

УДК 539.4.015

О. М. ОСТРИКОВ

Белорусский государственный университет транспорта, Гомель, Беларусь

ВЛИЯНИЕ ПРИЛЕГАЮЩИХ МИКРОРАЗМЕРНЫХ ЗЕРЕН НА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ ЗЕРНА ПОЛИКРИСТАЛЛА С ОСТАТОЧНЫМ КЛИНОВИДНЫМ ДВОЙНИКОМ

Разработана методика расчета полей напряжений в группе зерен поликристалла, одно из которых содержит единичный остаточный клиновидный двойник. В результате расчета с учетом влияния соседних зерен установлено, что максимальные значения напряжений локализуются на границах зерен и двойников.

Ключевые слова: напряженно-деформированное состояние, остаточный клиновидный двойник, зерно поликристалла.

В технике металлы применяются преимущественно в поликристаллическом состоянии [1–3]. Известно, что поликристаллы включают большое число мелких монокристаллических зерен, разделенных зонами перехода, которые называют границами зерен [4]. Такая граница представляет собой поверхность между двумя монокристаллами различной взаимной кристаллографической ориентации, которые примыкают друг к другу так, что не нарушается сплошность среды [5]. В поликристалле соседние зерна контактируют друг с другом и не могут деформироваться свободно. При этом на свойства металлов в поликристаллическом состоянии существенное влияние оказывает не только размер зерна, но и атомно-кристаллическое строение имеющихся межкристаллитных границ.

Несмотря на большую историю развития представлений о строении и свойствах границ зерен в металлах, исследования по данной тематике применительно к конструкционным сталям ограничены, что не позволяет находить новые решения для дальнейшего улучшения их эксплуатационных свойств. Поэтому практический интерес представляет разработка методик расчета напряженно-деформированного состояния зерен поликристаллов при наличии в них остаточных деформационных двойников, оказывающих существенное влияние на механические характеристики эксплуатационных материалов [2].

Изучение влияния зеренной и зернограницной структуры поликристаллических материалов на напряженно-деформированное состояние, обусловленное единичным двойником, является актуальным. В работах [6–8] разработана методика расчета напряженно-деформированного состояния сплошной среды, содержащей единичные или множественные остаточные деформационные клиновидные двойники. На данный момент не изучено влияние соседних зерен на деформационную картину в зерне поликристалла с единичным двойником, который является одним из основных каналов пластической деформации.

В данной работе поставлена цель по разработке методики учета влияния соседних зерен на поле напряжений в зерне поликристалла, которое содержит единичный остаточный клиновидный двойник.

На рисунке 1 представлена группа микроразмерных зерен поликристалла, причем находящееся в центре содержит единичный двойник. Зерна приняты шестиугольными, так как данная форма характеризует относительно устойчивую двумерную структуру поликристалла [3, 9].

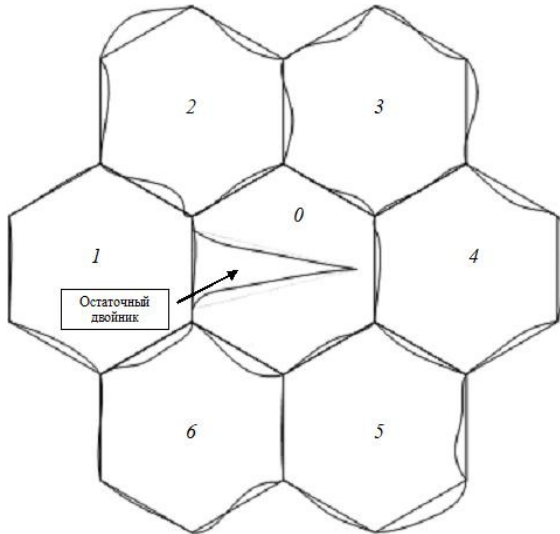


Рисунок 1 – Группа зерен 1–6 вокруг зерна 0 с остаточным двойником

Границы рассматриваемой группы зерен представим в виде стенок полных дислокаций. Для уменьшения громоздкости вычислений учтем только напряжения, создаваемые группой зерен и остаточным клиновидным двойником. Тогда смещения (u_i) и напряжения (σ_i), создаваемые рассматриваемым двойником и обусловленные границами всех рассматриваемых зерен, в соответствии с принципом суперпозиции [7] могут быть определены по формуле

$$\begin{pmatrix} u_i \\ \sigma_{ij} \end{pmatrix} = \sum_{m=1}^2 \begin{pmatrix} (u_i^{(m)})_{tw}(x, y) \\ (\sigma_{ij}^{(m)})_{tw}(x, y) \end{pmatrix} + \sum_{r=1}^g \sum_{k=1}^n \begin{pmatrix} (u_i^{(k)})_{b(r)}(x, y) \\ (\sigma_{ij}^{(k)})_{b(r)}(x, y) \end{pmatrix},$$

где m – номер двойниковой границы; $(u_i^{(m)})_{tw}(x, y)$, $(\sigma_{ij}^{(m)})_{tw}(x, y)$ – смещения и напряжения, создаваемые двойниковыми границами, i, j принимают значения x, y или z ; r – номер зерна; g – количество зерен; k – номер зеренной границы; n – количество зеренных границ (в рассматриваемом случае $n = 6$); $(u_i^{(k)})_{b(r)}(x, y)$, $(\sigma_{ij}^{(k)})_{b(r)}(x, y)$ – смещения и напряжения, создаваемые границами зерен.

Смещения и напряжения, создаваемые остаточным клиновидным двойником, рассчитываются с учетом напряжений и смещений на границах зерен по ранее разработанной в [7] методике.

Плотности дислокаций на всех элементах рассматриваемой системы прием постоянными. При этом на границах зерен плотность дислокаций пусть будет равна $(\rho^{(k)})_{b(r)} = C_1$, а на двойниковых границах – $(\rho^{(m)})_{nv} = C_2$ [10].

Уравнения для формы и положения границ зерен составим исходя того, что зерна имеют форму правильного шестиугольника. Если зерна имеют одинаковый размер, то уравнения формы границ зерен примут вид

– для зерна 0 (см. рисунок 1):

$$f_{b(0)}^{(1)}(y_0) = 0; \quad f_{b(0)}^{(2)}(x_0) = \frac{a}{2} + \frac{x_0}{\operatorname{tg} \alpha_2};$$

$$f_{b(0)}^{(k)}(x_0) = f_{b(1)}^{(k-1)}(a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})) + \frac{x_0 - a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})}{\operatorname{tg} \alpha_k};$$

– для зерна 1 (см. рисунок 1):

$$f_{b(1)}^{(1)}(y_0) = -a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3); \quad f_{b(1)}^{(2)}(x_0) = \frac{a}{2} + \frac{x_0 + a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3)}{\operatorname{tg} \alpha_2};$$

$$f_{b(1)}^{(k)}(x_0) = f_{b(1)}^{(k-1)}(-a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3) + a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})) + \frac{x_0 + a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3) - a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})}{\operatorname{tg} \alpha_k};$$

– для зерна 2 (см. рисунок 1):

$$f_{b(2)}^{(1)}(y_0) = a \sin \alpha_6; \quad f_{b(2)}^{(2)}(x_0) = \frac{3a}{2} + a \cos \alpha_6 + \frac{x_0 - a \sin \alpha_6}{\operatorname{tg} \alpha_2};$$

$$f_{b(2)}^{(k)}(x_0) = f_{b(2)}^{(k-1)}(a \sin \alpha_6 + a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})) + \frac{x_0 - a \sin \alpha_6 - a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})}{\operatorname{tg} \alpha_k};$$

– для зерна 3 (см. рисунок 1):

$$f_{b(3)}^{(1)}(y_0) = a \sin \alpha_2; \quad f_{b(3)}^{(2)}(x_0) = \frac{3a}{2} + a \cos \alpha_2 + \frac{x_0 - a \sin \alpha_2}{\operatorname{tg} \alpha_2};$$

$$f_{b(3)}^{(k)}(x_0) = f_{b(3)}^{(k-1)}(a \sin \alpha_2 + a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})) + \frac{x_0 - a \sin \alpha_2 - a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})}{\operatorname{tg} \alpha_k};$$

– для зерна 4 (см. рисунок 1):

$$f_{b(4)}^{(1)}(y_0) = a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3); \quad f_{b(4)}^{(2)}(x_0) = \frac{a}{2} + \frac{x_0 - a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3)}{\operatorname{tg} \alpha_2};$$

$$f_{b(4)}^{(k)}(x_0) = f_{b(4)}^{(k-1)}(a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3) + a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})) +$$

$$+ \frac{x_0 - a(\sin \alpha_2 + \sin \alpha_3) - a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})}{\operatorname{tg} \alpha_k};$$

– для зерна 5 (см. рисунок 1):

$$f_{b(5)}^{(1)}(y_0) = -a \sin \alpha_6; \quad f_{b(5)}^{(2)}(x_0) = -\frac{a}{2} - a \cos \alpha_6 + \frac{x_0 + a \sin \alpha_6}{\operatorname{tg} \alpha_2};$$

$$f_{b(5)}^{(k)}(x_0) = f_{b(5)}^{(k-1)}(-a \sin \alpha_6 + a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})) +$$

$$+ \frac{x_0 - a \sin \alpha_6 - a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})}{\operatorname{tg} \alpha_k};$$

– для зерна 6 (см. рисунок 1):

$$f_{b(6)}^{(1)}(y_0) = -a \sin \alpha_2; \quad f_{b(6)}^{(2)}(x_0) = -\frac{a}{2} - a \cos \alpha_2 + \frac{x_0 + a \sin \alpha_2}{\operatorname{tg} \alpha_2};$$

$$f_{b(6)}^{(k)}(x_0) = f_{b(6)}^{(k-1)}(-a \sin \alpha_2 + a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})) +$$

$$+ \frac{x_0 + a \sin \alpha_2 - a(\sin \alpha_2 + \dots + \sin \alpha_{k-1})}{\operatorname{tg} \alpha_k};$$

где a – длина ребра границы зерна; α_k – угол поворота k -й границы зерна рассматриваемой группы относительно вертикали; x_0 и y_0 – текущие координаты. Значения a и α_k определяются по формулам

$$a = 2R \sin\left(\frac{\pi}{6}\right); \quad \alpha_k = \pi - \frac{\pi}{3}(k-1),$$

где R – радиус вписанной в зерно окружности.

По аналогии с [7] форму границ остаточного клиновидного двойника опишем функциями

$$f_{nv}^{(1)}(x_0) = \frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L}\right); \quad f_{nv}^{(2)}(x_0) = -\frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L}\right),$$

где L – длина двойника; H – его ширина у устья.

Расчеты проводились для железа (Fe) по методике, описанной в [7]. Численные значения параметров принимались такие же, как и в [3]. Результаты расчета полей напряжений приведены на рисунке 2. Из него видно, что поля всех компонент тензора напряжений имеют четко выраженные места концентрации

напряжений: для нормальных σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} и скалывающих σ_{xy} , σ_{yz} и σ_{xz} напряжений – это узловые точки зерен, вершина двойника и двойниковые границы.

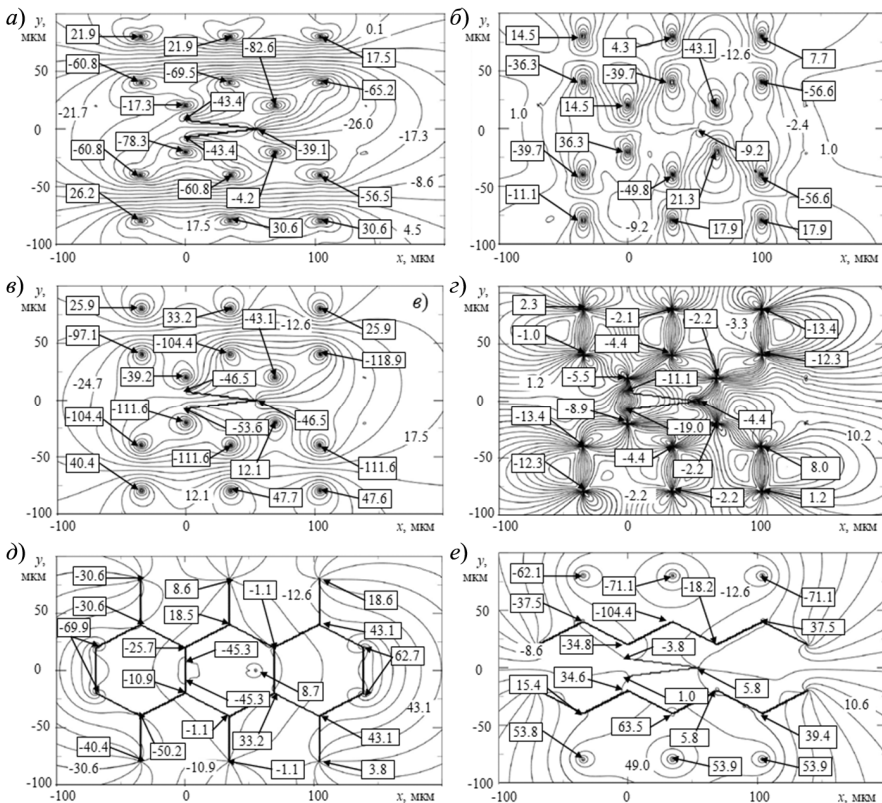


Рисунок 2 – Напряжения, МПа, в группе из семи зерен при наличии в одном из них единичного остаточного клиновидного двойника:

a – для $\sigma_{xx}(x, y)$; *b* – для $\sigma_{yy}(x, y)$; *c* – для $\sigma_{zz}(x, y)$; *d* – для $\sigma_{xy}(x, y)$; *e* – для $\sigma_{xz}(x, y)$

Изучение влияния криволинейности границ зерен показало, что форма границ существенно влияет на распределение напряжений только при граничных условиях в виде стенок полных дислокаций. При отсутствии двойника в зерне поликристалла основными места концентрации напряжений являются границы и узловые точки зерна, а также участки за его пределами. Центр зерна в таком случае – зона низкого уровня напряжений.

При наличии единичного клиновидного двойника наблюдается увеличение компонент тензора напряжений внутри зерна. За пределами зерна влияние рассматриваемого двойника незначительно. Симметричность распределения напряжений внутри зерна нарушается, однако их знакопеременность не изменяется.

Таким образом, разработанная методика расчета полей напряжений в зерне поликристалла, содержащем единичный остаточный клиновидный двойник, позволяет учитывать влияние прилегающих зерен. Выполненный расчет напряжений в системе «зерно поликристалла с остаточным двойником – соседние зерна» показал, что их максимальные значения локализируются на границах зерен и двойников.

Автор благодарит Дробышевскую Т. В. за помощь в проведении расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 **Lubenets, S. V.** Dynamics of twinning in metals and alloys / S. V. Lubenets, V. I. Startsev, L. S. Fomenko // *Physica Status Solidi (a)*. – 1985. – Vol. A92, is. 1. – P. 11–55.
- 2 **Полухин, П. И.** Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – М. : Металлургия, 1982. – 584 с.
- 3 **Дробышевская, Т. В.** Задача о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным некогерентным двойником в пяти-, шести- и семигранном зерне поликристалла с гексагональной структурой / Т. В. Дробышевская, О. М. Остриков // *Физическая мезомеханика*. – 2015. – Т. 18, № 2. – С. 79–88
- 4 **Хирт, Дж.** Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М. : Атомиздат, 1972. – 600 с.
- 5 **Павлов, П. В.** Физика твердого тела / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – М. : Высш. шк., 2000. – 494 с.
- 6 **Остриков, О. М.** Методика прогнозирования распределения полей напряжений в реальных кристаллах с остаточными некогерентными двойниками : монография / О. М. Остриков. – Гомель : ГГТУ им. П. О. Сухого, 2019. – 278 с.
- 7 **Остриков, О. М.** Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О. М. Остриков // *Вестник ГГТУ им. П. О. Сухого*. – 2006. – № 2. – С. 10–18.
- 8 **Дробышевская, Т. В.** Задача о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным двойником в поликристаллическом зерне различной формы / Т. В. Дробышевская, О. М. Остриков // *Наука и техника*. – 2016. – Т. 15, № 3. – С. 247–260.
- 9 **Fidder, H.** Twinning induced spatial stress gradients: Local versus global stress states in hexagonal close-packed materials / H. Fidder, I. Basu, J. Th. M. DeHosson // *Acta Materialia*. – 2023. – Vol. 256. – Article 119142. – 17 p.
- 10 **Остриков, О. М.** Дислокационная модель некогерентного нетонкого двойника / О. М. Остриков // *Журнал технической физики*. – 2012. – Т. 82, № 11. – С. 38 – 42.

O. M. OSTRIKOV

Belarusian State University of Transport, Gomel, Belarus

INFLUENCE OF ADJACENT MICROGRAINS ON THE STRESS-STRAIN STATE OF A POLYCRYSTAL GRAIN WITH A RESIDUAL WEDGE TWIN

A method for calculating stress fields in a group of polycrystal grains is developed for the case when one of grain contains a single residual wedge-shaped twin. The calculations took into account the influence of adjacent grains; it is estimated that the maximum stress values are localized at the grain and twin boundaries.

Keywords: stress-strain state, residual wedge-shaped twin, polycrystal grain.

Получено 15.09.2025