

МНОГОУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ: ОПИСАНИЕ ЗЕРНОГРАНИЧНОГО СКОЛЬЖЕНИЯ

Э.Р. ШАРИФУЛЛИНА, А.И. ШВЕЙКИН, П.В. ТРУСОВ

Пермский национальный исследовательский политехнический университет

E-mail: elvira16_90@mail.ru

Разработка современных технологий термомеханической обработки металлов и сплавов требует создания математических моделей, позволяющих значительно снизить используемые ресурсы на прямые экспериментальные исследования поведения материалов в исследуемых процессах. Построение многоуровневых математических моделей материалов на основе физических теорий пластичности [1,2], способных описывать как интегральные характеристики процесса неупругого деформирования, так и эволюционирующую структуру материала, представляется наиболее перспективным подходом для прогнозирования физико-механических свойств получаемых изделий, чего в большинстве случаев невозможно достичь эмпирически. Такие модели дают возможность определять рациональные технологические режимы и выработать рекомендации по назначению параметров технологических процессов для получения материалов с требуемыми свойствами (и необходимой для их достижения структурой материала). При этом одним из актуальных направлений является создание универсальных математических моделей, позволяющих описывать поведение материалов в широком диапазоне изменения параметров воздействия. В рамках настоящей работы ключевой задачей является учет одного из важнейших механизмов неупругого деформирования – зернограничного скольжения (ЗГС) для широкого диапазона температурно-скоростных воздействий и различной зеренной структуры, в зависимости от которых меняется роль данного механизма и его вклад в неупругое деформирование (наиболее существенно он проявляется при повышенных температурах и мелкозернистой структуре материала, в режиме структурной сверхпластичности (СП) является лидирующим).

Предлагается модификация разработанной ранее двухуровневой статистической модели, включающей два масштабных уровня – уровень представительного макрообъема поликристалла, состоящего из различно ориентированных кристаллитов (макроуровень), и уровень отдельного кристаллита (мезоуровень) [1]: для описания ЗГС в рассмотрение вводятся границы кристаллитов, учитывается взаиморасположение кристаллитов и границ в пространстве. Уровень описания ЗГС выделяется в отдельный структурный уровень, и модель рассматривается как трехуровневая: макроуровень – уровень описания ЗГС – мезоуровень. Границы аппроксимируются плоскими площадками (фасетками) и характеризуются площадью, кристаллиты – ориентацией решетки, формой и размером; описывается эволюция всех перечисленных характеристик в процессе деформирования. Полагается, что смещения кристаллитов друг относительно друга по общим границам, наблюдаемые при ЗГС, происходят путем перемещения зернограничных дислокаций (ЗГД) в них (однако без явного модельного описания носителей данного механизма). Соотношение для скоростей зернограничных сдвигов формулируется для представительного макрообъема по аналогии с уравнением Орована, в котором для определения скоростей относительных смещений кристаллитов по границам используется соотношение аррениусовского типа. Для определения величины касательных сдвиговых напряжений и скорости неупругих деформаций за счет ЗГС для каждой межкристаллитной границы вводится базис из ортонормированных векторов нормали к плоскости границы и направлений смещения в ней, при этом один из векторов направления смещения привязывается к материалу одного из кристаллитов (к его решетке). На основе анализа экспериментальных и теоретических данных в соотношении для описания эволюции критических напряжений зернограничных сдвигов учитывается, что ЗГС реализуется во взаимосвязи с внутризерненным дислокационным скольжением (ВДС) и зернограничной диффузией, а также ограничено наличием в поликристаллическом материале соседних кристаллитов [3]. Скорости внутризерненных сдвигов определяются на мезоуровне в каждом кристаллите за счет ВДС по известным для данного материала кристалло-

графическим плоскостям скольжения с использованием соотношения аррениусовского типа.

Модель формулируется для случая больших градиентов перемещений, на каждом масштабном уровне в качестве меры скорости деформирования используется несимметричная мера – транспонированный градиент относительной скорости перемещений. Принимается новый способ разложения движения [4]: на мезоуровне спин определяется скоростью поворота подвижной системы координат (ПСК), которая связана с симметричными элементами кристаллита – кристаллографическим направлением и плоскостью; спин макроуровня для поликристалла представляется с помощью осреднения спинов входящих в него кристаллитов. Воздействия с макроуровня на мезоуровень передаются с помощью расширенной гипотезы Фойгта об однородности полных градиентов скоростей перемещений с учетом того, что часть воздействий реализуется за счет механизма ЗГС. Связь внутренних переменных уровней осуществляется с помощью условий согласования определяющих соотношений на них [1]. Конститутивные соотношения модели учитывают также температуру и ее изменение в процессе деформирования за счет диссипации.

Разработан алгоритм численной реализации трехуровневой модели, на основе которого создан комплекс программ. Проведены численные эксперименты по моделированию представительных объемов поликристаллических материалов при различных параметрах воздействия (скорость деформации, траектория деформации, температура) и исходных состояниях зеренной структуры. Полученные результаты демонстрируют важность учета механизма ЗГС, характеризуют особенности поведения материала при различных образом заданных параметрах воздействия и зеренной структуры и также позволяют отслеживать эволюцию параметров в процессе деформирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (базовая часть государственного задания ПНИПУ, проект №9.7434.2017/8.9), Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №15-08-06866-а, №17-41-590694-р_а).

Список литературы

1. Trusov P.V., Shveykin A.I., Nechaeva E.S., Volegov P.S. Multilevel models of inelastic deformation of materials and their application for description of internal structure evolution // Physical Mesomechanics. – 2012. – Vol. 15, Is. 3-4. – P. 155–175.
2. Trusov P.V., Shveykin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models // Physical Mesomechanics. – 2013. – Vol.16, №1. – P. 23–33.
3. Trusov P., Sharifullina E., Shveykin A. Three-level modeling of fcc polycrystalline inelastic deformation: grain boundary sliding description // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – Vol. 71. – P. 012081. doi:10.1088/1757-899X/71/1/012081.
4. Трусов П.В., Швейкин А.И., Янц А.Ю. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т.19, №2. – С. 47-65.