

П.С. Волегов, А.В. Шулепов

Пермский государственный технический университет

## УПРУГИЕ КОНСТАНТЫ МОНОКРИСТАЛЛА В НЕСИММЕТРИЧНОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПЛАСТИЧНОСТИ

On an example of several known problems of physical theories of plasticity the conclusion about necessity of construction of physical theories on the basis of asymmetrical measures of the intense and deformed condition becomes, the kind of a measure of speed of deformation is resulted, its decomposition on elastic and not elastic components is spent. The conclusion of the law of elasticity is resulted, by the analysis симметричных properties of a lattice the set independent nonzero a component of a tensor of elastic properties is defined. The method of a molecular statics carries out the qualitative analysis diagonal a component of a tensor of elastic characteristics. On an example of the decision of test problems necessity of the account of a divergence asymmetrical a component of a tensor of elastic properties is shown at the decision of problems упругопластического deformations.

При построении физических теорий для сплошной среды очень часто по умолчанию считают, что мера напряженного состояния – тензор напряжений Коши  $\sigma$  – симметрична. Эта гипотеза согласуется с уравнением баланса момента количества движения сплошной среды

$$\hat{\rho} \ddot{\tilde{\mathbf{I}}} = \hat{\rho} \hat{\mathbf{m}}_b + \hat{\nabla} \cdot \boldsymbol{\mu} + (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^T), \quad (1)$$

где ( $\tilde{\mathbf{I}}$  – момент количества движения (на единицу массы),  $\hat{\mathbf{m}}_b$  – массовые моменты пар сил,  $\boldsymbol{\mu}$  – так называемый тензор моментных напряжений – тензор второго ранга, связывающий поверхностные моменты пар сил  $\mathbf{m}$  на площадке с некоторой нормалью  $\mathbf{n}$  и в определенном смысле аналогичный тензору напряжений Коши, такой, что  $\mathbf{m} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}$  в случае отсутствия внутренних вращений, поверхностных и объемных моментов.

При построении двухуровневых физических теорий пластичности в качестве элемента мезоуровня рассматривается зерно (субзерно), изменяющее свою ориентацию. В этом случае пренебрегать массовыми и поверхностными моментами, а в некоторых случаях и скоростью изменения собственного момента количества движения нельзя, что означает принципиальную несимметрию тензора напряжений Коши, который необходимо использовать для описания напряженно-деформированного состояния зерна. Пренебрегать скоростью изменения собственного момента количества движения можно

в том случае, если производная угловой скорости (т.е. угловое ускорение) вращательного движения в процессе деформирования мала по сравнению с действующими на зерно напряжениями, а также массовыми и поверхностными моментами. Для ответа на вопрос, можно ли в качестве таких процессов рассматривать процессы, связанные с активной перестройкой структуры вещества, таких как процессы ОМД, необходимо дополнительное исследование.

Кроме того, при использовании симметричных мер напряженного и деформированного состояний при определенных условиях возникает проблема выбора активных систем скольжения. В работе [1] выполнено исследование геометрии многогранника текучести, если в качестве критерия активизации той или иной системы скольжения, а значит, условия перехода материала из состояния упругости к состоянию пластического течения рассматривается выполнение закона Шмида [2]:

$$\mathbf{b}^{(k)} \cdot \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{S} = \tau_c^{(k)}, \quad (2)$$

где  $k$  – номер системы скольжения,  $k = \overline{1, 24}$  (в силу удвоения систем скольжения). Рассмотрен случай поверхности текучести при постоянных и одинаковых для всех систем скольжения значениях функции  $g^{(k)}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n, t)$  (однородный изотропный случай), принято  $g^{(k)} = 15 \cdot 10^6$  Па,  $k = \overline{1, 24}$ .

Всего было рассмотрено 18 048 возможных комбинаций гиперплоскостей, которые могут образовывать вершины различного порядка. Из этого количества был произведен «отсев» комбинаций линейно зависимых гиперплоскостей различного вида зависимости. В результате «отсева» физически или геометрически невозможных вершин получено 26 вершин, причем в этом списке присутствуют вершины 6-го и 8-го порядка.

Таким образом, при использовании симметричных мер напряженного и деформированного состояний при определенных условиях возникает проблема выбора активных систем скольжения, имея всего 5 независимых компонент девиатора напряжений и попадая при этом в вершину 8-го порядка на поверхности текучести, необходимо каким-либо образом определить те 5 систем из 8, которые будем в дальнейших расчетах считать активными. Обычно для такого выбора приходится вводить дополнительные предположения или гипотезы, например принцип минимума сдвига или принцип максимума работы (что обычно и делают в моделях типа Тейлора – Бишоп – Хилла). Физическое обоснование этих дополнительных предположений достаточно сложно и неочевидно и, вообще говоря, затрудняет построение прозрачной теории пластичности, поэтому одной из причин, обосновывающих

необходимость перехода к несимметричным мерам, является уход в таком случае от неопределенности при выборе набора активных систем.

В физических теориях пластичности часто используются величины, физический смысл которых не всегда ясен. Например, в определяющие соотношения модели Линя (как и многих других моделей) явным образом входит так называемый симметризованный ориентационный тензор системы скольжения:  $\mathbf{M}_s^{(k)} = \frac{1}{2}(\mathbf{n}^{(k)}\mathbf{b}^{(k)} + \mathbf{b}^{(k)}\mathbf{n}^{(k)})$ . При этом возникает несоответствие между физическим смыслом, который несет эта величина (а именно она характеризует ориентацию  $k$ -й системы скольжения (СС) дислокаций с единичным вектором Бюргера  $\mathbf{b}^{(k)}$ , определяющим направление скольжения, и единичной нормалью к плоскости скольжения  $\mathbf{n}^{(k)}$ ), и соотношением, которым она определяется. В симметризованном случае в ориентационный тензор «вносится», по сути, еще одна система скольжения, с нормалью  $\mathbf{b}^{(k)}$  и направлением сдвига  $\mathbf{n}^{(k)}$ . Например, если записывать ориентационный тензор системы скольжения  $(111)[110]$ , то за счет симметризации в выражение для ориентационного тензора будет «внесена» еще и система  $(110)[111]$ . Совершенно очевидно, что (например, для ГЦК-решетки) добавление такой системы скольжения лишено всякого физического смысла, более того, прямо противоречит кристаллографии кристаллической решетки.

Таким образом, из трех приведенных выше доводов следует необходимость в ***построении такой физической теории пластичности, в которой не используется не имеющая под собой физической базы симметризация мер напряженного и деформированного состояний, а также их скоростей. Эта теория должна быть построена на физически обоснованных предположениях и соотношениях, в ней должен быть ясен физический смысл всех используемых величин.***

Построение такой теории сопряжено с некоторыми трудностями, в том числе связанными с ожидаемым увеличением количества констант в определяющих соотношениях, в первую очередь в определяющем соотношении (ОС) упругости – законе Гука. К положительным моментам стоит отнести прозрачность соотношений модели, что приведет к простоте добавления в них при необходимости дополнительных механизмов деформирования, либо учета различных эффектов, возникающих в процессах глубокой пластической деформации. Речь здесь идет о процессах текстурирования, фрагментации, упрочнения и разупрочнения, накопления повреждений и разрушения поликристаллических тел. Кроме того, исчезнет проблема выбора активных систем скольжения, упомянутая выше. В случае введения несимметричной

меры деформации (или несимметричной меры скорости деформации), с учетом условия несжимаемости для необратимой (пластической) составляющей такой меры, будем иметь пространство с размерностью 8. Это означает, что с точки зрения физики твердого тела мы будем иметь возможность осуществлять выбор не пяти активных систем скольжения, а восьми. Это означает, что даже в самом «плохом» случае, когда изображающая точка напряжений (ИТН) попадает в вершину 8-го порядка, в модели будет достаточное количество уравнений, чтобы точно определить сдвиги по всем активным системам скольжения.

## 1. Несимметричные меры скорости деформаций и напряжения

Для описания процессов деформирования сплошной среды предлагается использовать в качестве меры скорости деформации транспонированный градиент скорости:

$$\zeta = \mathbf{v}\hat{\nabla}. \quad (3)$$

Введем теперь две конфигурации – отсчетную  $\mathbf{K}_0$  и актуальную  $\mathbf{K}_t$ . Тогда тензор скорости деформации  $\zeta$  можно представить в виде  $\zeta = \mathbf{v}\hat{\nabla} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1}$ , где  $\mathbf{F} = \overset{0}{\nabla} \mathbf{r}^T$  – транспонированный градиент места. Далее представим градиент места как мультипликативное разложение на упругую (обратимую) и пластическую (необратимую) части:  $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p$ , и подставим это соотношение в выражение для  $\zeta$ :

$$\begin{aligned} \zeta &= (\mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p) \cdot \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{e-1} = (\dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^p + \mathbf{F}^e \cdot \dot{\mathbf{F}}^p) \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{e-1} = \\ &= \dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{e-1} + \mathbf{F}^e \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{e-1} = \\ &= \dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^{e-1} + \mathbf{F}^e (\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}) \mathbf{F}^{e-1}. \end{aligned} \quad (4)$$

Первое слагаемое суммы описывает обратимые (упругие) деформации среды, второе, вообще говоря, в записанном виде не может быть названо скоростью пластической деформации. Для представления  $\zeta^p$  тогда необходимо перейти в разгруженную конфигурацию  $\mathbf{K}^*$  (при помощи оператора  $\mathbf{F}^{e-1}$ ), уже в этой конфигурации  $\zeta^p = \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}$ .

Таким образом, для рассмотрения геометрической интерпретации проведенных преобразований необходимо ввести три конфигурации – отсчетную  $\mathbf{K}_0$ , актуальную  $\mathbf{K}_t$  и разгруженную  $\mathbf{K}^*$ . На рис. 1 показаны линейные операторы, преобразующие бесконечно малый отрезок материальный  $d\mathbf{x}$  в отсчетной конфигурации в отрезки в текущей и разгруженной конфигурациях.

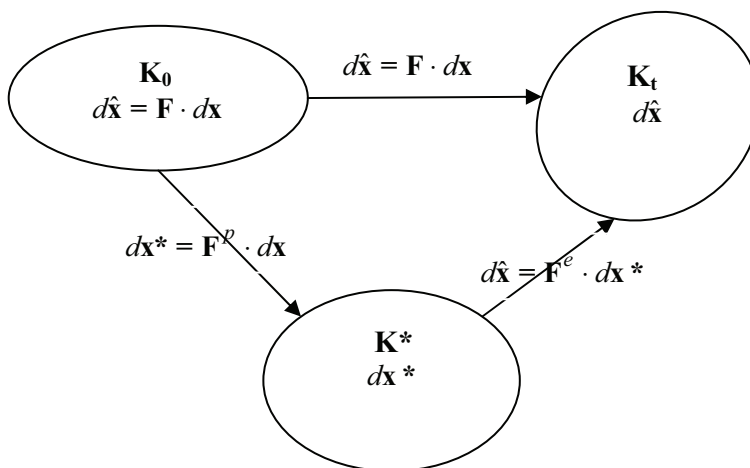


Рис. 1. К выводу аддитивного разложения меры  $\zeta$

Далее введем меру деформированного состояния, формально используя определение меры скорости деформации как производной от соответствующей меры деформации. В контексте построения модели, пригодной для описания процессов глубокой пластической деформации континуума, с учетом ротационных мод, при определении меры скорости деформации дифференцированием меры деформированного состояния недостаточно использовать локальную производную, необходимо использовать более адекватные задаче подходы, например коротационное дифференцирование:

$$\mathbf{Q}^R = \dot{\mathbf{Q}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{Q} + \mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\Omega} = \zeta = \mathbf{v} \hat{\nabla}. \quad (5)$$

Вообще говоря, построение несимметричной неголономной меры скорости деформации (и соответствующей ей меры деформации) сопряжено с достаточно большими сложностями, в первую очередь, касающихся определения геометрического смысла компонент меры деформированного состояния (в отличие, например, от тензора малых деформаций). Поэтому использование неголономных мер требует дополнительных, достаточно сложных исследований, которые здесь не приводятся.

В качестве несимметричной меры напряженного состояния предлагается использовать тензор напряжений Коши  $\boldsymbol{\sigma}$ , вообще говоря, несимметричного (без дополнительного предположения об отсутствии моментных напряжений).

Тогда основной задачей построения модели становится определение общего вида закона, связывающего обратимую составляющую меры скорости деформации и скорости напряжений. Это соотношение будем в дальнейшем называть несимметричным законом упругости.

## 2. Несимметричный закон упругости

Различают два определения упругости – упругость по Коши (в такой формулировке требование о существовании упругого потенциала не выдвигается) и упругость по Грину, в которой такой постулат вводится [3]. В данной работе будем следовать второму определению. Запишем бесконечно малое приращение внутренней энергии при деформировании упругой среды:

$$dU = \rho^{-1} \boldsymbol{\sigma} : d\mathbf{Q} + Tds, \quad (6)$$

где  $U$  – запасенная при нагружении удельная (на единицу массы) внутренняя энергия,  $\mathbf{Q}$  – мера деформированного состояния (в общем случае несимметричная), такая, что  $T$  – температура,  $s$  – удельная энтропия системы. Переходя к свободной энергии  $\mathbf{F} = U - Ts$  и рассматривая в дальнейшем только изотермические процессы, приходим к выражению для свободной энергии в виде

$$d\mathbf{F} = \rho^{-1} \boldsymbol{\sigma} : d\mathbf{Q} + sdT = \rho^{-1} \boldsymbol{\sigma} : d\mathbf{Q}. \quad (7)$$

В силу того, что свободная энергия не зависит от пластических деформаций, будем в качестве термодинамической переменной данного потенциала рассматривать упругую составляющую меры деформаций  $\mathbf{Q}^e$ :

$$d\mathbf{F} = \rho^{-1} \boldsymbol{\sigma} : d\mathbf{Q} = \rho^{-1} \boldsymbol{\sigma} : d(\mathbf{Q}^e + \mathbf{Q}^p) = \rho^{-1} \boldsymbol{\sigma} : d\mathbf{Q}^e. \quad (7')$$

Воспринимая теперь  $\mathbf{Q}^e$  и  $s$  как параметры термодинамического состояния, можно записать

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \left( \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Q}^e} \right)_T. \quad (8)$$

Раскладывая свободную энергию в ряд в окрестности нуля, получим

$$\mathbf{F}(\mathbf{Q}^e) = \mathbf{F}(0) + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Q}_{ij}^e} \mathbf{Q}_{ij}^e \Big|_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Q}_{ij}^e \partial \mathbf{Q}_{kl}^e} \Big|_0 \mathbf{Q}_{ij}^e \mathbf{Q}_{kl}^e + \dots \quad (9)$$

Тогда, принимая гипотезу о начальном ненапряженном и недеформированном состоянии, из (8) и (9) можно записать:

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Q}_{ij}^e \partial \mathbf{Q}_{kl}^e} \mathbf{Q}_{kl}^e = G_{ijkl} \mathbf{Q}_{kl}^e; \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{G} : \mathbf{Q}^e. \quad (10)$$

где  $\mathbf{G}$  – тензор четвертого ранга, описывающий упругие свойства материала. Из вида (10) можно утверждать симметрию  $\mathbf{G}$  по парам индексов,  $G_{ijkl} = G_{klij}$ . Утверждать симметрию  $\mathbf{G}$  внутри пар индексов нельзя в силу несимметрии мер напряженного и деформированного состояний.

Для определения количества ненулевых независимых компонент тензора упругих свойств используются свойства симметрии физического объекта, к которому будет применяться построенная теория, а именно исходя из симметрии кристаллической решетки монокристалла. В книге [4] приведен метод, позволяющий в общем случае получать ограничения на вид модулей упругости – компонент тензора упругих свойств  $\mathbf{G}$ , накладываемые симметрией решетки материала. Для этого рассматривают повороты относительно осей симметрии кристалла и записывают условия инвариантности компонент тензора  $\mathbf{G}$  при переходе из одной системы координат в другую:

$$G'_{ijkl} = G_{\alpha\beta\gamma\delta} q_{\alpha i} q_{\beta j} q_{\gamma k} q_{\delta l}, \quad (11)$$

где  $q_{\alpha i}$  и т.д. – это косинусы углов поворота, определяемые вектором поворота  $\boldsymbol{\omega} = \omega_i \mathbf{e}_i$ :

$$\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} \\ q_{31} & q_{32} & q_{33} \end{pmatrix} = \cos \boldsymbol{\omega} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\sin \boldsymbol{\omega}}{\boldsymbol{\omega}} \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1 - \cos \boldsymbol{\omega}}{\boldsymbol{\omega}^2} \begin{pmatrix} \omega_1^2 & \omega_1 \omega_2 & \omega_1 \omega_3 \\ \omega_1 \omega_2 & \omega_2^2 & \omega_2 \omega_3 \\ \omega_1 \omega_3 & \omega_2 \omega_3 & \omega_3^2 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Здесь используется инвариантное представление поворота при помощи ортогонального тензора  $\mathbf{R}_e^\omega$ , где  $\mathbf{e}$  – это ось, вокруг которой осуществляется вращение, а  $\boldsymbol{\omega}$  – угол поворота вокруг этой оси. В общем виде тензор поворота  $\mathbf{R}_e^\omega$  можно представить в виде

$$\mathbf{R}_e^\omega = (\cos \boldsymbol{\omega} + 1) \mathbf{e} \mathbf{e} + \cos \boldsymbol{\omega} \mathbf{I} - \sin \boldsymbol{\omega} \mathbf{e} \times \mathbf{I}.$$

Выполнив ряд тригонометрических преобразований, можно перейти к представлению поворота через направляющие косинусы в виде (12), где  $\boldsymbol{\omega} = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2}$ , а  $\mathbf{e}_i$  – базисные векторы кристаллографической системы координат (КСК), в случае кубической симметрии направленные вдоль тройки перпендикулярных ребер куба (по направлениям [100], [010], [001]).

Так, для решетки с кубической симметрией необходимо записать условия инвариантности  $\mathbf{G}$  при повороте вокруг координатных осей КСК на угол  $\frac{\pi}{2}$  (поворотные оси симметрии 4-го порядка), вокруг диагонали грани на угол  $\pi$  (ось 2-го порядка) и вокруг пространственных диагоналей куба на угол  $\frac{2\pi}{3}$  (поворотная ось симметрии 3-го порядка). Другие преобразования симметрии (преобразование центральной симметрии, плоскости симметрии и отражения относительно их) являются комбинациями указанных выше преобразований, а следовательно, их рассмотрение не приводит к дополнительным ограничениям на компоненты  $\mathbf{G}$ .

Записывая совокупность соотношений (11) с использованием (12), можно получить некоторое количество ограничений, связывающих между собой компоненты тензора четвертого ранга. Вместе с условием симметрии по парам индексов такой алгоритм позволяет утверждать, что для материала с кубической симметрией решетки тензор упругих свойств  $\mathbf{G}$  всего имеет 4 независимых компоненты –  $G_{1111}, G_{1122}, G_{1212}, G_{1221}$ , (в кристаллографической системе координат).

Тогда на основании вышесказанного окончательно несимметричный закон упругости можно записать в виде

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{G} : \mathbf{Q}^e, \quad (13)$$

здесь  $\mathbf{G}$  – тензор четвертого ранга, имеющий 4 независимые компоненты:  $G_{1111}, G_{1122}, G_{1212}, G_{1221}$ , или в скоростной форме

$$\boldsymbol{\sigma}^R = \mathbf{G} : \boldsymbol{\zeta}^e, \quad (14)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}^R$  – соответствующая коротационная производная, введенная выше и учитывающая вращение кристаллографической системы координат, связанной с решеткой как жесткого целого.

В рамках данного подхода возникает одна дополнительная сложность – если в симметричных теориях значения независимых компонент тензора упругих свойств измерены для различных монокристаллов экспериментально, то в нашем случае возникает проблема, связанная с идентификацией как «обычных» компонент  $G_{1111}, G_{1122}$ , так и вновь появившихся  $G_{1212}, G_{1221}$ . Для решения этой задачи требуется поставить серию численных экспериментов на простое нагружение, позволяющих подсчитать значение всех независимых компонент (точнее, речь идет о комплексе таких экспериментов).



### 3. Определение упругих констант методом молекулярной статики

Остановимся более подробно на определении независимых компонент тензора  $\mathbf{G}$ . Будем рассматривать кристаллическую решетку, для определенности – гранецентрированную кубическую (ГЦК). Исследуем данную решетку методом молекулярной статики.

В общем случае молекулярная статика, так же, как и молекулярная динамика, позволяет определять силы взаимодействия между частицами (атомами). Но в отличие от молекулярной динамики здесь нет необходимости вести итерационные расчеты и использовать гипотезу о том, что движение частиц подчиняется второму закону Ньютона. Все, что необходимо для вычисления сил, действующих между частицами, это потенциал взаимодействия. В качестве последнего используем потенциал Морзе,

$$U(r) = 4\epsilon \left( e^{-2\alpha(r-\sigma)} - 2e^{-\alpha(r-\sigma)} \right), \quad (15)$$

который является трехпараметрическим и позволяет удовлетворять значению двух независимых макроскопических параметров, таких как, например, модуль упругости и предел прочности [5]. Выбранный потенциал является достаточно простым в вычислительном плане по сравнению с многочастичными потенциалами и в то же время позволяет получать качественные оценки. Для расчетов будем использовать следующие константы, взятые для меди:

$$\epsilon_{\text{Cu}} = 0,3429 \text{ эВ}, \quad \alpha_{\text{Cu}} = 1,3588 \text{ \AA}^{-1}, \quad \sigma_{\text{Cu}} = 2,866 \text{ \AA} \quad [6].$$

Поясним, каким образом будет вычисляться напряжение. Рассмотрим куб, состоящий из  $N \times N \times N$  элементарных ГЦК-ячеек. Выделим плоскость, напряжение на которой будем определять. В данном случае в качестве плоскости выберем одну из граней куба. Определим все частицы, попавшие в данную плоскость, и некоторую  $\epsilon$ -окрестность от нее. Определим результирующий вектор сил, действующих между частицами из плоскости и всеми остальными частицами. Далее относим компоненты этого вектора к площади, которую занимают частицы на плоскости. В итоге получаем касательные и нормальные напряжения для плоскости.

Общая расчетная схема определения независимых компонент тензора  $\mathbf{G}$  выглядит следующим образом. Во-первых, задается конфигурация частиц в виде куба, состоящего из  $N \times N \times N$  элементарных ГЦК ячеек. Во-вторых, вычисляются напряжения на трех взаимно ортогональных плоскостях заданной конфигурации (грани куба) и определяется тензор напряжений  $\sigma_1$ . Далее осуществляется аффинное преобразование заданной конфигурации согласно

некоторой схеме нагружения, т.е. задаются перемещения частиц  $\mathbf{u}$ . По аналогии проводятся вычисления напряжений для новой конфигурации частиц и определяется тензор напряжений  $\boldsymbol{\sigma}_2$ . Отметим также, что в действительности поле перемещения  $\mathbf{u}$  описывает переход из одной конфигурации  $\mathbf{K}_{t1}$  в другую конфигурацию  $\mathbf{K}_{t2}$ . Зная напряжения  $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{K}_{t1}}$  в конфигурации  $\mathbf{K}_{t1}$  и деформацию при переходе к конфигурации  $\mathbf{K}_{t2}$ , можно определить приращение напряжений при переходе в конфигурацию  $\mathbf{K}_{t2}$ . Далее под  $\boldsymbol{\sigma}$  будет подразумеваться именно  $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{K}_{t2}} - \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{K}_{t1}}$ .

Для определения  $G_{1111}, G_{1122}, G_{1212}, G_{1221}$  (все компоненты в данном параграфе определяются в базисе КСК) необходимо реализовать две схемы нагружения: одноосное растяжение и простой сдвиг. Отметим, что далее под мерой деформированного состояния  $\mathbf{Q}^e$  будет подразумеваться тензор дисторсии  $\nabla \mathbf{u}$ . Кроме того, согласно (14) поворот кристаллической решетки должен быть исключен.

Рассмотрим подробнее схему одноосного растяжения. Поле перемещения  $\mathbf{u}$  имеет вид

$$(\mathbf{u})_i = \{\alpha x, 0, 0\}.$$

Вдоль двух осей конфигурация не меняется. Тензор дисторсии получается следующим:

$$(\nabla \mathbf{u})_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_3} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Несимметричный закон упругости можно переписать в компонентах:

$$\sigma_{ij} = G_{ijkl} (\nabla \mathbf{u})_{lk}.$$

И тогда тензор напряжений будет диагональным:

$$(\boldsymbol{\sigma})_{ij} = \begin{pmatrix} \alpha G_{1111} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha G_{1122} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha G_{1122} \end{pmatrix}.$$

Из схемы одноосного растяжения можно определить две независимые компоненты тензора упругих свойств:  $G_{1111} = \frac{\sigma_{11}}{\alpha}$ ,  $G_{1122} = \frac{\sigma_{22}}{\alpha}$ .

По аналогии со схемой одноосного нагружения проделаем все выкладки для схемы простого сдвига. Поле перемещения  $\mathbf{u}$  имеет вид

$$(\mathbf{u})_i = \{\gamma z, 0, 0\},$$

где  $\gamma$  – сдвиговая деформация. Тогда с учетом вида  $\mathbf{u}$  компоненты тензора дисторсии можно записать следующим образом:

$$(\nabla \mathbf{u})_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_3} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \gamma & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Далее, подставляя компоненты тензора дисторсии в (13), получаем

$$(\boldsymbol{\sigma})_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \gamma G_{1313} \\ 0 & 0 & 0 \\ \gamma G_{3113} & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \gamma G_{1212} \\ 0 & 0 & 0 \\ \gamma G_{1221} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Из схемы простого сдвига можно определить еще две независимые компоненты тензора упругих свойств:  $G_{1212} = \frac{\sigma_{13}}{\gamma}$ ,  $G_{1221} = \frac{\sigma_{31}}{\gamma}$ . Как видно из формул, компоненты будут отличаться друг от друга только в случае несимметричности тензора напряжений. Также можно показать, что с увеличением количества частиц получаемые напряжения и, как следствие, рассчитанные из них компоненты  $\mathbf{G}$  сходятся.

На рис. 2 представлены результаты численного эксперимента в соответствии со схемой нагружения простого сдвига. В качестве объема частиц рассматривалась кристаллическая решетка, состоящая из  $20 \times 20 \times 20$  ГЦК-ячеек. Предварительно объем частиц был приведен к конфигурации с минимальными нормальными напряжениями на всех площадках путем варьирования размера ГЦК-ячеек. Были проведены исследования зависимости компонент тензора напряжений от сдвиговой деформации, которая задавалась в интервале  $[0, 0.01]$ , с шагом  $d\gamma = 0,0001$ .

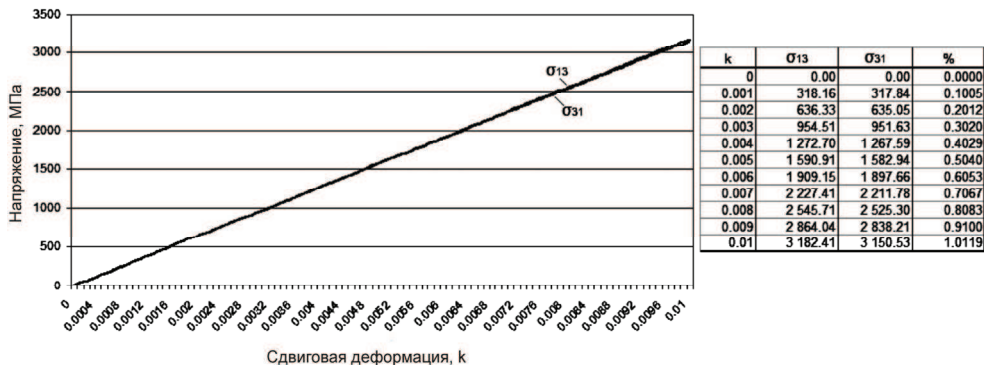


Рис. 2. Касательные напряжения на площадках

Как видно из рис. 2, касательные напряжения на перпендикулярных площадках, которые как раз и определяют  $G_{1212}$  и  $G_{2112}$ , мало отличаются друг от друга, но не совпадают. Причем с ростом деформаций изменяется и разница между напряжениями. Уже при  $k = 0,01$  компоненты  $\sigma_{31}$  и  $\sigma_{13}$  тензора напряжений, а следовательно, и компоненты  $G_{1212}$  и  $G_{2112}$  тензора упругих свойств отличаются более чем на 1 %.

#### 4. Структура модели мезоуровня

С определением общего вида несимметричного закона упругости становится возможным сформулировать общую схему физической теории пластичности, построенной на базе введенных выше несимметричных мер деформированного и напряженного состояния.

Перечислим основные гипотезы модели:

1. Мету скорости деформации  $\zeta$  можно представить в виде суммы двух мер: меры скорости обратимых деформаций  $\zeta^e$  и необратимых деформаций  $\zeta^p$ :

$$\zeta = \mathbf{v}\hat{\mathbf{V}} = \zeta^e + \zeta^p, \quad (16)$$

где  $\zeta^e = \dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^{e-1}$ , а  $\zeta^p = \mathbf{F}^e \cdot (\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}) \cdot \mathbf{F}^{e-1}$ .

2. Полные меры  $\zeta_{(n)}$  скорости деформации отдельных зерен равны полной мере скорости деформации поликристаллического агрегата (принимается аналог гипотезы Фойгта):

$$\zeta_{(n)} = \zeta, \quad \forall n. \quad (17)$$

Вообще говоря, следует отметить, что из равенства в зернах мер скорости деформации не следует равенства мер деформации, так как в данный момент деформирования зерна могут иметь различные угловые скорости вращения (в силу введения коротационных производных при определении меры деформированного состояния).

3. На скорость необратимых деформаций можно наложить условие несжимаемости (в силу того, что ниже в качестве механизмов необратимых деформаций будут рассматриваться движение дислокаций, двойникование и проскальзывание частей кристалла друг относительно друга, сохраняющие объем):

$$\begin{aligned} I_1(\dot{\zeta}^p) &= I_1(\mathbf{F}^e \cdot (\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}) \cdot \mathbf{F}^{e-1}) = \text{sp}(\mathbf{F}^e \cdot (\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}) \cdot \mathbf{F}^{e-1}) = \\ &= \text{sp}(\mathbf{F}^{e-1} \cdot \mathbf{F}^e \cdot (\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1})) = \text{sp}(\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}) = I_1(\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}) = 0. \end{aligned} \quad (18)$$

4. Необратимые деформации осуществляются сдвигами по вполне определенным кристаллографическим системам, для описания процессов сдвигов по системам скольжения используется упруговязкопластический закон вида

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 H(\boldsymbol{\tau}^{(k)} - \boldsymbol{\tau}_c^{(k)}) \left| \frac{\boldsymbol{\tau}^{(k)}}{\boldsymbol{\tau}_c^{(k)}} \right|^{1/m} \text{sign}(\boldsymbol{\tau}^{(k)}), \quad (19)$$

где  $m$  – параметр чувствительности материала к скорости,  $H(\boldsymbol{\tau}^{(k)} - \boldsymbol{\tau}_c^{(k)})$  – функция Хэвисайда.

Теперь в любой момент деформирования скольжения скорость необратимых деформаций в произвольно взятом зерне определяется выражением

$$\dot{\zeta}^p = \mathbf{F}^e \left( \sum_{k=1}^K \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} \right) \mathbf{F}^{e-1}, \quad (20)$$

где  $K$  – число активных систем скольжения.

Скорости изменения критических сдвиговых напряжений в каждой системе скольжения определяются некоторой функцией от полных сдвигов по системам скольжения, а также их скоростей (так называемые законы упрочнения):

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}_c^{(k)} = f(\boldsymbol{\gamma}^{(i)}, \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(j)}), \quad i, j = \overline{1, 24}. \quad (21)$$

Скорости обратимых деформаций в зерне можно тогда определить соотношением

$$\zeta^e = \mathbf{v}\hat{\mathbf{V}} - \mathbf{F}^e \left( \sum_{k=1}^K \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} \right) \mathbf{F}^{e-1}. \quad (22)$$

Используя скоростную форму закона Гука, введенную выше, легко получить выражение для скорости напряжений:

$$\boldsymbol{\sigma}^R = \mathbf{G} : \left( \mathbf{v}\hat{\mathbf{V}} - \mathbf{F}^e \left( \sum_{k=1}^K \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} \right) \mathbf{F}^{e-1} \right). \quad (23)$$

## Результаты

С использованием несимметричной упруговязкопластической модели мезоуровня, приведенной выше, проведена серия численных экспериментов по одноосному сжатию и чистому сдвигу поликристаллического агрегата, состоящего из 1000 зерен. В связи с тем, что экспериментально качественно показано достаточно небольшое (порядка 0,1 %) расхождение несимметричных коэффициентов  $G_{1212}$ ,  $G_{1221}$  тензора упругих свойств  $\mathbf{G}$ , ставилась задача определения необходимости учета несимметрии упругих свойств материала при численных расчетах. Упругие свойства отдельных зерен принимались анизотропными, причем компоненты тензора упругих свойств определялись следующим образом: компоненты  $G_{1111}$  и  $G_{1122}$  соответствуют тем же компонентам в случае «классической симметричной» физической теории, а компоненты  $G_{1212}$ ,  $G_{1221}$  будут иметь некоторое «отклонение» от значения  $C_{1212}$  для симметричного случая. В модели сделано предположение о том, что компоненты  $G_{1212}$ ,  $G_{1221}$  имеют одинаковое отклонение от «симметричного» значения  $C_{1212}$ . Развороты зерен поликристаллического агрегата не рассматриваются, упрочнение степенное и одинаковое по всем системам скольжения (учитывается различие в латентном и кинематическом упрочнении).

На рис. 3, 4 представлены диаграммы интенсивность напряжение–интенсивность деформаций при разных значениях «отклонения» компонент тензора упругих свойств. Заметно существенное отклонение диаграмм от «симметричного» случая, даже при незначительных (меньше 1 %) различиях в компонентах  $G_{1212}$ ,  $G_{1221}$  тензора упругих свойств, причем расхождения результатов в упругой области практически отсутствуют, а наиболее существенные различия характерны для области начала пластической деформации (при интенсивности деформаций от 0,3 до 4 %). Результаты позволяют сделать вывод о необходимости учета несимметрии упругих свойств материалов с решеткой, имеющих кубическую симметрию, при построении моделей, описывающих процессы упругопластического деформирования материалов. Также стоит отметить, что для получения полного представления о причинах

резкого изменения диаграммы нагружения поликристаллического агрегата при внесении в модель несимметрии упругих свойств требуется провести ряд численных экспериментов как на монокристаллах, так и на поликристаллах с учетом ротаций отдельных зерен.

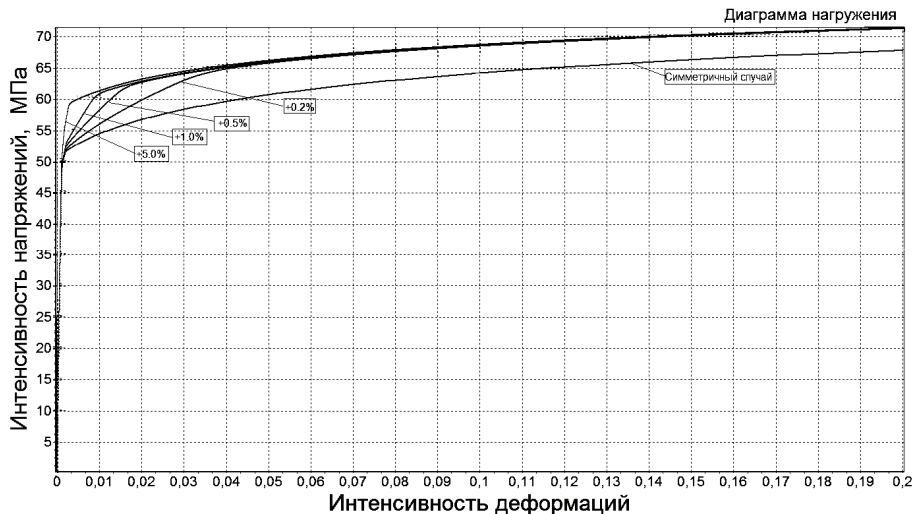


Рис. 3. Диаграммы нагружения при одноосном сжатии поликристаллического агрегата для различных значений компонент  $G_{1212}$ ,  $G_{1221}$ . (На выносках указано отличие от значения компоненты  $C_{1212}$ )

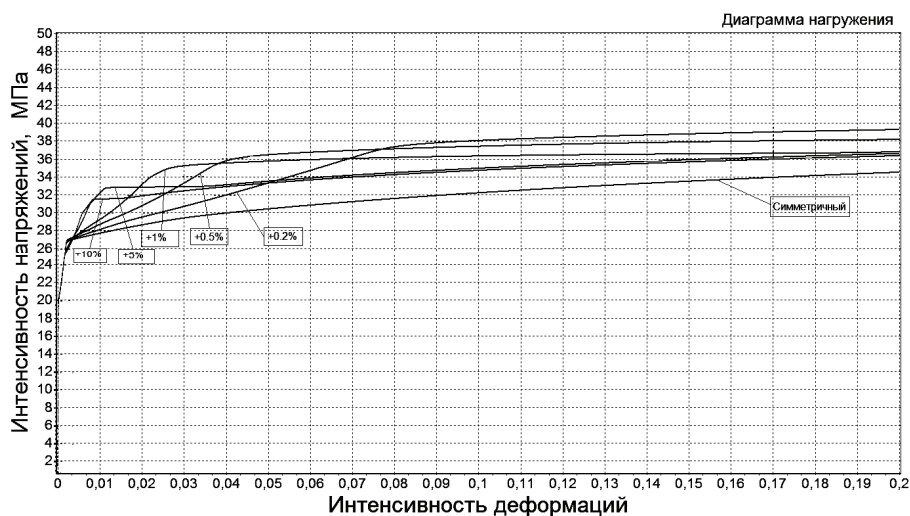


Рис. 4. Диаграммы нагружения при чистом сдвиге поликристаллического агрегата для различных значений компонент  $G_{1212}$ ,  $G_{1221}$ . (На выносках указано отличие от значения компоненты  $C_{1212}$ )

Таким образом, в статье приводится краткое обоснование необходимости перехода к физическим теориям на основе несимметричных мер напряженного и деформированного состояния, введена несимметричная мера скорости деформации, построен несимметричный закон упругости, методами молекулярной статистики исследован тензор упругих свойств, приведена общая структура физической теории, приведены результаты тестовых численных экспериментов, позволяющие сделать вывод о необходимости учета несимметрии упругих свойств при дальнейшем моделировании.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 10-08-00156-а, 10-08-96010-р\_урал\_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. Сер. Математическое моделирование систем и процессов. – Пермь: Изд-во ПГТУ, 2009. – № 17. – С. 25–33.

2. Линь Т.Г. Физическая теория пластичности // Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. Вып. 7. – М: Мир, 1976. – С. 7–68.

3. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. – М.: Наука, 1980. – 512 с.

4. Черных К.Ф. Введение в анизотропную упругость. – М.: Наука, 1988. – 192 с.

5. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН. – 2002. – Т. 3, № 2. – С. 254–276.

6. Şoru D., Popovici D.M., Gîrţu M.A. Molecular dynamics simulation of defect formation in irradiated face centered cubic materials // Journal of optoelectronics and advanced materials. – April 2007. – Vol. 9, No. 4. – P. 799–809.

Получено 12.07.2010