

На правах рукописи

Зисман Александр Абрамович

**Наведенные мезодефекты, разориентировки и
внутренние напряжения при пластической деформации
и фазовых превращениях кристаллических агрегатов**

Специальность 01.04.07- физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург

2003

Работа выполнена в Федеральном государственном унитарном предприятии “Центральный научно-исследовательский институт конструкционных материалов “Прометей”

Научный консультант:

член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук,
профессор
В.В.Рыбин

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор,
В.А.Пальмов

доктор физико-математических наук
И.А.Овидько

доктор физико-математических наук
А.Е.Романов

Ведущая организация:

Институт кристаллографии РАН

Защита состоится *15 октября 2003 г.* в 16ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д212.229.05 при Санкт-Петербургском государственном политехническом университете по адресу: 195251 г.Санкт-Петербург, Политехническая ул., д.29, II учебный корпус, аудитория 265.

С диссертацией можно ознакомиться в Фундаментальной библиотеке СПбГПУ

Автореферат разослан *15 августа 2003 г.*

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.229.05

Титовец Ю.Ф.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Неупругие деформации, присущие таким явлениям, как пластичность, фазовые превращения, термическое расширение, магнито- и электрострикция, проявляют в кристаллах выраженную анизотропию. Поэтому в реальных кристаллических материалах, которые обычно состоят из различно ориентированных зерен или фрагментов, на границах раздела и в стыках локализуются несовместности неупругой деформации- наведенные мезодефекты. Они генерируют упругие поля, т.е. приводят к упругим искажениям кристаллической решетки во всем объеме материала, а также создают на границах дополнительные (наведенные) разориентировки. Оба этих фактора существенно влияют на структуру и макроскопические свойства твердых тел, поэтому разработка приемлемо строгих и экспериментально обоснованных моделей наведенных мезодефектов является в теории конденсированного состояния весьма актуальной проблемой.

С практической точки зрения актуальность подобных исследований прежде всего обусловлена проблемой повышения прочности конструкционных материалов. В последнее время данная проблема, традиционная для аэрокосмических отраслей и судостроения, обостряется и приобретает общий характер, т.к. чрезмерное потребление ресурсов промышленностью требует резко снизить вес и габариты металлических конструкций за счет повышения их прочности. Перспективным с этой точки зрения технологическим направлением является формирование мелкодисперсных кристаллических структур при больших пластических деформациях, когда исходные кристаллические элементы фрагментируются, а также при полиморфных превращениях, благодаря гетерогенному характеру зарождения новой фазы. Выгодное отличие указанных подходов состоит в том, что накопленные ими теоретические представления о процессах структурообразования подкрепляются многовековым опытом промышленного формоизменения и термообработки металлических полуфабрикатов.

Исследования явления фрагментации, проведенные за последние десятилетия, позволяют заключить, что она инициируется интенсивными напряжениями вблизи границ и стыков между исходными кристаллами, а фрагментированная субструктура возникает при пластической аккомодации, которая неоднородна внутри этих кристаллов. Новые границы раздела в них формируются в результате коллективного взаимодействия решеточных

дислокаций, что было отражено большинством предложенных моделей этого явления. В тоже время, взаимодействие между *цельными* кристаллами деформируемого агрегата, т.е. первопричина фрагментации, систематически не анализировалось до начала данной диссертационной работы.

Движущая сила полиморфного превращения, т.е. разность удельных энергий конкурирующих фаз, на первый взгляд не допускает аналогий между структурами деформационного и фазового происхождения. Однако, несовместные фазовые деформации величиной от нескольких до десятка процентов индуцируют на возникающих межфазных границах источники напряжений, величина которых сравнима с теоретической прочностью кристалла и неизбежно предполагает пластическую аккомодацию, которая наводит на границах дополнительные разориентировки и непосредственно влияет на межфазные ориентационные соотношения. Кроме того, от распределения связанной с фазовыми напряжениями упругой энергии зависит кинетика превращения и эволюция двухфазной структуры. Значимость указанных факторов сегодня не вызывает сомнений, однако прямое измерение фазовых напряжений на микронных и субмикронных масштабах структуры пока остается практически неосуществимым. В связи с этим, особую актуальность приобретают экспериментально обоснованные количественные модели межфазных мезодефектов и связанных с ними упругих полей.

Целью работы является разработка количественной теории наведенных мезодефектов и ее приложение к структурам, возникающим при пластической деформации и полиморфных превращениях в поликристаллах, а также при деформации пластичных матриц, упрочненных дисперсными твердыми частицами. Подобная теория должна учитывать:

- (а) накопление неупругих несовместностей на границах раздела при пластической деформации или полиморфном превращении материала;
- (б) разориентировки и источники напряжений, наведенные на границах, и соответствующие упругие поля в объемах прилегающих кристаллов;
- (в) возникновение новых границ раздела в результате неоднородной пластической аккомодации, которая активируется растущими внутренними напряжениями.

При построении теории были решены следующие **основные задачи**:

1. Распределение пластической деформации между зернами или фрагментами деформируемого агрегата с учетом их кристаллографической ориентации, полиэдрической формы и пространственной координации.

2. Формулировка условия совместности, связывающего относительные повороты взаимодействующих кристаллов с распределением деформации между ними.
3. Анализ условий сопряжения планарных мезодефектов на линейных и точечных стыках граничных фасеток и выявление характерных конфигураций мезодефектов, наведенных в масштабе целых зерен или фрагментов.
4. Разработка аналитических методов вычисления упругих полей наведенных мезодефектов при произвольной форме и пространственной координации структурных элементов.
5. Выявление механизма и создание количественной модели формирования стыковых и частичных дисклинаций, ответственных за зарождение и рост новых границ раздела в деформируемом кристаллическом агрегате.
6. Интегрирование эффектов фазовой деформации и последующей пластической аккомодации при моделировании мезодефектов, наведенных в ходе фазового превращения.
7. Восстановление наведенных источников напряжений и прошедших в прилегающих кристаллах пластических сдвигов по заданным (измеренным) разориентировкам на границах раздела.

Научная новизна. Следующие результаты впервые получены в данной диссертации.

Кусочно-однородная модель пластической деформации кристаллического агрегата, которая при распределении деформации между взаимодействующими кристаллическими элементами в явной форме учитывает их ориентацию, полиэдрическую форму и пространственную координацию.

Предсказание и количественная модель формирования дисклинации на линии стыка кристаллов из-за различия их собственных пластических деформаций; а также описание характерных конфигураций линейных и планарных мезодефектов, наведенных в кристаллическом агрегате.

Трехмерные аналитические выражения, с помощью которых вычислены упругие поля мезодефектов, наведенных на границе *полиэдрической* частицы; при этом предложен приближенный метод учета упругой неоднородности (различия упругих свойств частицы и окружения), который основан на тензорном представлении формы частицы и определении ассоциированного с ней эллипсоида.

Алгоритм последовательного выбора активных систем скольжения, который отражает аккомодационный характер множественного скольжения и

обеспечивает заданную скорость пластической деформации кристалла при минимальной величине накопленной пластической несовместности с окружением; а также определяет с точностью до скалярного множителя тензор напряжений кристалла.

Учет фактора формы в уравнении совместности для поворотов и деформаций целых структурных элементов, а также выражение для скорости аккомодационного вращения при различии скоростей деформации смежных элементов.

Предсказание эволюции локальной текстуры в рамках модели, описывающей взаимодействие соседних кристаллов деформируемого агрегата с учетом их ориентаций, полиэдрической формы и пространственной координации.

Подход к восстановлению типа, мощности и пространственного расположения мезодефектов в объеме материала по данным автоматизированного ориентационного анализа на плоской внешней поверхности.

Анализ распределения разориентировок на границе оборванной микрополосы сдвига, возникшей в поликристалле железа при изменении пути деформирования, а также расчетный метод восстановления по этим данным активной системы скольжения и механизма распространения микрополосы.

Моделирование мартенситного превращения в малоуглеродистых сталях с учетом пластической аккомодации, вызванной фазовыми напряжениями, и предсказание закономерного чередования канонических ориентационных соотношений по мере развития пластической аккомодации мартенсита.

Эволюция гидростатических фазовых напряжений в ходе ферритного превращения, предсказанная с учетом пластической аккомодации в феррите и аустените под действием сдвиговых фазовых напряжений.

Моделирование вращения твердых цилиндрических частиц и оценка их упрочняющего эффекта при взаимодействии с пластически деформируемой матрицей в зависимости от их параметра формы и ориентации относительно главных осей деформации. Восстановление параметра формы удлиненных частиц по ориентациям их *плоских следов* на внешней поверхности после разных степеней деформации материала.

Научная и практическая значимость результатов работы. Введение понятия наведенных мезодефектов и их теоретическое описание позволяет с единых позиций анализировать внутренние напряжения, пластическую

аккомодацию и эволюцию структуры в кристаллических агрегатах различного происхождения (поликристаллы, фрагментированные кристаллы, металлические композиты, тонкие покрытия, слоистые структуры) независимо от природы несовместных деформаций (пластических, фазовых, термических и т.д.). При этом естественным образом удается согласовать физический и механический подходы: собственные деформации кристаллических элементов и, следовательно, геометрические параметры наведенных мезодефектов определяются при помощи соответствующих физических моделей с учетом решеточных дефектов, а генерируемые мезодефектами упругие поля позволяют учесть влияние структуры агрегата на его макроскопические свойства в рамках континуальной модели.

При формировании мелкодисперсных структур посредством пластической обработки материалов необходимо решение обратной проблемы- по заданной макроскопической деформации предсказать эволюцию структуры кристаллического агрегата. В этом случае основной интерес представляют упругие сингулярности вблизи границ раздела и стыков, где зарождаются “границы деформационного происхождения”. При анализе подобных особенностей могут использоваться полученные в работе выражения для упругих полей, генерируемых наведенными дефектами.

Практическая значимость работы в целом обусловлена, прежде всего, проблемой внутренних напряжений структурного масштаба, возникающих при пластической деформации и фазовых превращениях. Эти напряжения кардинально влияют на механические и физические свойства твердых тел, но не могут быть непосредственно измерены. Сформулированный в диссертации подход позволяет в определенных случаях использовать измеримые разориентировки на границах раздела, чтобы восстановить наведенные мезодефекты и связанные с ними поля напряжений.

Предложенная модель деформируемого кристаллического агрегата, учитывающая взаимодействие соседних кристаллов и позволяющая предсказать эволюцию *локальных* текстур, представляет особый практический интерес в случае деформирования агрегатов с ограниченным числом взаимодействующих кристаллов (тонкие поликристаллические листы или крупнозернистые поликристаллические детали).

Аккомодационные модели, предсказывающие межфазные ориентационные соотношения при мартенситном превращении и гидростатические фазовые напряжения при ферритном превращении, существенно расширяют научные

основы для оптимизации структуры и свойств малоуглеродистых сталей при термической обработке.

Кинематическая модель взаимодействия твердых частиц произвольной формы с пластичной матрицей позволяет целенаправленно выбирать форму и морфологические ориентации частиц “наполнителя” в зависимости от условий деформирования и требуемого механического поведения композиционных материалов.

Основные научные положения, выносимые на защиту:

1. Критерий наименьшей несовместности, позволяющий выбрать *заданное* (от 1 до 5) количество активных систем скольжения и определить распределение сдвига между ними, обеспечивая минимум реактивных напряжений при взаимодействии деформируемого кристалла с окружающим материалом.
2. Уравнение совместности, которое связывает повороты и деформации *целых* структурных элементов, учитывая их форму и взаимное расположение.
3. Анализ характерных конфигураций наведенных мезодефектов и механизм формирования *стыковых дисклинаций* в результате различия неупругих деформаций стыкующихся кристаллов.
4. *Двумерный и трехмерный* аналитические методы вычисления упругих полей, генерируемых наведенными мезодефектами, в зависимости от пластических деформаций, упругих свойств и формы структурных элементов.
5. Механизм распространения микрополосы сдвига, восстановленный по распределению разориентировок на ее границе и включающий в себя:
 - рост дипольных малоугловых границ *перед фронтом* микрополосы за счет локальных аккомодационных сдвигов поперек нее;
 - основной сдвиг, следующий *за фронтом* микрополосы по плоскости скольжения, наименее отклоненный от плоскости ее залегания.
6. Аккомодационные модели мартенситного и ферритного превращений в сталях, предсказывающие, соответственно:
 - зависимость межфазных ориентационных соотношений от степени пластической аккомодации мартенсита,
 - зависимость гидростатических напряжений в феррите и аустените от объемной доли превращения.

7. Тензорное представление формы и морфологической ориентации структурного элемента, а также количественная модель, описывающая повороты дисперсных твердых частиц произвольной формы при деформировании содержащей их матрицы.

Достоверность основных результатов и выводов работы подтверждается:

- сопоставлением теоретических предсказаний с экспериментальными данными, опубликованными в научной литературе, а также полученными при участии соискателя;
- рассмотрением предельных переходов, при которых численные результаты моделирования (поля напряжений, текстуры, повороты частиц и т.д.) совпадают с предсказаниями соответствующих классических моделей;
- сопоставлением теоретических предсказаний с предсказаниями современных моделей, опубликованных другими авторами;
- математической корректностью и внутренней непротиворечивостью использованных в работе вычислений, преобразований и доказательств;
- обсуждением основных результатов работы на научных форумах.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях, симпозиумах и семинарах: Международная конференция по текстурам материалов (Сеул, Корея, 2002), Российско-Французский симпозиум “Физика и механика больших пластических деформаций” (Санкт-Петербург, 2002), Международный семинар “Мезоструктура” (Санкт-Петербург, 2001), Международный семинар по локальным решеточным ротациям и дисклинациям в микроструктурах искаженных кристаллических материалов (Раушенбах, Германия, 2000), Международный симпозиум по материаловедению “Деформационные микроструктуры” (Роскильд, Дания, 1999), Международные конференции по межзеренным и межфазным границам в материалах (Прага, Чехия, 1998; Лиссабон, Португалия, 1995), Международная конференция “Проблемы материаловедения при изготовлении и эксплуатации оборудования АЭС” (Санкт-Петербург, 1996), Международная конференция по разрушению (Киев, 1993), Российско-Французский семинар “Структура и свойства границ зерен” (Санкт-Петербург, 1993), Международная конференция по композитам (Москва, 1990).

Публикации. Результаты диссертации отражены в 35 печатных работах, опубликованных соискателем в отечественных и международных научных журналах. Основные публикации [1-25] приведены в конце автореферата.

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения, приложений и списка литературы из 141 наименования. Содержание изложено на 309 страницах, включая 109 рисунков и 15 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, дана характеристика объектов исследования и применяемых методов, сформулирована цель работы, перечислены новые результаты и раскрыта их научная и практическая значимость, указаны положения, выносимые на защиту, описаны структура и объем диссертации.

В первой главе анализируются основные типы и характерные конфигурации наведенных мезодефектов, а также разрабатываются методы вычисления генерируемых ими упругих полей. Здесь формальный аппарат континуальной теории дефектов применяется с учетом следующих особенностей кристаллического агрегата: (а) полиэдрическая форма структурных элементов, т.е. наличие линейных и точечных стыков между ними; (б) особые геометрические ограничения при сопряжении стыкующихся планарных мезодефектов в связи с их зависимостью от одних и тех же деформаций примыкающих кристаллов. Важным следствием упомянутых геометрических условий оказывается, в частности, формирование *стыковых дисклинаций* при различии пластических деформаций стыкующихся кристаллов. Для расчета упругих полей трехмерного кристаллического элемента с помощью тензора Грина сформулирован метод, обобщающий модель Эшелби на случай включения полиэдрической формы.

Сначала рассматривается плоская граница раздела S с нормалью N , на которой пластическая дисторсия β^{pl} (сумма деформации ϵ^{pl} и поворота ω^{pl}) испытывает произвольный геометрически малый разрыв $[\beta^{pl}]$. Из условия непрерывности материала находятся выражения для вектора наведенной разориентировки и несовместной на S пластической деформации $[\epsilon^{pl}]_S$, которая характеризует границу как планарный источник напряжений. Чтобы облегчить анализ сопряжения фасеток полиэдрической границы, мезодефект, наведенный

на плоской поверхности раздела, представляется в виде дислокационного распределения с тензорной плотностью \mathbf{B}_S ; левый и правый индексы данного тензора отвечают, соответственно, направлениям залегания и векторам Бюргерса изображающих дислокаций. Показано, что для любого плоского мезодефекта дислокационное представление \mathbf{B}_S является суперпозицией геометрически независимых составляющих \mathbf{B}_θ и \mathbf{B}_σ . Первая из них создает на S разориентировку, но не генерирует поля напряжений, вторая- наоборот. Дислокационные плотности \mathbf{B}_θ и \mathbf{B}_σ при произвольном ортонормированном базисе $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}\}$ плоскости S имеют вид:

$$(a) \quad \mathbf{B}_\theta = \theta_c(\mathbf{i} \otimes \mathbf{N} \cos \varphi + \mathbf{j} \otimes \mathbf{N} \sin \varphi) + (\theta_n/2)(\mathbf{i} \otimes \mathbf{i} + \mathbf{j} \otimes \mathbf{j}) \quad (1)$$

$$(б) \quad \mathbf{B}_\sigma = [\varepsilon^{pl}]_s^{(\gamma)} \{(\mathbf{i} \otimes \mathbf{i} - \mathbf{j} \otimes \mathbf{j}) \sin 2\varphi + (\mathbf{i} \otimes \mathbf{j} + \mathbf{j} \otimes \mathbf{i}) \cos 2\varphi\} + [\varepsilon^{pl}]_s^{(o)} (\mathbf{i} \otimes \mathbf{j} - \mathbf{j} \otimes \mathbf{i}),$$

где скалярные инварианты θ_c , θ_n , $[\varepsilon^{pl}]_s^{(\gamma)}$ и $[\varepsilon^{pl}]_s^{(o)}$ являются, соответственно, углами разориентировок наклона или кручения, и величинами чисто-сдвиговой или аксиально-симметричной частей несовместной деформации $[\varepsilon^{pl}]_s$. Угловой параметр φ здесь произволен, т.к. зависит от выбора ориентации базиса $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}\}$ в плоскости границы; это означает, что один и тот же планарный мезодефект может иметь различные дислокационные представления.

Характерные конфигурации мезодефектов анализируются на примере пробного полиэдрического элемента, испытавшего избыточную по отношению к окружению пластическую деформацию ε^{pl} . Показано, что при обходе по замкнутому контуру линии стыка двух фасеток, Рис.1(а), в общем случае накапливается невязка разориентровок $[\theta]_\Gamma \neq 0$, т.е. стыковая дисклинация с вектором ротации

$$\mathbf{\Omega} = -[\theta]_\Gamma = \oint_\Gamma d\Gamma \cdot (\nabla \omega^{el}), \quad (2)$$

где ω^{el} – поле упругого поворота в окружающем объеме, а величина и направление вектора $\mathbf{\Omega}$ зависят от расположения стыкующихся плоскостей по отношению к тензору ε^{pl} . Подчеркнем, стыковая дисклинация определяется исключительно симметричной частью (ε^{pl}) пластической дисторсии рассматриваемого элемента, Рис.1(б), тогда как ее антисимметричная часть (пластический поворот ω^{pl}) дисклинации не создает, Рис.1(в).

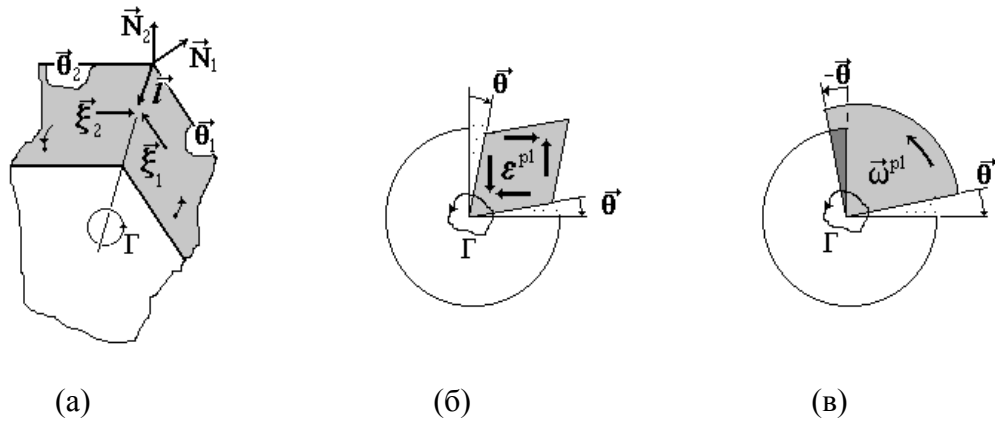


Рис.1. Линейный стык (а); возникновение невязки $[\theta]_{\Gamma}$ при скачке пластической деформации (б) и независимость $[\theta]_{\Gamma} \neq 0$ от пластического поворота (в).

Рассматриваемая дисклинация может иметь как клиновую составляющую $\Omega_c \parallel l$, так и составляющую кручения $\Omega_n \perp l$, где l -директриса стыка. Однако, как показано в данной главе, изолированным линейным дефектом в стыке может быть только клиновая дисклинация; стыковая дисклинация кручения формируется исключительно в комбинации с примыкающим к ней планарным источником напряжений (дислокацией Сомилиана). Хотя бы один мезодефект последнего типа всегда присутствует и в любом точечном (вершинном) стыке фасеток, т.е. присутствие подобных мезодефектов на замкнутой полиэдрической границе обязательно. На Рис.2 показаны примеры замкнутых конфигураций при разных направлениях главных осей тензора ϵ^{pl} относительно фасеток структурного элемента. В целом, из проведенного анализа следует, что наведенные в кристаллическом агрегате мезодефекты представляют собой двумерную совокупность дислокаций Сомилиана, натянутых на каркас стыковых дисклинаций.

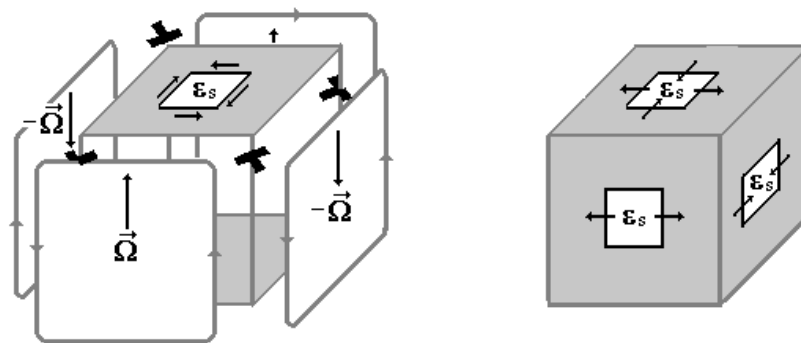


Рис.2. Мезодефекты, наведенные на замкнутой границе пробного структурного элемента при его разных пластических деформациях.

Далее, с учетом полученных результатов, анализируется формирование дисклинации на линии стыка трех кристаллов. Ее вектор ротации Ω , а также составляющие наклона (клиновья) и кручения, соответственно, равны:

$$(a) \quad \Omega = -[\theta]_{\Gamma} = -\sum_{i=1}^3 (\mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i) \times \cdot [\boldsymbol{\varepsilon}]_i = -\boldsymbol{\varepsilon} : \sum_{i=1}^3 (\mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i) \cdot [\boldsymbol{\varepsilon}]_i \quad (3)$$

$$(б) \quad \Omega_c = l \sum_{i=1}^3 (\xi_i \otimes \mathbf{N}_i) : [\boldsymbol{\varepsilon}]_i, \quad \Omega_n = \Omega - \Omega_c,$$

где “:” означает двойную скалярную свертку, $\boldsymbol{\varepsilon}$ -трехвалентный и антисимметричный по любой паре индексов тензор Леви-Чивита, а остальные обозначения соответствуют Рис.3(а,б), причем $[\boldsymbol{\varepsilon}]_i$ –скачки пластической деформации при пересечении границ замкнутым контуром Γ . Для подобной стыковой дисклинации остаются справедливыми предыдущие геометрические правила: она не зависит от пластических поворотов смежных кристаллов, а ее компонента кручения обязательно предполагает планарный источник напряжений хотя бы на одной из трех границ стыка.

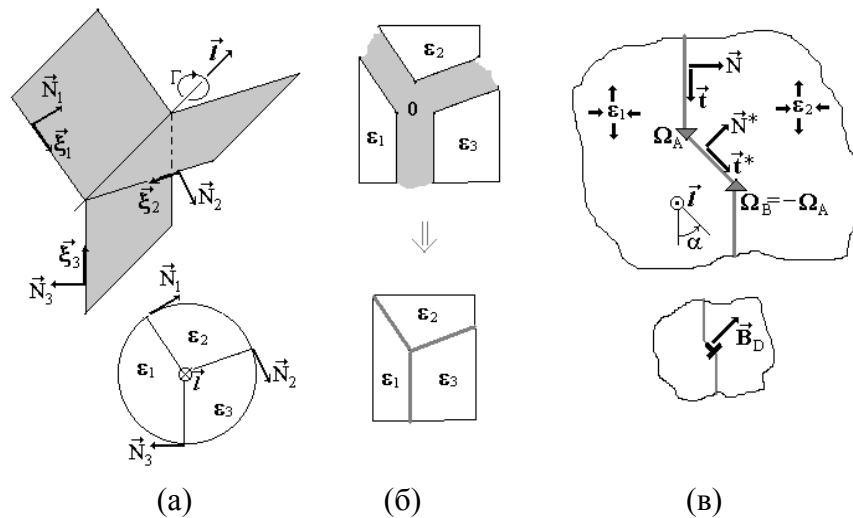


Рис.3. Линейный стык трех границ (а) и его представление суперпозицией трех парных стыков (б); диполь клиновых дисклинаций на уступе границы и его эффективный вектор Бюргерса (в).

Уступ границы, Рис.3(в), содержит пару двойных стыков ($i=1,2$ для каждого). В соответствии с (3), на нем возникает диполь дисклинаций $\Omega_A = -\Omega_B$, который обладает собственным вектором Бюргерса

$$\mathbf{B}_D = \Omega_A \times \mathbf{t}_h, \quad (4)$$

где h —ширина уступа, и в этом смысле может рассматриваться как “мезоскопическая” дислокация. Пусть пластические деформации смежных кристаллов со-осны и различаются лишь положительным скалярным множителем, как изображено на Рис.3(в), при этом вектор \mathbf{V}_D равен

$$\mathbf{V}_D = N^* h (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \sin(2\alpha), \quad (5)$$

где α —угол уступа. Тогда направление \mathbf{V}_D определяется более деформированным (более пластически податливым) из двух кристаллов. Отсюда следует, что со стороны деформирующих напряжений на дисклинационный диполь всегда действует сила направленная в менее податливый кристалл. При рассмотрении уступа в качестве дипольного источника частичных дисклинаций, это позволяет предсказать рост диполя малоугловых границ в тот из смежных кристаллов, который имеет более “жесткую” ориентацию по отношению к деформирующим напряжениям, что означает преимущественную фрагментацию неблагоприятно ориентированных кристаллов.

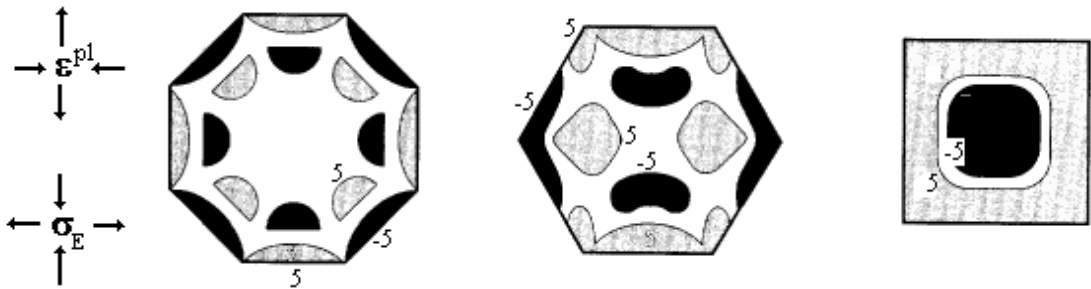


Рис.4. Относительное отклонение (%) сдвиговых напряжений во фрагментах разного поперечного сечения от однородных напряжений σ_E в цилиндрическом включении Эшелби: величина отклонения превышает 5% в черных и серых областях.

В рамках *двумерной* модели, при анализе упругих напряжений σ и поворотов ω^{el} , поля пробного фрагмента

$$\begin{aligned} (a) \quad \sigma(\mathbf{r}) &= (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) : \mathbf{F}^\sigma(\Gamma, \mathbf{r}) \\ (б) \quad \omega^{el}(\mathbf{r}) &= (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{pl}) : \mathbf{F}^\omega(\Gamma, \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (6)$$

выражаются (при помощи дислокационного представления наведенных мезодефектов) через его избыточную пластическую деформацию $\boldsymbol{\varepsilon}^{pl}$ и функционалы \mathbf{F}^σ и \mathbf{F}^ω , зависящие от его контура Γ , где \mathbf{k} —нормаль к плоскости

модели. В качестве примера вычислений Рис.4 показывает влияние формы (контура) фрагмента на неоднородность сдвиговых напряжений внутри него; здесь представлено относительное отклонение от однородных напряжений цилиндрического включения, найденных методом Эшелби. Выражение (6а) также используется для расчета напряжений в модельном (двумерном) трикристалле, погруженном в однородно деформируемую матрицу.

Для расчета *трехмерных* полей упругих деформаций напряжений и ротаций, модель эллипсоидального включения Эшелби, основанная на использовании тензора Грина, была обобщена на случай частиц произвольной формы. В частности, поле упругой деформации вне частицы при этом выражается через интеграл по ее поверхности S:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} = \mathbf{G}^{(\varepsilon)} : (\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}), \quad (7)$$

$$\mathbf{G}^{(\varepsilon)} = \frac{-1}{16\pi G(1-\nu)} \int_S \frac{dS'}{R^2} \{ (\mathbf{I} - 3\rho \otimes \rho) \otimes \rho - (1-2\nu)(\rho \otimes \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_i \otimes \rho) \otimes \mathbf{e}_i \} \otimes \mathbf{N}',$$

где \mathbf{C} – тензор упругости, \mathbf{R} – радиус-вектор, проведенный из точки наблюдения к S, $\rho = \mathbf{R}/R$, $\{\mathbf{e}_i\}$ – ортонормированный базис, а $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{pl}}$ – избыточная пластическая деформация частицы. Предложенный подход был успешно проверен посредством сравнения с известными упругими полями – ротаций вблизи прямолинейной клиновой дисклинации и деформаций внутри сферического “центра дилатации”. Практические вычисления данным методом проведены (в Главе 6) применительно к твердым полиэдрическим частицам в пластически деформируемой матрице.

Вторая глава посвящена возможным методам реконструкции мезодефектов и упругих полей *в объеме* материала по данным кристаллографического анализа. Предполагается, что с помощью ПЭМ могут быть измерены локальные разориентировки на границах и определены пространственные ориентации линейных стыков, а автоматизированным методом СЭМ, основанным на дифракции электронов обратного рассеяния, построены карты ориентаций на плоской *поверхности* образца. Основанная на таких данных реконструкция должна, во-первых, проверить геометрические предсказания теории наведенных мезодефектов и, во-вторых, расширить область применения количественного анализа с помощью ПЭМ и СЭМ при исследовании деформированных кристаллических структур.

В качестве пробного объекта рассмотрен уступ на границе, Рис.5(а), перпендикулярной к поверхности образца. С учетом разгрузки на свободной поверхности при вырезке образца, наибольший практический интерес представляют “невозмущенные” составляющие поля упругой дисторсии, которые параллельны плоскости наблюдения. Это означает, что для сравнения с экспериментом имеет смысл реконструировать лишь вертикальные (нормальные к поверхности) составляющие вектора упругого поворота и принадлежащие упомянутой плоскости компоненты упругой деформации. Несовместная пластическая деформация, генерирующая эти поля должна быть, соответственно, также параллельна S .

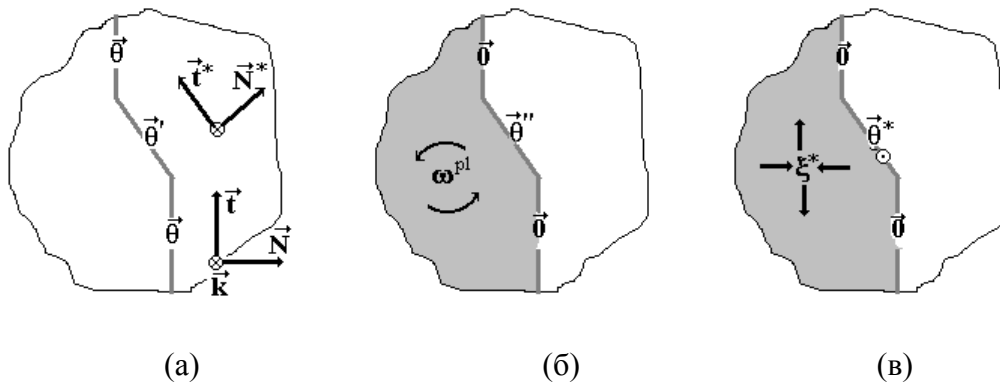


Рис.5. (а) экспериментальные разориентировки на границе с уступом, (б) компенсация разориентировок на главной плоскости границы за счет однородного пластического поворота левого кристалла и (в) его избыточная пластическая деформация, определяемая по оставшейся на уступе разориентировке наклона $\theta^* = (\theta'' \cdot k)k$.

Предложена следующая процедура. Мысленно подвергнем любой из кристаллов однородному пластическому повороту, так чтобы исходная разориентировка θ на основной плоскости границы исчезла, Рис.5(б), и определим остающуюся на уступе разориентировку θ'' . При этом, как показано в предыдущей главе, на поверхности раздела не возникает дополнительных источников напряжений, т.е. неоднородные упругие искажения в приграничных областях сохраняются в исходном виде. Далее выделим в θ'' клиновую составляющую $\theta^* = (\theta'' \cdot k)k$ и определим пластическую деформацию ξ^* , одного из смежных кристаллов, которая бы индуцировала нулевую разориентировку на основной границе и θ^* на уступе, Рис.5(в). Затем, следуя Главе 1, найдем по ξ^* соответствующие упругие поля. На Рис.6(а) показано вычисленное подобным образом нормированное поле упругого поворота ω^{el}/θ^* вблизи уступа с углом $\alpha=45^\circ$. При этом величина θ^* “разностной” разориентировки наклона

предполагается малой (не более 1...2 градусов), а экранирование упругих полей обеспечено включением уступа шириной h в замкнутую границу модельного квадратного элемента, Рис.6(б). Рассматривался элемент с размером сечения $H=10^2h$, т.к. лишь достаточно большая величина H/h позволяет выявить *собственное* упругое поле уступа. Заметим, что вычисленное поле ω^{el} от всех наведенных дефектов содержало скачок $[\omega^{el}]$ (разориентировку) при пресечении уступа. Мы попросту вычли ее, чтобы представить на Рис.6(a) *непрерывно* распределенный упругий поворот, который аккомодирует векторы ротации стыковых дисклинаций.

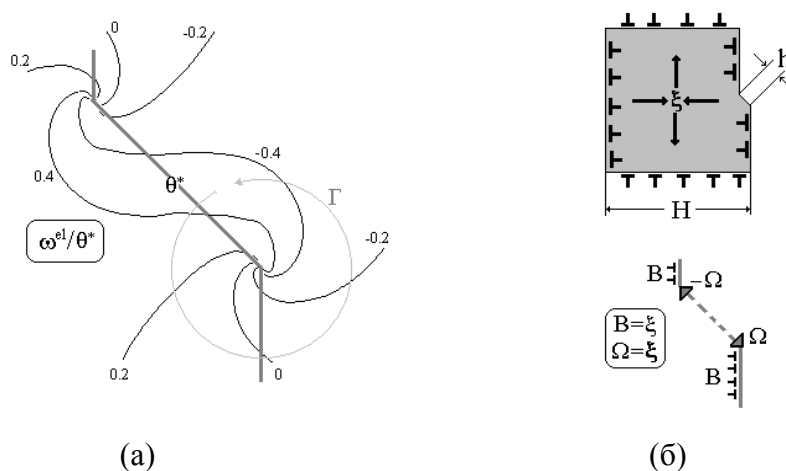


Рис.6. Уступ границы с полем упругого поворота (а) и генерирующие его наведенные дефекты (б); принятое отношение $H/h=100$ показано не в пропорции.

Тот факт, что поле ω^{el} , восстановленное по разориентировкам, отнюдь не сводится к дисклинам, заслуживает особого внимания. Именно благодаря присутствию планарных источников напряжений, вблизи линейных стыков появляются вихреобразные особенности, Рис.6(а), которые возмущают аксиальную симметрию упругого поворота, присущую прямолинейным дисклинам. С одной стороны, при измерении поля ω^{el} методом ориентационной картографии, предсказанные особенности могут служить признаком наведенного планарного дефекта. С другой стороны, из-за них потребуется специальный подход к “фильтрации” данных при выявлении собственно дисклинаций. Предложено осуществлять ее с учетом топологических особенностей соответствующих упругих полей: в поле планарного источника напряжений изолинии равного поворота образуют вокруг стыка концентрические контуры, а изолинии от дисклинации образуют у стыка расходящуюся полярно-симметричную конфигурацию. Далее рассмотрена процедура восстановления мезодефектов в стыке трех кристаллов, также

перпендикулярного плоской внешней поверхности. При этом, для разрешимости проблемы, сделано дополнительное предположение о том, что средняя пластическая деформация данного “трикристалла” не отличается от средней деформации окружающего материала.

Рассмотренные выше подходы предполагали перпендикулярность невидимых линейных стыков к плоской поверхности наблюдения, т.е. полученные результаты могут использоваться лишь после восстановления реальной, в общем случае случайной, пространственной ориентации стыков. Для этого сформулирован метод учитывающий три фактора: (а) в деформированном состоянии стыки кристаллов содержат дисклинации, (б) поле ω^{el} прямолинейной дисклинации аксиально-симметрично, (б) в пересечении с поверхностью подобная симметрия определенным образом нарушается в зависимости от угла наклона линии стыка к этой поверхности.

В третьей главе кристаллические агрегаты рассматриваются в рамках кусочно-однородного приближения, которое отражает распределение деформаций и напряжений между *цельми* зернами или фрагментами, но игнорирует любые неоднородности внутри таких кристаллов. При этом, в отличие от традиционных моделей поликристалла, учитывается ориентация и пространственное расположение каждого кристалла и его непосредственных соседей. Такой подход используется в теории наведенных мезодефектов как первое приближение- для оценки собственных пластических деформаций смежных элементов и, затем, пластических несовместностей на границах между ними. Кроме того, предложенная модель позволяет предсказывать *локальные* текстуры и повышает точность предсказания *макроскопической* текстуры при умеренных степенях деформации, пока межзеренные разориентировки еще доминируют на фоне деформационной субструктуры.

Рассматривался модельный кристаллический агрегат элементов в форме кубооктаэдров, имеющих по 14 граней, Рис.7(а), причем каждому из них должна быть приписана определенная кристаллографическая ориентация. Для простоты, до начала пластической деформации предполагалось хаотичное распределение ориентаций, т.е. отсутствие текстуры. При рассмотрении взаимодействия смежных кристаллов учитывалось, по мере деформации агрегата, изменение формы каждого из них, т.е. площадей его контакта с ближайшими соседями, Рис.7(б). На внешних границах задавались периодические ”граничные условия“ для ориентаций, что необходимо при рассмотрении взаимодействия кристаллов в ходе пластической деформации. Иначе говоря, каждому внешнему кристаллу в

качестве недостающего соседа приписывался подходящий кристалл (со своей ориентацией) с противоположной внешней границы.

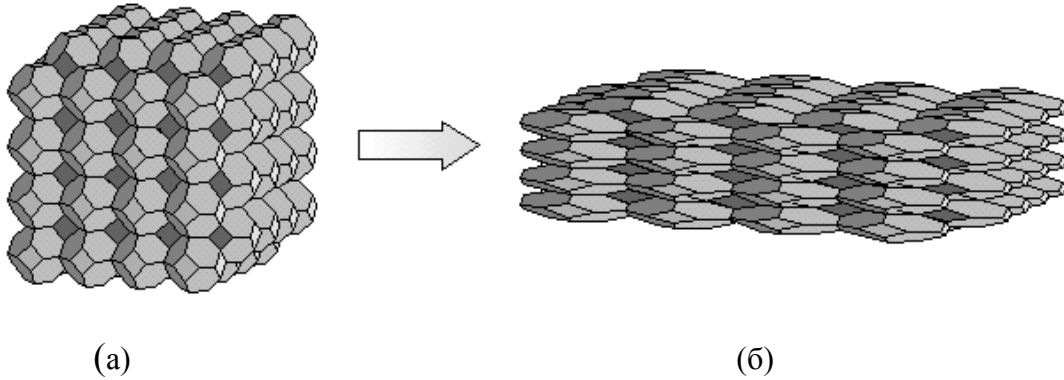


Рис.7. Геометрическая модель кристаллического агрегата до (а) и после (б) пластической деформации.

При действии в отдельном кристалле N систем скольжения $(\mathbf{m}, \mathbf{b})_i$, где \mathbf{m}_i и \mathbf{b}_i – соответствующие орты нормали к плоскости скольжения и вектора Бюргера, тензор скорости пластической деформации \mathbf{D}^p и вектор пластического спина \mathbf{w}^p определялись следующим образом

$$(a) \quad \mathbf{D}^p = \sum_{i=1}^N \dot{\gamma}_i \mathbf{d}_i, \quad \mathbf{d}_i = (\mathbf{m} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{m})_i / 2, \quad (8)$$

$$(б) \quad \mathbf{w}^p = \sum_{i=1}^N \dot{\gamma}_i \mathbf{w}_i, \quad \mathbf{w}_i = (\mathbf{m} \times \mathbf{b})_i / 2,$$

где $\dot{\gamma}_i$ – скорость сдвига по i -й системе скольжения. При совместной пластической деформации выполняется условие

$$\mathbf{D}^p = \mathbf{D}^*, \quad (9)$$

где \mathbf{D}^* – скорость пластической деформации окружения, однако это требует в общем случае участия пяти систем скольжения ($N=5$). Между тем, внешние напряжения активируют одну (наиболее нагруженную) систему скольжения, а постепенное развитие множественного скольжения, необходимого для равенства (9), есть результат аккомодации под действием упругих реакций между кристаллами. На основе этого физически очевидного факта был сформулирован метод последовательного выбора систем скольжения, которые вместе обеспечивают (9) при минимальном уровне накопленной несовместности и

реактивных напряжений. При любом неполном наборе ($N < 5$) рассматривалась разность

$$\Delta = \mathbf{D}^* - \mathbf{D}^p, \quad (10)$$

а распределение сдвига между N системами определялось по критерию наименьшей несовместности (КНН):

$$\|\Delta\|^2 = \Delta : \Delta = \min. \quad (11)$$

Оставшаяся при этом несовместность скорости деформации позволяла затем определить *направление* роста реактивных напряжений кристалла, а по нему *следующую* систему скольжения, в которой сдвиговое напряжение достигнет критического значения раньше чем в других.

Предложенный критерий сначала был опробован в предположении, что \mathbf{D}^* для всех кристаллов одинаково и равно скорости макроскопической пластической деформации, что является одним из основных постулатов в модели Тэйлора. В тоже время, КНН отличает нашу модель от упомянутой, где выбор систем скольжения осуществлялся по критерию *минимального сдвига*. Тем не менее, соответствующие результаты предсказания текстуры прокатки ГЦК поликристалла с системами скольжения типа $\langle -110 \rangle \{111\}$ оказались практически неотличимы от предсказаний модели Тэйлора.

Для рассматриваемого агрегата, Рис.7, мы отказались от слишком жесткого требования однородности пластической деформации, а процедура была модифицирована следующим образом. Одновременно во всех кристаллах выбираются первичные системы скольжения, а в качестве \mathbf{D}^* для окружения каждого кристалла используется средняя деформация соседних кристаллов. То же самое повторяется для двойного скольжения всех кристаллов и т.д. По окончании процедуры на пятом шаге, \mathbf{D}^p различно ориентированных кристаллов несколько различаются; они лишь *в среднем* следуют макроскопической деформации, но схема выбора снова обеспечивает минимальные реактивные напряжения. Алгоритм испытывался на агрегате 5500 случайным образом ориентированных кристаллов в условиях деформации прокаткой; на Рис.8 представлено полученное при этом распределение некоторых компонент скорости деформации кристаллов. Для выявления эффекта формы вычисления также повторялись на агрегате кубических элементов. Очень близкие результаты

ранее были получены с помощью МКЭ (Сарма, Доусон, 1996) при потреблении значительно больших вычислительных ресурсов.

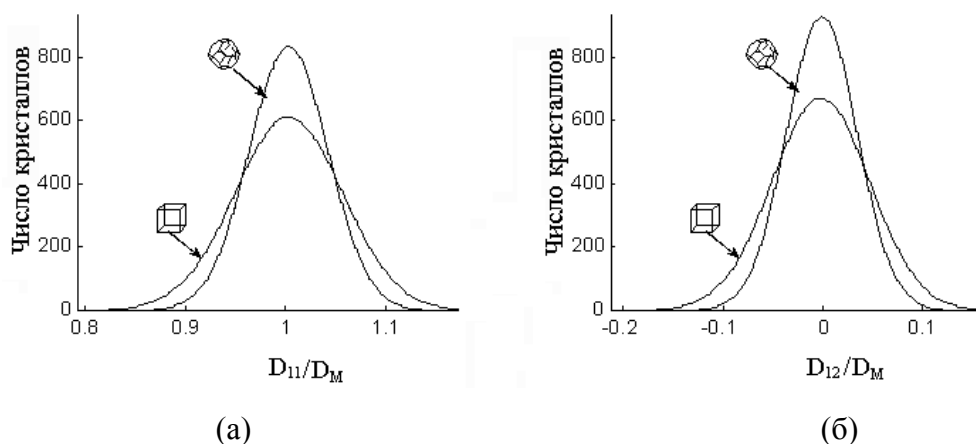


Рис.8. Огибающие гистограмм скоростей деформации кубических и полиэдрических (14 граней) кристаллов модельного агрегата; D_{11} -компонента растяжения в направлении прокатки (а), D_{12} - компонента сдвига в плоскости прокатки (б), D_M -скорость макроскопической деформации.

Для моделирования развития текстуры в агрегате с *неоднородным* распределением деформации необходимо было знать, помимо (8(б)), скорости относительного вращения кристаллов, что вызвано указанной неоднородностью и зависит от конкретного распределения деформации между ближайшими соседями, а также от их пространственной координации. С этой целью было сформулировано условие совместности для *целых* квазиоднородных структурных элементов, включающее их деформации и повороты. На Рис.9 представлены с помощью обратной полюсной фигуры результаты моделирования переориентации двух кристаллов с заданными исходными ориентациями в ходе 50%-го сжатия агрегата. Из двух начальных ориентаций исходит по 10 ориентационных траекторий, т.к. для каждого из рассматриваемых кристаллов случайным образом подбиралось десять вариантов распределения ориентаций между его 14 соседями. Результат, во-первых, согласуется с известными данными по локальным текстурам сжатия крупнозернистого поликристалла алюминия (Золоторевский, Титовец, Ермакова, 2002). Во-вторых, отсюда видно, что *собственная* ориентация кристаллов не предопределяет (сама по себе) их переориентацию; последняя столь же сильно зависит от ориентаций непосредственных соседей.

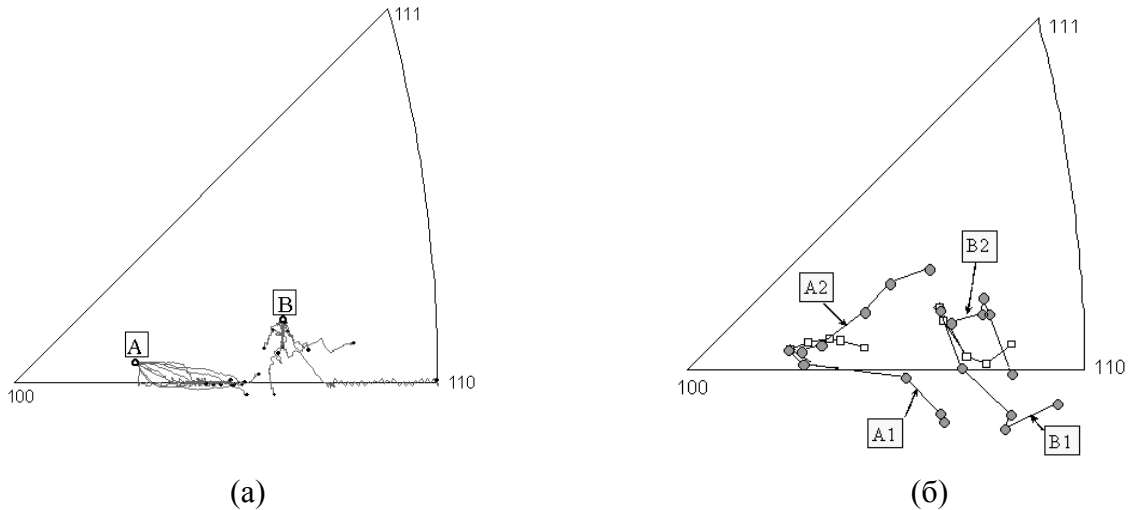


Рис.9. Эволюция локальных текстур сжатия модельного ГЦК агрегата (а) и недавно опубликованные экспериментальные данные (Золоторевский и др., 2002) по сжатию крупнозернистого алюминия (б).

Четвертая глава посвящена моделированию и экспериментальному изучению микрополос сдвига. Здесь разориентировки и источники напряжений, наведенные локализованным пластическим сдвигом на границах микрополосы, анализируются с помощью геометрических соотношений Главы 1.

Сначала рассматриваются геометрически возможные моды локализации простого сдвига, Рис.10(а-в), и показывается следующее. Моды А и Б свободны от наведенных источников напряжений, причем первая из них свободна и от наведенных разориентировок, а вторая индуцирует на возникающих границах раздела дипольные разориентировки наклона. Мода В, кристаллографическим признаком которой являются дипольные разориентировки кручения, порождает на границах планарные источники напряжений. Поэтому ее самостоятельное существование вряд ли возможно; она лишь сопутствует эффективным модам А или Б, которые не могут проявиться в чистом виде из-за отсутствия идеально ориентированных для этого систем скольжения. Связанные с модами А и Б эффективные сдвиги вдоль плоскости микрополосы равны, поэтому, при отсутствии слабо отклоненных от этой плоскости плоскостей скольжения, дислокационные сдвиги поперек микрополосы представляют собой альтернативный механизм локализованной пластичности. В тоже время, мода Б кинематически неустойчива из-за сопутствующей переориентации кристалла и может поддерживаться лишь в течении относительно малых приращений макроскопической деформации. Можно полагать, что появление наведенных разориентировок на границах микрополосы наиболее существенно при

взаимодействии локализованного сдвига с барьерами или при резком изменении микроструктуры на начальных стадиях фрагментации кристаллов.

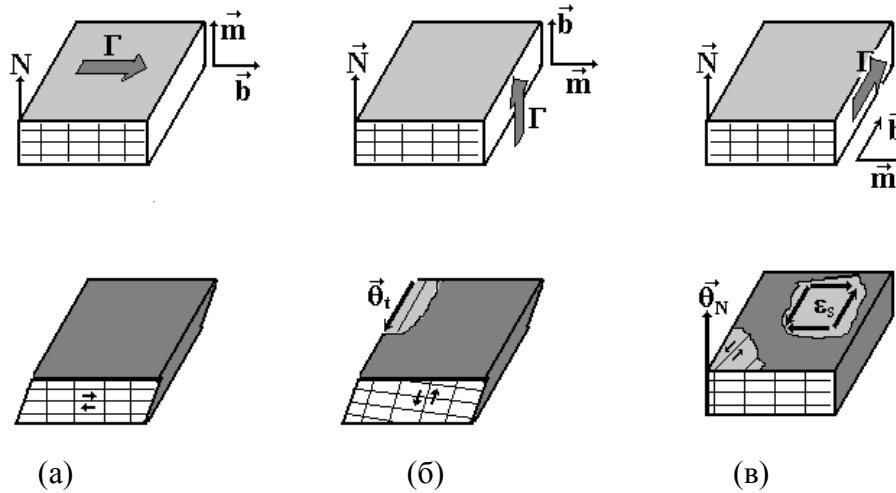


Рис.10. Элементарные моды локализации простого сдвига, не создающие (а,б) и создающие (в) планарные источники напряжений. Отсутствие разориентировок (а), наведенные разориентировки наклона (б) и кручения (в).

Анализ напряженного состояния на фронте микрополосы типа Б, т.е. вблизи диполя клиновых частичных дисклинаций (ЧД), показал, что подобный диполь подвижен лишь при очень малой мощности (~ 0.01) его ЧД. Следовательно, для формирования разориентировок в несколько градусов необходимо многократное появление и прохождение по границам микрополосы маломощных диполей ЧД (“квантов сдвига”). Это порождает вопрос о механизме циклически работающего дипольного источника частичных дисклинаций, в частности о его емкости, т.е. предельной суммарной мощности испускаемых им по каждой границе дисклинаций. Обратимся еще раз к уступу на границе между кристаллами, собственные пластические деформации которых различаются (см. Рис.3(в)) из-за их разной ориентации и, соответственно, податливости относительно деформирующих напряжений. С учетом предсказанных в Главе 3 вариаций (Рис.8) разность $[\epsilon^p]$ может достигать по порядку величины $0.1\epsilon_m$. Поэтому мощность дисклинаций $\pm\Omega$ на уступе, Рис.4.4(б), нарастает по мере деформации. В конце концов, локальные сдвиговые напряжения активируют вблизи уступа дислокационные перестроения, которые обеспечивают эмиссию диполя частичных дисклинаций мощности $\delta\Omega \leq \Omega$. Прошедший при этом по микрополосе сдвиг приводит к частичному спрямлению уступа на угол $\delta\alpha$, что делает последующее накопление диполя дисклинаций чуть более медленным. Однако, суммарная мощность испущенных дисклинаций определяется исходным углом

α , Рис.3(в). Если этот угол достаточно велик, то формирование *большеуголовых* разориентировок оказывается возможным. То же относится и к *большеуголовой* (исходной) разориентировке кристаллов, которая поддерживает величину $[\epsilon^P]$ в ходе деформации агрегата и обеспечивает, таким образом, пополнение источника частичных дисклинаций. Напомним, согласно (5), что знак эффективного вектора Бюргерса на уступе, определяется именно тем из смежных кристаллов, который испытал большую пластическую деформацию, т.е. кристаллом с более “мягкой” ориентацией (с меньшим фактором Тэйлора M). Это означает, что дисклинационный диполь и следующая за ним микрополоса должны распространяться в кристалл с более “жесткой” ориентацией. Данное заключение и, соответственно, предложенная модель дисклинационного источника имеют убедительные экспериментальные подтверждения. Так, при больших пластических деформациях меди локализация сдвига была зарегистрирована исключительно в кристаллах, окружающих зерна с наиболее “мягкими” ориентациями (Дугган и др., 1999). Подобные исследования поликристаллического алюминия, в свою очередь, обнаружили локализацию сдвига преимущественно в наиболее “жестких” кристаллах (Фортунье и др., 1987).

Прямой вклад разориентировок в сдвиг микрополосы относительно мал, но они отражают ее взаимодействие с окружением и позволяют судить о локализованном дислокационном скольжении. Это важно, в частности, при изменении главных осей деформирования, когда микрополосы, образованные новыми системами скольжения разрушают предшествующую микроструктуру. Возможные при этом пластические неустойчивости (разупрочнение) ограничивают промышленные технологии формоизменения. Для предсказания таких эффектов желательно исследовать серию “переходных” структурных состояний. В реальности, однако, это невозможно, т.к. подготовка образцов для ПЭМ является разрушающей процедурой, а историю деформации в конкретной микрообласти нельзя воспроизвести повторением эксперимента на макроскопических образцах.

В связи со сказанным, особый интерес представляют оборванные микрополосы сдвига, сформированные при изменении пути деформирования, *фронты* (области обрыва) которых удастся обнаружить в исследуемых частях кристалла. Каждая такая микрополоса фактически представляет “панорамный снимок” эволюции микроструктуры. Действительно, при движении от фронта в направлении места зарождения микрополосы, удастся проследить постепенное

изменение схемы скольжения и ориентации кристалла на пути локализованного сдвига. Кроме того, морфологические и кристаллографические особенности непосредственно на фронте особенно информативны, т.к. на локальном уровне отражают взаимодействие новой моды деформации (после изменения пути деформирования) с ранее сформированной микроструктурой. Одна из микрополос рассматриваемого типа, возникшая в поликристаллическом железе при простом сдвиге в направлении предшествующего растяжения, показана на Рис.11. На ее границах методом ПЭМ были измерены локальные разориентировки, а также выраженные сдвиговые уступы в пересечении с барьерными границами.

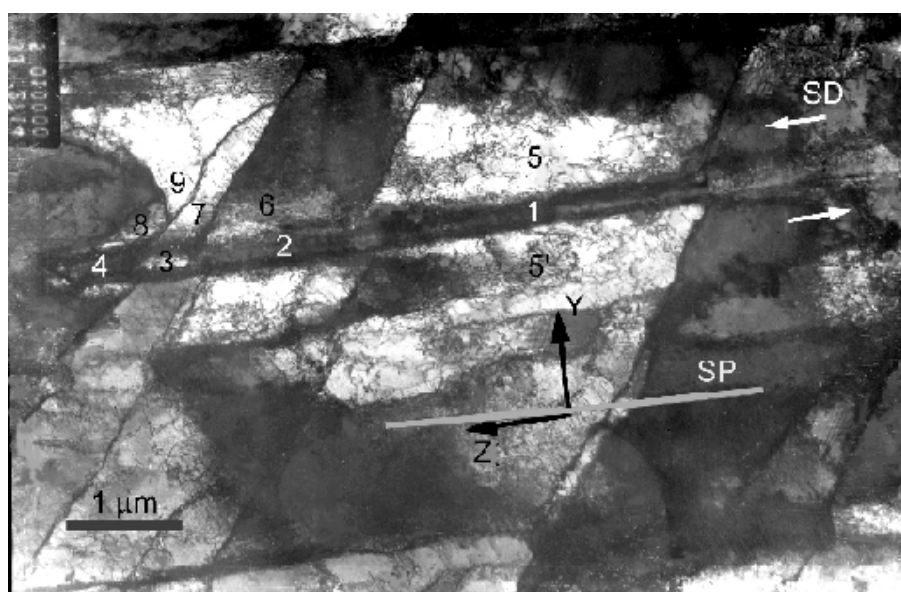


Рис.11. Микрополоса сдвига, пересекающая ранее сформированные дислокационные границы. В пронумерованных (1-9) микрообластях измерены локальные кристаллографические ориентации. SD-направление сдвига, SP-след плоскости скольжения (2 -1 -1).

По полученным данным было проведено моделирование, которое позволило восстановить следующий механизм распространения локализованного сдвига (порядка единицы) с “линзовидным” фронтом, Рис.12. Локализованный сдвиг создает *перед* таким фронтом мощные напряжения, которые активируют перестроение внешних решеточных дислокаций и поддерживает рост диполя оборванных малоугловых границ (частичных дисклинаций). Эти границы устраняют микроструктурные барьеры на пути локализованного сдвига и формируют магистраль для распространения содержащей его микрополосы.

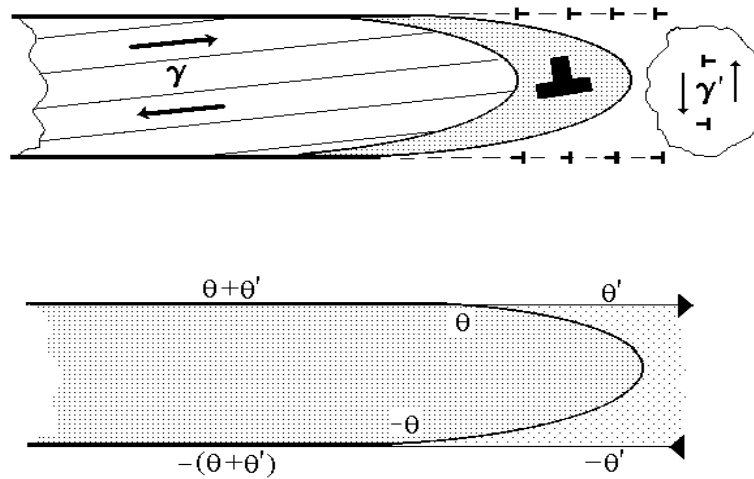


Рис.12. Восстановленный механизм распространения микрополосы (сверху) и суперпозиция разориентировок (снизу), наведенных основным сдвигом в микрополосе (θ) и аккомодационным сдвигом пред ее фронтом (θ').

В пятой главе анализируется влияние фазовых напряжений и пластической аккомодации на ход γ - α превращения в сталях. Предложенная модель мартенситного превращения объясняет разнообразие наблюдаемых ориентационных соотношений между фазами, предсказывая реализацию того или иного из них в зависимости от степени пластической аккомодации превращенных кристаллов. Результаты моделирования подтверждаются данными кристаллографического анализа мартенситных структур, полученных в широком диапазоне скоростей охлаждения. Модель ферритного превращения, учитывающая зарождение новой фазы на исходных границах раздела и частичную пластическую аккомодацию сдвиговой составляющей фазовых напряжений, предсказывает эволюцию гидростатических напряжений в феррите и аустените по мере роста объемной доли феррита. Такие оценки необходимы при моделировании кинетики превращения, т.к. рассматриваемые напряжения существенно влияют на энергию и скорость роста новой фазы.

Мартенситный кристалл моделируется бесконечно протяженной пластиной, в которой проходит решеточная деформация Бейна, а возникающие из-за взаимодействия с аустенитной матрицей фазовые напряжения активируют в рассматриваемом кристалле пластическую аккомодацию. В качестве аккомодационной системы скольжения выбирается та из систем $\langle 111 \rangle \{-110\}_M$, которая максимально загружена фазовыми напряжениями сразу по завершении деформации Бейна. Далее, в зависимости от степени пластической аккомодации,

анализируются параметры превращенного кристалла: угловое отклонение δ от ближайшего из канонических ориентационных соотношений между фазами (N-Нишиямы, GT-Гренингера-Трояно, KS-Курдюмова-Закса); Γ -мезоскопический сдвиг вдоль пластины, видимый при ее выходе на внешнюю поверхность или при пересечении с поперечными границами; τ -приведенные сдвиговые напряжения в аккомодационной системе скольжения, $\|\epsilon_S\|$ -величина несовместности деформации на межфазной границе. Для проверки модели были проанализированы с помощью ПЭМ мартенситные структуры малоуглеродистых сталей, полученные в широком диапазоне скоростей охлаждения (от 0.25 до 30 град/с) в межкритическом интервале. Среди них были обнаружены мартенситные пластины с плоскостью габитуса типа $(252)_A$, которая и использовалась при моделировании. Результаты моделирования представлены на Рис.13. Они хорошо согласуются с полученными экспериментальными данными, согласно которым при быстром охлаждении реализуется соотношение Нишиямы, а при медленном – Курдюмова-Закса; при этом соответствующая (модельная) степень аккомодации изменяется в интервале от 50 до 98%.

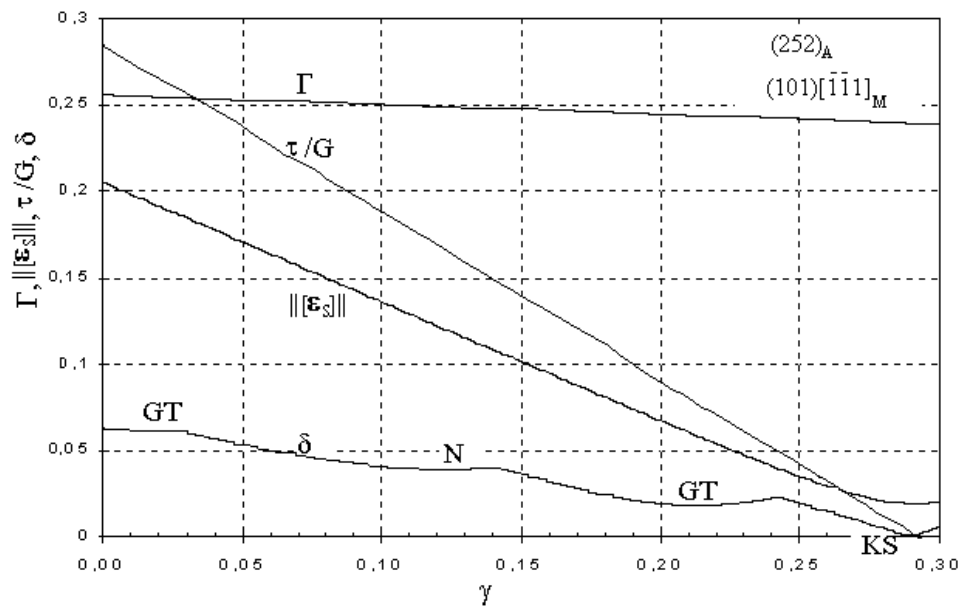


Рис.13. Эволюция параметров мартенситной пластины с габитусом $(252)_A$ по мере прохождения аккомодационного сдвига γ в системе скольжения $[-1-11]_M(101)_M$.

При моделировании ферритного превращения мы предполагали преимущественное зарождение новой фазы в стыках аустенитных зерен с последующим ее ростом вдоль границ этих зерен до образования связного каркаса, когда изолированными становятся уже аустенитные области. При этом на начальной и завершающей стадиях превращения использовалась модель

сферического включения (соответствующей фазы) в конечной сфере второй фазы. Результаты моделирования сшивались при объемной доле феррита, которая отвечает формированию связного ферритного каркаса. На Рис.14 представлены гидростатические напряжения (давления) в обеих фазах *вблизи межфазной границы* в зависимости от объемной доли феррита (p^F), где σ_s^F и σ_s^A – пределы текучести феррита и аустенита, соответственно. Вычисление соответствующего вклада упругой энергии в движущую силу превращения позволяет предсказать ускоренное движение межфазных границ при $p^F \geq 0.4$. Это предсказание хорошо согласуется с экспериментальными данными по кинетике ферритного превращения (Кемпен, Соммер, Миттэмайер, 2002), которые были получены методом дифференциального термического анализа.

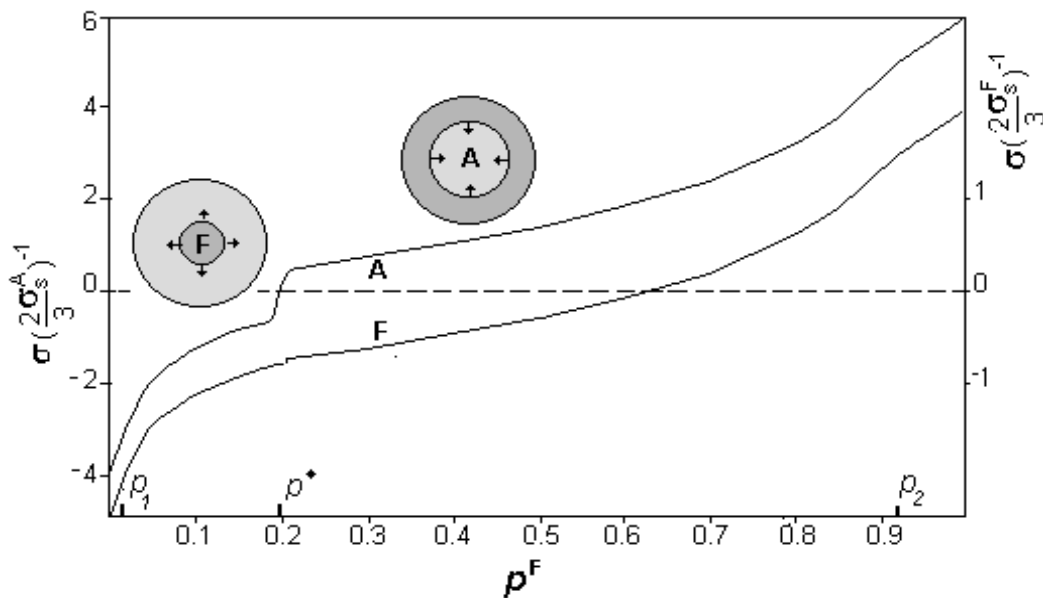


Рис.14. Гидростатические фазовые напряжения в феррите (F) и аустените (A) вблизи межфазной границы в зависимости от объемной доли феррита.

Шестая глава посвящена дисперсным твердым частицам произвольной (в частности- полиэдрической) формы, погруженным в пластичную матрицу. В зависимости от формы и исходной морфологической ориентации таких частиц анализируется их упрочняющий эффект и моделируется их переориентация по мере деформации материала. При этом используется тензорное представление формы частиц и условие совместности, связывающее их повороты с распределением деформации в окружении. Для расчета связанного с частицами поля внутренних напряжений используется сформулированный в Главе 1 *трехмерный аналитический* метод, который обобщает модель Эшелби на случай произвольной формы «включения». Этот метод позволяет, в частности, оценить

упругие сингулярности вблизи ребер и вершин полиэдрических (“ограниченных”) частиц.

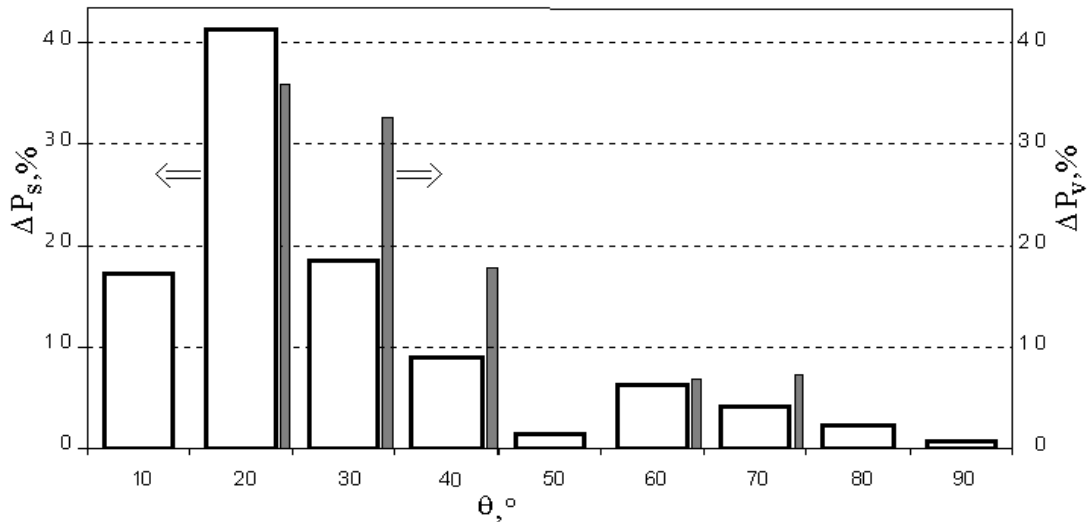


Рис.15. Ориентации следов пересечения частиц с плоской поверхностью (белые столбцы), в соответствии с экспериментальными данными и восстановленные по этим данным *пространственные* ориентации модельных частиц (серые столбцы).

Для моделирования вращения удлиненных твердых частиц в пластической матрице использовались опубликованные металлографические данные (Агравал, Гокхэйл и др., 2002), полученные на алюминиевом сплаве после различных степеней деформации сжатия и кручения. На Рис.15 показана экспериментальная гистограмма ориентаций *следов* частиц при их пересечении с *плоскостью* образца, а также реконструированное нами распределение *пространственных* ориентаций этих частиц по пяти дискретным группам (узкие столбцы). Параметр формы (отношение длины к диаметру) частиц был определен подгонкой под экспериментальные данные после сжатия, Рис.16(а). Затем моделировалась переориентация частиц при кручении, а результаты сопоставлялись с независимыми экспериментальными данными по кручению, Рис.16(б).

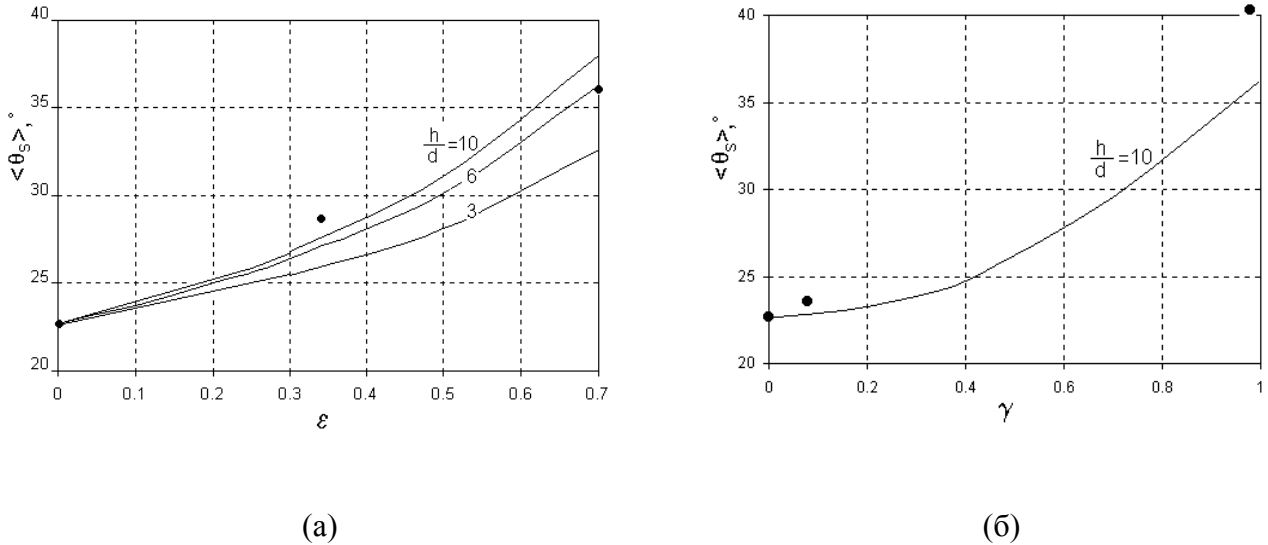


Рис.16. (а)-Моделировании эволюции средней ориентации следов частиц на внешней поверхности при деформации образца сжатием; жирные точки представляют известные экспериментальные данные, h и d –длина и диаметр цилиндрических частиц, соответственно. (б)-модельная эволюция ориентации следов частиц при деформации кручением и экспериментальные точки; по горизонтальной оси откладывается величина соответствующего простого сдвига.

С помощью разработанного в Главе 1 аналитического метода были рассчитаны поля напряжений вокруг твердых кубических частиц в пластически деформируемой матрице. Результаты, частично проиллюстрированные на Рис.17, выявляют отчетливую упругую сингулярность вблизи ребра частицы.

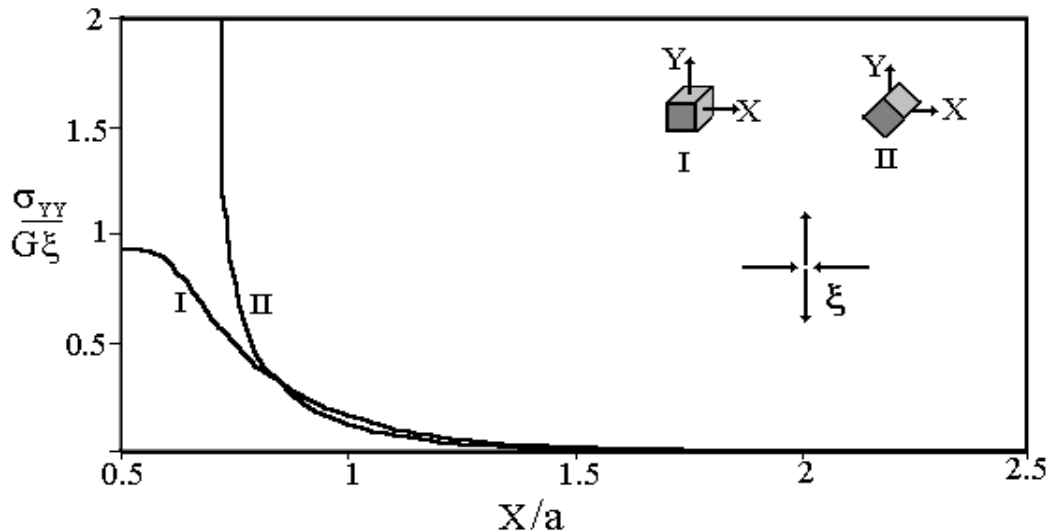


Рис.17. Растягивающие напряжения σ_{yy} на оси X вне кубической частицы с ребром a при ее различных морфологических ориентациях относительно главных осей избыточной деформации ξ .

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Получены геометрические соотношения, позволяющие определить тип и мощность наведенных мезодефектов, а также выявить их характерные конфигурации, в зависимости от распределения неупругой деформации между структурными элементами и от морфологии границ раздела. На линиях стыков плоских границ (тройные стыки кристаллов, изломы межкристаллитных границ, ребра изолированных полиэдрических частиц) наводятся дисклинации; причем к стыковой дисклинации с компонентой кручения всегда примыкает граница, содержащая планарный источник напряжений. Хотя бы один планарный источник напряжений также обязательно присутствует среди мезодефектов, наведенных на фасетках каждого точечного (вершинного) стыка.
2. Получены аналитические выражения для вычисления упругих полей наведенных мезодефектов при произвольной форме структурных элементов. В случае изолированной полиэдрической частицы угловая зависимость и асимптотика вычисленного упругого поля на больших расстояниях согласуются с моделью эллипсоидального включения Эшелби, но в окрестности частицы заметно сказываются особенности огранки; в частности, мощные сингулярности напряжений располагаются на ее ребрах. В тоже время, с помощью тензорного представления формы частицы можно определить ассоциированный эллипсоид; в задаче о напряжениях это позволяет, следуя модели Эшелби, учесть связанную с частицей упругую неоднородность посредством “эффективной” пластической деформации.
3. Сформулирован подход к восстановлению наведенных мезодефектов и их упругих полей в *объеме* материала по данным автоматизированного ориентационного анализа плоской *поверхности* образца. В частности, предложены методы (а) обнаружения стыковых дисклинаций и определения их характеристических векторов, (б) определения пространственной ориентации невидимых линейных стыков, (в) выявления планарных источников напряжений, примыкающих к линейным стыкам. Подход позволяет, во-первых, проверить предсказания теории наведенных мезодефектов и, во-вторых, объединить возможности сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии при исследовании сильно деформированных кристаллических структур.
4. Получено уравнение совместности для деформаций и поворотов *целых* структурных элементов, учитывающее их форму и пространственную

координацию. На этой основе проанализированы вращения кристаллических зерен или фрагментов при взаимодействии с различно деформируемыми соседями и твердых полиэдрических частиц в пластически деформируемой матрице. В первом случае выявлен значительный эффект распределения деформации между соседними кристаллами; во втором случае, наряду с неравноосной формой частицы, на ее вращение влияют особенности полиэдрического строения границы.

5. Разработан алгоритм последовательного выбора активных систем скольжения кристалла по критерию наименьшей пластической несовместности. Критерий отражает аккомодационную природу множественного скольжения и для заданной скорости пластической деформации кристалла предполагает минимальную величину реактивных напряжений при его взаимодействии с окружающим материалом. При этом, с точностью до скалярного множителя, восстанавливается тензор напряжений, который соответствует поверхности текучести кристалла в модели Бишопа-Хилла.
6. Сформулирована модель пластически деформируемого кристаллического агрегата, описывающая взаимодействие соседних кристаллов с учетом их ориентации, формы и пространственной координации. При выборе активных систем скольжения использован критерий наименьшей несовместности, а относительные материальные повороты кристаллов из-за различия их пластических деформаций определены с помощью специального условия совместности (см. пункт 4). Распределение деформации между кристаллами, предсказанное моделью, согласуется с известными результатами моделирования с помощью МКЭ, а предсказанная *локальная* текстура ГЦК поликристалла соответствует известным данным локального дифракционного анализа крупнозернистого алюминия после деформации сжатия.
7. Разработан метод восстановления локализованного сдвига по разориентировкам на границах микрополосы. С помощью этого метода исследована оборванная микрополоса сдвига, возникшая в поликристалле железа при изменении пути деформирования, и реконструирован механизм ее распространения. Он включает в себя основной дислокационный сдвиг по плоскости скольжения, ближайшей к плоскости залегания микрополосы, а также локальные аккомодационные сдвиги, которые обеспечивают рост диполя оборванных малоугловых границ *перед фронтом* микрополосы и частично устраняют микроструктурные барьеры на ее пути.

8. Показано, что при пластической деформации на уступе межкусталлитной границы накапливается дисклинационный диполь, а уступ становится дипольным источником частичных дисклинаций (ЧД). Емкость источника ограничена лишь исходным углом уступа и разориентировкой на границе, что допускает формирование микрополосы с большеугловыми границами за счет многократной эмиссии маломощных диполей ЧД. При этом, диполи ЧД испускаются в тот из смежных кристаллов, который менее благоприятно ориентирован относительно внешних напряжений. Данное предсказание согласуется с известными результатами исследования микрополос в поликристаллах меди и алюминия при больших пластических деформациях.
9. Проведено численное моделирование фазовых напряжений и пластической аккомодации в ходе мартенситного и ферритного превращения в сталях. С ростом степени пластической аккомодации мартенсита предсказано закономерное чередование канонических ориентационных соотношений (Нишиямы, Гренингера-Трояно, Курдюмова-Закса). Кристаллографический анализ мартенситных структур, полученных при разных скоростях охлаждения, подтвердил основные предсказания модели и позволил по межфазным разориентировкам оценить степень пластической аккомодации мартенсита. Для ферритного превращения зависимость гидростатической составляющей фазовых напряжений от объемной доли феррита рассчитана с учетом пластической аккомодации, вызванной их сдвиговой составляющей; предсказан значительный *положительный* вклад фазовых напряжений в движущую силу превращения на его промежуточной стадии.
10. Разработана количественная модель вращения твердых частиц в пластически деформированной матрице при произвольной макроскопической деформации и произвольной форме частиц. Результаты моделирования хорошо согласуются с опубликованными данными количественного металлографического анализа интерметаллидных частиц в алюминиевом сплаве после разных степеней его деформации сжатием и кручением.

Основные результаты диссертации отражены в следующих работах:

1. Зисман А.А., Рыбин В.В. Об оценке величины максимальной обратной плотности общих узлов в модели специальных границ.- Поверхность, 1982, N7, с.87-90.

2. Рыбин В.В., Зисман А.А. Структурная микромеханика пластической деформации и вязкого разрушения фрагментированных кристаллов.- Проблемы Прочности, 1985, N3, с.70-77.
3. Рыбин В.В., Зисман А.А., Золоторевский Н.Ю. Стыковые дисклинации в пластически деформируемых кристаллах.- ФТТ, 1985, Т.27, с.181-185.
4. Зисман А.А., Рыбин В.В. Некоторые вопросы теории развитой пластической деформации разориентированных кристаллов.- ФММ, 1986, Т.62, с.421-427.
5. Зисман А.А., Рыбин В.В. Температурно-геометрические условия существования специальных физически выделенных границ.- ФММ, 1989, Т.68, с.264-270.
6. Рыбин В.В., Зисман А.А. О влиянии внутренних напряжений на сопротивление пластической деформации кристаллических тел.- ФММ, 1990, N4, с.5-14.
7. Зисман А.А., Рыбин В.В. Собственные напряжения фрагмента, испытавшего избыточную пластическую деформацию.- ФММ, 1991, N.3, с.86-95.
8. Зисман А.А., Рыбин В.В. Нелокальное упругое взаимодействие частиц второй фазы в пластически деформируемых материалах.- ФММ, 1991, N7, с.59-66.
9. Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotorevsky N.Yu. Junction disclinations in plastically deformed crystals.-Acta Met. Mater., 1993, V.41, pp.2211-2217.
10. Rybin V.V., Zisman A.A. Structural micromechanics of elasto-plastic deformation of composites.- In: Soviet advanced composite technology. V.3 (ed. Fridlyander J.N.), London: Chapman&Hall, 1995, pp.645-658.
11. Рыбин В.В., Зисман А.А. Использование методов структурной микромеханики при описании упруго-пластической деформации композиционных материалов.- В сб.: Механика разрушения. Теория и Эксперимент, Санкт-Петербург: Изд-во С.-Петербургского университета, 1995, с.102-117.
12. Zisman A.A., Rybin V.V. Basic configurations of interfacial and junction defects induced in a polycrystal by deformation of grains.-Acta Mater., 1996, V.44, pp.403-407.
13. Zisman A.A., Rybin V.V. Basic elements of interfacial and joint defects induced by non-elastic strain of the grains in polycrystals.-Mater. Sci. Forum, 1996, V.207-209, pp.829-832.

14. Zisman A.A., Rybin V.V. Mesoscopic stress field arising from the grain interaction in plastically deformed polycrystals.-Acta Mater., 1998, V.46, pp.457-464.
15. Zisman A., Teodosiu C., Rybin V. Micromechanics of shear microbands under strain-path changes in mild steel.- Comput. Mater. Sci., 1999, pp.307-314.
16. Zisman A.A., Rybin V.V. Local segregation at the grain junction: elastic singularity and its effect on radiation embrittlement.-Mater. Sci. Forum, 1999, V.294-296, pp.153-156.
17. Rybin V.V, Zisman A.A., Teodosiu C. Disclination model of shear microbands in ferritic steel.- In: Proc. 20th Risø Int. Symposium on Mater. Sci. (ed. Bilde-Sørensen et al), Risø Nat. Lab., Roskilde, Denmark, 1999, pp.475-480.
18. Zisman A., Rybin V. Shape-dependent compatibility and spin in interaction of differently deformed structural elements.- J. Mech. Behav. Mater.- 2002, V.13, No.1, pp.1-16.
19. Зисман А.А., Нестерова Е.В., Рыбин В.В., Теодосиу К. Разориентировки и система скольжения микрополосы сдвига, сформированной в поликристалле железа при изменении осей деформирования.- Вопросы Материаловедения, 2002, N1(29), с.267-272.
20. Зисман А.А., Курнаков Д.В., Нестерова Е.В., Рыбин В.В. Роль пластической аккомодации при формировании структур мартенситного превращения в низкоуглеродистых сталях. Моделирование фазовых напряжений и межфазных разориентировок.- Вопросы Материаловедения, 2002, N4(32), с.5-17.
21. Рыбин В.В., Зисман А.А., Курнаков Д.В., Нестерова Е.В., Роль пластической аккомодации при формировании структур мартенситного превращения в низкоуглеродистых сталях.- Известия Академии Наук. Серия Физическая, 2002, Т.66, с.1254-1262.
22. Zisman A., Zolotarevsky N., Ermakova N. Sequential selection of active slip systems by the least incompatibility criterion.- Вопросы Материаловедения, 2003, N1(33) (Специальный выпуск: Труды первого Российско-Французского симпозиума "Физика и механика больших пластических деформаций", Санкт-Петербург, 4-7 мая 2002 г.), с.258-263.
23. Zisman A., Rybin V. Material rotation and lattice re-orientation in interaction of differently deformed structural elements.- Вопросы Материаловедения, 2003,

N1(33) (Специальный выпуск: Труды первого Российско-Французского симпозиума "Физика и механика больших пластических деформаций", Санкт-Петербург, 4-7 мая 2002 г.), с.75-80.

24. Ermakova N., Zisman A., Zolotarevsky N. Polycrystal deformation model incorporating the shape and spatial coordination of constitutive crystals.- *Materials Sci. Forum*, 2002, V.408-412 (Proc. ICOTOM-13), pp.311-316.
25. Zisman A., Nesterova E., Rybin V., Teodosiu C. Interfacial misorientations and underlying slip activity of a shear microband in mild steel: TEM analysis and numerical simulation.- *Scripta Mater.*, 2002, V.46, pp.729-733.