

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Институт прикладной математики и механики

**Выпускная квалификационная работа магистра  
«МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ФРАГМЕНТАЦИИ ЗЁРЕН»**

по направлению 15.04.03 «Прикладная механика»  
по образовательной программе 15.04.03\_06 «Физика прочности и пластичности  
материалов»

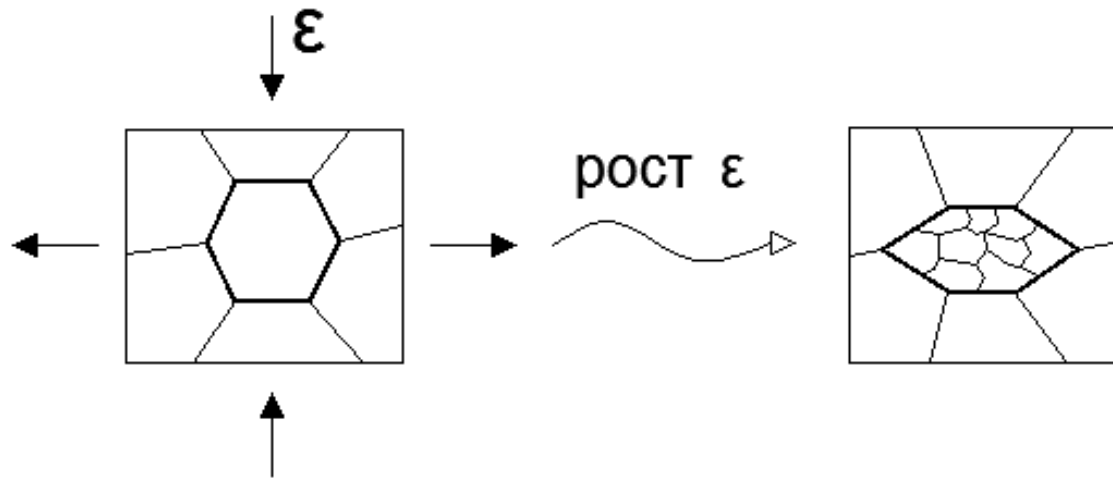
Выполнил:

Студент гр. 23645/2 А.Д. Саламанов

Руководитель:

Проф., д. ф.-м. н. А.А. Зисман

Санкт-Петербург  
2019



Эмиссия малоугловых ( $\theta \sim 1^\circ$ ) границ со стыков зёрен

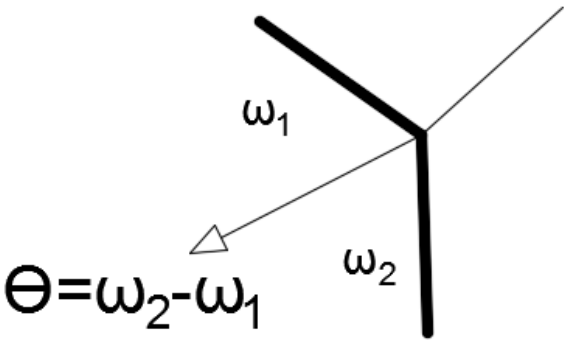
Фрагментированная структура с разориентировками  $\theta \sim \varepsilon$ .  
При  $\varepsilon > 1$  величина  $\theta$  достигает  $10^\circ \dots 20^\circ$ .

**Актуальность проблемы:** Измельчение структуры при больших пластических деформациях позволяет повысить прочность материала более чем в 2 раза, не используя дорогостоящего легирования.

**Природа фрагментации по современным представлениям:**

1. Для произвольной однородной деформации зерна необходимо 5 систем скольжения, но их взаимодействие предполагает чрезмерное упрочнение материала, т.е. увеличение работы деформации, следовательно энергетически выгодно реализовать данную деформацию зерна усреднением порционных деформаций субзерен, в каждом из которых действует малое (2-3) число систем скольжения.
2. Неоднородность скольжения порождает внутри зерна дислокации границ.
3. Процесс начинается от стыков в результате взаимодействия различно ориентированных зёрен

**Цель работы** – моделирование начальных стадий фрагментации, т.е. формирование субграниц вблизи стыков из-за различия картины скольжения у смежных фасеток межзёренной границы.

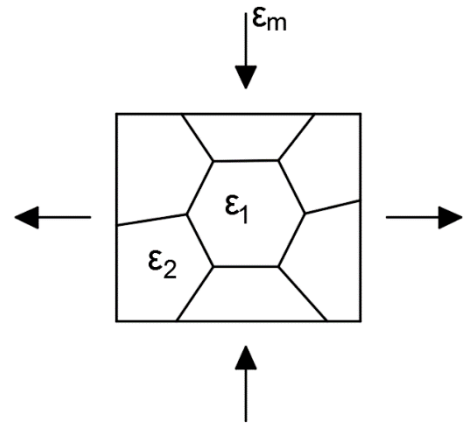


Особенность этой стадии – преобладает эффект взаимодействия зёрен.

Необходимые условия при моделировании взаимодействия зёрен:

1. Совместность пластической деформации на межзёренных границах
2. Распределение деформации между зёрнами согласуется с заданной макроскопической деформацией

**Пример – модель Тейлора:**



$\epsilon_1 = \epsilon_2 \dots = \epsilon_m$ , однако однородность деформации (схемы скольжения) в каждом зерне исключает его фрагментацию. Это же ограничение сохраняется в существующих моделях деформации поликристалла, которые являются развитием модели Тейлора.

## Решение проблемы

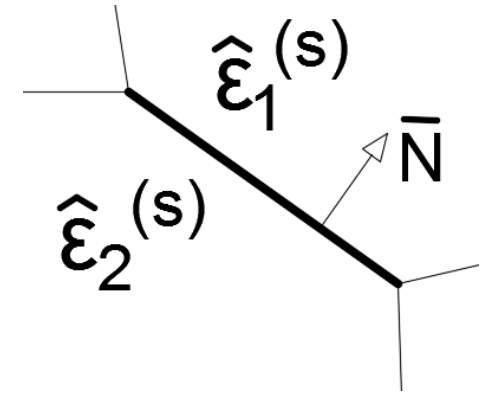
**1. Условие совместности Сен-Венана:**  $\nabla \times \hat{\varepsilon} \times \nabla = 0$



На границе раздела:

$$\bar{N} \times [\hat{\varepsilon}] \times \bar{N} = 0,$$

где  $[\hat{\varepsilon}] = \hat{\varepsilon}_2 - \hat{\varepsilon}_1$



Это означает равные проекции локальных  $\hat{\varepsilon}_2$  и  $\hat{\varepsilon}_1$  на плоскость границы:  $\hat{\varepsilon}_1^{(s)} = \hat{\varepsilon}_2^{(s)}$

**2. Связь с макроскопической деформацией  $\varepsilon$ :**

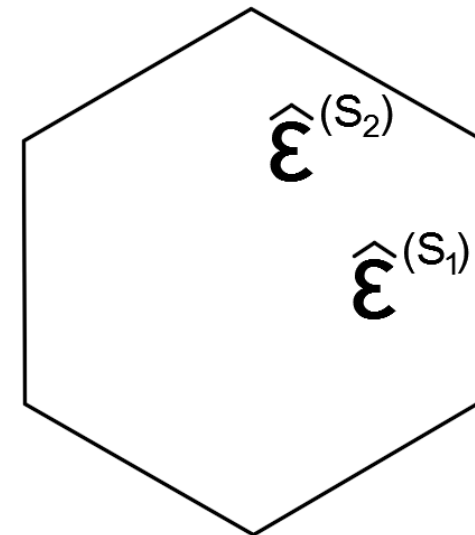
Пусть проекция  $\hat{\varepsilon}_m$  на фасетку  $\bar{N}$  равна  $\hat{\varepsilon}_s$ , тогда  $\hat{\varepsilon}_1^{(s)} = \hat{\varepsilon}_2^{(s)} = \hat{\varepsilon}_s$

Поскольку  $\hat{\varepsilon}_s$  зависит от  $\bar{N}$ , то внутри одного зерна, вблизи разных фасеток границы будут различные деформации и, следовательно, схемы скольжения.

**Геометрический смысл модели:**

Каркас межзёренных границ следует макроскопической деформации, но при этом не требуется однородной деформации исходного зерна.

Поскольку  $\hat{\varepsilon}_s$  имеет лишь 3 независимых системы компоненты, у каждой фасетки достаточно 3-х активных систем скольжения. Но  $\hat{\varepsilon}_s$  зависит от  $\bar{N}$ , т.е. выбор 3-х систем у различных фасеток будет различаться.



## Выбор локальной схемы скольжения

ГЦК кристалл: 12 систем скольжения типа  $\bar{b} \langle 110 \rangle \bar{n} \{111\}$ . Они задаются единичными нормальными векторами  $\bar{n}$  и векторами Бюргера  $\bar{b}$ .

$\bar{d}_i$  - элементарная симметричная деформация (при единичном сдвиге  $\gamma$ )

$i$  – системы скольжения;  $\hat{S}_i$  - проекция  $\bar{d}_i$  на фасетку  $\bar{N}$ .

### Ориентация кристалла:

Унитарная матрица  $\hat{R}$  или дуальный вектор  $\bar{V}_R$ .  $\{\bar{b}_i\}^{(0)}, \{\bar{n}_i\}^{(0)}$  – исходная ориентация, определена в исходной системе координат

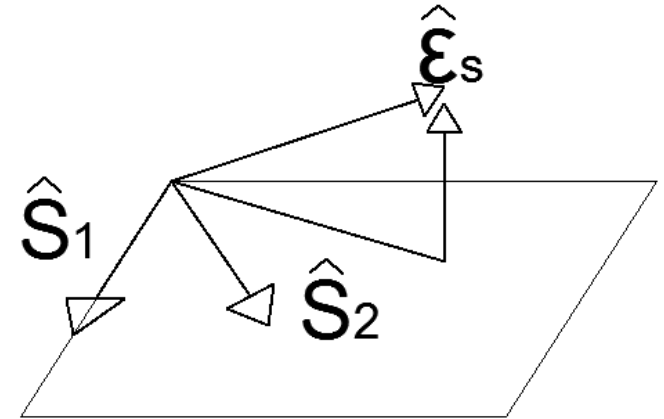
$$\bar{b}_i = \hat{R} \cdot \bar{b}_i^{(0)}$$

$$\bar{n}_i = \hat{R} \cdot \bar{n}_i^{(0)}$$

$$\hat{S}_i = \hat{R} \cdot \hat{S}_i^{(0)} \cdot \hat{R}^T$$

**Шаг 1:**  $|\hat{S}_1 : \hat{\epsilon}_s| = \max$ , т.е. 1-я система скольжения обеспечивает максимальный вклад в заданную проекцию  $\hat{\epsilon}_s$ .

**Шаг 2:**  $|\Delta : \Delta| = \min$ , т.е. первые две системы гарантируют минимальное отклонение проекции  $\gamma_1 \hat{S}_1 + \gamma_2 \hat{S}_2$  от заданной  $\hat{\epsilon}_s$ .



**Шаг 3:** Для каждой возможной третьей системы решается уравнение  $\gamma_1 \hat{S}_1 + \gamma_2 \hat{S}_2 + \gamma_3 \hat{S}_3 = \hat{\epsilon}_s$  и выбирается та, которой отвечает минимальная работа, т.е.  $|\gamma_1| + |\gamma_2| + |\gamma_3| = \min$

## Локальные повороты решётки

$$\hat{d} = \frac{1}{2}(\bar{n} \otimes \bar{b} + \bar{b} \otimes \bar{n})_i$$

$\hat{d}$ - пластическая деформация

$$\hat{\omega} = \frac{1}{2}(\bar{n} \otimes \bar{b})_i$$

$\hat{\omega}$ - пластический поворот при инвариантной решётке

По выбранным системам скольжения и соответствующим сдвигам находим локальные переориентации  $\bar{W}$  и разориентировки  $\bar{\theta}$ :

$W = \bar{N} \times \hat{\varepsilon} * \bar{N} - \bar{\omega}$  - следует из условий совместности, включающей как симметричную деформацию, так и пластический поворот.

,где:

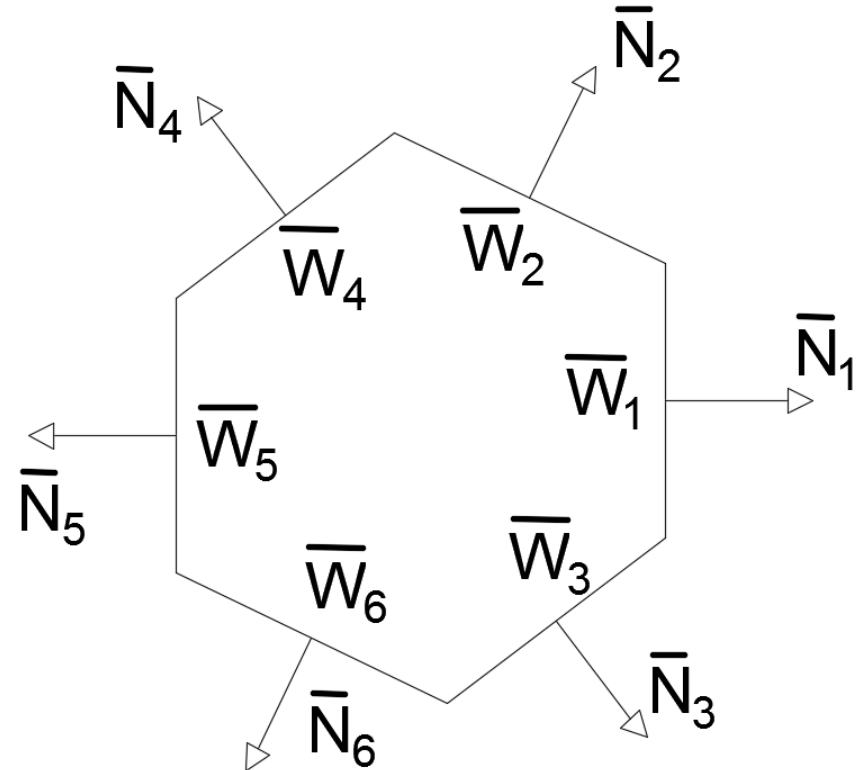
$$\hat{\varepsilon} = \gamma_1 \hat{d}_1 + \gamma_2 \hat{d}_2 + \gamma_3 \hat{d}_3$$

$$\bar{\omega} = \gamma_1 \bar{\omega}_1 + \gamma_2 \bar{\omega}_2 + \gamma_3 \bar{\omega}_3$$

$$\bar{\theta}_{12} = \bar{W}_2 - \bar{W}_1$$

$$\bar{\theta}_{12} = \bar{\theta}_{56}; \bar{\theta}_{13} = \bar{\theta}_{45}; \bar{\theta}_{23} = \bar{\theta}_{24} = \bar{\theta}_{63}$$

$$\bar{W}_1 = \bar{W}_5; \bar{W}_2 = \bar{W}_6; \bar{W}_3 = \bar{W}_4$$



# Результаты

Результаты для  $\hat{\varepsilon} = 0.05 * \begin{pmatrix} -0.5 & 0 & 0 \\ 0 & -0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Результаты для  $\hat{\varepsilon} = 0.1 * \begin{pmatrix} -0.5 & 0 & 0 \\ 0 & -0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

при ориентации  $\bar{V}_R = 0.1\pi[1; 1.1; 0.9]$  и  $\bar{V}_R = 0.15\pi[0.9; 1.1; 1]$

при ориентации  $\bar{V}_R = 0.1\pi[1; 1.1; 0.9]$  и  $\bar{V}_R = 0.15\pi[0.9; 1.1; 1]$

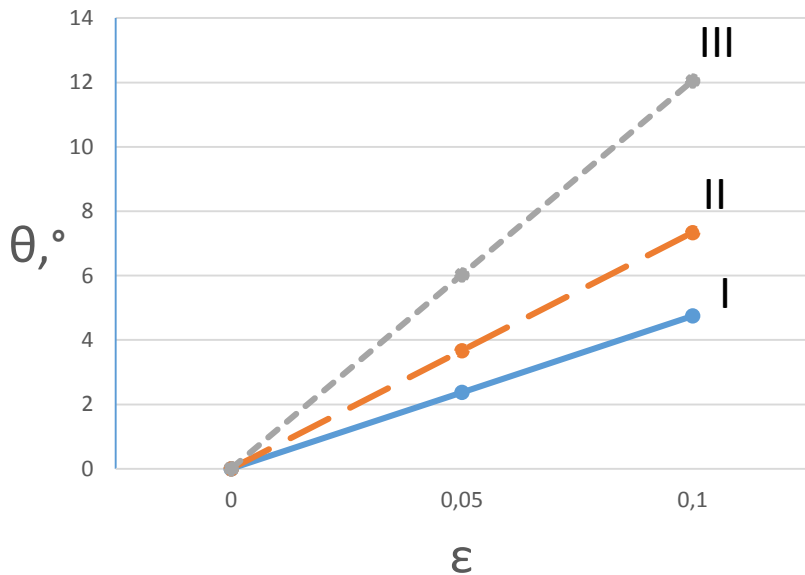
Ориентация	$\bar{V}_R = 0.1\pi[1; 1.1; 0.9]$	$\bar{V}_R = 0.15\pi[0.9; 1.1; 1]$
$\bar{W}_1$	[-0.6625; 0.9876; -0.6808] <b>1.2563°</b>	[-0.0266; -0.9384; 0.3444] <b>0.6429°</b>
$\bar{W}_2$	[0.8793; 0.0909; 0.4675] <b>1.7152°</b>	[-0.4461; 0.5181; -0.7298] <b>1.5297°</b>
$\bar{W}_3$	[-0.8407; 0.5394; 0.0477] <b>4.5482°</b>	[0.5260; 0.2652; -0.8081] <b>0.2905°</b>
$\bar{\theta}_{12}$	[-0.8913; 0.4472; 0.0749] <b>2.3735°</b>	[0.6075; -0.1642; -0.7772] <b>2.2395°</b>
$\bar{\theta}_{13}$	[-0.8771; -0.4221; 0.2293] <b>3.6671°</b>	[-0.1955; 0.9805; 0.0191] <b>0.6939°</b>
$\bar{\theta}_{23}$	[0.8853; -0.4332; 0.1691] <b>6.0228°</b>	[0.3274; -0.4422; 0.8350] <b>1.6179°</b>

Ориентация	$\bar{V}_R = 0.1\pi[1; 1.1; 0.9]$	$\bar{V}_R = 0.15\pi[0.9; 1.1; 1]$
$\bar{W}_1$	[-0.4838; 0.7209; -0.4963] <b>2.5153°</b>	[0.0050; -0.0282; 0.0080] <b>1.2863°</b>
$\bar{W}_2$	[0.8791; -0.0894; -0.4682] <b>3.4315°</b>	[-0.4464; 0.5178; -0.7298] <b>3.0562°</b>
$\bar{W}_3$	[-0.8406; 0.5397; 0.0474] <b>9.1005°</b>	[0.5177; -0.2696; -0.8120] <b>0.5787°</b>
$\bar{\theta}_{12}$	[-0.8916; 0.4465; 0.0755] <b>4.7481°</b>	[-0.0288; 0.0559; -0.0470] <b>4.4746°</b>
$\bar{\theta}_{13}$	[0.8770; 0.4224; -0.2290] <b>7.3346°</b>	[-0.0003; -0.0255; 0.0162] <b>1.3830°</b>
$\bar{\theta}_{23}$	[-0.8853; 0.4331; -0.1692] <b>12.0475°</b>	[0.0290; -0.0303; 0.0307] <b>3.2316°</b>

# Зависимость фрагментации от ориентации зерна и степени макроскопической деформации

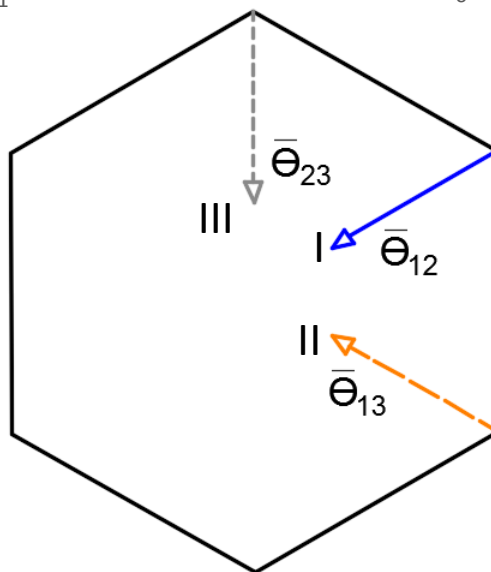
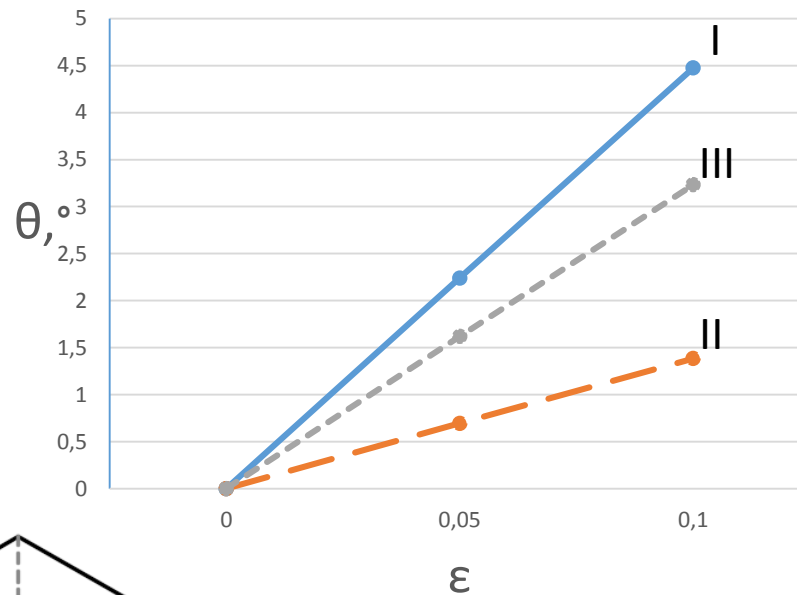
Ориентация зерна  $V_R=0.1\pi[1; 1.1; 0.9]$

- разориентировка  $\theta_{12}$
- разориентировка  $\theta_{13}$
- разориентировка  $\theta_{23}$



Ориентация зерна  $V_R=0.15\pi[0,9; 1.1; 1]$

- разориентировка  $\theta_{12}$
- разориентировка  $\theta_{13}$
- разориентировка  $\theta_{32}$





## **Заключение**

Модель воспроизводит наблюдаемую в экспериментах зависимость локальных разориентировок внутри зерна, на начальной стадии фрагментации, от исходной ориентации решётки относительно главных осей макродеформации и от морфологии межзёренных границ.