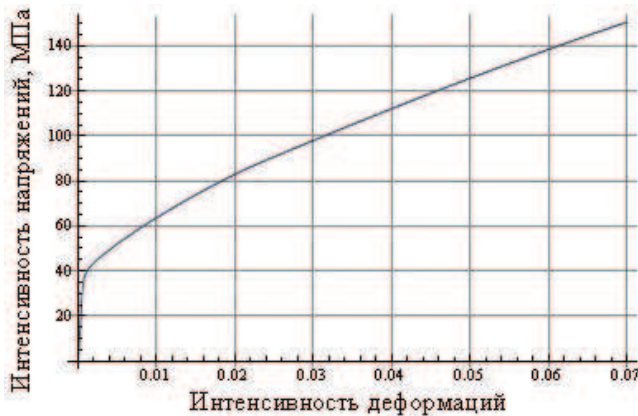


Рис. 1. Диаграмма нагружения поликристалла ОЦК-железа

На рис. 1 представлена зависимость интенсивности напряжений от интенсивности деформаций для одноосного нагружения поликристалла ОЦК-железа. На рис. 2 и 3 представлены нетривиальные компоненты тензоров напряжения и деформации для случая стесненной осадки.

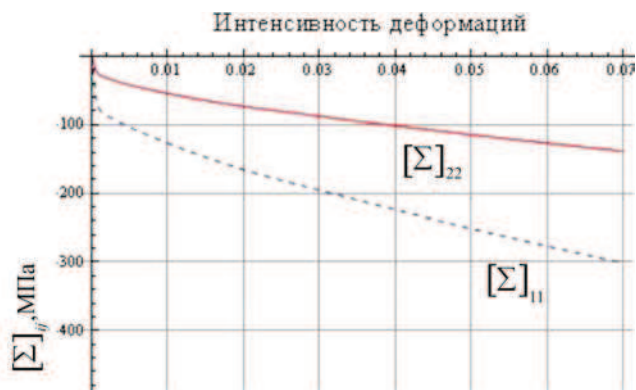


Рис. 2. Компоненты тензора напряжений Коши в лабораторной системе координат при стесненной осадке поликристалла ОЦК-железа

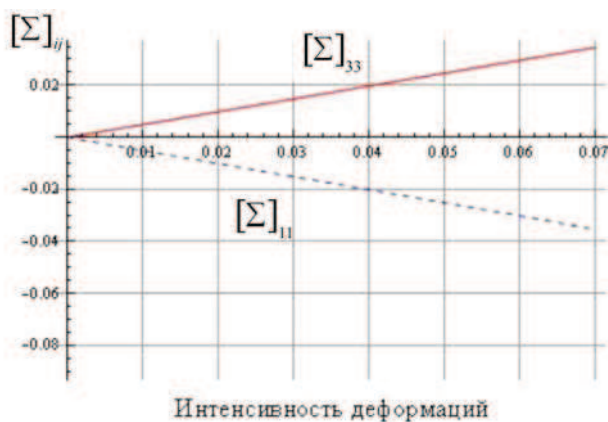


Рис. 3. Компоненты тензора деформации в ЛСК при стесненной осадке поликристалла ОЦК-железа

Заключение

В работе представлена физическая упруговязкопластическая модель, в которой учитывается не только движение дислокаций, но и двойниковая мода деформирования, оказывающая существенное влияние на отклик материала при его неупругом деформировании. Разработан алгоритм и программа его реализации. Предлагаемая модель

позволяет описывать неупругое деформирование ПО поликристаллов; представлены результаты расчетов для одноосного нагружения и стесненной осадки.

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

Библиографический список

1. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория определяющих соотношений: учеб. пособие. – Ч. II. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. гос. тех. ун-та, 2008. – 243 с.
2. Myagchilov S., Dawson P.R., Evolution of texture in aggregates of crystals exhibiting both slip and twinning // Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 1999. – Vol. 7, No. 6. – P. 975–1004.
3. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Анализ деформирования ГЦК-металлов с использованием физической теории пластичности // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13, № 3. – С.21–30.
4. Швейкин А.И., Ашихмин В.Н., Трусов П.В. О моделях ротации решетки при деформировании металлов // Вестник ПГТУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2010. – № 1. – С. 111–127.
5. 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.

Получено 02.07.2011.

N.S. Kondratev

The Perm national research polytechnic university

INELASTIC DEFORMATION OF POLYCRYSTALLINE BODY CENTERED CUBIC MATERIALS BY SLIP AND TWINNING

There considered the two-level physical model elastoviscoplastic deformation of polycrystalline materials. Along with the main mechanism of inelastic deformation (slip of edge dislocations) is considered twinning. Dislocation mechanism of twinning can consider it like a slip. The proposed model allows to describe the processes of polycrystalline materials.

Keywords: slip, twinning, elastoviscoplastic, inelastic deformation, bcc crystals.