

УДК 539.3

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ОЦК–МОНОКРИСТАЛЛОВ, УЧИТЫВАЮЩАЯ ДВОЙНИКОВАНИЕ

Н.С. Кондратьев, П.В. Трусов

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия*

Рассматривается моделирование упруговязкопластического деформирования монокристаллических тел, реализуемого за счет механизмов скольжения краевых дислокаций и двойникования. Дислокационная природа двойникования позволяет рассматривать его подобно скольжению. Подробно описываются процедуры идентификации параметров модели и ее верификация, основанные на численных алгоритмах решения задач нелинейного программирования. Принятые эволюционные соотношения для критических напряжений сдвига и двойникования позволяют получить приемлемые количественные совпадения результатов моделирования и экспериментов. Реализация модели осуществляется с применением разработанных численных алгоритмов и программ; приводятся результаты расчетов напряженно-деформированного состояния при одноосном нагружении монокристаллов  $\alpha$ -железа и тантала для различных по отношению к оси нагружения ориентировок кристаллов.

*Ключевые слова:* монокристалл, двойникование, скольжение, идентификация, верификация, алгоритмы, программа, результаты расчетов

## A MATHEMATICAL MODEL FOR DEFORMATION OF BCC SINGLE CRYSTALS TAKING INTO CONSIDERATION THE TWINNING MECHANISM

N.S. Kondratev and P.V. Trusov

*Perm State National Research Polytechnical University, Perm, Russia*

The paper is concerned with modeling of the elastoviscoplastic deformation of bcc single crystals. Dislocation slip and twinning are mechanisms for plastic deformation. Due to the dislocation nature of twinning, it can be treated as slip. To solve the nonlinear programming problems, numerical algorithms are used. The procedures of identification and verification of the model parameters are described in detail. The evolution relationships of the critical shear stress and twinning allow us to obtain acceptable quantitative agreement between the simulation and experimental results. The implementation of the model is carried out using the developed numerical algorithms and programs. The results of simulations of the stress-strain state of  $\alpha$ -iron and tantalum single-crystals in uniaxial loading are shown for different lattice orientations relative to the loading axis.

*Key words:* single crystal, twinning, slip, identification, verification, algorithm, program, calculation results

### 1. Введение

Одним из интенсивно развивающихся направлений построения моделей неупругого деформирования моно- и поликристаллов является создание и модификация физических теорий 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 этих масштабах используются параметры, называемые внутренними переменными. Внутренние переменные характеризуют эволюционирующую микроструктуру материала и содержат информацию об истории воздействий на материал. Те из них, которые непосредственно входят в структуру определяющих соотношений данного масштабного уровня, называются явными внутренними переменными [1]. Вторая группа внутренних переменных — неявные (скрытые),

относится к более глубоким масштабным уровням и применяется для замыкания системы уравнений.

Деформирование представительного объема поликристалла в физических теориях пластичности обычно описывается прямыми или статистическими моделями. В прямых моделях, как правило, используется метод конечных элементов, который позволяет более точно находить распределение напряжений и деформаций, но требует больших вычислительных затрат.

В настоящее время наиболее распространенными являются статистические двухуровневые модели, так как они менее затратны по вычислительным ресурсам. В данных моделях обычно принимается во внимание один механизм деформирования — внутризеренное скольжение краевых дислокаций. В качестве элемента макроуровня выступает представительный макрообъем, содержащий значительное число (от нескольких сотен до тысяч) структурных элементов мезоуровня (зерен, субзерен, фрагментов). Связь элементов мезо- и макроуровня осуществляется с помощью гипотезы Фойгта (в каждый момент процесса имеет место равенство тензора деформации скорости в элементах макро- и мезоуровней) или гипотезы Рейсса (равенство напряжений); по остальным параметрам в большинстве работ используется осреднение (или по объему, или в ориентационном пространстве). Основным компонентом любой двухуровневой модели служит подмодель элемента мезоуровня — кристаллита, рассмотрению которой и посвящена предлагаемая работа.

Двойникование не является преобладающим видом неупругого деформирования в металлах с большим числом систем скольжения (ГЦК- и ОЦК-кристаллы) и в основном происходит там, где скольжение дислокаций ограничено (ГПУ-кристаллы). Однако экспериментально установлено, что двойникование наблюдается также в ОЦК (ГЦК) металлах при низких гомологических температурах и в материалах с низкой энергией дефекта упаковки. При этом появление двойниковых прослоек приводит к значительному изменению отклика материала. Поэтому при моделировании упругопластического деформирования указанных классов кристаллов необходимо учитывать не только движение краевых дислокаций, но и двойникование как механизм неупругого формоизменения материала.

Настоящая статья посвящена анализу неупругого деформирования монокристалла с учетом двух его мод — внутризеренного скольжения краевых дислокаций и двойникования, а также идентификации и верификации модели. При этом моделирование носит континуальный характер.

## 2. Кинематика деформирования

Для описания кинематики в данной работе используются четыре конфигурации: отсчетная  $K_0$ , две промежуточные  $K_t^*$ ,  $K_t^{**}$  и текущая (актуальная)  $K_t$ . Градиент места  $\mathbf{f}_s^p$  определяет неупругое деформирование материала скольжением дислокаций и переводит отсчетную конфигурацию  $K_0$  в промежуточную  $K_t^*$ . Градиент места  $\mathbf{f}_{tw}^p$  отвечает за 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)  $\mathbf{f} \stackrel{og}{=} \nabla \mathbf{r}^T$  на упругую  $\mathbf{f}^e$  и неупругие  $\mathbf{f}_{tw}^p$ ,  $\mathbf{f}_s^p$  составляющие:

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

Здесь  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор частицы в текущей конфигурации  $K_t$ ;  $\overset{\circ}{\nabla}$  и  $\hat{\nabla}$  — оператор Гамильтона (набла-оператор) в отсчетной ( $K_0$ ) и текущей ( $K_t$ ) конфигурации; символ « $\overset{\circ}{=}$ » расшифровывается как «равно по обозначению»;  $\Gamma$  — знак операции транспонирования.

Определение градиента скорости перемещения  $\mathbf{l}$  и разложение (1) позволяют показать справедливость следующего разложения:

$$\mathbf{l} = \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^{e-1} + \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}_{tw}^p \cdot \mathbf{f}_{tw}^{p-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1} + \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}_{tw}^p \cdot \dot{\mathbf{f}}_s^p \cdot \mathbf{f}_s^{p-1} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{p-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1} = \mathbf{l}^e + \mathbf{l}_{tw}^p + \mathbf{l}_s^p, \quad (2)$$

где  $\mathbf{l}^e \overset{\circ}{=} \dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{e-1}$ ,  $\mathbf{l}_{tw}^p \overset{\circ}{=} \dot{\mathbf{f}}_{tw}^p \cdot \mathbf{f}_{tw}^{p-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1}$ ,  $\mathbf{l}_s^p \overset{\circ}{=} \dot{\mathbf{f}}_s^p \cdot \mathbf{f}_s^{p-1} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{p-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1}$ . Введем обозначения  $\mathbf{l}_{tw}^{**p} \overset{\circ}{=} \dot{\mathbf{f}}_{tw}^p \cdot \mathbf{f}_{tw}^{p-1}$ ,  $\mathbf{l}_s^{**p} \overset{\circ}{=} \dot{\mathbf{f}}_s^p \cdot \mathbf{f}_s^{p-1} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{p-1}$ . Тогда соотношение (2) запишется следующим образом:  $\mathbf{l} = \mathbf{l}^e + \mathbf{f}^e \cdot (\mathbf{l}_{tw}^{**p} + \mathbf{l}_s^{**p}) \cdot \mathbf{f}^{e-1}$ .

Отметим, что «общую неупругую составляющую» градиента скорости перемещений можно записать в виде суммы неупругих составляющих от скольжения и двойникования:

$\mathbf{l}^{**p} \overset{\circ}{=} \mathbf{l}_s^{**p} + \mathbf{l}_{tw}^{**p}$ , где  $\mathbf{l}^{**p}$  представляет собой скорость изменения компонент метрического тензора в конфигурации  $K_t^*$ , отнесенных к диадному базису конфигурации  $K_t^{**}$ .

Симметричной частью градиента скорости перемещений является тензор деформации скорости  $\mathbf{d} = (\mathbf{l} + \mathbf{l}^\Gamma) / 2$ . Неупругая составляющая тензора деформации скорости, связанная с механизмами дислокационного скольжения и двойникования, в силу (2) записывается в аддитивном виде:  $\mathbf{d}^{in} = \mathbf{d}_s^p + \mathbf{d}_{tw}^p = \left( \mathbf{l}_s^p + (\mathbf{l}_s^p)^\Gamma \right) / 2 + \left( \mathbf{l}_{tw}^p + (\mathbf{l}_{tw}^p)^\Gamma \right) / 2$ .

### 3. Деформирование кристалла скольжением дислокаций

Одним из основных механизмов неупругого деформирования монокристаллов служит внутризеренное скольжение краевых дислокаций по известным системам скольжения (СС). В классической работе Тейлора и Илам [2] показано, что скольжение в ОЦК-кристаллах всегда происходит в наиболее плотно упакованных направлениях  $\langle 111 \rangle$ . Многочисленными опытами установлено, что плоскостями скольжения могут быть плоскости  $\{110\}$ ,  $\{112\}$ ,  $\{123\}$ , а направление  $\langle 111 \rangle$  всегда остается неизменным. Таким образом, число возможных СС равняется 48 (см. Табл.).

Для описания систем скольжения вводится ориентационный тензор

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

где  $\overset{\circ}{\mathbf{b}}^{(k)}$ ,  $\overset{\circ}{\mathbf{n}}^{(k)}$  — единичные направления скольжения и нормали  $k$ -й системы скольжения в отсчетной конфигурации, которые преобразуются в векторы  $\hat{\mathbf{b}}^{(k)}$ ,  $\hat{\mathbf{n}}^{(k)}$  в актуальной конфигурации согласно соотношениям  $\hat{\mathbf{n}}^{(k)} = \mathbf{F}^e \cdot \overset{\circ}{\mathbf{n}}^{(k)}$ ,  $\hat{\mathbf{b}}^{(k)} = \mathbf{F}^e \cdot \overset{\circ}{\mathbf{b}}^{(k)}$ , причем считается, что векторы  $\hat{\mathbf{n}}$ ,  $\hat{\mathbf{b}}$  также остаются единичными и ортогональными, то есть влияние упругих искажений решетки не принимается во внимание:  $\mathbf{U}^e = \mathbf{E}$  в ортогональном разложении  $\mathbf{f}^e = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{U}^e$ , где  $\mathbf{R}^e$ ,  $\mathbf{U}^e$  — ортогональный тензор и тензор «чистой деформации», а  $\mathbf{E}$  — единичный тензор. Использование физических теорий не требует рассмотрения движения отдельных дислокаций, их распределение предполагается

Таблица. Системы скольжения в ОЦК материале

Система скольжения {110}, <111>			Система скольжения {112}, <111>			Система скольжения {123}, <111>			Система скольжения {123}, <111>		
$k$	$\overset{\circ}{\mathbf{n}}^{(k)}$	$\overset{\circ}{\mathbf{b}}^{(k)}$									
1	(011)	[1 $\bar{1}$ 1]	13	(121)	[1 $\bar{1}$ 1]	25	(123)	[11 $\bar{1}$ ]	37	(321)	[ $\bar{1}$ 11]
2	(011)	[11 $\bar{1}$ ]	14	( $\bar{1}$ 21)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]	26	( $\bar{1}$ 23)	[1 $\bar{1}$ 1]	38	( $\bar{3}$ 21)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]
3	(0 $\bar{1}$ 1)	[111]	15	( $\bar{1}$ 21)	[ $\bar{1}$ 11]	27	( $\bar{1}$ 23)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]	39	( $\bar{3}$ 21)	[1 $\bar{1}$ 1]
4	(0 $\bar{1}$ 1)	[ $\bar{1}$ 11]	16	( $\bar{1}$ 21)	[11 $\bar{1}$ ]	28	( $\bar{1}$ 23)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]	40	( $\bar{3}$ 21)	[11 $\bar{1}$ ]
5	( $\bar{1}$ 10)	[111]	17	(211)	[ $\bar{1}$ 11]	29	(132)	[1 $\bar{1}$ 1]	41	(231)	[1 $\bar{1}$ 1]
6	( $\bar{1}$ 10)	[11 $\bar{1}$ ]	18	( $\bar{2}$ 11)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]	30	( $\bar{1}$ 32)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]	42	( $\bar{2}$ 31)	[11 $\bar{1}$ ]
7	(110)	[ $\bar{1}$ 11]	19	( $\bar{2}$ 11)	[1 $\bar{1}$ 1]	31	( $\bar{1}$ 32)	[ $\bar{1}$ 11]	43	( $\bar{2}$ 31)	[ $\bar{1}$ 11]
8	(110)	[1 $\bar{1}$ 1]	20	(2 $\bar{1}$ 1)	[11 $\bar{1}$ ]	32	( $\bar{1}$ 32)	[11 $\bar{1}$ ]	44	( $\bar{2}$ 31)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]
9	(101)	[11 $\bar{1}$ ]	21	(112)	[11 $\bar{1}$ ]	33	(312)	[1 $\bar{1}$ 1]	45	(213)	[11 $\bar{1}$ ]
10	(101)	[ $\bar{1}$ 11]	22	(1 $\bar{1}$ 2)	[1 $\bar{1}$ 1]	34	(3 $\bar{1}$ 2)	[ $\bar{1}$ 11]	46	( $\bar{2}$ 13)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]
11	( $\bar{1}$ 01)	[111]	23	( $\bar{1}$ 12)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]	35	( $\bar{3}$ 12)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]	47	( $\bar{2}$ 13)	[ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]
12	( $\bar{1}$ 01)	[1 $\bar{1}$ 1]	24	( $\bar{1}$ 12)	[1 $\bar{1}$ 1]	36	( $\bar{3}$ 12)	[111]	48	(2 $\bar{1}$ 3)	[1 $\bar{1}$ 1]

однородным по элементу мезоуровня (зерну, субзерну), что дает возможность учитывать неупругую составляющую тензора деформации скорости за счет скольжения краевых дислокаций в виде:

$$\mathbf{d}_s^p = \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k \mathbf{m}^k, \quad \mathbf{m}^k = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{m}_0^k \cdot (\mathbf{f}^e)^T, \quad (4)$$

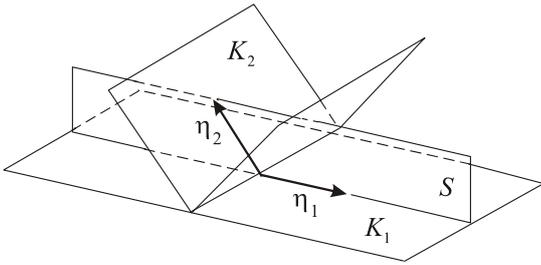
где  $\dot{\gamma}_s^k$  — скорость сдвига по  $k$ -й системе скольжения.

Условием активации  $k$ -й системы скольжения является достижение в ней касательным напряжением некоторого критического значения  $\tau_{cs}^k$ ; данное условие называется законом Шмида:  $\tau_{cs}^k = \mathbf{m}^k : \boldsymbol{\sigma}$ , здесь  $\boldsymbol{\sigma}$  — тензор напряжений Коши (однородный по рассматриваемому зерну).

#### 4. Деформирование кристалла двойникованием

Несмотря на то, что вклад двойникования в полную деформацию незначителен, оно играет важную роль в реализации одной из учитываемых основных мод деформирования — скольжения. Определяющим развитие двойникования фактором является взаимодействие скользящих дислокаций и двойников. Скольжение дислокаций способствует релаксации напряжений в некоторых участках кристалла, тем самым не давая им достичь критических значений  $\tau_{ctw}^k$ , при которых начинается двойникование. Следовательно, деформирование кристалла двойникованием или скольжением будет определяться соотношением между критическими напряжениями скольжения  $\tau_{cs}^k$  и двойникования  $\tau_{ctw}^k$  [3].

Двойник может быть образован посредством сдвига; элементы такого типа двойникования показаны на общеизвестном рисунке 1 [4, 5]. Процесс двойникования рассматривается далее как «псевдоскольжение». Приняв во внимание две конфигурации зерна — отсчетную (монокристалл находится в недеформированном состоянии) и актуальную (в монокристалле появляются несколько двойниковых прослоек),



**Рис. 1.** Элементы двойникования:  $K_1$  – плоскость двойникования (габитусная плоскость);  $\eta_1$  ( $\mathbf{b}_{tw}$ ) – направление двойникового сдвига;  $K_2$  – инвариантная плоскость;  $\eta_2$  – направление, лежащее в плоскости  $K_2$  и плоскости сдвига  $S$ , перпендикулярной плоскости двойникования  $K_1$  и содержащей направление сдвига  $\eta_1$ ;  $\mathbf{n}^{tw}$  – нормаль к плоскости двойникования.

можно показать, что осредненный (по зерну) градиент места имеет следующий вид:  $\mathbf{f}_{tw} = f\gamma\mathbf{b}_{tw}\mathbf{n}_{tw} + \mathbf{E}$ , где  $\mathbf{E}$  — единичный тензор;  $f$  — объемная доля двойников (безразмерная величина, представляющая отношение объемов двойниковых прослоек, в которых произошел сдвиг, к объему всего зерна);  $\gamma$  — величина постоянного сдвига двойника, для ОЦК-кристалла равная 0,707.

Полагая, что двойникование происходит непрерывно, а  $\dot{f}$  существует и конечно, осредненный градиент скорости перемещений двойникования для монокристалла можно записать в виде [6]:

$$\mathbf{I}_{tw}^p = \dot{\mathbf{f}}_{tw} \cdot \mathbf{f}_{tw}^{-1} = \dot{f}\gamma\mathbf{b}_{tw}\mathbf{n}_{tw} = \dot{f}\gamma\mathbf{t}. \quad (5)$$

Таким образом, двойникование может рассматриваться как «псевдоскольжение» со скоростью «двойникового» сдвига  $\dot{f}\gamma$  и ориентационным тензором  $\mathbf{t} = \mathbf{b}_{tw}\mathbf{n}_{tw}$ . При этом симметричная часть (5) является неупругой составляющей тензора деформации скорости за счет двойникования:  $\mathbf{d}_{tw}^p = \left( \mathbf{I}_{tw}^p + (\mathbf{I}_{tw}^p)^T \right) / 2$ .

## 5. Законы упрочнения кристалла

Одним из важнейших компонентов физических теорий пластичности является построение и анализ законов упрочнения монокристалла. Упрочнение материала можно разделить на два типа: упрочнение систем скольжения (УСС) и упрочнение систем двойникования (УСД). УСС определяется взаимодействием движущихся дислокаций как друг с другом, так и с дислокациями леса (взаимодействие типа сдвиг–сдвиг), а также и взаимодействием дислокаций с двойниками (взаимодействие сдвиг–двойникование). В УСД выделяется влияние дислокаций (взаимодействие типа двойникование–сдвиг) и двойников (взаимодействие двойникование–двойникование) на развитие двойников.

В случае УСС при взаимодействии дислокаций по типу сдвиг–сдвиг одиночный сдвиг по активной системе скольжения вызывает увеличение критического напряжения сдвига  $\tau_{cs}^k$ , связанное с ростом плотности дислокаций в активной системе скольжения и взаимодействием дислокаций этой же системы скольжения друг с другом через взаимовлияние полей напряжений. Такое упрочнение называется деформационным (активным) упрочнением. Из экспериментов известно, что наряду с активным упрочнением наблюдается скрытое (латентное) упрочнение, характеризующееся увеличением критических напряжений в других системах, где сдвиг в процессе одиночного скольжения отсутствует:  $\tau_{cs}^l$ ,  $l \neq k$ . Увеличение последних обусловлено как ростом плотности дислокаций в активных системах скольжения, являющихся препятствиями (дислокациями леса) для дислокаций других систем скольжения, так и возникновением других барьеров дислокационного происхождения [1].

При взаимодействии типа сдвиг-двойникование на границе двойника происходит резкая смена систем скольжения, поэтому двойники являются эффективными препятствиями для скольжения мобильных дислокаций. Другими словами, двойники играют роль барьеров, приводящих к скоплению и торможению дислокаций, и, как

следствие, к упрочнению материала. При этом отдельно стоит отметить, что плоскости скольжения дислокаций и габитусные плоскости могут совпадать, и тогда ориентация плоскости и направление скольжения от исходного кристалла к двойнику, согласно критериям образования двойника, изменяться не будут, а вклад такой системы скольжения, вносимый в упрочнение, учитывающее взаимодействие вида сдвиг–двойникование, является минимальным. Следовательно, эволюционное соотношение для сопротивления сдвигу можно записать в виде:

$$\dot{\tau}_{cs}^{\alpha} = (1-f) \sum_{\beta} H_s^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_s^{\beta}| + f \sum_{\beta} H_{tw}^{\alpha\beta} \gamma_{tw}^{\beta} \dot{f}^{\beta}, \quad (6)$$

где первое слагаемое учитывает взаимодействие сдвиг–сдвиг, второе — сдвиг–двойникование. В соотношении (6) обозначено:  $f \stackrel{\text{об}}{=} \sum_{k=1}^{12} f^k$  — объемная доля двойников

всех систем двойникования (СД);  $H_s^{\alpha\beta}$  — матрица упрочнения, отражающая взаимодействие сдвиг–сдвиг между системами скольжения  $\alpha$  и  $\beta$ , которая определяется следующим образом [7]:

$$H_s^{\alpha\beta} = [q_s + (1-q_s)\delta^{\alpha\beta}] H^{\beta}, \quad (7)$$

где  $q_s$  — параметр латентного упрочнения, который в общем случае отличен от нуля;

$H^{\beta}$  — параметр, характеризующий активное упрочнение [8]:  $H^{\beta} = H_0^{\beta} \left( H_0^{\beta} \gamma^{\alpha} / (\tau_0^{\beta} n) + 1 \right)^{n-1}$

( $H_0^{\beta}$  — параметр активного упрочнения при нулевом накопленном сдвиге  $\beta$ ,  $\gamma^{\alpha}$  — накопленный сдвиг системы скольжения  $\alpha$ ,  $n$  — показатель упрочнения);

$H_{tw}^{\alpha\beta}$  — матрица упрочнения, отражающая взаимодействие сдвиг–двойникование между системами скольжения  $\alpha$  и двойникования  $\beta$ , которая в соответствии с вышесказанным имеет вид  $H_{tw}^{\alpha\beta} = H_{tw}^0 - H_{tw}^0 \delta^{\alpha\beta}$ , где  $H_{tw}^0$  — параметр взаимодействия не совпадающих друг с другом систем скольжения и двойникования (на данном этапе исследования он считается одинаковым и постоянным для различных систем); в соотношении для  $H_{tw}^{\alpha\beta}$  учитывается, что двойники не упрочняют материал за счет сдвигов дислокаций, плоскости скольжения которых коллинеарны плоскостям двойникования.

Итак, первое слагаемое соотношения (6) учитывает взаимодействие дислокаций, второе — вклад двойников в упрочнение систем скольжения за счет торможения краевых дислокаций границами двойников. Активное и латентное упрочнение учитываются с помощью матрицы модулей упрочнения (7).

Из рассмотрения упрочнения другого типа — УСД, можно сделать вывод, что каждой плоскости двойникования  $\{112\}$  соответствует единственное направление —  $\langle 111 \rangle$  — направление скольжения двойнивающей дислокации, находящейся в данной плоскости (всего имеется 12 СД). Следовательно, в ОЦК-кристаллах отсутствуют другие направления скольжения двойнивающих дислокаций, лежащих в одной плоскости, и двойники, принадлежащие различным СД, будут играть друг для друга роль барьеров и тем самым вносить вклад в упрочнение. Сдвиги при этом оказывают малое влияние на развитие двойника.

Эволюцию параметра  $\tau_{ctw}^k$  можно представить в следующем виде:  $\dot{\tau}_{ctw}^k = \psi f \sum_{i=1}^{12} \gamma_{tw}^i \dot{f}^i$ ,

где  $\psi$  — параметр упрочнения за счет двойникования.

В ГЦК-решетке, в отличие от ОЦК-кристалла, в скольжение происходит по системам скольжения  $\{111\} \langle 110 \rangle$  (всего 12 СС). Многими исследователями для ГЦК-кристаллов принимается допущение, что начальные критические напряжения сдвига во всех СС

одинаковые. В случае ОЦК-решетки, имеющей три существенно отличающиеся системы плоскостей ( $\{110\}$ ,  $\{112\}$ ,  $\{123\}$ ), такое допущение вряд ли может быть принято.

В дальнейшем для решения поставленной задачи потребуется нахождение начальных критических напряжений сдвига для всех СС. Для оценки начального критического напряжения воспользуемся соотношением Пайерлса–Набарро [1]:

$$\tau_{\Pi-H} = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi d}{(1-\nu)b}\right). \text{ Здесь } G \text{ — модуль упругости; } \nu \text{ — коэффициент Пуассона;}$$

$b$  — модуль вектора Бюргера (характеристика, описывающая искажения кристаллической решетки вокруг дислокации);  $d$  — расстояние между атомными плоскостями в нормальном по отношению к плоскости скольжения направлении, которое определяется формулой  $d = a/\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}$ , где  $\{ABC\}$  — индексы плоскости скольжения,  $a$  — период решетки. Таким образом, согласно формуле Пайерлса–Набарро получается следующая качественная оценка напряжений различных систем скольжения:

$\tau_{\Pi-H\{110\}} < \tau_{\Pi-H\{112\}} < \tau_{\Pi-H\{123\}}$ . Если начальные критические напряжения сдвига СС  $\{110\} < 111 >$  считать независимыми, то напряжения в остальных СС определяются посредством процедуры идентификации в долях  $\tau_{\Pi-H\{110\}}$  (в соответствии с приведенной выше оценкой коэффициенты пропорциональности соотносятся как  $1 < k_{\{112\}} < k_{\{123\}}$ ).

## 6. Модель упруговязкопластического деформирования зерна

На мезоуровне в качестве определяющего соотношения используется закон Гука, при этом учитывается анизотропия кристаллической решетки [9]:

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

где  $\boldsymbol{\sigma}$  — тензор напряжений Коши;  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$  — материальная производная тензора напряжений Коши;  $\boldsymbol{\sigma}^r$  — коротационная производная тензора напряжения Коши;  $\mathbf{c}$  — тензор четвертого ранга упругих свойств ОЦК-кристалла, не зависящий от кинематики нагружения (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 описывается моделью Тейлора. Следует отметить, что напряжения характеризуют именно упругие связи в зерне, учитывающие изменения расстояний между соседними атомами.

Система разрешающих уравнений для зерна в скоростях имеет следующий вид [9]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in}) + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \quad 1 \\ \mathbf{d}^{in} = \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k \mathbf{m}^k + \sum_k^{N^{tw}} \dot{f}^k \gamma_{tw}^k \mathbf{t}^k, \quad 2 \\ \mathbf{d} = \mathbf{D}, \quad 3 \\ \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} (\hat{\nabla} \mathbf{v} - \hat{\nabla} \mathbf{v}^T) - \frac{1}{2} \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k (\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} - \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}), \quad 4 \quad (9) \\ \dot{\tau}_{cs}^k = (1-f) \sum_{\beta} H_s^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_s^{\beta}| + f \sum_{\beta} H_{tw}^{\alpha\beta} \gamma_{tw}^{\beta} \dot{f}^{\beta}, \quad \dot{\tau}_{ctw}^k = \Psi f \sum_{i=1}^{12} \gamma_{tw}^i \dot{f}^i, \quad 5 \\ \dot{\gamma}_s^k = H \left( |\tau_s^k| - \tau_{cs}^k \right) \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_s^k}{\tau_{cs}^k} \right|^{1/m} \text{sign}(\tau_s^k), \quad \dot{f}^k = \begin{cases} H \left( |\tau_{tw}^k| - \tau_{ctw}^k \right) \frac{\dot{\gamma}_0}{\gamma_{tw}^k} \left| \frac{\tau_{tw}^k}{\tau_{ctw}^k} \right|^{1/m}, & \tau_{tw}^k \geq 0, \\ 0, & \tau_{tw}^k < 0. \end{cases} \quad 6 \end{array} \right.$$

Здесь (9)<sub>1</sub> — закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности (8); (9)<sub>2</sub> — кинематическое соотношение, следующее из (2), (4) и (5); (9)<sub>3</sub> — гипотеза Фойгта ( $\mathbf{D}$  — тензор деформации скорости на макроуровне); (9)<sub>4</sub> — соотношение модели поворота Тейлора; (9)<sub>5</sub> — соотношения для скоростей критических напряжений сопротивления сдвигу и двойникованию; (9)<sub>6</sub> — упруговязкопластические соотношения для скоростей сдвига и изменения объемной доли двойников;  $H(\bullet)$  — функция Хевисайда.

В определяющее соотношение (закон Гука в скоростной форме) входят три явные внутренние переменные — скорость неупругих деформаций, спин решетки и тензор упругих характеристик. К неявным внутренним переменным следует отнести скорости критических напряжений сдвига и двойникования, скорости сдвигов дислокаций и двойников, параметры взаимодействия скольжения и двойникования.

## 7. Одноосное растяжение (сжатие)

При обсуждении задачи одноосного растяжения или сжатия монокристалла рассматривается представительный объем мезоуровня (для монокристалла представительные объемы мезо- и макроуровней совпадают) с однородным напряженно-деформированным состоянием; краевая задача не ставится и не решается.

Для определенности принимается, что растяжение (сжатие) происходит вдоль оси  $Ox_1$  фиксированной лабораторной системы координат (ЛСК). Используется гипотеза Фойгта, в соответствии с которой задается кинематическое (жесткое) нагружение; при одноосном нагружении в этом случае возникают определенные сложности, поскольку граничные условия являются смешанными. Одноосное растяжение реализуется следующим образом (для одноосного нагружения предписанной является только одна компонента (в ЛСК) тензора деформации скорости —  $d_{11}^{LCK}(t)$ ), а остальные компоненты определяются из условия, обеспечивающего соответствующее одноосное напряженное состояние [9]):

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^m) + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \quad \mathbf{d}^m = \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k \mathbf{m}^k + \sum_k^{N^{tw}} \dot{f}^k \gamma_{tw}^k \mathbf{t}^k, \quad 1 \\ d_{11}^{LCK} = d_{11}^{LCK(пред)}, \quad \mathbf{d} = \mathbf{D}, \quad 2 \\ \dot{\sigma}_{ij}^{LCK} = 0 \quad (ij) \neq (11), \quad 3 \\ \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} (\hat{\nabla} \mathbf{v} - \hat{\nabla} \mathbf{v}^T) - \frac{1}{2} \sum_k^{N^s} \dot{\gamma}_s^k (\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} - \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}), \quad 4 \quad (10) \\ \dot{\tau}_{cs}^\alpha = (1-f) \sum_\beta H_s^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_s^\beta| + f \sum_\beta H_{tw}^{\alpha\beta} \gamma_{tw} \dot{f}^\beta, \quad \dot{\tau}_{ctw}^k = \psi f \sum_{i=1}^{12} \gamma_{tw} \dot{f}^i, \quad 5 \\ \dot{\gamma}_s^k = H(|\tau_s^k| - \tau_{cs}^k) \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_s^k}{\tau_{cs}^k} \right|^{1/m} \text{sign}(\tau_s^k), \quad \dot{f}^k = \begin{cases} H(|\tau_{tw}^k| - \tau_{ctw}^k) \frac{\dot{\gamma}_0}{\gamma_{tw}} \left| \frac{\tau_{tw}^k}{\tau_{ctw}^k} \right|^{1/m}, & \tau_{tw}^k \geq 0, \\ 0, & \tau_{tw}^k < 0. \end{cases} \quad 6 \end{array} \right.$$

Здесь (10)<sub>1</sub> — определяющее соотношение и кинематическое соотношение для неупругой составляющей тензора деформации скорости; (10)<sub>2</sub> — кинематическое условие; (10)<sub>3</sub> — условие одноосного напряженного состояния; (10)<sub>4</sub> — соотношения модели поворота Тейлора; (10)<sub>5</sub> — соотношения для скоростей критических напряжений сдвигу и двойникованию; (10)<sub>6</sub> — упруговязкопластические соотношения для скоростей сдвига и изменения объемной доли двойников.

В приведенной системе (10) содержится  $48+12+5+6+1+3$  уравнений для определения 48 неизвестных скоростей критических напряжений сдвига  $\dot{\tau}_{cs}^{\alpha}$ , 12 критических напряжений двойникования  $\dot{\tau}_{ctw}^k$ , 6 компонент тензора напряжений  $\sigma$ , 6 компонент тензора деформации скорости  $\mathbf{d}$ , 3 компонент тензора спина  $\omega$ . Следует отметить, что из геометрического смысла тензора вихря и условий нагружения (боковые грани образца остаются параллельными самим себе) следует равенство тензора вихря нулевому тензору.

## 8. Идентификация параметров модели

Процедуры идентификации и верификации модели осуществлялись на основе экспериментальных данных одноосного нагружения монокристаллов тантала [10] и альфа-железа ( $\alpha$ -Fe) [11] при различных ориентациях оси нагружения по отношению к кристаллографической системе координат. На стадии идентификации модели использовались экспериментальные данные на сжатие монокристалла тантала в направлении [100] и растяжение монокристалла  $\alpha$ -Fe в направлении [001]; на стадии верификации модели — экспериментальные данные на сжатие монокристалла тантала в направлении [110] и растяжение монокристалла  $\alpha$ -Fe в направлении [011].

Для идентификации модели принималась гипотеза о том, что параметры модели условно делятся на два типа: «физические» или параметры состояния (их значения считаются известными) и параметры управления, значения которых определяются в процессе идентификации. К первому типу относились параметры, которые были либо найдены другими исследователями, либо установлены с помощью простых процедур, не требующих решения задачи оптимизации.

Параметрами первого типа служили: упругие константы  $c_{1111}, c_{1122}, c_{1212}$ ; начальные критические напряжения сдвига  $\tau_{cs0}^k$  для плоскостей легкого скольжения  $\{110\}$ ; начальные критические напряжения двойникования  $\tau_{ctw0}^k$ ; скорость сдвига  $\dot{\gamma}_0$  в упруговязкопластическом соотношении при напряжении, равном критическому; параметр скоростной чувствительности  $m$  в упруговязкопластическом соотношении; отношения начальных критических напряжений в плоскостях скольжения  $\{112\}$  и  $\{123\}$   $k_{\{112\}}, k_{\{123\}}$  к начальному критическому напряжению в плоскости легкого скольжения  $\{110\}$ .

Ко второму типу параметров относились: параметр активного упрочнения при нулевом накопленном сдвиге, характеризующий упрочнение за счет барьеров, препятствующих движению дислокаций на выделенной системе скольжения  $H_0^{\beta}$ ; параметр, отвечающий за скорость упрочнения за счет сдвигов  $\tau_0^{\beta}$ ; параметр упрочнения вследствие двойникования  $\psi$ ; параметр взаимодействия не совпадающих систем скольжения и двойникования  $H_{tw}^0$ ; параметр латентного упрочнения  $q_s$ ; показатель упрочнения  $n$ .

Идентификация параметров первого типа  $c_{1111}, c_{1122}, c_{1212}, \tau_{cs0}^k, \tau_{ctw0}^k, \dot{\gamma}_0, m, k_{\{112\}}, k_{\{123\}}$  осуществлялась по экспериментальным данным начальной стадии деформирования. Нетривиальные компоненты  $c_{1111}, c_{1122}, c_{1212}$  тензора упругих свойств  $\mathbf{c}$  в кристаллографической системе координат соответствовали значениям модулей упругости монокристаллов тантала или  $\alpha$ -Fe (в зависимости от рассматриваемого эксперимента). Начальные критические напряжения сдвига  $\tau_{cs0}^k$  в плоскости легкого скольжения  $\{110\}$  определялись по диаграмме одноосного нагружения, используемой для идентификации модели.

Следует отметить, что основной плоскостью скольжения в кристаллах  $\alpha$ -Fe является плоскость  $\{110\}$  [4], поэтому отношения начальных критических напряжений в плоскостях скольжения  $\{112\}$  и  $\{123\}$  к начальным критическим напряжениям в плоскости легкого скольжения  $\{110\}$  можно оценить с помощью напряжений Пайерлса–Набарро, которые дают следующие значения коэффициентов пропорциональности:  $k_{\{112\}} = 4,7$ ;  $k_{\{123\}} = 24,7$ . Для кристаллов тантала, деформируемых сжатием, скольжение реализуется по плоскостям  $\{110\}$  и  $\{112\}$  [11]. Уменьшение параметра  $k_{\{112\}}$  позволяет учесть этот экспериментальный факт; в расчетах для тантала принято:  $k_{\{112\}} = 4,7$ ,  $k_{\{123\}} = 24,7$ . Из экспериментов известно, что начальные критические напряжения двойникового должны превышать начальные критические напряжения сдвига, поэтому первые должны соответствовать условию  $\tau_{ctw0}^k > \tau_{cs0}^k$ . Скорость сдвига  $\dot{\gamma}_0$  при напряжении, равном критическому, в упруговязкопластическом соотношении должна быть постоянной  $\dot{\gamma}_0 = 1 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$  для согласования с условием квазистатического нагружения, а параметр скоростной чувствительности — достаточно малым и постоянным:  $m = 0,012$ , то есть рассматриваемые материалы малочувствительны к скорости деформирования.

Параметры, характеризующие состояние системы, обозначались как  $\mathbf{x} = \{c_{1111}, c_{1122}, c_{1212}, \tau_{cs0}^k, \tau_{ctw0}^k, \dot{\gamma}_0, m, k_{\{112\}}, k_{\{123\}}\}$ , параметры управления, которые определялись из решения задачи оптимизации, — как  $\mathbf{u} = \{H_0^\beta, \tau_0^\beta, q_s, n, \psi, H_{tw}^0\}$ .

Ставилась следующая задача оптимизации: при заданных и фиксированных параметрах состояния  $\mathbf{x}$  требуется найти параметры управления  $\mathbf{u}$ , доставляющие минимум функционалу

$$\sum_i (\sigma_u^{\varepsilon_i}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) - \sigma_*^{\varepsilon_i})^2 \rightarrow \min, \quad (11)$$

при ограничениях:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in}) - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \quad \mathbf{d}^{in} = \sum_k \dot{\gamma}_s^k \mathbf{m}^k + \sum_k \dot{f}^k \gamma_{tw}^k \mathbf{t}^k, \\ \mathbf{d}_{11}^{LCK} = \mathbf{d}_{11}^{LCK(nped)}, \\ \dot{\sigma}_{ij}^{LCK} = 0 \quad (ij) \neq (11), \\ \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{v}} \mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}} \mathbf{v}^T) - \frac{1}{2} \sum_k \dot{\gamma}_s^k (\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} - \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}), \\ \dot{\tau}_{cs}^\alpha = (1-f) \sum_\beta H_s^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}_s^\beta| + f \sum_\beta H_{tw}^{\alpha\beta} \gamma_{tw} \dot{f}^\beta, \quad \dot{\tau}_{ctw}^k = \psi f \sum_{i=1}^{12} \gamma_{tw} \dot{f}^i, \\ \dot{\gamma}_s^k = H \left( |\tau_s^k| - \tau_{cs}^k \right) \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_s^k}{\tau_{cs}^k} \right|^{1/m} \text{sign}(\tau_s^k), \quad \dot{f}^k = \begin{cases} H \left( |\tau_{tw}^k| - \tau_{ctw}^k \right) \frac{\dot{\gamma}_0}{\gamma_{tw}} \left| \frac{\tau_{tw}^k}{\tau_{ctw}^k} \right|^{1/m}, & \tau_{tw}^k \geq 0, \\ 0, & \tau_{tw}^k < 0. \end{cases} \end{array} \right. \quad (12)$$

где  $\sigma_*^{\varepsilon_i}$  — значение напряжений, определяемое по аппроксимированной экспериментальной диаграмме нагружения при интенсивности деформации  $\varepsilon_i$ ;  $\sigma_u^{\varepsilon_i}$  — интенсивность напряжений, рассчитанная с помощью модели; индекс  $i$  обозначает номер точки на аппроксимированной экспериментальной диаграмме нагружения.

В системе ограничений (12) имелось  $48 + 12 + 5 + 6 + 1 + 3$  уравнений для определения 48 неизвестных скоростей критических напряжений сдвига  $\dot{\tau}_{cs}^\alpha$ , 12 критических

напряжений двойникования  $\dot{\tau}_{c_{nv}}^k$ , 6 компонент тензора напряжений  $\sigma$ , 6 компонент тензора деформации скорости  $\mathbf{d}$ , 3 компонент тензора скорости поворота  $\omega$ .

В решении задачи оптимизации выделялось два этапа. На первом этапе численно, методом Хука–Дживса, решалась задача оптимизации (11) при ограничениях (12) до достижения начального критического напряжения двойникования  $\tau_{c_{nv}0}^k$  (в какой-либо системе двойникования). При этом параметрами управления являлись только параметры, характеризующие скольжение  $\mathbf{u} = \{H_0^\beta, \tau_0^\beta, q_s, n\}$ . На втором этапе после достижения  $\tau_{c_{nv}0}^k$  параметрами управления становились  $\mathbf{u} = \{\psi, H_{nv}^0\}$ . Таким образом, сначала идентифицировались параметры, определяющие скольжение, затем — параметры двойникования и взаимодействия двух мод неупругого деформирования (скольжения и двойникования). Данный прием позволил сократить время вычислений и получить удовлетворительные результаты на стадии верификации модели.

В результате были найдены следующие параметры:

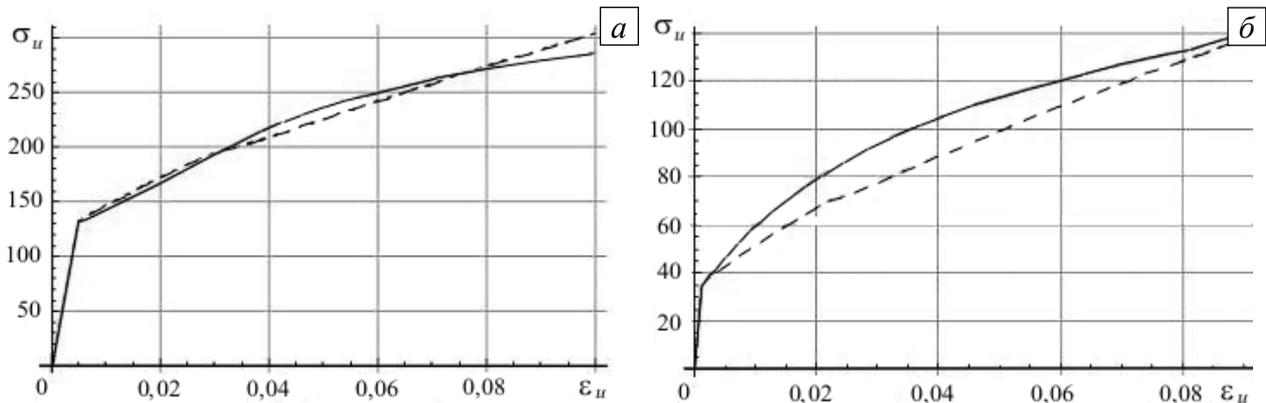
– для монокристалла тантала

$n = 0,53$ ,  $H_0^\beta = 1,4 \cdot 10^9$  Па,  $\tau_0^\beta = 81 \cdot 10^6$  Па,  $\psi = 8,1 \cdot 10^{11}$  Па,  $H_{nv}^0 = 2 \cdot 10^9$  Па,  $q = 1,2$   
при параметрах состояния:  $c_{1111} = 220 \cdot 10^9$  Па,  $c_{1122} = 166 \cdot 10^9$  Па,  $c_{1212} = 87 \cdot 10^9$  Па,  
 $\tau_{cs0}^k = 90 \cdot 10^6$  Па,  $\tau_{c_{nv}0}^k = 155 \cdot 10^6$  Па,  $\dot{\gamma}_0 = 1 \cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$ ,  $m = 0,012$ ,  $k_{\{112\}} = 1,4$ ,  $k_{\{123\}} = 24,7$ ;

– для монокристалла  $\alpha$ -Fe

$n = 0,58$ ,  $H_0^\beta = 0,84 \cdot 10^9$  Па,  $\tau_0^\beta = 24 \cdot 10^6$  Па,  $\psi = 9,9 \cdot 10^{11}$  Па,  $H_{nv}^0 = 1,9 \cdot 10^9$  Па,  $q = 1,3$   
при параметрах состояния:  $c_{1111} = 200 \cdot 10^9$  Па,  $c_{1122} = 137 \cdot 10^9$  Па,  $c_{1212} = 116 \cdot 10^9$  Па,  
 $\tau_{cs0}^k = 24 \cdot 10^6$  Па,  $\tau_{c_{nv}0}^k = 56 \cdot 10^6$  Па,  $\dot{\gamma}_0 = 1 \cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$ ,  $m = 0,012$ ,  $k_{\{112\}} = 4,7$ ,  $k_{\{123\}} = 24,7$ .

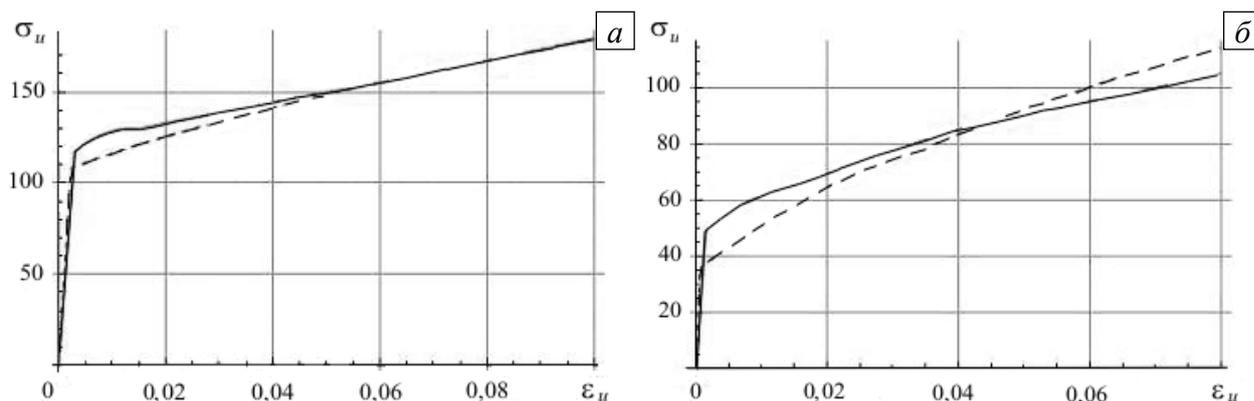
На рисунке 2 показаны диаграммы нагружения, экспериментальные и вычисленные с помощью предлагаемой модели, на стадии идентификации.



**Рис. 2.** Стадия идентификации: диаграммы сжатия монокристалла тантала в направлении [100] (а) и растяжения монокристалла  $\alpha$ -Fe в направлении [001] (б), полученные с помощью предлагаемой модели (штриховые линии) и экспериментальные (сплошные линии)

## 9. Результаты расчетов

На стадии верификации модели при сжатии монокристалла тантала в направлении [110] и растяжении монокристалла  $\alpha$ -Fe в направлении [011] были получены результаты, показанные на рисунке 3. Видно, что для монокристалла тантала диаграммы нагружения (в осях интенсивность напряжений  $\sigma_u$  — интенсивность деформаций  $\epsilon_u$ ) в большей степени приближены друг к другу, чем диаграммы  $\alpha$ -Fe.

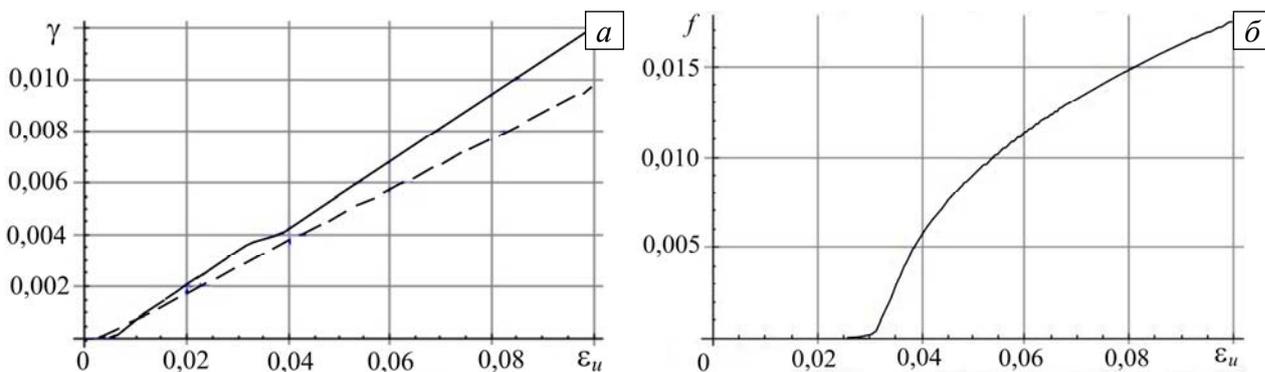


**Рис. 3.** Стадия верификации: диаграммы сжатия монокристалла тантала в направлении  $[110]$  (а) и растяжения монокристалла  $\alpha$ -Fe в направлении  $[011]$  (б), полученные с помощью предлагаемой модели (штриховые линии) и экспериментальные (сплошные линии)

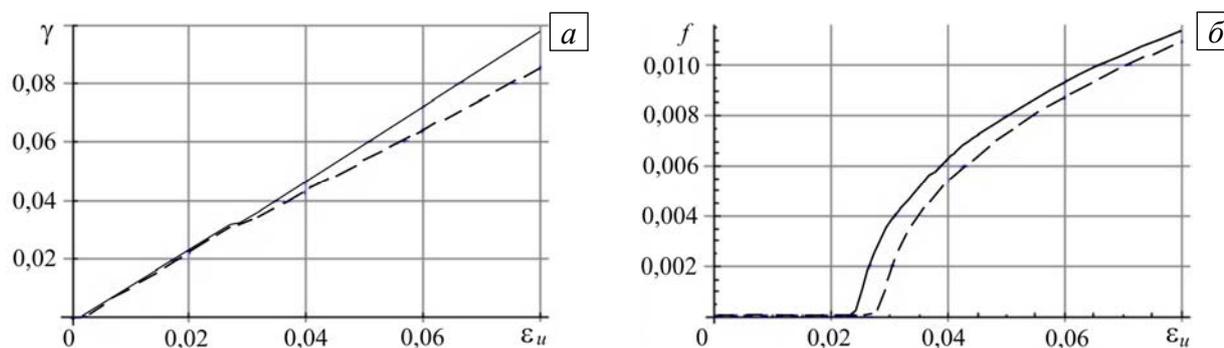
При деформировании сжатием монокристалла тантала в направлении  $[100]$  происходит сдвиг по 8 системам скольжения:  $(\bar{1}10)[111]$ ,  $(\bar{1}10)[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $(110)[\bar{1}11]$ ,  $(110)[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $(101)[11\bar{1}]$ ,  $(101)[\bar{1}11]$ ,  $(\bar{1}01)[111]$ ,  $(\bar{1}01)[1\bar{1}\bar{1}]$ , и двойникование — по 2 системам двойникования:  $(211)[\bar{1}11]$ ,  $(\bar{2}\bar{1}\bar{1})[1\bar{1}\bar{1}]$ ; при деформировании в направлении  $[110]$  наблюдается сдвиг по одной СС  $(\bar{1}\bar{2}1)[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ , а двойникование отсутствует.

На рисунке 4 показаны зависимости накопленного сдвига  $\gamma$  по всем СС и объемной доли двойников  $f$  по всем СД от интенсивности деформаций. Поскольку при одноосном растяжении монокристалла тантала в направлении  $[100]$  происходит множественное скольжение и двойникование, а при деформировании в направлении  $[110]$  — одиночное скольжение без двойникования, это объясняет неплохое соответствие диаграмм нагружения на стадии верификации модели монокристалла тантала.

При деформировании монокристалла  $\alpha$ -Fe в направлении  $[001]$  совершается сдвиг по 8 системам скольжения:  $(011)[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $(011)[11\bar{1}]$ ,  $(0\bar{1}1)[111]$ ,  $(0\bar{1}1)[\bar{1}11]$ ,  $(101)[11\bar{1}]$ ,  $(101)[\bar{1}11]$ ,  $(\bar{1}01)[111]$ ,  $(\bar{1}01)[1\bar{1}\bar{1}]$ , а двойникование — по трем СД:  $(112)[11\bar{1}]$ ,  $(1\bar{1}\bar{2})[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $(\bar{1}\bar{1}\bar{2})[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ; при деформировании в направлении  $[011]$  имеет место сдвиг по 4 СС:  $(\bar{1}10)[111]$ ;  $(\bar{1}10)[11\bar{1}]$ ;  $(101)[\bar{1}11]$ ;  $(\bar{1}01)[111]$  и двойникование по одной СД:  $(\bar{2}11)[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ .



**Рис. 4.** Накопленный сдвиг всех СС (а) и объемная доля двойников всех СД (б) при деформировании монокристалла тантала в направлении  $[100]$  (сплошные линии) и в направлении  $[110]$  (штриховая линия)



**Рис. 5.** Накопленный сдвиг всех СС (а) и объемная доля двойников (б) при деформировании монокристалла  $\alpha$ -Fe в направлении [001] (сплошные линии) и в направлении [011] (штриховые линии)

На рисунке 5 приведены зависимости накопленного сдвига по всем СС  $\gamma$  и объемной доли двойников по всем СД  $f$  от интенсивности деформаций. При деформировании  $\alpha$ -Fe в направлении [001] скольжение и двойникование происходят по большему числу СС и СД, чем при нагрузке вдоль направления [011], что объясняет более интенсивное упрочнение  $\alpha$ -Fe при растяжении вдоль [001].

## 10. Заключение

В большинстве физических теорий пластичности считается, что основным механизмом неупругого деформирования является внутризеренное скольжение краевых дислокаций [12–14]. В данной работе предложено использовать физическую упруговязкопластическую модель, в которой учитывается не только движение дислокаций, но и двойниковая мода деформирования.

Рассмотрены процессы зарождения и развития двойников, а также их взаимодействие с подвижными дислокациями. На основе физического анализа двух мод неупругого деформирования — двойникования и скольжения краевых дислокаций, записаны соотношения законов упрочнения. Приведены постановка задачи одноосного нагружения монокристалла, алгоритм и результаты использования программы его реализации. Предложена и осуществлена процедура идентификация предлагаемой модели. Верификация модели показала удовлетворительное соответствие теоретических и экспериментальных результатов.

Представленная в настоящей статье модель монокристалла может быть использована в сочетании с ранее разработанными алгоритмами и программами (см., например, [15, 16]) для анализа поведения поликристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-96010-р\_Урал\_а, № 10-08-00156-а).

## Литература

1. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности. – Пермь: ПНИПУ, 2011. – 419 с.
2. Taylor G.I., Elam C.F. The distortion of iron crystals // Proc. Roy. Soc. London. A. – 1926. – V. 112, N. 761. – P. 337-361.
3. Федоров В.А., Плужникова Т.Н., Кириллов А.М. Характеристики двойникования в поликристаллическом ОЦК сплаве Fe+3,25 Si // Вестник ТГУ. – 2007. – Т. 12, № 1 – С. 66-68.
4. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.
5. Вишняков Я.Д., Бабарэко А.А., Владимиров С.А., Эгиз И.В. Теория образования текстур в металлах и сплавах. – М.: Наука, 1979. – 344 с.
6. Myagchilov S., Dawson P.R. Evolution of texture in aggregates of crystals exhibiting both slip and twinning // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. – 1999. – V. 7, N. 6. – P. 975-1004.
7. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals // Acta Metall. – 1985. – V. 33, N. 6. – P. 923-953.

8. *Inal K., Neale K.W.* High performance computational modelling of microstructural phenomena in polycrystalline metals // *Mechanics & Construction*. – 2006. – V. 140, N. 5. – P. 583-593.
9. *Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И.* Анализ деформирования ГЦК-металлов с использованием физической теории пластичности // *Физ. мезомех.* – 2010. – Т. 13, № 3. – С. 21-30.
10. *Rittel D., Bhattacharyya A., Poon B., Zhao J., Ravichandran G.* Thermomechanical characterization of pure polycrystalline tantalum // *Mater. Sci. Eng.* – 2007. – V. 447, N. 1. – P. 65-70.
11. *Yalcinkaya T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D.* BCC crystal plasticity for multi-stage loading processes. Internal Poster. – 2006. – [www.mate.tue.nl/mate/pdfs/7222.pdf](http://www.mate.tue.nl/mate/pdfs/7222.pdf) (дата обращения: 01.08.10).
12. *Трусов П.В., Волегов П.С.* Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 1. Жесткопластические и упругопластические модели // *Вестник ПГТУ. Механика*. – 2011. – № 1. – С. 5-45.
13. *Трусов П.В., Волегов П.С.* Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 2. Вязкопластические и упруговязкопластические модели // *Вестник ПГТУ. Механика*. – 2011. – № 2. – С. 146-197.
14. *Трусов П.В., Волегов П.С.* Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 3. Теории упрочнения, градиентные теории // *Вестник ПГТУ. Механика*. – 2011. – № 3. – С. 101-131.
15. *Нечаева Е.С., Трусов П.В.* Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации модели мезоуровня // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2011. – Т. 4, № 1. – С. 74-89.
16. *Нечаева Е.С., Трусов П.В.* Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации для представительного объема макроуровня // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2011. – Т. 4, № 2. – С. 82-95.

*Поступила в редакцию 24.03.11*

---

*Сведения об авторах*

*Кондратьев Никита Сергеевич*, студ., Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ), 614990, Пермь, Комсомольский проспект, д. 29; E-mail: [kondratevns@gmail.com](mailto:kondratevns@gmail.com)  
*Трусов Петр Валентинович*, дфмн., проф., зав. каф., ПНИПУ; E-mail: [tpv@matmod.pstu.ac.ru](mailto:tpv@matmod.pstu.ac.ru)