

РАСЧЕТ ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛОТНОУПАКОВАННОЙ РЕШЕТКОЙ ПРИ ЗАДАННОЙ ТЕКСТУРЕ

© 2024 г. А. Г. Кесарев^{а, *}

^аИнститут физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

*e-mail: kesarev@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 23.06.2023 г.

После доработки 06.02.2024 г.

Принята к публикации 14.02.2024 г.

Для поликристаллического материала с гексагональной плотноупакованной решеткой предложена модель, позволяющая оценить предел текучести при заданной текстуре. Пластические свойства отдельного зерна описываются предложенным авторами ранее обобщенным критерием Мизеса. Для определения предела текучести поликристалла рассмотрены наиболее распространенные способы осреднения. Предложен оригинальный способ осреднения для неоднородной среды в условиях пластической деформации, учитывающий наличие недеформируемых зерен, доля которых определяется средствами теории перколяции. На основе каждого подхода решена задача о растяжении/сжатии однородного стержня квадратного поперечного сечения для двух предельных случаев: отсутствия текстуры и жесткой базисной текстуры. Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися литературными данными. Рассмотрено влияние текстуры на предел текучести. Дано качественное объяснение образования текстуры.

Ключевые слова: магний, деформация, пластичность, критерий текучести, тензор напряжений, тензор скоростей деформации, девиатор, порог перколяции, перколяционный кластер

DOI: 10.31857/S0015323024060113, **EDN:** WQINXU

ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее распространенных в природе кристаллических структур, в которую кристаллизуются металлы, является гексагональная плотноупакованная (ГПУ). В частности, в этой решетке кристаллизуется магний, который сейчас активно исследуется как в чистом виде [1], так и в виде компонента сплавов [2]. Особенность ГПУ-решетки — более низкая симметрия по сравнению с другими наиболее распространенными типами структур (кубическими), что приводит к наличию большого количества деформационных мод, необходимых для обеспечения произвольной деформации монокристалла и сохранения сплошности при деформации поликристалла. Критические напряжения этих мод могут различаться более чем на порядок [3], что приводит к сильной зависимости механических свойств материала от текстуры, в особенности при низких температурах. Поликристалл с ГПУ-решеткой при низких температурах должен демонстрировать композитоподобное поведение, так как различно ориентированные зерна ведут себя при механической нагрузке со-

вершенно по-разному. При описании любого процесса пластической деформации металла с ГПУ-структурой необходимо учитывать образование текстуры, ее эволюцию и влияние на механические свойства. Такого рода задачи решают физические теории пластичности, явно учитывающие системы скольжения и двойникования [4], [5] и критические напряжения сдвига, при которых активизируется каждая из систем. Такие теории позволяют описывать достаточно сложные явления, такие как деформация меди с учетом ее рекристаллизации [6]. Для описания деформации магния похожие теории также широко применяются [7]. Следует отметить большую сложность моделей физических теорий пластичности, требующих компьютерного моделирования для решения самых простых задач. Кроме того, для ряда мод деформации данные по критическим сдвиговым составляющим напряжения, полученные разными исследователями, имеют большой разброс [8] (в 4 раза для двойникования сжатия, в 9 — для призматического скольжения и т.д.). Это делает точность моделей, явно учитывающих все моды дефор-

мации, иллюзорной, а критические напряжения сдвига — подгоночными параметрами, зависящими от выбранной модели. Следовательно, требуется модель, учитывающая основные черты явления пластической деформации и при этом — по возможности простая. В работе [9] был предложен путь построения такой модели: 1) нахождение по возможности простого феноменологического критерия текучести монокристаллического материала; 2) выбор подходящего способа осреднения; 3) описание эволюции текстуры. Первый этап пройден в работах [9] — [12]. Вместо этого явного учета систем скольжения и двойникования авторы данной работы предлагают для отдельного монокристалла использовать феноменологический критерий текучести, обобщающий известные критерии Мизеса [13] и Хилла [14] с учетом особенностей ГПУ-монокристалла. Такой критерий предложен и подробно исследован авторами ранее в работах [9] — [12], согласно нему, пластическая деформация начинается, когда функция текучести

$$f(p_{ij}) = a + kI_2 + I_1 + \alpha(I_2)^2 + \beta I_3 \quad (1)$$

обращается в нуль. (Ее отрицательные значения соответствуют упругой области, а положительные являются недостижимыми). Здесь:

$$I_1 = (p_{13})^2 + (p_{23})^2, \quad I_2 = p_{33} - (p_{11} + p_{22}) / 2, \\ I_3 = (p_{11} - p_{22})^2 + 4(p_{12})^2. \quad (2)$$

Здесь p_{ij} — компоненты тензора напряжений в системе координат, связанной с кристаллом, в которой ось z направлена перпендикулярно базисной плоскости (кристаллографической) [9].

Таким образом, для отдельного монокристалла принята жесткопластическая модель без упрочнения. (Использование феноменологического описания упрочнения в монокристалле с ГПУ-решеткой не оправданно, так как при пластической деформации в нем появляется большое количество двойников, и он перестает быть монокристаллом. Такое упрочнение может быть оправдано только при рассмотрении деформации поликристалла вместе с основным механизмом упрочнения — образованием текстуры.) Особенностью функции (1) является ее цилиндрическая симметрия с осью z . Данный подход обладает очевидными преимуществами перед традиционным — меньшее количество параметров, гладкость функции и отсутствие сложной процедуры поиска активных систем скольжения или двойникования, требующей даже для самых простых задач компьютерного расчета. Тензор скоростей деформации e_{ij} определяется с использованием ассоциированного закона [13]:

$$e_{ij} = \dot{\Lambda}(t) \frac{\partial f}{\partial p^{ij}}, \quad (3)$$

где $\dot{\Lambda}(t)$ — произвольная функция времени, система координат — кристаллографическая. Данная работа соответствует второму этапу построения модели, ее цель — нахождение зависимости предела текучести от текстуры путем усреднения пределов текучести по всем возможным ориентировкам зерен при заданной текстуре. Для этого рассматриваются способы усреднения, принятые в физической теории пластичности [4], и сравниваются их результаты, после чего будет предложен оригинальный подход, учитывающий особенности жесткопластической модели. Для тестирования подходов решим задачу о свободном сжатии/растяжении бруска квадратного поперечного сечения. Материалом является крупнокристаллический магний, размер зерен и текстура которого являются однородными, текстура обладает осевой симметрией с осью, параллельной линии приложения силы. Подробно будет рассмотрен случай с равномерным распределением ориентировок зерен. Далее результаты расчетов сравним с известным значением предела текучести литого магния [15]. Кроме этого, рассмотрим случай базисной текстуры, когда нормали к базисным плоскостям всех зерен ориентированы вдоль линии приложения нагрузки, а также промежуточный случай, когда текстура не является идеальной. Вместе с тем предложенный подход не будет связан с этими допущениями и применим к любой текстуре и краевой задаче.

ПОСТАНОВКА ТЕСТОВОЙ ЗАДАЧИ

Итак, рассмотрим прямоугольный параллелепипед, заполняющий в некоторый момент времени область $0 \leq X \leq A$, $0 \leq Y \leq A$, $0 \leq Z \leq C$ (рис. 1).

С торцов образца $Z = 0$ и $Z = C$ приложены силы растяжения/сжатия, распределения сил

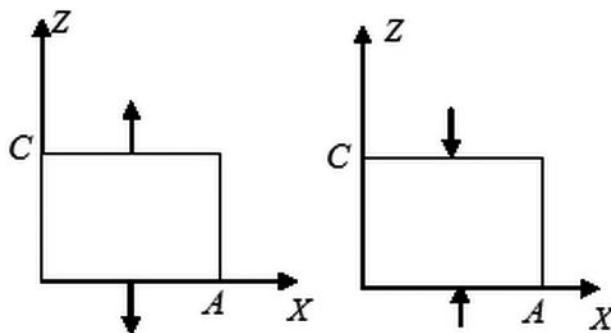


Рис. 1. К постановке краевой задачи. Стрелки показывают направление приложенных сил.

по поверхности торцов предполагаем равномерным, касательные составляющие сил предполагаем равными нулю. На боковых сторонах образца напряжения отсутствуют. Под действием приложенных сил грань $Z = C$ смещается с некоторой скоростью v_0 , точное значение которой не существенно, положение противоположной грани предполагается фиксированным. Таким образом, граничные условия имеют вид:

$$\begin{aligned} v_Z &= 0, \quad P_{XZ} = 0, \\ P_{YZ} &= 0 \text{ при } Z = 0; \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} v_Z &= v_0, \quad P_{XZ} = 0, \\ P_{YZ} &= 0 \text{ при } Z = C; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} P_{Yi} &= 0, \quad i = X, Y, Z \\ \text{при } Y &= 0 \text{ и } Y = A; \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} P_{Xi} &= 0, \quad i = X, Y, Z \\ \text{при } X &= 0 \text{ и } X = A, \end{aligned} \quad (7)$$

где P_{ij} — компоненты тензора напряжений в лабораторной системе координат.

Известно [13], что пластическое квазистационарное течение металла описывается системой уравнений:

$$\begin{aligned} \nabla_i P_{ij} &= 0, \quad E_{ii} = 0, \quad f_1(P_{ij}) = 0, \\ E_{ij} &= \dot{\Theta}(t) \frac{\partial f_1(P_{ij})}{\partial P_{ij}}, \quad E_{ij} = 0.5(\nabla_i v_j + \nabla_j v_i). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь первое уравнение — это условие равновесия, второе — условие несжимаемости, третье — критерий текучести, четвертое — ассоциированный закон; E_{ij} — компоненты тензора скоростей деформации в лабораторной системе координат, v_i — скорость вещества в данной точке, $f_1(P_{ij})$ — эффективная функция текучести поликристаллического материала, $\Theta(t)$ — произвольная функция времени. Тензоры напряжений и деформаций, как в большинстве моделей механики сплошной среды, предполагаются симметрическими. Эффективная функция текучести нам неизвестна, но ее симметрия должна совпадать с симметрией текстуры. В частности, для осесимметричной текстуры эта функция также должна быть осесимметричной. Задача (4)–(8) допускает решение, при котором тензоры напряжения и скорости деформации являются однородными, т. е. тензоры E_{ij} и P_{ij} не зави-

сят от координат. Кроме того, в силу симметрии задачи выполняются равенства:

$$\begin{aligned} P_{iX} &= P_{iY}, \quad E_{iX} = E_{iY}, \\ \text{при } i &\in \{X, Y, Z\}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} P_{ij} &= 0, \quad E_{ij} = 0, \\ \text{при } i &\neq j. \end{aligned} \quad (10)$$

Из условия несжимаемости следует:

$$E_{ZZ} = -E_{XX} - E_{YY}. \quad (11)$$

ТРАДИЦИОННЫЕ СПОСОБЫ ОСРЕДНЕНИЯ

При описании эффективных свойств неоднородных материалов чаще всего используются способы усреднения по Фойгту и по Рейссу. Первый подход обычно дает верхнюю оценку механических свойств, второй — нижнюю. Для применения их к рассматриваемой здесь задаче в первом случае следует предположить, что все зерна подвергаются одной и той же деформации, а во втором — одним и тем же напряжениям. Последний подход, очевидно, не совместим с принятой жесткопластической моделью отдельного зерна, так как одна и та же нагрузка будет недостижима для одних зерен и не вызовет деформацию других. Вместо него для нижней оценки предела текучести при одноосном растяжении/сжатии часто используется следующий подход, предложенный Заксом еще в 20-х годах прошлого века [4]: 1) каждое зерно подвергается одноосному растяжению/сжатию; 2) зерна не взаимодействуют между собой; 3) деформация начинается, когда начинает деформироваться каждое зерно. Результирующее напряжение находится усреднением по поперечному сечению. Применим данный подход к системе зерен, пластические свойства которых описываются критерием (1).

Рассмотрим систему монокристаллов, текстура которой описывается функцией распределения ориентаций (ФРО) $\rho(\phi_1, \Phi)$ [4]. (В общем случае ориентировка монокристалла задается углами Эйлера (ϕ_1, Φ, ϕ_2) , но из-за цилиндрической симметрии функции (1) последний угол можно не рассматривать, первые два угла задают ориентацию нормали $\vec{n}$ к базисной плоскости относительно лабораторной системы координат, однозначно определяющую ориентацию такого “цилиндрически-симметричного” зерна.). Угол Φ отсчитывается от направления приложенной силы сжатия/растяжения.

Используем значения параметров, вычисленные для монокристаллического магния в нашей работе [9] на основе данных по критическому напряжению сдвига в базисной плоскости, взятому из работы [16] $a = -0.28 \pm 20\% \text{ МПа}^2$, и по условным пределам текучести, снятым с графиков из работы [3]. (К сожалению, данный метод не позволяет получить высокую точность.) $\alpha = (7.1 \pm 46\%) \cdot 10^{-4}$, $\beta = (5.4 \pm 59\%) \cdot 10^{-4}$, $k = (6.4 \pm 49\%) \cdot 10^{-2} \text{ МПа}$.

Далее в большинстве случаев предполагаем отсутствие текстуры, когда ФРО имеет вид $\rho(\phi_1, \Phi) = 1 / (4\pi)$. Обозначив p_{tr} значение предела текучести для случая растяжения, p_{cr} — для случая сжатия и используя формулы (A2) — (A3), (A5) — (A7) приложения А, найдем $p_{tr} = 3.7 \pm 22\% \text{ МПа}$, $p_{cr} = 2.2 \pm 12.5\% \text{ МПа}$.

Известно [15], что предел текучести литого магния равен $\sigma_{0.2} = 25 \text{ МПа}$, что отличается от рассчитанных значений примерно на порядок. Отсюда даже с учетом погрешностей можно сделать вывод о полной неприменимости данного подхода даже для самых грубых оценок. В поликристалле взаимодействие между зернами достаточно сильно и пренебречь им нельзя. При деформации монокристалла магния при низких температурах при подавляющем большинстве ориентировок активируется скольжение в базисной плоскости, но реализация только этой моды в поликристалле при случайной ориентировке зерен приведет в общем случае к нарушению сплошности материала. Этого не происходит благодаря работе других механизмов деформации (скольжение в других плоскостях и двойникование), для которых требуются напряжения, на 1–2 порядка превосходящие напряжение скольжения в базисной плоскости, что приводит к значительному росту результирующего напряжения.

Одним из наиболее широко применяемых способов осреднения в физических теориях пластичности является приближение Фойгта, которое к данной области впервые применил Тейлор и в дальнейшем развили Бишоп и Хилл [4]. При данном подходе предполагается, что макроскопический тензор скоростей деформации E_{ij} задан и совпадает с микроскопическим, т. е. все зерна деформируются одинаково. Тогда с использованием критерия текучести (в подходе Тейлора — это закон Шмида с явным учетом работающих систем скольжения) вычисляется тензор напряжений для каждого зерна и проводится осреднение. В данной работе в качестве критерия текучести будет использовано условие обращения в нуль функции (1). Далее используем результаты работ [11], [12], позволяющие

определить тензор напряжений P_{ij} по заданному тензору скоростей деформации E_{ij} и гидростатическому давлению. Тогда, зная тензор напряжений для каждой ориентировки, умножаем его на ФРО $\rho(\phi_1, \Phi)$ и, интегрируя полученное выражение по всем возможным ориентировкам, находим значение макроскопического тензора напряжений:

$$\begin{aligned} \langle P_{ij} \rangle &= \int_S \rho(\vec{n}) P_{ij}(\vec{n}) d\vec{n} = \\ &= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(\Phi, \phi_1) P_{ij}(\Phi) \sin(\Phi) d\phi_1 d\Phi. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь S — единичная сфера с центром в начале координат. Одно из очевидных преимуществ такого подхода — возможность рассматривать самую разнообразную геометрию деформации. Применим данный подход к задаче (4)–(8), предполагая отсутствие текстуры.

Знание тензора скоростей деформации позволяет определить только девиатор тензора напряжений

$$S_{ij} = P_{ij} + p\delta_{ij}, \quad (13)$$

где

$$p = -\frac{1}{3} P_{ii} \quad (14)$$

— гидростатическое давление. Из условий на боковых гранях (6) и (7) следует $p = -P_{zz} / 3$, т. е. $P_{zz} = S_{zz} + P_{zz} / 3$. Отсюда находим $P_{zz} = 1.5S_{zz}$, следовательно, усредняя, находим:

$$p_r = 1.5S_r. \quad (15)$$

Вычислив среднее значение ZZ — компоненты девиатора тензора напряжений S_r (Приложение В), по формуле (15) найдем пределы текучести при растяжении и сжатии (в прежних обозначениях) $p_{tr} = p_{cr} = 37.1 \pm 50\% \text{ МПа}$, что примерно в полтора раза превосходит предел текучести литого магния $\sigma_{0.2}$. Отклонение лежит в пределах оценки погрешности, но, следует отметить, что эта оценка — верхняя, реальная погрешность может быть меньше. Данный подход дает правильный порядок условного предела текучести и, таким образом, значительно лучше описывает прочностные свойства поликристаллического материала, чем подход Закса. Тем не менее желательно получить лучшую оценку предела текучести. Кроме того, возникает вопрос: если все зерна деформируются одинаково, за счет чего в поликристаллическом магнии при низких температурах происходит образование текстуры, препятствующей дальнейшему его деформированию? Следует еще упомянуть

самосогласованный метод, дающий наилучшее приближение для задач линейных, либо поддающихся линеаризации, в частности для задач линейной теории упругости [17, 18]. К сожалению, для моделей с нелинейностью порогового типа (когда процесс начинается при превышении некоторой функцией напряжений определенного значения) применение данного метода затруднительно.

УЧЕТ НЕДЕФОРМИРУЕМЫХ ЗЕРЕН

Для построения модели, правильно учитывающей основные черты пластической деформации поликристаллических материалов с ГПУ-структурой, требуется адекватная процедура осреднения, учитывающая специфику принятой жесткопластической модели без упрочнения: когда некоторая функция компонент тензора напряжений (функция текучести) меньше нуля — деформация отсутствует, когда она равна нулю — деформация идет. Причем, согласно ассоциированному закону, тензор напряжений не зависит от абсолютных значений компонент тензора скоростей деформации, а только от их отношений.

Сперва заметим, что смесь компонент с сильно различающимися механическими свойствами может деформироваться, даже если включения более твердого компонента движутся, как твердые тела. Наоборот, такие “жесткие” включения начнут деформироваться не раньше, чем соприкоснутся друг с другом. Более того, как целое могут двигаться даже скопления — кластеры более жесткой фазы. Следовательно, деформация жестких включений начнется не раньше, чем они образуют единый кластер, пронизывающий весь материал, т.е. их доля достигнет критического значения — порога перколяции. Поскольку предел текучести каждого зерна зависит от его ориентировки относительно приложенных к нему сил и геометрии этих сил, то всегда будет некоторое количество “жесткоориентированных зерен”, которые могут двигаться, как твердое тело, не мешая при этом деформироваться остальным зернам. В данном случае будет данное зерно “жесткоориентированным” или нет зависит не только от его ориентировки, и внешних сил, но и от поведения окружающих зерен. Если выбрать “самые жесткоориентированные” зерна, то среди них будут деформирующиеся, только если их доля превысит порог перколяции, в противном случае они деформироваться не могут. В то же время, если доля деформирующихся зерен превысит этот порог, то какая-то их часть (“самая мягкая”) неизбежно

начнет деформироваться, так как скольжение по границам зерен мы здесь не учитываем (оно играет заметную роль только при повышенных температурах либо в ультрамелкозернистых материалах, а мы здесь ограничиваемся случаем обычных поликристаллов (с зерном, размер которого превосходит один микрон) и достаточно низких температур).

Таким образом, следует ожидать, что доля “жесткоориентированных” недеформируемых зерен в точности соответствует порогу перколяции (протекания) [19] т.е. доле, при которой образуется или распадается сплошной кластер из недеформирующихся зерен. (Размер зерен предполагаем примерно одинаковым, следовательно доля числа зерен каждой ориентировки приблизительно равна их объемной доле).

Для остальных зерен примем модифицированную гипотезу Фойгта: микроскопические тензоры скоростей деформации E_{ij} таких зерен совпадают, но из-за наличия “жесткоориентированных” зерен они связаны с макроскопическим тензором скоростей деформации E_{ij} соотношением:

$$E_{ij} = E_{ij} / \rho_1, \quad (16)$$

где $\rho_1 = 1 - \rho_2$ — доля деформирующихся зерен. Поставив в соответствие каждому зерну точку и соединив точки, если соответствующие зерна имеют общую границу получим граф. Тогда задача об определении доли “жесткоориентированных” зерен сведется к задаче об определении порога перколяции для задачи узлов [19], [20] на полученном графе. Поскольку зерна упакованы максимально плотно, примем, что граф является изоморфным [21] одной из двух решеток с максимально плотной упаковкой — ГЦК или ГПУ. Тогда предел перколяции равен 0.199 [19], [20], что дает оценку доли “жесткоориентированных” зерен:

$$\rho_2 = 0.199 \approx 0.2. \quad (17)$$

Кроме того, заметим, что перколяционный кластер вблизи порога распада имеет рыхлую структуру [19], большая часть “жестких” зерен принадлежит “мертвым” концам (не входящим ни в один замкнутый контур) и, следовательно, почти каждое “жесткое” зерно должно быть окружено “мягкими”. Предполагается, что деформация идет достаточно медленно, ускорения пренебрегаем и равновесие не нарушается. Поскольку любое “жесткое” зерно любой ориентировки может быть окружено зернами любой “мягкой” ориентировки почти со всех сторон и находится с ними в механическом равновесии, следует ожидать, что тензор упругих напряжений, усредненный по всем “жесткоориенти-

рованными” зернам $\langle P_{ij} \rangle_2$, должен совпадать с тензором напряжений, усредненным по всем деформирующимся зернам $\langle P_{ij} \rangle_1$:

$$\langle P_{ij} \rangle_1 = \langle P_{ij} \rangle_2. \quad (18)$$

Тогда результирующее напряжение равно

$$\langle P_{ij} \rangle = \frac{\langle P_{ij} \rangle_1 \rho_1 + \langle P_{ij} \rangle_2 \rho_2}{\rho_1 + \rho_2} = \langle P_{ij} \rangle_1. \quad (19)$$

Результирующее напряжение и “мягкие” ориентировки находятся из условия минимизации мощности [4]

$$\left| \int_{S_1} P_{ij}(\vec{n}) \rho(\vec{n}) E_{ij} d\vec{n} \right| \rightarrow \min, \quad (20)$$

при условии

$$\int_{S_1} \rho(\vec{n}) d\vec{n} = \rho_1, \quad \int_S \rho(\vec{n}) d\vec{n} = 1. \quad (21)$$

Здесь $\rho(\vec{n})$ — плотность распределения зерен по ориентировкам их единичных нормалей, S — единичная сфера, S_1 — область ориентировок зерен, участвующих в деформации. Вариационная задача с ограничениями (20)–(21) является изопериметрической задачей относительно границы области S_1 и решается методом множителей Лагранжа, что приводит к вариационной задаче без ограничений [22]:

$$\int_{S_1} [P_{ij}(\vec{n}) E_{ij} - \lambda] \rho(\vec{n}) d\vec{n} \rightarrow \min. \quad (22)$$

Варьируя область интегрирования S_1 , находим уравнение ее границы

$$P_{ij}(\vec{n}) E_{ij} = \lambda. \quad (23)$$

После того, как область “мягких” ориентировок найдена, определим результирующий тензор напряжения, соответствующий заданному тензору скоростей деформации:

$$\langle P_{ij} \rangle = \langle p_{ij} \rangle_1 = \frac{1}{1 - \rho_2} \int_{S_1} P_{ij}(\vec{n}) \rho(\vec{n}) d\vec{n}. \quad (24)$$

Тогда работа, совершаемая при деформации внутренними поверхностными силами, равна [23]

$$\begin{aligned} W &= - \int_S P_{ij}(\vec{n}) \rho(\vec{n}) E_{ij}(\vec{n}) d\vec{n} = \\ &= - \langle P_{ij} \rangle_1 E_{ij} (1 - \rho_2) = - \langle P_{ij} \rangle \langle E_{ij} \rangle, \end{aligned} \quad (25)$$

т. е. макроскопическая работа равна микроскопической, что подтверждает корректность данного подхода.

На основе данного подхода снова рассмотрим задачу с краевыми условиями (4)–(8) в предположении отсутствия текстуры.

Рассматривая зависимости $S_{zz}(\Phi)$ (рис. 2), находим, что область легкого деформирования для случая растяжения должна иметь вид области из двух компонент $\Phi < \Phi_1$, $\Phi > \pi - \Phi_1$, тогда второе уравнение (21) принимает вид:

$$\begin{aligned} \int_{S_1} \rho(\vec{n}) d\vec{n} &= 2 \int_0^{\Phi_1} 2\pi \rho \sin(\Phi) d\Phi = \\ &= 4\pi \rho \cos(\Phi)_0^{\Phi_1} = 4\pi \rho [1 - \cos \Phi_1] = \rho_1 \end{aligned} \quad (26)$$

или

$$\Phi_1 = \arccos \rho_2, \quad \rho = 1/4/\pi. \quad (27)$$

Отсюда находим девиатор тензора напряжений

$$\begin{aligned} \langle S_{zz} \rangle &= \frac{4\pi}{1 - \rho_2} \int_0^{\Phi_1} \frac{1}{4\pi} S_{zz}(\Phi) \sin \Phi d\Phi = \\ &= \frac{1}{1 - \rho_2} \int_0^{\Phi_1} S_{zz}(\Phi) \sin \Phi d\Phi. \end{aligned} \quad (28)$$

Аналогично, рассматривая случай сжатия, определяем область легкого деформирования

$$\Phi_2 < \Phi < \pi - \Phi_2, \quad (29)$$

где угол Φ_2 находится из условия

$$\Phi_2 = \arccos(1 - \rho_2). \quad (30)$$

Девиатор тензора напряжений при сжатии равен

$$\langle S_{zz} \rangle = \frac{1}{1 - \rho_2} \int_{\pi/2}^{\pi - \Phi_2} S_{zz}(\Phi) \sin \Phi d\Phi. \quad (31)$$

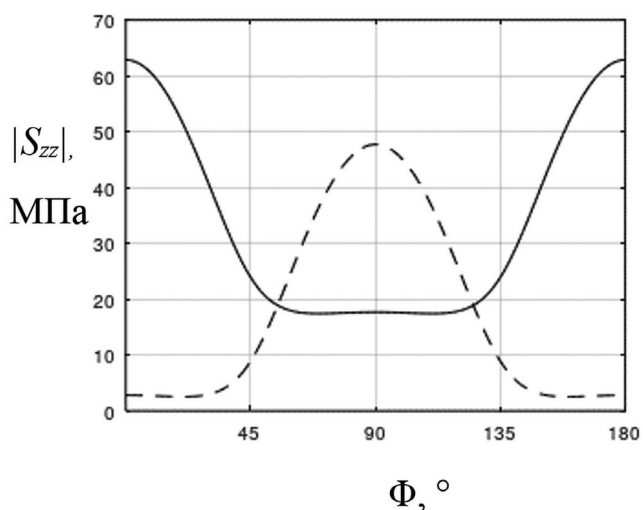


Рис. 2. Зависимость абсолютного значения компоненты S_{zz} девиатора тензора напряжений для случаев сжатия (сплошная линия) и растяжения (штриховая линия) от угла Φ .

Как и ранее, гидростатическое давление находится по девиатору напряжений и условиям на боковых поверхностях (6), (7), а предел текучести оказывается в полтора раза больше соответствующего девиатора (24). Рассчитанный предел текучести как при сжатии, так и при растяжении, приблизительно равен $29 \pm 50\%$ МПа, что достаточно хорошо согласуется с имеющимися в литературе экспериментальными данными по условному пределу текучести крупнокристаллического литого магния $\sigma_{0.2} = 25$ МПа [15], $\sigma_{0.2} = 20 \div 30$ МПа [24] (Оценка погрешности проводится также, как в приложении А). Для магния с “жесткой” базисной текстурой (сила сжатия приложена перпендикулярно базисной плоскости) все три подхода дают $94.5 \pm 2\%$ МПа, так как в рамках нашей модели такая ориентировка соответствует одиночному кристаллу [9]. Это с достаточной точностью совпадает с условным пределом текучести для деформированного магния $\sigma_{0.2} = 90$ МПа (прессованные прутки) [15].

ВЛИЯНИЕ ТЕКСТУРЫ

Выше рассматривались два предельных случая текстуры: 100% базисная текстура и полное ее отсутствие. Большой интерес представляет промежуточный случай, так как именно он должен встречаться чаще всего. Кроме того, его рассмотрение позволит оценить влияние отклонения от предельных случаев на величину пределов текучести. Снова рассмотрим задачу (4)–(8), предполагая, что ФРО остается симметричной относительно направления приложения силы. Зададим ФРО в виде:

$$\rho(\vec{n}) = \rho(\Phi) = K \exp(-\Phi^2 / \sigma^2). \quad (32)$$

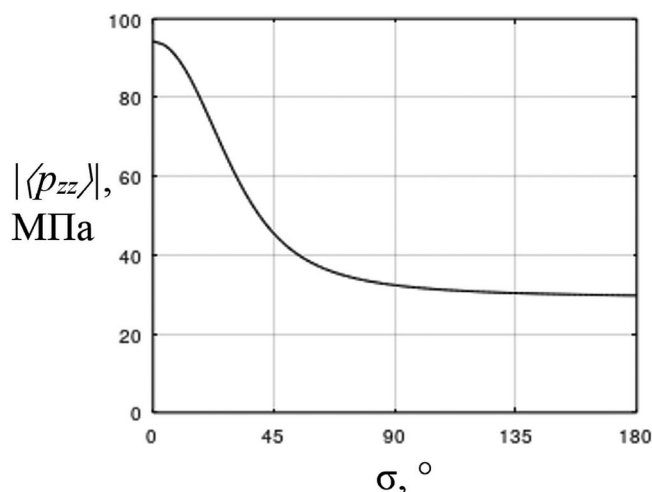


Рис. 3. Зависимость предела текучести от разброса ориентировок зерен.

Заметим, что базисная плоскость является плоскостью симметрии ГПУ-решетки, поэтому при замене $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$ ориентировка ячейки не меняется. С учетом симметрии задачи $\rho(\pi - \Phi) = \rho(\Phi)$ можно ограничиться областью $\Phi \in [0, \pi / 2]$. Кроме того, из-за ограниченности области определения аргумента и ее несимметричности распределение (32) нельзя считать распределением Гаусса, а параметр σ – разброс ориентировок зерен, не совпадает с его дисперсией. Ограничимся случаем сжатия. Область легкого деформирования имеет вид (29). Из второго уравнения (21) находим:

$$K = 1 / \int_0^{\pi/2} 4\pi \exp(-\Phi^2 / \sigma^2) \sin(\Phi) d\Phi \quad (33)$$

Из первого уравнения (21) находим уравнение для Φ_2 :

$$\int_{\Phi_2}^{\pi/2} 4\pi \exp(-\Phi^2 / \sigma^2) \sin(\Phi) d\Phi = \rho_1. \quad (34)$$

Тогда критическое напряжение сжатия находится из (24), (B1). Его зависимость от величины σ приведена на рис. 3. Видно, что уже при $\sigma = 90^\circ$ предел текучести почти не отличается от случая отсутствия текстуры. При этом среднее значение угла Φ равно $\bar{\Phi} = 51.3^\circ$, доля зерен, заключающаяся в области $\Phi < \bar{\Phi}$, равна 76%, а функция $\rho(\Phi)$ меняется в e раз при изменении угла Φ от 0° до 90° , т.е. распределение достаточно сильно отличается от равномерного. Возможно, именно это объясняет, почему предел текучести литого магния составляет 20–30 МПа, хотя полностью исключить образование текстуры затруднительно.

ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанное по данной модели напряжение значительно точнее, чем рассчитанное согласно двум предыдущим подходам. Кроме того, оно позволяет качественно объяснить возникновение текстуры. “Жесткоориентированные” зерна не могут свободно вращаться среди окружающих их зерен (тем более, что многие из них сгруппированы в кластеры). Поэтому можно сделать допущение, что “жесткоориентированные” зерна движутся только поступательно. В этом случае несимметричность градиента скоростей деформации, обеспечиваемой скольжением в базисной плоскости, и двойникование неизбежно вызовут разворот решетки части зерен “мягкой” ориентировки. Из-за этого зерна “мягкой” ориентировки будут время от времени попадать в “жесткую” ориентировку и оставаться в ней, т. к. в последней не происходит разворота решетки.

Из-за этого предел текучести будет повышаться, для продолжения деформации потребуется прикладывать все большую силу, в результате часть “жесткоориентированных” зерен (“наименее жесткоориентированные”) начнут деформироваться — доля деформирующихся зерен останется прежней, но предел текучести увеличится. Заметим, что предложенный способ осреднения может быть применен ко всем поликристаллическим системам, где связь между деформацией и напряжением носит пороговый характер.

ВЫВОДЫ

1) Предложенная модель дает удовлетворительную оценку условного предела текучести как литого крупнокристаллического, так и сильнодеформированного магния.

2) Модель также позволяет качественно объяснить образование жесткой базисной текстуры и вызванное ей упрочнение.

3) Слабовыраженная текстура не сказывается заметно на пределе текучести.

4) Полное пренебрежение взаимодействием между зернами ведет к грубым ошибкам.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме “Давление” Г. р. № 122021000032-5.

Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Так как приложенное напряжение и свойства материала в рассматриваемой тестовой задаче обладают осевой симметрией (ось направлена вдоль направления приложения силы), то угол ϕ_1 можно не рассматривать. Используя формулу (3.10) из нашей работы [9]

$$a + k \frac{p}{2} (1 - 3 \cos^2 \Phi) + \frac{p^2}{4} \sin^2 2\Phi + \alpha \frac{p^2}{4} (1 - 3 \cos^2 \Phi)^2 + \beta p^2 \sin^4 \Phi = 0, \quad (\text{A1})$$

находим напряжение p , способное вызвать деформацию зерна, в зависимости от угла Φ , который в данном случае равен углу между направлением действия силы и нормалью к базисной плоскости. Решение уравнения (A1) дает величину приложенного напряжения:

$$p_c(\Phi) = \left[\pm 0.5k(1 - 3 \cos^2 \Phi) + \sqrt{D} \right] \times \left[0.5 \sin^2 2\Phi + 0.5\alpha(1 - 3 \cos^2 \Phi)^2 + 2\beta \sin^4 \Phi \right]^{-1}, \quad (\text{A2})$$

где знак “+” соответствует растяжению, знак “–” — сжатию,

$$D = (0.25k^2 - a\alpha)(1 - 3 \cos^2 \Phi)^2 - a \sin^2 2\Phi - 4\beta a \sin^4 \Phi \quad (\text{A3})$$

— дискриминант квадратного уравнения.

Чтобы найти среднее критическое напряжение p_r умножим функцию (A2) на ФРО $\rho(\phi_1, \Phi)$ (нормированную на единицу) и проинтегрируем по всевозможным ориентировкам:

$$p_r = \int_S \rho(\vec{n}) p_c(\vec{n}) d\vec{n} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(\phi_1, \Phi) p_c(\Phi) \sin(\Phi) d\phi_1 d\Phi. \quad (\text{A4})$$

Здесь S — единичная сфера с центром в начале координат. В отсутствии текстуры $\rho(\phi_1, \Phi) = 1 / (4\pi)$ и выражение (A4) упрощается:

$$p_r = 0.5 \int_0^\pi p_c(\Phi) \sin(\Phi) d\Phi. \quad (\text{A5})$$

Предполагая погрешности каждого параметра независимыми, относительную погрешность вычисляем по формуле:

$$\delta p_r = \left[\left(\frac{\partial p_r}{\partial a} \Delta a \right)^2 + \left(\frac{\partial p_r}{\partial \alpha} \Delta \alpha \right)^2 + \left(\frac{\partial p_r}{\partial \beta} \Delta \beta \right)^2 + \left(\frac{\partial p_r}{\partial k} \Delta k \right)^2 \right]^{1/2} / p_r. \quad (\text{A6})$$

Для оценки производных используем разделенные разности [25]:

$$y' = [y(x+h) - y(x-h)] / (2h). \quad (\text{A7})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

В силу симметрии задачи (4) — (8) и приближения Фойгта деформация образца должна быть однородной и одноосной, т.е. два собственных значения тензора скоростей деформации совпадают (соответствующие им оси перпендикулярны оси Z). В работе [11] показано, что ZZ компоненты девиатора тензора напряжений в таких условиях для критерия текучести (1)–(2) имеют вид:

$$S_{zz} = -\frac{E}{2\beta\Lambda} - \frac{4En_z^2}{\Lambda} \left(1 - \frac{1}{4\beta} \right) + An_z^2 + B, \quad (\text{B1})$$

где

$$\Lambda = \left[\frac{3E^2}{4\beta} + \left(1 - \frac{1}{4\beta} \right) E^2 (1 + 3n_z^2) + \left(1 + \frac{1}{4\alpha} + \frac{1}{16\beta} \right) E^2 (1 - 3n_z^2)^2 \right]^{1/2} / \sqrt{\left(\frac{k^2}{2\alpha} - a \right)}; \quad (\text{B2})$$

$$A = -\frac{k}{2\alpha} + E \frac{1-3n_z^2}{\dot{\Lambda}} \left(\frac{1}{8\beta} + \frac{1}{2\alpha} - 2 \right); \quad (B3)$$

$$B = \frac{k}{6\alpha} + E \left(\frac{1}{8\beta} - \frac{1}{6\alpha} \right) \frac{1-3n_z^2}{\dot{\Lambda}}. \quad (B4)$$

Постоянная E может быть вычислена при известной скорости v , но она не представляет интереса, так как не входит в выражение для тензора напряжений. Интегрируя, находим средний девиатор тензора напряжения растяжения и сжатия:

$$S_r = \frac{1}{2} \int_0^\pi S_{zz}(\Phi)(\Phi) \sin(\Phi) d\Phi. \quad (B5)$$

Оценка погрешностей проводится аналогично приложению А.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Antonova O.V., Komkova D.A., Tokarev M.A., Sokolov A.L., Antonov B.D. Structure and Texture of Pure Magnesium After the Backward Extrusion at Room Temperature // AIP Conference Proceedings. 2022. V. 2533. № 1. P. 020014-1 – 020014-5.
2. Дорошенко В.В., Барыкин М.А., Короткова Н.О., Васина М.А. Влияние кальция и цинка на структуру и фазовый состав литейных магналиев // ФММ. 2022. Т. 123. № 8. С. 872–880.
3. Kelly E.W., Hosford W.F. Plane-strain compression of magnesium and magnesium alloy crystals // Trans. Metal. Soc. AIME. 1968. V. 242. P. 5–15.
4. Трусов П.В., Волегов П.С., Кондратьев Н.С. Физические теории пластичности. Пермь: Изд-во пермского национального исследовательского политехнического ун-та, 2013. 244 с.
5. Трусов П.В. Классические и многоуровневые конститутивные модели для описания поведения металлов и сплавов: проблемы и перспективы (в порядке обсуждения) // Изв. РАН. МТТ. 2021. № 1. С. 69–82.
6. Trusov P., Kondratiev N., Podsedertsev A. Description of Dynamic Recrystallization by Means of An Advanced Statistical Multilevel Model: Grain Structure Evolution Analysis // Crystals. 2022. V. 12. P. 653 (19).
7. Sarkar A., Chakravartty J.K. Modeling of deformation behaviour of HCP metals using Crystalplasticity approach // BARC Newsletter 2011. V. 319. P. 31–35.
8. Zhang J., Joshi S.P. Phenomenological crystal plasticity modeling and detailed micromechanical investigations of pure magnesium // J. Mech. Phys. Solids. 2012. V. 60. P. 945–972.
9. Власова А.М., Кесарев А.Г. Обобщение критерия Мизеса на монокристаллы с гексагональной решеткой // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2019. № 6. С. 86–98.
10. Власова А.М., Кесарев А.Г. Модель деформации монокристаллического магния // Изв. Вузов. Физика. 2018. Т. 61. № 7. С. 68–78.
11. Кесарев А.Г., Власова А.М. Обобщенный критерий Мизеса как инструмент для определения прочностных свойств гексагональных материалов // ФММ. 2022. Т. 123. № 2. С. 200–206.
12. Кесарев А.Г., Власова А.М. Определение предела текучести монокристаллов с гексагональной решеткой при заданном тензоре деформаций и гидростатическом давлении // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2023. № 1. С. 55–67.
13. Седов Л.И. Механика сплошной среды, Т. 2. М.: Наука, 1994. 560 с.
14. Хилл Р. Математическая теория пластичности. М.: Гостехиздат, 1956. 408 с.
15. Лахтин Ю.М., Леонтьева В.П. Материаловедение. М.: Машиностроение, 1990. 528 с.
16. Shelly W.F., Nash R.R. Mechanical Properties of Magnesium Monocrystals // Trans. Metal. Soc. AIME. 1960. V. 218. P. 416–423.
17. Kube C.M., De Jong M. Elastic constants of polycrystals with generally anisotropic crystals. // J. Appl. Phys. 2016. V. 120. № 16. P. 165105 (14).
18. Li A., Zhao T., Lan Z., Huang M. Constitutive Relations of Anisotropic Polycrystals: Self-Consistent Estimates // Materials. 2022. V. 15. P. 4974 (17).
19. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука. Главная редакция физ.-мат. литературы, 1982. 176 с.
20. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: URSS, 2012. 112 с.
21. Емеличев В.А., Мельников О.И., Сарванов В.И., Тышкевич Р.И. Лекции по теории графов. М.: Наука. Главная редакция физ.-мат. литературы, 1990. 384 с.
22. Кабанов Н.И. Элементарное введение в вариационное исчисление. Изд.-во Саратовского университета, 1978. 304 с.
23. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. М.: Наука, 1994. 528 с.
24. Кругликов Н.А., Логинов Ю.Н., Каменецкий Б.И., Саврай Р.А., Долматов А.В., Ключин И.В., Волков А.Ю. Микроструктура и механические свойства литого магния // Литейщик России. 2013. № 8. С. 17–21.
25. Калиткин Н.Н. Численные методы. СПб: БХВ – Петербург, 2011. 586 с.

CALCULATION OF THE YIELD STRENGTH OF POLYCRYSTALLINE MATERIALS WITH A HEXAGONAL CLOSE-PACKED LATTICE AT A GIVEN TEXTURE

A. G. Kesarev*

Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620108 Russia

**e-mail: kesarev@imp.uran.ru*

For a polycrystalline material with a hexagonal close-packed lattice, a model is proposed that allows estimating the yield strength at a given texture. The plasticity properties of an individual grain are described by the generalized von Mises criterion. The most widespread averaging approaches are considered to determine the yield strength of a polycrystal. An original averaging method for a heterogeneous medium under plastic deformation conditions is proposed that takes into account the presence of undeformed grains whose share is determined by means of the percolation theory. Using each approach, the problem about tension/compression of a homogeneous rod of square cross-section is solved for two limiting cases: no texture and rigid basis texture. The calculation results are juxtaposed with the available literature data. The effect of the texture on the yield strength is considered. A qualitative explanation of generating a texture is given.

Keywords: magnesium, deformation, plasticity, yield criterion, stress tensor, strain rate tensor, deviator, percolation threshold, percolation cluste