На правах рукописи

Ермакова Наталья Юрьевна

Эффекты взаимодействия и фрагментации зерен в процессе формирования текстуры деформации поликристалла

01.04.07 – физика конденсированного состояния

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико – математических наук

Санкт-Петербург 2002 Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном техническом университете

Научный руководитель:	доктор физико-м профессор	атематических наук, Титовец Ю.Ф.
Официальные оппоненты:	доктор физико-м профессор	атематических наук, Бетехтин В.И.
	доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Гуткин М.Ю.	

Ведущая организация: ГНЦ ЦНИИ КМ «Прометей»

Защита состоится 28 мая 2002 года в 17 часов 30 минут на заседании диссертационного совета Д 212.229.05 при Санкт-Петербургском государственном техническом университете по адресу: 195251 г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29, II учебный корпус, аудитория 265.

С диссертацией можно ознакомиться в Фундаментальной библиотеке СПбГТУ

Автореферат разослан « » апреля 2002 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.229.05

Титовец Ю.Ф.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Технологии создания конструкционных материалов, отвечающих требованиям современной техники, используют большие пластические деформации как для формоизменения заготовок, так и для повышения комплекса прочностных свойств материала. Одновременно в процессе деформации формируется кристаллографическая текстура – неравномерное распределение ориентаций кристаллитов, – определяющая анизотропию свойств материала.

К настоящему времени накоплен огромный опыт экспериментального изучения текстур деформации. Предпринимались и многочисленные попытки теоретического описания процесса текстурообразования. Было достигнуто качественное понимание природы формирования текстуры, качественно же удается предсказать основные характеристики текстуры при различных способах деформации различных материалов.

Ключевой проблемой при построении теории, предсказывающей текстуру деформации, является адекватный учет взаимосвязи между развитием текстуры и деформационной микроструктуры. Эта проблема интенсивно изучалась в последние два десятилетия. Было установлено, что структурные превращения, происходящие в ходе деформации, приводят к потере зерном ориентационной однородности: в нем формируется неоднородное распределение ориентаций – микротекстура. На развитие микротекстуры, в свою очередь, влияет пластическое взаимодействие зерна с ближайшими соседями, стесняющими его деформацию. Очевидно, что адекватная теория текстурообразования должна учитывать эти "локальные" эффекты, то есть особенности развития микротекстуры в масштабе отдельных зерен. Однако к началу диссертационной работы в этом направлении были сделаны только первые шаги. Так, не было методики, позволяющей количественно определять локальную текстуру в микрообъемах деформируемого поликристалла. Не было прямых экспериментальных доказательств существенного влияния локальных межзеренных взаимодействий на текстурообразование. Не было и теории, последовательно учитывающей пространственное расположение зерен, их формоизменение и эффекты локальных межзеренных взаимодействий.

Цель работы состояла в экспериментальном выявлении и теоретическом описании эффектов фрагментации и межзеренного взаимодействия в процессе формирования текстуры деформации поликристаллов.

Для достижения этой цели требуется решить следующие основные задачи:

- 1. Разработка методики количественной аттестации микротекстуры на основе данных локальной рентгеновской дифрактометрии.
- 2. Экспериментальное исследование влияния локального окружения зерна на эволюцию его микротекстуры под действием пластической деформации.
- 3. Развитие модели деформации поликристалла, учитывающей реактивные напряжения и взаимодействие между смежными зернами, и количественное предсказание на этой основе эволюции кристаллографической текстуры.

Научная новизна. В диссертации впервые:

- разработана методика количественного анализа микротекстуры в объеме отдельных зерен, облучаемом рентгеновским пучком; созданная методика существенно повышает возможности метода локальной рентгеновской дифрактометрии для изучения пластически деформированных поликристаллов;
- исследованы и проанализированы распределения ориентаций внутри отдельных зерен;
- проведено сравнительное исследование эволюции микротекстуры зерен, имеющих одинаковую ориентацию относительно оси деформации в исходном состоянии;
- прямым экспериментом показано, что локальное окружение зерна существенно влияет на характер его переориентации в ходе деформирования;
- проведен сравнительный анализ результатов рентгеновского исследования микротекстуры с данными электронно-микроскопического исследования разориентаций на границах деформационного происхождения;
- для моделирования деформации поликристалла предложен критерий наименьшей несовместности между зерном и его окружением, позволяющий учесть последовательную активацию систем скольжения в соответствии с аккомодационной предысторией множественного скольжения;
- построена модель деформации поликристалла, основанная на критерии минимальной несовместности и учитывающая пластическое взаимодействие зерна с его локальным окружением при выборе активных систем скольжения, определении их загрузки и вычислении поворота решетки зерна; с использованием этой модели проведено моделирование деформации металла с ГЦК решеткой.

Научная и практическая значимость работы. Изучение взаимосвязи формирования микроструктуры и текстуры является в настоящее время одним из приоритетных направлений в работе многих научных центров. Следовательно, разработанная методика расчета функции распределения ориентаций в микрообъемах материала на базе данных локальной рентгеновской дифрактометрии может найти широкое применение для исследования структурных и текстурных превращений в крупнокристаллических материалах.

Экспериментально установленное влияние межзеренного взаимодействия на переориентацию зерна объясняет ранее зафиксированное в ряде работ несоответствие в наблюдаемых и рассчитанных поворотах решетки отдельных зерен. Определенные характеристики рассеяния микротекстуры зерна могут быть использованы для учета эффекта фрагментации при моделировании текстуры. Построенная модель деформации поликристаллического агрегата является основой для количественного моделирования текстурообразования в материалах при различных способах пластического формоизменения.

Основные положения, выносимые на защиту:

- 1. Создание методики, позволяющей на основе данных локальной рентгеновской дифрактометрии определять функцию распределения ориентировок в микрообъемах, в частности, в отдельных зернах пластически деформированного материала и проводить количественный анализ эволюции микротекстуры.
- 2. Экспериментальное подтверждение того, что локальное окружение зерна является фактором, от которого в существенной мере зависит эволюция микротекстуры зерна, в наибольшей степени траектория изменения его преимущественной ориентации.
- 3. Модель деформации поликристалла, учитывающая аккомодационную природу множественного скольжения и пластическое взаимодействие между смежными зернами и тем самым позволяющая более адекватно моделировать процесс эволюции текстуры деформации.

Апробация работы. результаты работы были Основные доложены на международной конференции «Высокие технологии современном В материаловедении» (Санкт-Петербург, Россия, 27-28 мая 1997 г.); International workshop on new approaches to Hi-Tech materials '98 "Nondestructive testing and computer simulations in materials science and engineering" (NDTCS-98, St.Petersburg, Russia, 8-12 June 1998); International workshop on new approaches to Hi-Tech materials '99 "Nondestructive testing and computer simulations in materials science and engineering" (NDTCS-99, St.Petersburg, Russia, 7-11 June 1999); 4th International workshop on Nondestructive testing and computer simulations in materials science and engineering (St.Petersburg, Russia, 12-17 June 2000); 5th International workshop on nondestructive testing and computer simulations in materials science and engineering (St.Petersburg, Russia, 12-17 June 2001); на XXXVIII семинаре «Актуальные проблемы прочности» (Санкт-Петербург, Россия, 24-27 сентября 2001 г.); на международном семинаре «Мезоструктура» (Санкт-Петербург, Россия, 4-7 декабря 2001 г.); на XIII Петербургских чтениях по проблемам прочности (Санкт-Петербург, Россия, 12-14 марта 2002 г.).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 8 работ.

Структура и объем диссертации. Диссертация включает в себя введение, четыре главы, заключение и библиографический список использованной литературы. Общий объем составляет 143 страницы, из них 11 - список литературы из 118 наименований и 47 иллюстраций.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение к диссертации содержит обоснование актуальности работы и краткую характеристику научных проблем, связанных со взаимным влиянием процессов эволюции микроструктуры и текстуры деформации. Кратко изложено

содержание диссертации, сформулирована цель работы и приведены основные положения, выносимые на защиту.

Глава 1 является аналитическим обзором литературы, посвященным формированию деформационной структуры и текстуры, методам анализа макро- и микротекстур и моделям деформации поликристаллических материалов и текстурообразования.

В первом разделе рассмотрены основные типы разориентированных структур, формирующихся при деформации. На относительно ранних стадиях пластической деформации в металлах с высокой и средней энергией дефекта упаковки возникает ячеистая структура, на фоне которой с ростом деформации формируется фрагментированная структура. Эти структурные перестройки приводят к тому, что результате пластического течения теряет ориентационную кристаллит В однородность и может быть охарактеризован распределением ориентаций. Таким образом, распределением ориентаций характеризуется не только поликристалл (макротекстура), но и отдельное зерно (микротекстура). Экспериментальные приведенные обзоре, показывают, что физический данные. В механизм формирования текстуры поликристалла может быть понят только на основе исследования закономерностей возникновения и развития микротекстуры в масштабе зерен.

Во втором разделе рассмотрены экспериментальные методы исследования текстур и теоретические основы их математического описания. Описание текстуры будет полным, если вычислена функция распределения ориентаций (ФРО). Способы вычисления ФРО для макротекстуры существуют и широко используются на практике, в то время как метод определения локальной ФРО, характеризующей микрообъемы порядка размера зерна, до настоящего времени не разработан.

третьем разделе обсуждается состояние теории тектурообразования. В Тейлора и Кренера используют предположение об Классические теории однородности пластической деформации зерен поликристаллического агрегата. Каждая из моделей, созданных в развитие упомянутых, либо учитывает особенности изменения формы кристаллитов для частичного снятия тейлоровского требования однородности деформации, либо некоторых искусственных с помощью математических построений учитывает влияние непосредственного окружения фрагментации. Значительный шаг вперед в отношении учета зерна И межкристаллитных взаимодействий позволяет сделать конечно - элементное (КЭ) моделирование. Но КЭ модели, задавая пространственную координацию зерен и обеспечивая непрерывность смещений и равновесие напряжений, довольно грубо воспроизводят структуру поликристалла, для приближения конфигурации агрегата к большие затраты компьютерного времени и ресурсов реальной требуются вычислительной памяти. Таким образом, желательным является развитие модели, учитывающей эффекты локальных межзеренных взаимодействий, избегая тех сложностей, которые неизбежно возникают в КЭ моделировании.

На основании анализа литературы в заключении данной главы сформулированы задачи диссертационной работы.

Методика восстановления локальных ФРО по данным локальной рентгеновской дифрактометрии (ЛРД) изложена в Главе 2. Метод ЛРД позволяет получать информацию о характере распределения ориентаций кристаллической решетки в объеме, облучаемом тонким параллельным пучком рентгеновских лучей, в виде микрополюсных фигур (МПФ), дающих распределение полюсной плотности для отдельных рефлеков. Полюсная фигура {133} для одного из исследованных зерен приведена на рис. 1.

Первый этап процедуры определения ФРО состоит в предварительной обработке полученных МПФ, включающей отделение фона и нормировку экспериментальных МПФ. Расчет ФРО, f(g), базируется на интегральном уравнении, устанавливающем связь между ФРО и распределением полюсной плотности на плоскости проекций. В данном случае это уравнение будет определять взаимное соответствие между локальной ФРО и МПФ:



Рис. 1. Полюсная фигура {133}, включающая в себя пять МПФ, для одного из зерен после деформации 50%.

$$P_{h}(\omega,\phi) = \frac{1}{V_{Q}} \int_{Q} f(g) dg.$$
(1)

Интеграл берется по всем ориентациям Q, которые возникают при вращении вокруг оси, параллельной нормали к отражающей плоскости $\mathbf{h} \equiv \{hkl\}$. $P_h(\omega, \phi)$ - нормированная интенсивность МПФ в точке с координатами (ω, ϕ).

В соответствии со смыслом Φ PO произведение f(g)dg дает долю объема, ориентации в которой занимают в пространстве вращений G элементарную область dg вокруг ориентации g. Все существующие в зерне ориентации составляют некую область ΔG , которая для случая идеального кристалла вырождается в точку. Формирование дефектной субструктуры внутри зерна при пластической деформации приводит к тому, что область ΔG увеличивается, но даже при относительно больших деформациях не охватывает все пространство вращений (что означало бы присутствие в зерне всех возможных ориентаций). Определение ΔG области существования ФРО - является следующим шагом на пути количественного описания микротекстуры. Связь между МПФ и ФРО устанавливается посредством матрицы соответствия М, являющейся оператором в уравнении, полученном при линеаризации интегрального уравнения (1):

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{R} = \mathbf{P} \,. \tag{2}$$

Здесь подобно векторному методу Φ PO представлена в виде вектора **R** в области Δ G пространства вращений, **P** – вектор интенсивности, определенный на плоскости проекций. Предложенный способ определения **M** позволяет даже при ограниченном наборе МП Φ добиваться удовлетворительной точности при решении векторного



Рис. 2. ФРО, рассчитанная на основе экспериментальных данных ЛРД. Представлены значения при φ₂ = const.

уравнения (2). Метод наименьших квадратов, примененный к решению такой системы, приводит к тому, отрицательные что возникают компоненты в искомой ФРО. В этих предпочтителен условиях иной подход, аналогичный тем, которые используются в теории решения некорректно поставленных задач. Система уравнений (2) является переопределенной и имеет неточно заданную правую часть, поскольку МΠΦ интенсивность содержит измерительные погрешности. Для решения такой системы используется метод ортогонализации с разложением матрицы М на ортогональную и верхнетреугольную. Из множества возможных решений относительно **R** выбирается то, которое имеет наименьшую норму, $\|\mathbf{R}\|$. На рис. 2. графически представлен результат восстановления функции распределения ориентаций в зерне, полюсная фигура для которого приведена на рис.1. В работе выполнена оценка точности вычислений. Хорошее согласие экспериментальных данных и расчета достигнуто по следующим параметрам: интегральная интенсивность, координаты центра тяжести рефлекса, ширина разброса, значение максимума полюсной плотности и координаты этого полюса. Проанализированы причины наблюдаемых погрешностей. В качестве существенной нетривиальной причины следует отметить возможную неточность определения границы фонового рассеяния, которая может приводить к исключению из ФРО некоторых из имеющихся в зерне ориентировок.

В Главе 3 изложены результаты применения разработанной методики анализа локальных текстур для изучения закономерностей эволюции микротекстуры отдельных зерен. В рамках этого исследования особый интерес представляло выявление степени влияния локального окружения зерна на траекторию его поворота и характер фрагментации. Для исследования был выбран поликристалл приблизительно алюминия технической чистоты. имевший структуру с равноосными зернами, средний размер которых составлял около 0.6 мм. Рентгенодифрактометрически были определены ориентировки около 100 зерен, находящихся в центральной области большой грани образца. Из их числа были пары зерен с попарно близкими ориентировками плоскости, выбраны 2 параллельной внешней поверхности образца: ~(128) для зерен А1 и А2, и ~(135) для зерен В1 и В2. Исследованные зерна схематически изображены на рис. 3, на котором также приведены облучаемые при рентгеновском эксперименте области.



Рис. 3. Схематическое изображение исследованных зерен. Соотношение размеров зерен и облучаемых областей (круги) соответствует деформации 50%.

Для исследования процессов формирования текстуры образец деформировался сжатием по нормали к большой грани. Деформирование в ходе эксперимента осуществлялось поэтапно, до степеней 13, 30, 40 и 50% с тем, чтобы получать микроструктуре изучаемых зерен в развитии. информацию о Эволюция микротекстуры одного из зерен представлено в виде обратных полюсных фигур (ОПФ) для оси сжатия, полученных на основе предварительно определенных ФРО, на рис. 4. Уже при малых степенях деформации (13%) во всех зернах возникает значительное рассеяние ориентировки оси сжатия. При увеличении степени существенное деформации наблюдается рассеяние ориентировок вокруг



- **Рис. 4.** Распределения ориентации оси сжатия на стандартном стереографическом треугольнике в зерне A1 для степеней деформации 13% (а), 30% (б), 40% (в) и 50% (г).
 - - исходная ориентация оси сжатия;
 - × преимущественная ориентация оси сжатия.



Рис. 5. Траектории изменения преимущественной ориентировки зерен, определенные на основе экспериментальных данных, в сравнении с рассчитанными согласно моделям Тейлора (□) и Закса (◊).

преимущественной, и при 50% деформации разброс ориентировок становится настолько сильным, что точнее было бы говорить не о преимущественной ориентировке, а о некоторой области на стереографическом треугольнике, в которой сосредоточены наиболее вероятные для данного зерна ориентировки оси сжатия.

Наряду с отмеченными выше общими для исследованных зерен тенденциями наблюдаются очевидные различия. Прежде всего, повороты зерен в ходе деформации существенно различаются как по величине, так и по направлению. преимущественных ориентировок Траектории изменения приведены на стереографическом треугольнике (рис. 5) вместе с результаты моделирования, выполненного для двух вариантов пластического взаимодействия зерна со своим окружением: при полном стеснении зерна (модель Тейлора) и при отсутствии стеснения (модель Закса). Как видно, зерна с близкими начальными ориентировками оси сжатия переориентируются по-разному – траектории поворота существенно расходятся внутри каждой пары. Более того, трудно увидеть какую-либо корреляцию между начальной ориентировкой и траекторией поворота. Это позволило заключить, ЧТО В исследованных зернах не только начальная ориентировка, но и другие факторы определяют траекторию поворота. Повидимому, это те факторы, которые можно объединить в понятие "локальная

конфигурация", прежде всего, ориентации соседних зерен, а также, возможно, морфология и размер самого рассматриваемого зерна.

Анализ характеристик разброса ориентаций в пределах зерна показал, что существует их корреляция с характеристиками разориентированной субструктуры. На рис. 6 приведена величина угла отклонения ориентаций от преимущественной, усредненная по исследованным зернам, и средняя разориентировка на границах фрагментов¹. Здесь же представлены величина максимального угла отклонения, также усредненная по исследованным зернам, и максимальная разориентировка на границах фрагментов¹. На основании корреляции скорости В изменения приведенных параметров можно предположить, что среднее значение отклонения преимущественной действительно ориентаций ОТ отражает среднюю разориентированность внутризеренной микроструктуры. С другой стороны, максимальное отклонение ориентаций на начальной стадии возрастает медленнее, разориентировка, деформации максимальная но с ростом скорости чем выравниваются. Заметим, что причинами отклонения ориентировок ОТ преимущественной могут служить как межфрагментные разориентировки, так и градиенты ориентаций в масштабе зерна. В случае доминирования последних в деформационной микроструктуре наблюдалось бы существенное превышение максимальных отклонений по сравнению с максимальными разориентировками. Тот факт, что максимальное отклонение ориентаций от преимущественной несколько меньше, чем максимальная разориентировка, свидетельствует о доминировании первого фактора из упомянутых, т.е. межфрагментных разворотов, которые, как



Рис. 6. Углы отклонения от преимущественной ориентировки, усредненные по исследованным зернам, а также средняя и максимальная разориентации между блоками ячеек в зависимости от степени деформации.

¹ Liu Q., Juul Jensen D., Hansen N. Acta Mater., 1998, v. 46, p. 5819-5838.

правило, скомпенсированы в масштабе зерна.

Проведенные исследования микротекстуры в разных частях зерен при деформации 50% (рис.3) подтвердили, что внутризеренные градиенты ориентации в масштабе зерна не являются определяющим фактором для формирования свойственной данному зерну микротекстуры.

В Главе 4 предложена новая модель деформации поликристалла. В ней делается попытка учесть аккомодационную природу множественного скольжения, которое развивается в ходе подстройки зерна к его окружению.

разделе развитие множественного первом скольжения В В зерне проанализировано в рамках постулата Тейлора об однородности деформации. деформации кристаллитов Предполагается, ЧТО при стесненной внутри поликристаллического агрегата заданная скорость макродеформации должна полностью аккомодироваться работой активных систем скольжения. Это условие выполняется в общем случае при работе пяти независимых систем скольжения, тогда как активация меньшего числа систем скольжения (n<5) порождает соответствии несовместность скоростей пластической деформации. В с предлагаемым методом активируется та комбинация из п систем скольжения, которая обеспечивает наименьшее различие между скоростями макродеформации и Несовместность кристаллита. деформации скоростей деформации с необходимостью приводит к возникновению реактивных напряжений в кристаллите, и условие минимума несовместности с этой точки зрения означает наименьшую скорость возрастания напряжений. Предлагаемый критерий, названный критерием минимальной несовместности, предполагает последовательный выбор систем скольжения, при котором сначала выбирается основная система скольжения, наиболее благоприятно ориентированная относительно приложенной скорости деформации. Вторая и последующие системы выбираются таким образом, чтобы совместно с ранее выбранными обеспечить наименьшую несовместность. При реализации предлагаемого критерия нет необходимости в вычислении скоростей сдвига по активным системам скольжения на каждой итерации, этот расчет производится на заключительном этапе, после определения полной комбинации систем скольжения. Алгоритмическим свойством метода является принадлежность формируемой комбинации систем скольжения вершине поверхности текучести Бишопа-Хилла, что означает равное нагружение всех избранных систем.

Для проверки разработанного алгоритма выбора активных систем скольжения был рассмотрен массив ГЦК кристаллитов, скорость деформации которого описывалась тензором, соответствующим прокатке без уширения. Показано, что с вероятностью ~94% сумма скоростей сдвига по активным системам скольжения равна минимальной, т.е. выбирается комбинация из числа тейлоровских. Анализ тех немногочисленных случаев, для которых критерий минимальной несовместности не обеспечивает наименьшего значения суммы скоростей сдвига, показал, что для таких ориентировок комбинации, удовлетворяющие условию Тейлора, не содержат системы скольжения, наиболее благоприятно ориентированной относительно макроскопических осей деформации. Следовательно, в этих случаях предложенный критерий, в отличие от модели Тейлора, дает решение, имеющее физический смысл.

Таким образом, реализация предложенного алгоритма приводит, в основном, к выбору таких же комбинаций активных систем скольжения, что и модель Тейлора – Бишопа – Хилла, а следовательно, и предсказываемая на его основании текстура оказывается близкой к моделируемой на основе теории Тейлора. Однако наблюдается значительное (примерно на порядок) ускорение вычислений, связанное с тем, что нет необходимости проводить комбинаторный анализ сочетаний систем скольжения и выполнять расчет скоростей сдвигов для них.

Во втором разделе описана модель, явно рассматривающая пространственную координацию зерен и локальное межзеренное взаимодействие. В качестве структурных элементов, составляющих поликристалл, были выбраны полиэдры, чья

обеспечивая плотную форма, упаковку В агрегате, наилучшим образом отвечает координации реальных зерен (рис. 7). Каждый кристаллит имеет 14 непосредственных соседей, что в большей степени соответствует реальности, чем используемая в КЭ моделировании форма кубическая) (обычно зерен. В модели используются периодические граничные условия, можно интерпретировать которые следующим образом: к модельному агрегату со всех сторон примыкают подобные ему, которые деформационное то испытывают же самое воздействие.



Рис. 7. Фрагмент модельного поликристалла.

деформирования поликристалла Процесс пластического представляется последовательностью дискретных шагов деформации. На каждом шаге используется итерационная процедура последовательного выбора систем скольжения на основе критерия минимальной несовместности. Но, в отличии от алгоритма, описанного в первом разделе, множественное скольжение рассматривается происходящим одновременно и в зерне, и в кристаллитах, непосредственно к нему примыкающих. На начальной итерации осуществляется выбор основной системы скольжения в каждом из зерен агрегата: это система, характеризуемая наибольшим напряжением сдвига под действием внешнего поля напряжений. Критерием выбора системы скольжения на второй и последующих итерациях служит условие наилучшей аккомодации несоответствия между скоростью деформации зерна и средней скоростью деформации его непосредственного окружения. При этом относительный вклад от каждого соседнего зерна берется пропорциональным площади контактной фасетки. Реализованный в данной модели учет формоизменения состоит в том, что на каждом шаге деформирования определяется новое положение координат вершин полиэдра, и, соответственно, относительные вклады в среднюю скорость зерен изменяются. Последовательное выполнение деформации окружающих итераций можно проводить до тех пор, пока невязка скоростей деформации не

достигнет заданного уровня. В настоящей работе процедура выбора активных систем скольжения прерывалась на пятой итерации, а не ранее, чтобы избежать проблемы определения допустимого уровня межзеренной аккомодации. После определения комбинаций систем скольжения в каждом зерне повороты решетки рассчитывались с учетом локального материального поворота (спина) кристаллитов, вызванного стесненностью деформации.

рассмотрены Далее результаты моделирования деформации текстуры использованием поликристаллического агрегата и эволюции с предложенной модели. Показано, что возникает разброс по скоростям деформации кристаллитов, который демонстрирует отдельных подобный тому, КЭ моделирование. Наблюдается нормальное распределение скоростей деформации вокруг среднего, а среднее значение соответствует макроскопической величине скорости. Моделирование эволюции текстуры было выполнено для агрегата, состоящего из ~5500 зерен полиэдрической формы. Исходное распределение ориентировок было хаотическим. Деформация соответствовала прокатке с обжатием 50% (истинная деформация 0.69). В таблице 1 приведены доли основных текстурных компонент, к которым относились ориентировки, отличающиеся не более чем на 15° от идеальной. Видно, что результаты, полученные при использовании предложенной в настоящей работе модели, лучше согласуются с экспериментом, чем результаты моделирования по модели Тейлора.

Текстурная компонента	Эксперимент ¹	Модель Тейлора	Новая модель
{110} <001>	8.8	4.2	3.6
{110} <112>	14.5	9.3	10.9
{211} <111>	15.0	20.5	17.5
{123} <634>	30.2	33.7	30.9
{100} <001>	2.8	1.3	0.6

Таблица 1. Доли главных текстурных компонент (в процентах) при прокатке ГЦК поликристалла.

Показано также, что в рамках данной модели особенности локального окружения существенно влияют как на скорость деформации кристаллита, так и на его поворот. Для демонстрации последнего факта в модельном поликристалле двум группам зерен были заданы такие же начальные ориентировки (А и В), как и в зернах, которые изучались экспериментально. При моделировании деформации сжатия каждая группа содержала 10 несмежных зерен, случайным образом расположенных в агрегате и имеющих исходно одинаковую ориентацию. Рис. 8 иллюстрирует вариации (в зависимости от окружения) траектории поворота оси

¹ Leffers T., Juul Jensen D. Proc. 13th International Simposium on Materials Science, 1992, p. 323-329.

сжатия. Рассчитанные траектории имеют бо́льшую эффективную протяженность, чем при использовании теории Тейлора, что лучше соответствует эксперименту.



Рис. 8. Изменение ориентации оси сжатия в процессе одноосной деформации ($\varepsilon_{max} = 0.7$) в зернах с исходно одинаковыми ориентировками А и В в условиях различного окружения.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

 Разработана методика расчета функции распределения ориентировок в микрообъемах изучаемого материала – локальной ФРО на базе данных локальной рентгеновской дифрактометрии. Возможности экспериментального изучения пластически деформированных материалов существенно расширяются благодаря предлагаемой методике: она позволяет выполнить количественный анализ локальной текстуры в приповерхностных областях образца, облученных зондирующим пучком диаметра 200...500 мкм. В частности, с помощью разработанной методики определения локальной ФРО возможно получение количественной информации об эволюции микротекстуры отдельных зерен, в том числе, об изменении преимущественной ориентации (то есть ориентации, представленной в данном зерне с максимальной вероятностью), и о рассеянии ориентаций в пределах зерна

- 2. Разработанный метод расчета локальной ФРО позволяет восстановить полную полюсную фигуру на основе нескольких (как минимум трех) рефлексов. Причинами возможных неточностей восстановления ФРО являются, во-первых, сама форма дискретного представления ФРО, приводящая к сглаживанию распределения; во-вторых, погрешности при определении границы фонового рассеяния, что может приводить к исключению из ФРО некоторых из имеющихся в зерне ориентировок; в третьих, относительно большой шаг разбиения в пространстве вращений вследствие ограниченного набора экспериментальных значений распределения полюсной плотности.
- 3. Проведено исследование микротекстуры эволюции В процессе сжатия крупнокристаллического алюминия отдельных для зерен, имевших ДО деформации попарно одинаковые ориентировки оси сжатия. Показано, что хотя поворот решетки зерен в целом согласуется с данными о формировании текстуры <110>. зерна c близкими начальными ориентировками сжатия переориентируются существенно по-разному. Локальное окружение зерна, а также, вероятно, его размер и форма являются факторами, определяющими траекторию переориентации исследованных зерен. Общепринятые модели, не учитывающие особенности пластического взаимодействия зерна с его локальным окружением, не в состоянии предсказать поворот решетки отдельного зерна.
- 4. Показано, что внутризеренные градиенты ориентации в масштабе зерна не являются определяющим фактором для формирования свойственной данному зерну микротекстуры. Главным образом она определяется характерной разориентированной микроструктурой, скомпенсированной по направлениям разворотов фрагментов. Изменение средней межфрагментной разориентации коррелирует со среднем разбросом ориентаций в пределах зерна.
- 5. Предложен метод выбора систем скольжения при моделировании деформации поликристалла, основанный на критерии минимальной несовместности. Метод в явном виде учитывает последовательную активацию систем в ходе развития множественного скольжения. При этом выбор очередной системы основан на предположении, что активируемая комбинация систем скольжения должна обеспечивать наименьшее различие между скоростями макродеформации и деформации кристаллита. Показано, что текстура, предсказываемая на основе критерия минимальной несовместности, оказывается аналогичной результату моделирования в соответствии с теорией Тейлора, но предложенный метод обеспечивает существенное ускорение вычислительной процедуры.
- деформации поликристалла, учитывающая пластическое 6. Развита модель взаимодействие зерна с его локальным окружением при выборе активных систем скольжения, определении их загрузки и вычислении поворота решетки зерна. процедура выбора Последовательная активных систем скольжения, базирующаяся критерии минимальной позволяет на несовместности, моделировать одновременное множественное скольжение в отдельных зернах поликристалла учетом c ИХ взаимной аккомодации. Таким образом, обеспечивается однозначность определения комбинации систем скольжения.

7. Предложенная модель без использования трудоемкого вычислительного аппарата метода конечных элементов позволяет прогнозировать эволюцию текстуры с учетом пространственной координации зерен поликристаллического агрегата. Текстура прокатки металла с ГЦК решеткой, предсказываемая на основе предложенной модели, оказывается ближе к экспериментально наблюдаемой по сравнению с моделью Тейлора. Модель предсказывает также согласующийся с экспериментом разброс траекторий переориентации зерен в зависимости от их локального окружения.

Основное содержание диссертации опубликовано в работах:

- 1. Ермакова Н.Ю., Золоторевский Н.Ю., Титовец Ю.Ф. Анализ распределений ориентировок в отдельных зернах пластически деформированного поликристалла на основе данных рентгеновской дифрактометрии. Заводская лаборатория, 2000, т. 66, №7, с. 26-32.
- 2. Золоторевский Н.Ю., Титовец Ю.Ф., Ермакова Н.Ю. Эволюция микроструктуры в отдельных зернах поликристалла алюминия при сжатии. - Физика металлов и металловедение, 2002, т. 93, №1, с. 94-101.
- 3. Ermakova N., Zolotorevsky N., Mirzoev V., Titovets Yu. Evaluation of microtexture using X-ray poly figures obtained from single grains. Proceedings of the International Society for Optical Engineers, 1999, v.3687, p. 365-370.
- 4. Золоторевский Н.Ю., Ермакова Н.Ю., Зубачева О.А., Титовец Ю.Ф., Калабушкин А.Е.- Исследование неоднородной переориентации зерен поликристалла при деформации сжатием. В сб. материалов международной научно-технической конференции "Пластическая, термическая и термомеханическая обработка современных металлических материалов". 1999, С.-Петербург, с. 25-27.
- 5. Zolotorevsky N., Ermakova N., Zubacheva O., Kalabushkin A., Titovets Yu. Lattice rotations in surface grains during compression of aluminium polycrystal. Proceedings of the International Society for Optical Engineers, 2000, v. 4064-55, p.355-360.
- 6. Золоторевский Н.Ю., Ермакова Н.Ю., Зубачева О.А., Титовец Ю.Ф. Исследование микромеханизма эволюции текстуры в поликристалле алюминия.
 В сб. материалов II международной конференции «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений», Вестник Тамбовского Университета, 2000, т.5, в.2-3, с.265-267.
- 7. Золоторевский Н.Ю., Титовец Ю.Ф., Ермакова Н.Ю. Исследование микротекстуры в зернах пластически деформированного поликристалла.-Материалы XXXVIII семинара «Актуальные проблемы прочности», 24-27 сентября 2001, С.-Петербург, с.273-278.
- 8. Ermakova N., Zisman A., Zolotorevsky N. Plastic deformation model incorporating coordination of grains in a polycrystalline aggregate. Proceedings of the International Society for Optical Engineers, 2002, v. 4627, p.285-289.