

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕНСИВНЫХ НЕУПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ И НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ\*

П.С. Волегов, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

А.Ю. Янц, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Э.Р. Шарифуллина, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Д.Г. Селуков, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

М.А. Тельканов, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

В.С. Озерных, *Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Рассмотрены вопросы, связанные с описанием процессов неупругих деформаций поликристаллических материалов, для которых существенным является влияние размера зерна на процессы эволюции внутренней структуры и сопутствующего изменения физико-механических свойств. В качестве базовой принята двухуровневая математическая модель упруговязкопластического деформирования поликристалла, дополненная описанием процессов упрочнения, в том числе за счет границ зерен, и разворотов (ротаций) кристаллических решеток. Для учета механизмов упрочнения предложено дополнительное слагаемое в законе упрочнения, описывающее увеличение критических сдвиговых напряжений дислокаций за счет взаимодействия последних с дислокациями ориентационного несоответствия, а также в явном виде учитывающее взаимную разориентацию решеток соседних зерен. Для описания механизмов ротаций, фрагментации и дробления зерен предложена подмодель с введением промежуточного структурного уровня, в которой основной причиной разворотов считается несовместность неупругих деформаций в соседних зернах, а анализ фрагментно-зеренной структуры осуществляется путем определения типа границы. Проведены численные эксперименты по деформированию представительного объема поликристалла, результаты которых согласуются с законом Холла–Петча; кроме того, получены новые результаты, позволяющие оценить характер и динамику процессов разворотов кристаллических решеток, приводящих к фрагментации и дроблению зерен.

**Ключевые слова:** наноматериалы, функциональные материалы, физические теории пластичности, межзеренное проскальзывание, закон Холла–Петча, упрочнение, фрагментация.

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Пермского края (грант № 14-01-96008).

Внутренняя структура поликристаллических материалов и ее эволюция в процессе интенсивных неупругих деформаций оказывают существенное влияние на физико-механические и эксплуатационные характеристики материалов и конструкций из них [1]. Кроме того, существенная перестройка дефектной структуры материала в процессах интенсивной пластической деформации приводит к накоплению поврежденности [2–4]. Дополнительным фактором, определяющим необходимость развития «тонких» моделей неупругого деформирования, является исследование особенностей деформирования субмикроструктурных и нанокристаллических материалов в связи с интенсивным развитием технологий производства соответствующих материалов, деталей и покрытий из них, обладающих уникальными физико-механическими свойствами [5].

Интенсивные пластические деформации практически всегда сопровождаются такими явлениями, как повороты (ротации) кристаллических решеток, фрагментация и дробление зерен металла [6]. Каждый из перечисленных процессов вносит существенный вклад в физико-механические свойства материала; так, в результате ротации кристаллических решеток зерен и их фрагментов происходит образование кристаллографической текстуры материала, которая порождает существенную анизотропию его свойств [7]. Фрагментация приводит к изменению дефектной структуры материала, дробление вызывает изменение предела текучести [8]; расчет предельно допустимых силовых нагрузок накладывает на применяемые материалы ограничения, учет которых обеспечивает работу конструкции в необходимом эксплуатационном режиме. Для большинства металлов влияние размера зерна на предел текучести металлов описывается известным соотношением Холла–Петча [9]:

$$\sigma_T = \sigma_0 + kd^{-1/2}, \quad (1)$$

где  $\sigma_T$  – предел текучести,  $d$  – средний размер зерна,  $\sigma_0$ ,  $k$  – параметры материала. При этом известно, что для сверхмало-

го размера зерна соотношение (1) перестает выполняться, более того, говорят даже об «обратном» законе Холла–Петча [10].

Кроме того, процессы неупругого деформирования, как правило, неизбежно приводят к увеличению предела текучести материала (т.н. упрочнению); при этом на уровне дислокационной структуры упрочнение связывают с взаимодействием дислокаций между собой, скоплениями дислокаций, границами зерен [11]. В связи с этим возникает необходимость физически корректного описания взаимодействия дислокаций между собой, а также с границами зерен, которое приводит к упрочнению.

Экспериментальные методы исследования указанных выше процессов весьма ресурсоемки и не позволяют оценить микро- и мезоструктуру, во-первых, в объеме материала, а во-вторых, в ходе самого процесса обработки. Существующие же в настоящее время макрофеноменологические или прямые подходы к моделированию процессов глубокого пластического деформирования или не позволяют адекватно описывать эволюцию микроструктуры в поликристаллических изделиях в силу довольно грубого учета (или неучета) физики неупругого деформирования, или же требуют существенных вычислительных ресурсов для моделирования реальных процессов в трехмерной постановке (т.н. прямые модели).

Следовательно, разработка физически обоснованных теорий пластичности поликристаллов, учитывающих неоднородность строения, размеры, форму и ориентацию структурных элементов и позволяющих описать процессы деформирования материалов с мелким и сверхмелким размером зерна является в настоящий момент актуальной. Процесс пластического деформирования является многоуровневым, при этом уже на уровне зерна большую роль начинают играть вращательные моды деформирования и моментные напряжения [12]. Поэтому авторы считают оправданным построение физически обоснованной многоуровневой модели интенсивных неупругих деформаций моно- и

поликристаллов с учетом эволюции размеров и ориентации элементов структуры (конгломератов зерен, отдельных зерен и т.д.), ротаций кристаллических решеток кристаллитов, внутризеренного и зернограничного упрочнения, позволяющей получать физико-механические свойства образца на макроуровне, которая бы учитывала влияние размера зерна на деформационные механизмы и могла быть применена для исследования особенностей поведения субмикроструктурных и нанокристаллических материалов.

Для достижения поставленных целей применена двухуровневая модель неупругого деформирования поликристаллов, подробное описание которой содержится, например, в [12–13]. Здесь опишем подмодели упрочнения, ротации, фрагментации и дробления зерен.

В рамках подхода к построению законов упрочнения считается, что изменение критических сдвиговых напряжений можно описать, используя аддитивность скоростей критических напряжений:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_{bas}^{(k)} \left( \dot{\gamma}^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)} \right) + \dot{\tau}_{GBH}^{(k)} \left( \dot{\gamma}^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_m^{(i)} \right), \quad i, k = \overline{1, K}, \quad (2)$$

где  $\dot{\gamma}^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}$  – скорость сдвига и накопленный сдвиг по  $i$ -й системе скольжения.

Выражение для скорости увеличения критических напряжений сдвига дислокаций, характеризующее механизм базового упрочнения, можно записать следующим образом:

$$\dot{\tau}_{bas}^{(k)} = \tau_{c0}^{(k)} \left( \sum_{j=1}^K a_j^{(k)} \left( \frac{\dot{\gamma}^{(j)}}{\dot{\gamma}_0} \right)^\psi \left( \frac{\dot{\gamma}^{(j)}}{\dot{\gamma}_0} \right)^\delta \right), \quad (3)$$

$$\dot{\gamma}^{(j)} \neq 0,$$

где  $\tau_{c0}^{(k)}$  – начальное критическое напряжение сдвига дислокаций,  $a_j^{(k)}$  – модули упрочнения,  $\dot{\gamma}_0$  – характерная скорость сдвига в вязком законе,  $\psi$  и  $\delta$  – параметры материала. В (3) учитывается «чистое» скольжение полных дислокаций и их

взаимодействие с препятствиями. Это слабое описывает упрочнение при любых ненулевых сдвигах по любым системам скольжения.

При благоприятной разориентировке зерен дислокации проходят через границу; при этом в границе остаются дислокации ориентационного несоответствия (ДОН), которые создают поля напряжений, препятствующие дальнейшему движению дислокаций в данной системе скольжения, что приводит к возникновению явления зернограничного упрочнения [14]. Выражение для зернограничного упрочнения можно записать как

$$\dot{\tau}_{GBH}^{(k)} = \eta \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \xi_i^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)} \gamma^{(k)} S_i, \quad (4)$$

где  $\eta$  – параметр модели,  $V$  – объем зерна,  $S_i$  – площадь соприкосновения данного и соседнего зерна,  $\xi_i^{(k)}$  – мера разориентации текущего и соседнего кристаллита [15],  $N$  – число фасеток границ для данного зерна.

Для описания процессов фрагментации и дробления зерен предлагается использовать модифицированную двухуровневую модель неупругого деформирования поликристаллов [10, 12] с выделением промежуточного масштабного квазиуровня (зерна) – совокупности слабозориентированных фрагментов, отделенных друг от друга большеугловыми границами [16]. В таком случае элементом нижнего масштабного уровня становится отдельный фрагмент с однородной ориентацией кристаллической решетки (рис. 1).

Для описания ротаций использована модель, связанная с несовместностью

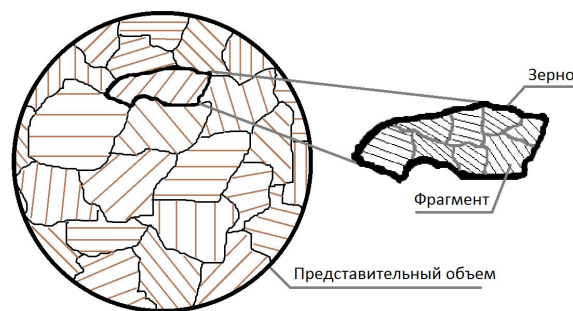


Рис. 1. Масштабные уровни модели

пластических сдвигов [17]. Стоит отметить, что в процессе деформирования вращаться могут как отдельные зерна, так и их фрагменты. Для удобства назовем структурную единицу, вращающуюся в данный момент как единое целое, элементом ротации (ЭР). Причиной разворотов решеток ЭР в модели считается вращательный момент, возникающий из-за появления ДОНов на поверхности раздела (границе) ЭР при переходе дислокации из одного ЭР в другой [18].

В модель ротаций [17] внесены два ключевых изменения. Первое изменение связано с наложением вращений на разных масштабных уровнях, предлагается схема наложения вращений «сверху-вниз». Это означает, что поворот решетки фрагментов зерен будет состоять не только из собственного вращения, но и из вращения зерна, в состав которого входит фрагмент. Тогда спин решетки фрагмента представляется суммой трех слагаемых, первое из которых совпадает со спином решетки из модели стесненного поворота по Тейлору [10] и описывает поворот решетки как жесткого целого:

$$\omega_{\text{фр}} = \mathbf{w} - \sum_{k=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}_{(i)}^{(k)} (\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} - \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}) + \omega_{\text{соб}} + \omega_{\text{зерна}}, \quad (5)$$

где  $\mathbf{w}$  – тензор вихря, а собственный спин ЭР и спин зерна определяются из модели [12, 17].

Вторая существенная модификация модели ротаций связана с введением так

называемого «ротационного упрочнения» [16]. В предположении о том, что критический вращательный момент  $M_{c(i)}$  зависит от накопленного поворота и размеров самого кристаллита, было записано следующее соотношение:

$$\dot{M}_{c(i)} = \frac{K_1}{V_{(i)}} \exp(-K_2 \Phi_{(i)}), \quad (6)$$

где  $K_1, K_2$  – параметры материала,

$\Phi_{(i)}(t) = \int_0^t \sqrt{\omega_{\text{фр}} : \omega_{\text{фр}}} d\tau$  – накопленный поворот решетки.

В результате проведенного в работе ряда численных экспериментов на представителем объеме поликристалла технической чистой меди получена зависимость условного предела текучести от размера зерна (рис. 2).

Зависимость, полученная в численном эксперименте, хорошо согласуется с законом Холла–Петча (1), при этом коэффициент Холла–Петча близок к наблюдаемому экспериментально для меди – порядка  $0,1 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$ .

С использованием построенной модели ротаций проведен эксперимент по одноосному растяжению представителем объема поликристалла, состоящего из 512 зерен, разбитых на 8 конгломератов, каждый из которых состоит из 64 изначально одинаково ориентированных фрагментов. Такая фрагментно-зеренная структура сгенерирована для того, чтобы в модельном материале присутствовал стык 8 раз-

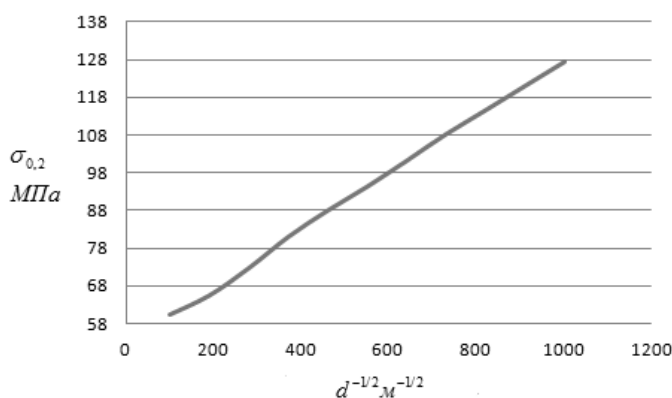


Рис. 2. Зависимость условного предела текучести от размера зерна. Диапазон размера зерна  $10^{-6} \div 10^{-4} \text{ м}$

ноориентированных решеток. В области стыка будут наблюдаться большие скачки пластических деформаций и локализоваться активные ротации.

Одними из главных показателей характера ротаций являются количество и скорость вращения решеток ЭР. Поэтому было проведено исследование зависимости количества элементов, участвующих в ротациях (рис. 3), и средней скорости их вращения (рис. 4) от интенсивности накопленной деформации.

По результатам исследования можно сделать следующий вывод: число фрагментов, принимающих участие в ротациях, с увеличением накопленной деформации начинает существенно снижаться, в то время как скорость вращения решеток увеличивается вплоть до момента формирования кристаллографической текстуры, на обеих диаграммах этот момент отображается четкими экстремумами. Данное явление можно объяснить сохранением некоторой эквивалентной энергии: в то время как одни фрагменты в процессе разворотов занимают положение с наименьшей энергией и прекращают свое вращение, другие зерна ускоряют вращение. Таким

образом, полная энергия системы, приходящаяся на вращение, распределяется между активными фрагментами зерен.

При этом очевидно, что скорость вращения фрагментов после образования текстуры заметно падает, а их количество несколько увеличивается, при этом характер текстуры остается неизменным вплоть до окончания деформирования, что подтверждают построенные полюсные фигуры (рис. 5). Это говорит о том, что фрагменты зерен совершают небольшие «колебания» около некоторого равновесного положения.

Кроме того, проведено исследование удельной мощности, затрачиваемой на поворот решеток ЭР в эксперименте на одноосное растяжение. В результате была получена зависимость, изображенная на рис. 6, а.

Из полученных данных видно, что механизм ротационного упрочнения заметно снижает мощность, приходящуюся на ротации решеток ЭР. На рис. 6, б приводится сравнение мощности, приходящейся на ротации, со средней мощностью, затрачиваемой на деформацию, из которых следует, что максимум мощности, приходящейся на

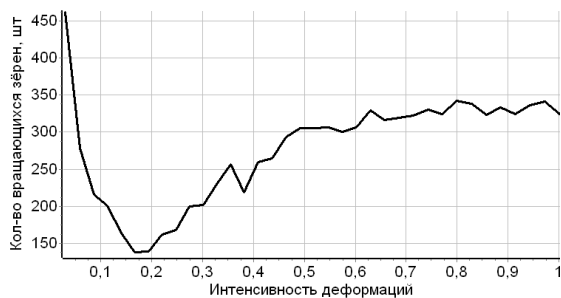


Рис. 3. Зависимость количества вращающихся фрагментов от интенсивности деформации

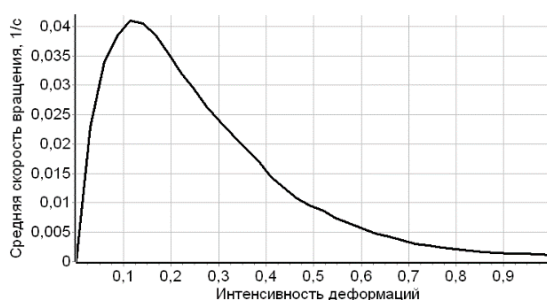


Рис. 4. Зависимость средней скорости вращения фрагментов от интенсивности деформации

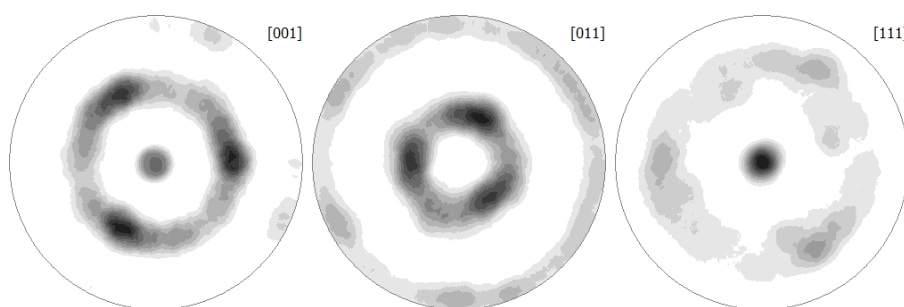


Рис. 5. Полюсные фигуры распределения ориентаций решеток фрагментов в поликристалле, построенные для направлений [001], [011] и [111]

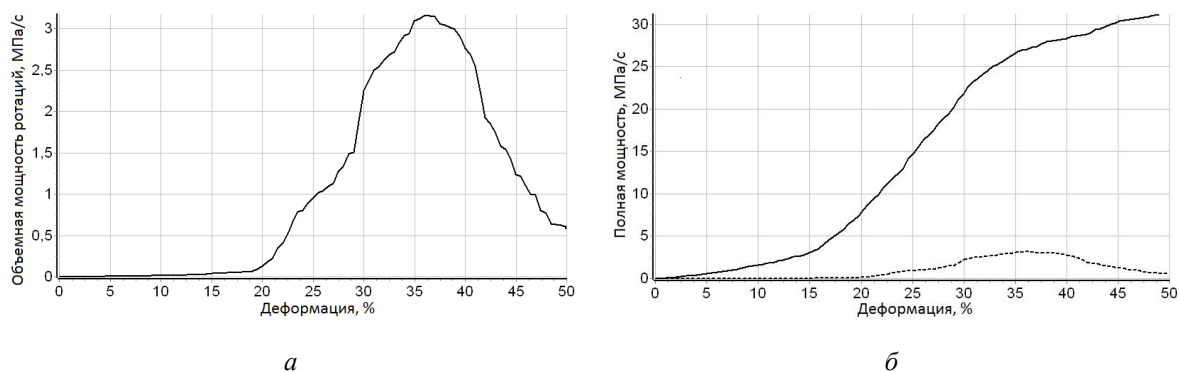


Рис. 6. Мощность, приходящаяся на ротации ЭР (а), средняя мощность энергии деформации (б). Пунктиром нанесен график (а)

ротации, составлял порядка 12% от общей закачиваемой в систему энергии. Кроме того, были проанализированы получаемые полюсные фигуры (рис. 7), из которых видно, что ротационное упрочнение влияет на остроту получаемой текстуры.

По итогам исследования можно сделать вывод о том, что учет ротационного

упрочнения является важным с точки зрения энергии вращения кристаллических решеток и положительным образом сказывается на адекватности модели. Учет влияния ротационного упрочнения на текстуру материала позволит более точно описывать свойства металлов после их обработки.

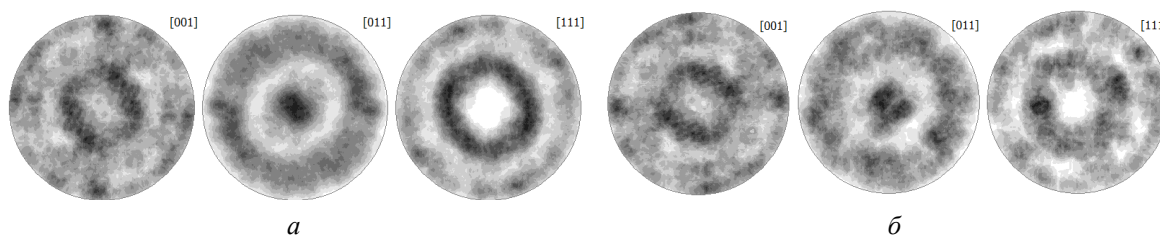


Рис. 7. Полюсные фигуры в направлении растяжения: без механизма ротационного упрочнения (а), с использованием механизма (б)

**Библиографический список**

1. Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Волегов П.С. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 33–56.
2. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: обзор экспериментальных работ // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т. 18, № 3. – С. 11–24.
3. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: классические континуальные теории // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т. 18, № 4. – С. 68–87.
4. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: модели, основанные на физических теориях пластичности // Физическая мезомеханика. – 2015. – Т. 18, № 6. – С. 12–23.
5. Валиев Р.З., Александров И.В. Объемные наноструктурные металлические материалы. – М.: Академкнига, 2007. – 397 с.
6. Орлов А.Н., Перезвентцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. – М.: Metallurgy, 1980. – 154 с.
7. Лобанов М.Л., Юровских А.С., Кардонина Н.И., Русаков Г.М. Методы исследования текстур в материалах: учеб.-метод. пособие. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2014. – 115 с.
8. Козлов Э.В., Жданов А.Н., Конева Н.А. Механизмы деформации и механические свойства наноматериалов // Физическая мезомеханика. – 2007. – Т. 10, № 3. – С. 95–103.
9. Hall E.O. The deformation and ageing of mild steel: III Discussion of results // Proc. Phys. Soc. B. – 1951. – Vol. 64. – P. 747–753.
10. Малыгин Г.А. Нарушение закона Холла–Петча в микро- и нанокристаллических материалах // Физика твердого тела. – 1995. – Т. 37, № 8. – С. 2281–2292.
11. Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Volegov P.S., Shveykin A.I. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution // Physical Mesomechanics. – 2010. – Vol. 13, Is.1-2. – P. 38–46.

12. *Trusov P.V., Volegov P.S., Shveykin A.I.* Multilevel model of inelastic deformation of FCC polycrystalline with description of structure evolution // *Computational Materials Science*. – 2013. – Vol. 79. – P. 429–441.
13. *Трусов П.В., Швейкин А.И.* Многоуровневые физические модели моно и поликристаллов. Статистические модели // *Физическая мезомеханика*. – 2011. – Т. 14, № 4. – С. 17–28.
14. *Озерных В.С., Волегов П.С.* Описание механизмов упрочнения при неупругом деформировании поликристаллов // *Вест. Тамбовского ун-та. Сер.: Естественные и технические науки*. – 2016. – Т. 21, № 3. – С. 1203–1206.
15. *Кондратьев Н.С., Трусов П.В.* О мере разориентации систем скольжения соседних кристаллитов в поликристаллическом агрегате // *Вест. ПНИПУ. Механика*. – 2012. – № 2. – С. 112–127.
16. *Тельканов М.А., Волегов П.С.* Описание ротаций кристаллических решеток и фрагментации зерен при интенсивных неупругих деформациях поликристаллов // *Вест. Тамбовского ун-та*. – 2016. – Т. 21, № 3. – С. 1338–1341.
17. *Швейкин А.И., Ашихмин В.Н., Трусов П.В.* О моделях ротации решетки при деформировании металлов // *Вест. ПНИПУ. Механика*. – 2010. – № 1. – С. 111–127.
18. *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: *Металлургия*. – 1986. – 224 с.

### **MATHEMATICAL MODELING OF INTENSIVE INELASTIC DEFORMATIONS OF SUBMICROCRYSTALLINE AND NANOCRYSTALLINE MATERIALS**

P.S. Volegov, A.Yu. Yanz, E.R. Sharufullina, D.G. Selukov, M.A. Telkanov, V.S. Ozernykh

*Perm National Research Polytechnic University*

This article is devoted to issues related to the description of the processes of inelastic deformations of polycrystalline materials, for which the influence of the grain size on the process of evolution of the internal structure and the accompanying change in physical and mechanical properties are essential. As a basic model, we accepted a two-level mathematical model of polycrystalline elastoviscoplastic deformation, which is supplemented by the description of the hardening processes, including due to the grain boundaries, and rotations of crystal lattices. To account for hardening mechanisms we suggested an additional term in the hardening law, describing an increase in the critical shear stress of dislocations due to the interaction of the latter ones with orientation mismatch dislocations and explicitly taking into account the mutual lattice misorientation of neighboring grains. To describe the rotation mechanism, fragmentation and grain crushing we introduced an intermediate structural level and suggested a sub-model, where the incompatibility of inelastic deformations in neighboring grains is considered to be the main cause of rotations, and the fragment-grain structure analysis is carried out by determining the type of grain boundaries. Numerical experiments on the deformation of a polycrystal representative volume were carried out; the results are consistent with the Hall–Petch law. In addition, new results were obtained that help to assess the nature and dynamics of the crystal lattice rotations, resulting in grain fragmentation and crushing.

*Keywords:* nanomaterials, functional materials, crystal plasticity, intergranular sliding, Hall–Petch law, hardening, fragmentation.

#### **Сведения об авторах**

*Волегов Павел Сергеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов (ММСП), Пермский национальный исследовательский политехнический университет (ПНИПУ), 614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29; e-mail: [sgosinc@mail.ru](mailto:sgosinc@mail.ru)

*Янц Антон Юрьевич*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры ММСП, ПНИПУ; e-mail: [maximus5.59@gmail.com](mailto:maximus5.59@gmail.com)

*Шарифуллина Эльвира Ривгатовна*, аспирант кафедры ММСП, ПНИПУ; e-mail: [elvira16\\_90@mail.ru](mailto:elvira16_90@mail.ru)

*Селуков Дмитрий Григорьевич*, магистрант кафедры ММСП, ПНИПУ; e-mail: [siluk94@mail.ru](mailto:siluk94@mail.ru)

*Тельканов Михаил Александрович*, студент 4 курса кафедры ММСП, ПНИПУ; e-mail: [michaelperm@gmail.com](mailto:michaelperm@gmail.com)

*Озерных Владимир Сергеевич*, студент 4 курса кафедры ММСП, ПНИПУ; e-mail: [ozernykh@yandex.ru](mailto:ozernykh@yandex.ru)

*Материал поступил в редакцию 21.10.2016 г.*