

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАШИНОСТРОЕНИЯ  
филиал федерального государственного бюджетного научного учреждения  
«Федеральный исследовательский центр институт прикладной физики  
Российской Академии Наук»

На правах рукописи

Кириков Сергей Владимирович

**РОЛЬ МЕЗОДЕФЕКТОВ ДЕФОРМАЦИОННОГО  
ПРОИСХОЖДЕНИЯ В ПРОЦЕССАХ  
СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ  
ПОЛИКРИСТАЛЛОВ**

Специальность 1.3.8.

Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени кандидата  
физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук, профессор  
Владимир Николаевич Перевезенцев

Нижний Новгород — 2022

## Оглавление

<b>ВВЕДЕНИЕ</b>	<b>4</b>
<b>1 АНАЛИЗ РОТАЦИОННО–СДВИГОВЫХ МЕЗОДЕФЕКТОВ И МЕТОДОВ РАСЧЁТА ИХ УПРУГИХ ПОЛЕЙ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК</b>	<b>10</b>
1.1 Масштабные уровни моделирования процессов пластической деформации . . . . .	10
1.2 Общие уравнения теории упругости применительно к задачам о собственных деформациях . . . . .	13
1.3 Основные соотношения теории пластической деформации с источниками внутренних напряжений . . . . .	16
1.4 Дефекты, возникающие на границах зерен в ходе пластической деформации поликристаллических твердых тел . . . . .	21
1.5 Классификация мезодефектов, возникающих на плоских участках границ зерен и в их объеме в 2D и 3D постановках . . . . .	23
1.6 Мезодефекты сложной структуры . . . . .	29
1.7 Поля упругих напряжений, создаваемые планарными мезодефектами . . . . .	30
1.8 Упругая энергия планарных мезодефектов . . . . .	39
<b>2 МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЗОДЕФЕКТОВ НА НАЧАЛЬНЫХ СТАДИЯХ ПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ</b>	<b>47</b>
2.1 Механизмы накопления первичных мезодефектов на границах зерен	47
2.2 Механизмы формирования вторичных мезодефектов вблизи границ зерен . . . . .	48
2.3 Характеристики мезодефектов, образующихся на деформационных фасетках в результате прохождения через границу зерна полосы сдвига или полосы скольжения . . . . .	51
2.4 Характеристики мезодефектов, образующихся на деформационных фасетках в результате прохождения через границу зерна дислокационного скопления . . . . .	57

2.5	Релаксация полей упругих напряжений от мезодефектов за счет формирования оборванных дислокационных границ . . . . .	65
2.6	Релаксация упругих полей от мезодефектов за счет формирования полосы сдвига . . . . .	70
2.7	Выводы по главе II . . . . .	77
<b>3</b>	<b>РОЛЬ МЕЗОДЕФЕКТОВ В ПРОЦЕССАХ ЗАРОЖДЕНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ МИКРОТРЕЩИН В ФРАГМЕНТИРОВАННОЙ СТРУКТУРЕ</b>	<b>79</b>
3.1	Релаксация упругих полей напряжений мезодефектов за счет формирования микротрещин . . . . .	79
3.2	Метод конфигурационной силы . . . . .	82
3.3	Анализ условий существования стабильных микротрещин и их характеристик, формирующихся в полях напряжений от планарного комбинированного мезодефекта . . . . .	85
3.4	Зарождение трещины на комбинированном мезодефекте при потере устойчивости сдвигового мезодефекта . . . . .	93
3.5	Блокировка трещин полями ротационно-сдвиговых мезодефектов	101
3.6	Выводы по главе III . . . . .	106
	<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b>	<b>108</b>
	<b>СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ</b>	<b>111</b>

## ВВЕДЕНИЕ

**Актуальность темы исследования и степень ее разработанности.** Многие современные технологии получения высокопрочных конструкционных материалов основаны на применении больших пластических деформаций. К таким технологиям относятся различные виды обработки металлов давлением: прокатка, штамповка, ковка, волочение, прессование, экструзия, которые в настоящее время получили широкое распространение для изготовления заготовок и изделий различных форм и размеров. В ходе больших пластических деформаций структура обрабатываемых материалов существенно меняется, а вместе с ней меняются и физико-механические свойства материала.

При этом наиболее характерной структурной трансформацией поликристаллического материала является фрагментация зерен. Многолетние экспериментальные исследования показали, что формирование фрагментированной структуры начинается с зарождения в приграничных областях зерен оборванных дислокационных границ деформационного происхождения. По мере увеличения пластической деформации, оборванные границы ветвятся и постепенно разбивают исходные зёрна поликристалла на взаимно разориентированные области – фрагменты, размер которых постепенно уменьшается и достигает предельных значений порядка 0.2 – 0.3 мкм.

Согласно современным представлениям, процессы структурообразования, происходящие в поликристаллах при больших пластических деформациях, тесно связаны с накоплением на границах и в стыках зерен несовместностей пластической деформации в виде ротационно-сдвиговых мезодефектов: стыковых дисклинаций и планарных мезодефектов. Мощные упругие поля от этих мезодефектов, возмущая ламинарные потоки дислокаций, создают условия для формирования областей с большой плотностью дислокационного заряда и их трансформации по мере дальнейшей деформации сначала в малоугловые, а затем и в большеугловые границы зёрен. На большеугловых границах зёрен деформационного происхождения вновь накапливаются несовместности пластической деформации, формирующие системы вторичных мезодефектов. Таким образом, по мере деформации и измельчения зёрненной структуры материала мезодефекты занимают все большие объемы исходных зерен, в то время как

плотность дислокаций внутри фрагментов падает. Предельно высокая концентрация мезодефектов является характерной особенностью структуры сильно деформированных материалов.

Несовместности пластической деформации, формирующиеся по границам зерен, играют важную роль не только в структурообразовании, но и в разрушении поликристаллов. В случае сильно фрагментированных структур, когда концентрация мезодефектов предельно высока, их роль в процессах зарождения и накопления микропор и микротрещин становится определяющей. Исходя из вышесказанного, исследование закономерностей формирования мезодефектной структуры и её влияния на процессы зарождения и накопления микропор и микротрещин являются важными задачами физики прочности и пластичности.

Следует отметить, что приоритет в открытии и исследовании закономерностей протекания процессов структурообразования и разрушения материалов при больших пластических деформациях принадлежит отечественным ученым. Большой вклад в экспериментальное изучение фрагментированных структур внесли отечественные ученые: Рыбин В. В., Лихачёв В. А., Золоторевский Н. Ю., Колобов Ю. Р., Ценёв Н. К. и зарубежные ученые: Хансен Н., Пантелеон У. и др. Вклад в развитие технологий получения мелкозернистых материалов с применением методов больших пластических деформаций внесли Валиев Р. З., Мулюков Р. Р., Копылов В. И., Чувильдеев В. Н., Лэнгдон Т., Эстрин Ю.З., Виноградов А.Ю. и др. Математические модели мезодефектов были развиты в работах Эшелби Дж., Кренера Э., Романова А. Е., Владимирова В. И., Индеборма В. Л., Рыбина В. В., Перевезенцева В. Н., Зисмана А. А., Муры Т.. Процессы структурообразования и разрушения при больших пластических деформациях теоретически исследовались в работах Рыбина В. В., Перевезенцева В. Н., Сарафанова Г. Ф., Глезера А. М., Назарова А. А., Зисмана А. А., Овидько И. А., Гуткина М. Ю., Панина В. Е., Трусова П. В. и других ученых. Настоящая работа посвящена разработке теоретических моделей структурообразования на начальных стадиях фрагментации и моделей зарождения и накопления микротрещин в упругих полях мезодефектов в сильно-фрагментированных структурах.

**Цели и задачи диссертационной работы.** Целью диссертационной работы является теоретическое исследование мезодефектов, формирующихся в

ходе пластической деформации поликристаллических материалов, и их роли в процессах структурообразования и разрушения. В соответствии с поставленной целью определены основные задачи научного исследования:

1. Провести анализ ротационно-сдвиговых мезодефектов, которые формируются по границам зерен и фрагментов в ходе пластической деформации и разработать методы вычисления полей упругих напряжений от систем этих мезодефектов.
2. Исследовать механизмы накопления первичных мезодефектов на большеугловых границах зерен деформируемого поликристалла и механизмы их пластической аккомодации.
3. Методами компьютерного моделирования определить условия формирования и характеристики (морфологию) оборванных дислокационных границ, формирующихся в упругих полях ротационно-сдвиговых мезодефектов на начальных стадиях фрагментации.
4. Разработать адекватные физические модели зарождения микротрещин в полях упругих напряжений мезодефектов.
5. Определить взаимосвязь характеристик микротрещин с параметрами мезодефектной структуры деформированного поликристалла и условия, при которых возможно накопление стабильных трещин в очагах разрушения.

**Научная новизна и результаты, выносимые на защиту.** Представленные ниже основные результаты диссертационной работы являются новыми. На защиту выносятся следующие результаты:

1. Проведен систематический анализ ротационно-сдвиговых мезодефектов, образующихся на границах и в стыках зёрен при пластической деформации поликристаллов. Получены аналитические выражения, описывающие основные полевые и энергетические характеристики базовых мезодефектов. Разработаны методы расчёта упругих полей более сложных систем мезодефектов в двухмерной и трехмерной постановках задачи.
2. Исследованы механизмы накопления мезодефектов в условиях локализованной пластической деформации. Предложены модели формирования

деформационной фасетки на большеугловой границе наклона при её взаимодействии с плоским скоплением решёточных дислокаций и полосой скольжения. Проведен численный анализ взаимосвязи параметров деформационных фасеток и мезодефектной структуры, формирующейся на ней, с кристаллогеометрией пластического течения.

3. В рамках 2D-модели дискретных дислокаций проведено моделирование процессов формирования оборванных дислокационных границ, результаты которого позволили объяснить особенности их морфологии на начальных стадиях фрагментации поликристаллических материалов.
4. Предложена модель аккомодационной пластической деформации и релаксации упругой энергии планарных сдвиговых мезодефектов, возникающих на границах зёрен в процессе пластической деформации поликристаллов.
5. Определены условия существования стабильных микротрещин, формирующихся в упругих полях систем ротационно-сдвиговых мезодефектов.
6. Предложена модель зарождения микротрещины путём атермического проскальзывания по границе зерна, которая содержит планарный сдвиговый мезодефект. Получены зависимости критического напряжения зарождения микротрещины от длины мезодефекта, его мощности и порогового напряжения атермического проскальзывания.
7. Рассмотрены механизмы блокировки распространяющихся под действием внешних и внутренних напряжений дислокационных трещин упругими полями ротационных и сдвиговых мезодефектов. Определены области существования устойчивых трещин в конфигурационном пространстве параметров системы мезодефектов.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Полученные в работе результаты важны для построения физической теории разрушения и разработки методов диагностики прочностного состояния поликристаллических металлов и сплавов, которые подверглись большим пластическим деформациям. Выявленные при исследовании качественные и количественные закономерности могут быть использованы при разработке статистических и многоуровневых моделей пластической деформации.

**Методология и методы исследования.** Рассматриваемые в диссертации модели структурообразования и разрушения поликристаллов базируются на экспериментально и теоретически обоснованных представлениях о физической природе фрагментации материалов при больших пластических деформациях. В рамках этих представлений ключевая роль в развитии процессов фрагментации и разрушения принадлежит ротационно-сдвиговым мезодефектам, формирующимся в процессе пластической деформации на границах и стыках зерен.

Для моделирования структурных перестроек при больших пластических деформациях использованы следующие методы компьютерного моделирования: метод динамики дискретных дислокаций, методы континуальной теории дислокаций, методы механики сплошной среды и механики разрушения, адаптированные к кристаллическим телам. Эти методы хорошо себя зарекомендовали при изучении различных процессов пластической деформации. Для анализа условий зарождения и стабилизации микротрещин на участках фрагментированной структуры применялись классические подходы микромеханики разрушения.

**Степень достоверности и апробация результатов.** Достоверность результатов определяется строгостью используемого в работе математического аппарата теории дислокаций и сравнением результатов с экспериментальными данными. Компьютерные модели, разработанные в рамках исследования, были верифицированы путем их применения к задачам с известными решениями.

По тематике, связанной с диссертационной работой, опубликовано 22 работы. Среди них 11 статей – непосредственно по материалам диссертации в журналах, рекомендованных ВАК и входящих в международные базы цитирования WOS и Scopus. Основные результаты диссертационного исследования были представлены на 5 международных конференциях:

- 12-я Международная научно-техническая конференция «Современные металлические материалы и технологии», 3 – 7 июля 2017, Санкт-Петербург.
- 4-я Международная научно-техническая конференция, посвященная 80-летию ИМАШ РАН «Живучесть и конструкционное материаловедение ЖивКоМ», 4 – 6 декабря 2018, Москва.

- Международная научная конференция «Проблемы прочности, динамики и ресурса», 25 – 29 ноября 2019, Нижний Новгород.
- XXXI Международная инновационная конференция молодых ученых и студентов по проблемам машиноведения «МИКМУС – 2019», 4 – 7 декабря 2019, Москва.
- Международная инновационная конференция молодых учёных и студентов по современным проблемам машиноведения «МИКМУС-2021», 30 ноября – 2 декабря 2021, Москва.

**Личный вклад автора.** Разработка математических и компьютерных моделей, а также численные расчеты, представленные в диссертации, были проведены лично автором работы. Предметная постановка задач и формулировка физических моделей проводились вместе с научным руководителем профессором В. Н. Перевезенцевым. Некоторые работы выполнены в соавторстве с Ю. В. Свириной и А. С. Пупыниным, которые внесли вклад в тестирование и отладку численных алгоритмов, а также в оформление и перевод научных публикаций.

**Структура и объём диссертации.** Диссертационная работа изложена на 123 страницах печатного текста, состоит из введения, трех глав, основных выводов и списка цитируемой литературы, который содержит 126 наименований.

## ГЛАВА 1.

# АНАЛИЗ РОТАЦИОННО–СДВИГОВЫХ МЕЗОДЕФЕКТОВ И МЕТОДОВ РАСЧЁТА ИХ УПРУГИХ ПОЛЕЙ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

### 1.1 Масштабные уровни моделирования процессов пластической деформации

В ходе деформирования, особенно в случае больших пластических деформаций, происходит существенное изменение структуры материала, которое проявляется в эволюции кристаллографической текстуры, образовании субзерен, формировании фрагментированной структуры, накоплении дефектной структуры в виде мезодефектов и микронесплошностей [1]. Такие изменения приводят к тому, что механические и физические свойства материала меняются с деформацией. Создание «идеальной» модели пластической деформации, которая бы учитывала структурные превращения на всех масштабных уровнях сразу, является сложной пока не решенной задачей. Поэтому все существующие модели пластической деформации [2] имеют четкие границы своей применимости и необходимы для описания некоторой совокупности явлений и процессов, происходящих на определенном масштабном уровне.

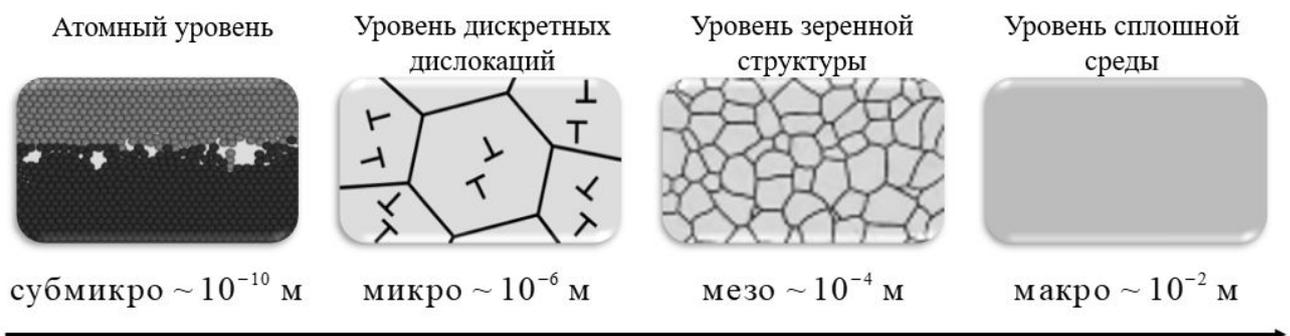


Рисунок 1.1 — Масштабные уровни моделирования пластической деформации

Один из способов классификации моделей пластической деформации связан с разделением имеющихся теоретических моделей по масштабному уровню, на котором рассматриваются те или иные процессы, происходящие во время деформирования материала. Выделяют макро-, мезо-, микро- и субмикро- уровни моделирования (рис. 1.1). При этом каждый из этих уровней характеризует-

ся определенным набором величин, которые описывают кристалло-геометрию пластического течения, структуру и свойства материала.

На макроуровне поликристалл рассматривается как пластически изотропная сплошная среда, которая характеризуется некоторой системой макропараметров: модулями упругости, коэффициентом упрочнения, коэффициентом вязкости и т.д. В зависимости от выбора определяющего соотношения, которое связывает деформацию (или скорость деформации) и внешнее напряжение, выделяют теории течения, теории, учитывающие упрочнение [3], и градиентные теории пластичности [4, 5]. Небольшое количество внутренних параметров, характеризующих состояние материала, позволяет использовать данные модели в различного рода инженерных и прикладных расчетах реальных конструкций.

Известно, что большинство конструкционных материалов имеет поликристаллическую структуру. В случае, когда распределение кристаллографических ориентаций зерен не является случайным, механические и физические свойства материала могут обладать существенной анизотропией. Вследствие этого протекание пластической деформации происходит иначе, чем в случае пластически изотропного тела. В результате на мезоуровне рассматриваются модели кристаллической пластичности, в которых модельный поликристалл состоит из пластически анизотропных зерен, а пластическая деформация протекает только по физически выделенным плоскостям скольжения. Как правило, эти модели реализуются с учетом результатов, полученных на других масштабных уровнях [6]. При моделировании реальных конструкций необходимо знание дополнительных внутренних параметров материала: распределение функции ориентировок зерен и разориентировок границ зерен, статистические данные по морфологии зерен, что значительно усложняет применение данных методов при инженерных расчетах конструкций. К основным направлениям моделирования на данном масштабном уровне можно отнести: моделирование эволюции кристаллографической текстуры при больших пластических деформациях, как с учетом [7, 8] так и без учета фрагментации зерен [9, 10], исследования пространственного распределения микро- и макро- деформаций и напряжений [11] в материалах и т.д.

Моделирование пластического течения на микроуровне осуществляется расчетом движения огромного количества сильно взаимодействующих решеточ-

ных дислокаций. Впервые идея данного подхода была предложена в работах [12–14], а реализация в виде численного алгоритма в работе [15] для 3D и для [16] 2D моделей. Математическое описание эволюции дислокационного ансамбля базируется на методах, используемых в молекулярной динамике [17, 18]. Однако применения данного подхода для моделирования пластической деформации напрямую возможно лишь тогда, когда характерный размер деформируемой области достаточно мал [20, 21]. Так же данный подход используют для моделирования процессов пластической деформации, связанных с эволюцией дислокационного ансамбля (когда нельзя пренебречь дискретностью дислокаций) таких как: процессы упрочнения [22], структурообразования [82] и взаимодействия дислокаций с микронесплошностями [24]. При этом результаты моделирования, полученные на микроуровне, используются для описания пластической деформации на более крупных масштабных уровнях.

На субмикроруровне структуру поликристаллического материала рассматривают на атомном масштабе. При этом один из основных подходов к моделированию процессов пластической деформации связан с применением методов молекулярной динамики [17, 18]. Суть этого метода сводится к тому, что эволюция конфигурации взаимодействующих атомов кристаллической решетки отслеживается с помощью интегрирования их уравнений движения, которые могут иметь как классическую, так и квантово-механическую природу. В данный момент вычислительные ресурсы позволяют моделировать поведение исследуемых объектов, состоящих из нескольких миллионов атомов на временных интервалах порядка нескольких наносекунд. Вследствие чего спектр рассматриваемых задач на данном масштабном уровне ограничивается либо короткими временами, например исследование высокоскоростных и ударных нагрузок [25], либо малыми пространственными размерами (порядка несколько нанометров) рассматриваемых объектов: например, исследование наноматериалов [26], моделирование наноиндентирования [27], исследования тонких пленок [28], а также исследование элементарных процессов пластической деформации: генерации, аннигиляции и движения дислокаций [29, 30] и т.д..

## 1.2 Общие уравнения теории упругости применительно к задачам о собственных деформациях

Далее всюду по тексту в тензорных обозначениях и выражениях будет использована разновидность бескоординатного подхода, приведенная в работе [31]. Как отмечалось ранее, при моделировании процессов пластической деформации на микроуровне пластические сдвиги дискретизируются, а именно представляются в виде движения решеточных дислокаций. Для моделирования данных дефектов удобно воспользоваться аппаратом механики сплошных сред, а именно аппаратом континуальной теории дефектов. Несмотря на то, что приближение сплошной среды, как правило, используют для описания макроскопического поведения поликристаллических материалов, при определенных допущениях и модернизации от данного подхода можно ожидать хорошего количественного совпадения и на микроуровне. Чтобы от кристаллической решетки с дефектами перейти к ее континуальной модели, необходимо поставить в соответствие каждому виду дефектов определенное состояние континуума с внутренними напряжениями. Развитие этой теории и ее современное состояние связано с работами Вольтерры, Сомилианы, Эшелби, Муры, Кренера, Кроупы, Де Вита и других [32–39].

Введение источников внутренних напряжений в сплошную среду осуществляется разными способами [40, 41], но одним из наиболее часто встречающихся и хорошо разработанных является подход, основанный на задании собственных дисторсий или собственных деформаций. Под собственной деформацией принято понимать разного рода неупругие типы деформаций, такие как, например, пластическая деформация или деформация при тепловом расширении или фазовом превращении. В ответ на несовместность собственных деформаций, возникает собственное напряжение – самоуравновешивающееся внутреннее напряжение, вызванное одной или несколькими собственными деформациями в телах, которые свободны от любых внешних сил и поверхностных ограничений. При этом стоит отметить, что собственная деформация является необходимой и достаточной характеристикой для задания дефекта.

Опишем модельную процедуру задания собственной деформации в упругом теле. Вначале в теле выбирается некоторая криволинейная и замкнутая двумерная поверхность, вдоль которой производится разрез. Верхний край

разреза пластически сдвигается относительно неподвижного нижнего края, при этом в случае необходимости материал можно извлекать или наоборот добавлять. Далее под действием усилий верхний берег подводится к нижнему и склеивается (отождествляется). После склейки берегов разреза силы снимаются, в результате в теле появляются внутренние напряжения. Похожий способ получения полей упругих напряжений от включений предложил Эшелби [42]. После того как сделан разрез, часть материала, которая ограничена замкнутой поверхностью, изымается и неупруго трансформируется (без возникновения внутренних напряжений). К этому материалу прикладываются силы, таким образом чтобы вставить его обратно. Далее граница деформированного материала склеивается (отождествляется) с границей разреза и усилия снимаются. Таким образом получается некоторый трехмерный источник внутренних напряжений (рис. 1.2).

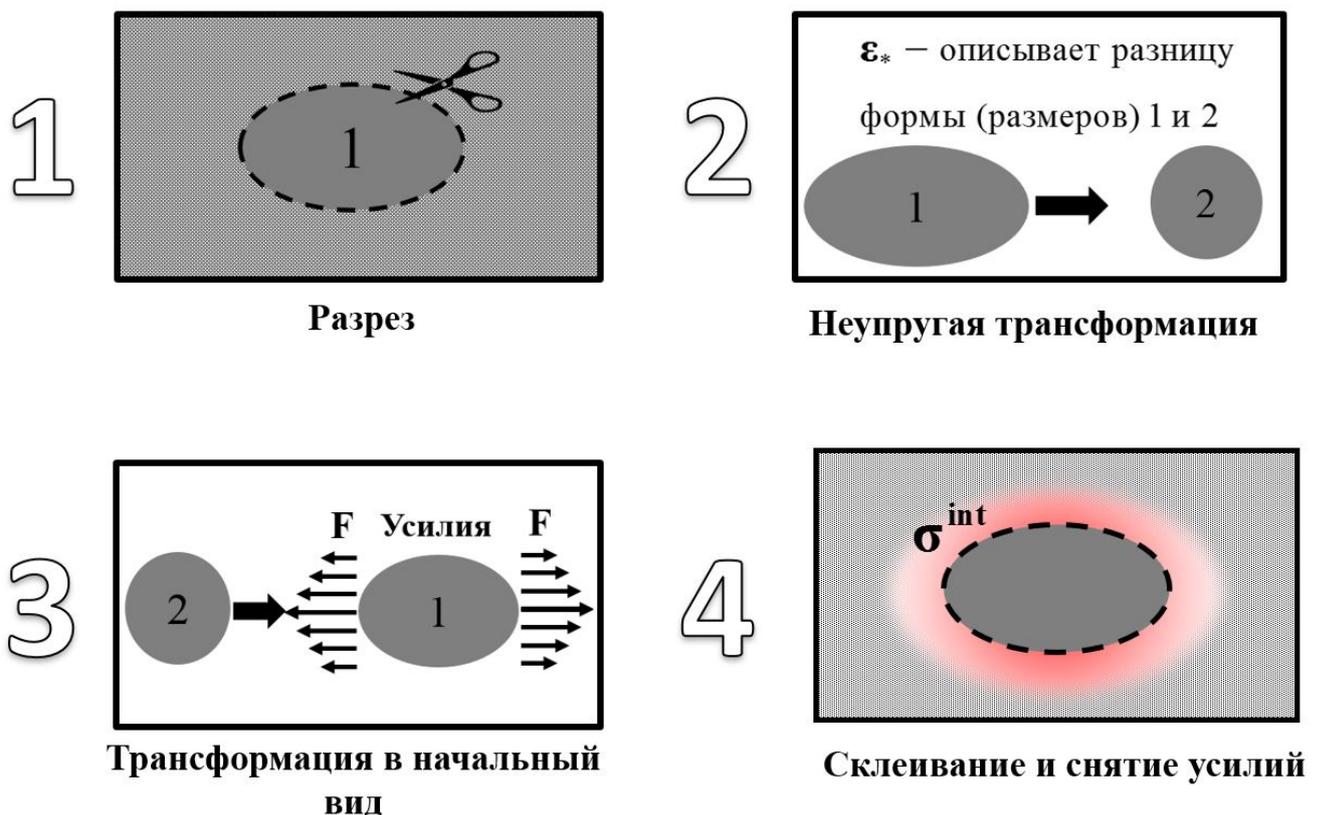


Рисунок 1.2 — Схема задания источников внутренних напряжений по Эшелби

Расчет внутренних напряжений от такого рода дефектов  $\sigma(\mathbf{r})$  основан на решении уравнения равновесия для упругого тела неподверженного каким-либо

внешним поверхностным нагрузкам или ограничениям:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = 0, \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) = 0. \end{cases} \quad (1.1)$$

В случае малых деформаций, полная деформация  $\boldsymbol{\varepsilon}_\Sigma(\mathbf{r})$  в точке сплошной среды рассматривается как сумма упругой деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}_{el}(\mathbf{r})$  и собственной деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}_*(\mathbf{r})$ :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\Sigma(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{el}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\varepsilon}_*(\mathbf{r}). \quad (1.2)$$

Получившиеся тензорное поле  $\boldsymbol{\varepsilon}_\Sigma(\mathbf{r})$  должно удовлетворять уравнениям совместности и может быть представлено как симметричная часть градиента векторного поля полных смещений  $\mathbf{u}_\Sigma(\mathbf{r})$ :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\Sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\nabla \otimes \mathbf{u}_\Sigma(\mathbf{r}) + \nabla \otimes \mathbf{u}_\Sigma(\mathbf{r})^T). \quad (1.3)$$

При этом упругая часть тензора деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}_{el}(\mathbf{r})$  связана с напряжением  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})$  законом Гука:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = \mathbf{C}(\mathbf{r}) : \boldsymbol{\varepsilon}_{el}(\mathbf{r}) = \mathbf{C}(\mathbf{r}) : (\boldsymbol{\varepsilon}_\Sigma(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})), \quad (1.4)$$

где  $\mathbf{C}(\mathbf{r})$  – тензор модулей упругости,  $:$  – двойное скалярное умножение в пространстве тензоров второго ранга.

Далее подставляя уравнения (1.2) в (1.4) и (1.4) в (1.1), получаем уравнение равновесия в смещениях:

$$\begin{cases} \nabla \cdot [\mathbf{C}(\mathbf{r}) : \nabla \otimes \mathbf{u}_\Sigma(\mathbf{r})] = \nabla \cdot [\mathbf{C}(\mathbf{r}) : \boldsymbol{\varepsilon}_*(\mathbf{r})], \\ [\mathbf{C}(\mathbf{r}) : \nabla \otimes \mathbf{u}_\Sigma(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) = [\mathbf{C}(\mathbf{r}) : \boldsymbol{\varepsilon}_*(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}). \end{cases} \quad (1.5)$$

Видно, что вклад правой части первого выражения в уравнения равновесия (1.5) аналогичен вкладу объемной силы  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot [\mathbf{C}(\mathbf{r}) : \boldsymbol{\varepsilon}_*(\mathbf{r})]$ . Точно так же правая часть второго выражения может восприниматься как внешняя поверхностная сила  $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = [\mathbf{C}(\mathbf{r}) : \boldsymbol{\varepsilon}_*(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r})$ . Таким образом, можно сказать, что поле упругих перемещений, вызванное в свободном теле собственной деформацией  $\boldsymbol{\varepsilon}_*(\mathbf{r})$ , эквивалентно полю, вызванному объемной и поверхностной силами. Для бесконечно протяженных тел граничные условия заменяются условием  $\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \infty} \mathbf{u}_\Sigma(\mathbf{r}) = 0$ . Если на упругое тело действует некоторая сила или оно закреплено, то суммарное упругое поле в такой среде может быть построено как

суперпозиции собственных напряжений для свободного тела и решения соответствующей краевой задачи для тела без дефектов. Способы вычисления полей упругих смещений, деформаций и напряжений для заданных собственных деформаций подробно излагаются в работе [37].

### 1.3 Основные соотношения теории пластической деформации с источниками внутренних напряжений

Особо важный случай применения теории собственных деформаций связан с теорией дислокаций и дисклинаций. Большинство внутренних источников напряжений, которые представляют физический интерес, можно получить через дислокации Вольтерры [32] (рис. 1.3), которые есть частный случай дислокаций более общего типа – дислокаций Сомилианы [33]. Для построения сингулярных дислокаций в упругом цилиндрическом теле вдоль поверхности  $S$  проводится разрез. Далее каждой паре соседних точек, лежащих на противоположных краях разреза, сообщается относительное смещение, при этом там, где нужно материал изымается или наоборот добавляется. В случае если вектор смещения вдоль поверхности  $S$  постоянный либо линейно увеличивается вдоль какой-то из осей (поворот), то получается дислокация Вольтерры. В случае если вектор смещения распределен по поверхности более сложным образом, то получается дислокация Сомилианы. Как правило, дислокацию Сомилианы удобно представлять как распределение некоторой плотности дислокаций Вольтерры. В свою очередь дислокации Вольтерры подразделяются на два основных типа. Первый тип – трансляционные дислокации Вольтерры, получающиеся путем относительного смещения недеформированных берегов разреза на постоянный вектор  $\mathbf{b}$ . Вторым тип – поворотные дислокации Вольтерры, получающиеся взаимным поворотом берегов разреза на вектор поворота  $\mathbf{w}$ . Согласно современной терминологии, трансляционные дислокации Вольтерры в случае если  $\mathbf{b} \parallel \boldsymbol{\xi}$  принято называть винтовыми дислокациями, а в случае  $\mathbf{b} \perp \boldsymbol{\xi}$  краевыми дислокациями. Поворотные дислокации Вольтерры в случае если  $\mathbf{w} \perp \boldsymbol{\xi}$  называют дисклинациями кручения, а в случае  $\mathbf{w} \parallel \boldsymbol{\xi}$  клиновыми дисклинациями.

Особый интерес к дислокациям возник в 40-е годы прошлого столетия, так как было установлено что они являются самостоятельными дефектами кристаллической решетки и определяют пластические свойства кристаллических тел [43–46]. Интерес к дисклинациям проявился гораздо позже, что было свя-

зано с вопросом о возможности их существования в кристаллических средах. Однако в дальнейшем было установлено, что подобного рода дефекты возникают в ходе пластической деформации в поликристаллических металлах и в значительной степени влияют на процессы структурообразования и разрушения в них [47–49].

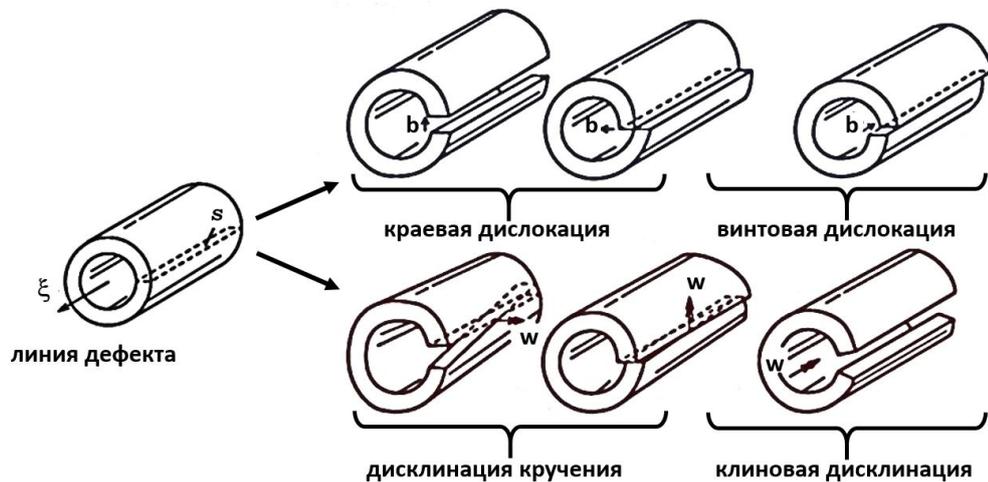


Рисунок 1.3 — Схематичное представление дислокаций Вольтерры

Рассмотрим движение сплошной среды, подверженной пластической деформации. Пусть дано материальное тело, которое в недеформируемом состоянии отождествляется с некоторой областью пространства  $\Omega_0$  в  $\mathbb{R}^3$ , которую часто называют отсчетной конфигурацией тела. Со временем тело деформируется под действием сил, и в момент времени  $t$  занимает новую область  $\Omega_t$ , которую называют актуальной конфигурацией тела (рис. 1.4). Описание процесса деформирования может быть проведено путем введения вектор-функции  $\mathbf{r}(\mathbf{x}, t)$  (или функции  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  – вектор-функция смещений) положения точек материальной среды, которую далее согласно [50] будем называть трансформацией:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \quad (1.6)$$

где  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор точки материальной среды в момент времени  $t$ ,  $\mathbf{x}$  – радиус-вектор той же точки в отсчетной конфигурации (является индексом точки). При этом для адекватного описания процесса деформирования материального тела от функции  $\mathbf{r}(\mathbf{x}, t)$  следует потребовать, чтобы она являлась диффеоморфизмом (или кусочно-гладким диффеоморфизмом). Для локального описания процесса

деформирования необходимо ввести градиент трансформации  $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ :

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \nabla \otimes \mathbf{r}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{I} + \nabla \otimes \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \Rightarrow d\mathbf{r} = d\mathbf{x} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}, t), \quad (1.7)$$

где градиент берется по переменной  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{I}$  – единичный тензор второго ранга (тождественный оператор).

При исследовании конечных упругопластических деформаций материалов широкое распространение получило предположение о мультипликативном разложении тензора градиента трансформаций (рис. 1.4, б) на упругую  $\mathbf{F}_{el}$  и пластическую  $\mathbf{F}_{pl}$  составляющие [51–53]:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{el} \cdot \mathbf{F}_{pl} = (\mathbf{I} + \nabla \otimes \mathbf{u}_{el}(\mathbf{x}, t)) \cdot (\mathbf{I} + \nabla \otimes \mathbf{u}_{pl}(\mathbf{x}, t)). \quad (1.8)$$

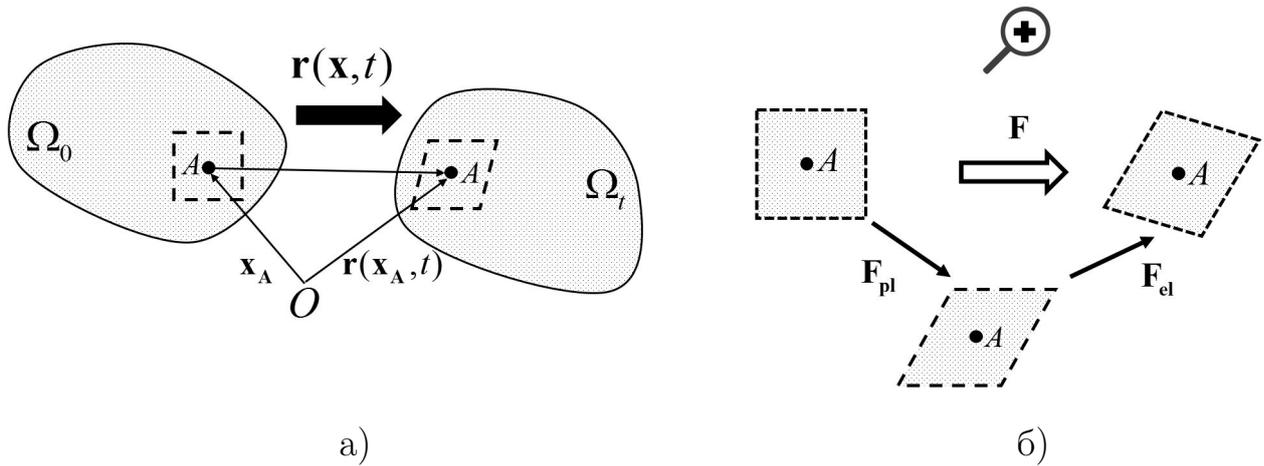


Рисунок 1.4 — Схематичное представление а) полной трансформации б) разложения градиента трансформации на упругую и пластическую составляющие

Следует отметить, что пластическая трансформация не меняет кристаллическую структуру металла, в то время как упругая деформация приводит к искривлению и поворотам кристаллической решетки. Предположение о мультипликативном разложении  $\mathbf{F}$  постулирует тот факт, что в окрестности каждой точки материальной среды существует локальная упруго-ненапряженная промежуточная конфигурация, определяемая градиентом пластической деформации  $\mathbf{F}_{pl}$  и получаемая упругой разгрузкой из полностью деформированного состояния:

$$\mathbf{F}_{pl} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}_{el}^{-1}. \quad (1.9)$$

Несмотря на то, что  $\mathbf{F}_{pl}$  и  $\mathbf{F}_{el}$  называются градиентами упругой и пластической

трансформаций, данные тензорные поля не обязательно должны быть интегрируемыми, то есть не обязательно должны быть истинными градиентами векторных полей, взятых относительно любых пространственных или материальных координат.

Физика пластичности кристаллов устанавливает, что пластическая деформация осуществляется путем консервативного движения решеточных дислокаций по кристаллографическим плоскостям скольжения. При этом решеточные дислокации, по своей сути являются заторможенными локализованными пластическими сдвигами, которые индуцируют внутренние напряжения эквивалентные трансляционным дислокациям Вольтерры. При этом движение дислокаций приводит к пластическому сдвигу  $\gamma = \rho\lambda$  в плоскости скольжения, по которой они двигались, где  $\rho$  – средняя плотность подвижных решеточных дислокаций, принадлежащих данной плоскости скольжения,  $\lambda$  – средний пробег решеточных дислокаций. Плоскости скольжения характеризуются единичным вектором нормали  $\mathbf{n}$  и единичным вектором в направлении скольжения  $\boldsymbol{\tau}$ . Найдем градиент пластической трансформации для некоторого малого объема, который за время  $\delta t$  подвергся  $k$  последовательным однородным пластическим сдвигам  $\delta\gamma_j = \dot{\gamma}_j\delta t$ : ( $\dot{\gamma}_j$  – скорость  $j$  пластического сдвига) по соответствующим плоскостям скольжения  $(\mathbf{n}_j, \boldsymbol{\tau}_j)$ . Градиент пластической трансформации для данного случая выражается в виде мультипликативной комбинации:

$$\mathbf{F}_{\text{pl}} = \prod_{j=1}^k (\mathbf{I} + \nabla \otimes \mathbf{u}_{\text{pl}}(\mathbf{x}, t))_j = \prod_{j=1}^k (\mathbf{I} + \delta\gamma_j \mathbf{n}_j \otimes \boldsymbol{\tau}_j). \quad (1.10)$$

Если приращение времени  $\delta t$  достаточно мало, величины  $\delta\gamma_j$ ,  $\nabla \otimes \mathbf{u}_{\text{pl}}(\mathbf{x}, t)_j$ ,  $\nabla \otimes \mathbf{u}_{\text{el}}(\mathbf{x}, t)_j$  так же будут малы, вследствие чего выражения определяющие величины  $\mathbf{F}$  и  $\mathbf{F}_{\text{pl}}$  можно подвергнуть процедуре линеаризации и перейти к «малым трансформациям»:

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \sum_{j=1}^k \nabla \otimes \mathbf{u}_{\text{pl}}(\mathbf{x}, t)_j + \sum_{j=1}^k \nabla \otimes \mathbf{u}_{\text{el}}(\mathbf{x}, t)_j, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{F}_{\text{pl}} = \mathbf{I} + \sum_{j=1}^k \delta\gamma_j \mathbf{n}_j \otimes \boldsymbol{\tau}_j. \quad (1.12)$$

Величину градиента поля смещений в механике сплошной среды принято называть тензором дисторсии  $\boldsymbol{\beta}$ , в результате  $\boldsymbol{\beta}_{pl} = \nabla \otimes \mathbf{u}_{pl}(\mathbf{x}, t)$  и  $\boldsymbol{\beta}_{el} = \nabla \otimes \mathbf{u}_{el}(\mathbf{x}, t)$ . Симметричная и антисимметричная части тензора дисторсии  $\boldsymbol{\beta}$  определяют тензор малых деформаций  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и тензор малых поворотов  $\boldsymbol{\omega}$ .

Когда тело испытывает произвольную пластическую дисторсию  $\boldsymbol{\beta}_{pl}$ , последняя не удовлетворяет условиям совместности, в результате чего возникают внутренние источники напряжений, которые порождают  $\boldsymbol{\beta}_{el}$ . Причем полная дисторсия будет уже совместной  $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_{pl} + \boldsymbol{\beta}_{el}$ . В случае известной пластической дисторсии  $\boldsymbol{\beta}_{pl}$  можно определить распределение континуальной плотности дислокаций, которая характеризуется тензором Ная  $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \delta t)$  [54]:

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \delta t) = -\nabla \times \boldsymbol{\beta}_{pl}(\mathbf{x}, \delta t). \quad (1.13)$$

В отличие от часто используемой в экспериментальных исследованиях величины плотности дислокаций, которая имеет размерность  $1/l^2$  и характеризует удельную длину дислокационных линий, компоненты тензора  $\boldsymbol{\alpha}$  характеризуют суммарный вектор Бюргерса дислокаций, пересекающих элемент произвольно ориентированной бесконечно малой поверхности:

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^3 \boldsymbol{\xi}_i \otimes \boldsymbol{\rho}_i(\mathbf{x}), \quad (1.14)$$

где  $\boldsymbol{\rho}_i(\mathbf{x})$  – плотность вектора Бюргерса дислокаций в точке  $\mathbf{x}$ , линии которых направлены вдоль вектора  $\boldsymbol{\xi}_i$ . Зная  $\boldsymbol{\alpha}$  можно рассчитать упругие напряжения и упругие деформации.

Вместо тензора Ная в механике сплошных сред часто используют связанный с ним тензор несовместности  $\boldsymbol{\eta}$  [35], определяемый как:

$$\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, \delta t) = -\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}(\mathbf{x}, \delta t))^T. \quad (1.15)$$

В этом случае задача нахождения распределений упругих деформации и внутренних напряжений сводится к решению уравнения (1.16) совместно с уравнениями равновесия и законом связи упругих деформаций и напряжений:

$$\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\varepsilon}_{el}(\mathbf{x}, \delta t))^T = \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, \delta t). \quad (1.16)$$

Решение динамической задачи теории пластичности сводится к тому, что определяющее соотношение должно учитывать внутренние напряжения в каждый момент времени, которые могут быть найдены путем решения соответствующей статической задачи континуальной теории дефектов (1.16).

#### 1.4 Дефекты, возникающие на границах зерен в ходе пластической деформации поликристаллических твердых тел

В силу того, что ориентировки плоскостей скольжения в разных зернах поликристалла различны, силы, действующие на дислокации со стороны внешнего напряжения, так же отличаются. Это приводит к тому, что потоки решеточных дислокаций на границы сопряженных зерен будут несогласованны, что приведет к накоплению дислокаций ориентационного несоответствия и формированию скачка пластической дисторсии  $[\boldsymbol{\beta}_{pl}] = \boldsymbol{\beta}_{pl}^{(1)} - \boldsymbol{\beta}_{pl}^{(2)}$  (здесь и далее по тексту у всех полей для краткости будем опускать аргументы  $(\mathbf{x}, \delta t)$ ). При этом поверхностная плотность дислокаций на границе характеризуется аналогом тензора Ная, тензором поверхностной плотности  $\mathbf{V}$ . Взаимосвязь скачка пластической дисторсии на границе сопряженных зерен с нормалью  $\mathbf{N}$  (внешняя по отношению к первому зерну) и тензором плотности вектора Бюргера дислокаций ориентационного несоответствия на этой границе  $\mathbf{V}$  дается формулой Баллоу-Билби [55, 56]:

$$\mathbf{V} = -\mathbf{N} \times [\boldsymbol{\beta}_{pl}]. \quad (1.17)$$

Зная тензор плотности вектора Бюргера для границы с нормалью  $\mathbf{N}$ , можно определить ее наведенную разориентировку  $\boldsymbol{\theta}$  и тензор рассогласования  $\mathbf{S}$ , который соответствует разности пластических деформаций пограничных областей, спроектированной на плоскость границы и следовательно характеризует относительную деформацию двух ее берегов:

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{N} - \frac{1}{2}(\mathbf{I}:\mathbf{V})\mathbf{N}, \quad \mathbf{S} = (\mathbf{V} \times \mathbf{N})^s. \quad (1.18)$$

Можно выделить другую классификацию дислокаций ориентационного несоответствия, возникающих на границе зерна, которая важна для приложений теории пластической деформации. Данная классификация связана с разложением скачка тензора пластической дисторсии  $[\boldsymbol{\beta}_{pl}]$  на симметричную часть  $[\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}]$ , характеризующую скачок пластической деформации на границе и антисиммет-

ричную часть  $[\boldsymbol{\omega}_{pl}]$ , которая характеризует скачок разворотов на этой границе. В результате выделяются следующие составляющие тензора  $\mathbf{V}$ :  $\mathbf{V}_{[\boldsymbol{\varepsilon}]}$  – дислокации ориентационного несоответствия, связанные со скачком пластической деформации и  $\mathbf{V}_{[\boldsymbol{\omega}]}$  – дислокации ориентационного несоответствия, связанные со скачком пластического поворота на границе зерна с нормалью  $\mathbf{N}$ :

$$\mathbf{V}_{[\boldsymbol{\varepsilon}]} = -\mathbf{N} \times [\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}], \quad \mathbf{V}_{[\boldsymbol{\omega}]} = -\mathbf{N} \times [\boldsymbol{\omega}_{pl}]. \quad (1.19)$$

Аналогично можно выделить части для  $\boldsymbol{\theta}$  и  $\mathbf{S}$ :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}_{[\boldsymbol{\varepsilon}]} &= \mathbf{N} \times [\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}] \cdot \mathbf{N}, \quad \mathbf{S}_{[\boldsymbol{\varepsilon}]} = -\mathbf{N} \times [\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}] \times \mathbf{N}, \\ \boldsymbol{\theta}_{[\boldsymbol{\omega}]} &= \frac{1}{2} (\mathbf{E}:[\boldsymbol{\omega}_{pl}]), \quad \mathbf{S}_{[\boldsymbol{\omega}]} = 0. \end{aligned} \quad (1.20)$$

где  $\mathbf{E}$  – тензор Леви-Чевиты третьего ранга.

При рассмотрении внутренних источников напряжений образующихся на границах зерен в ходе пластической деформации помимо чисто дислокационной дефектной структуры границ, полезным оказалось рассмотрение эквивалентной дислокационно-дисклинационного представления. Подробный обзор по теории дефектов дисклинационного типа дается в работах [35, 57, 58]. Интерес к использованию дисклинаций в теории пластичности поликристаллических тел резко возрос в 70-х годах прошлого столетия, благодаря работам Лихачева, Рыбина и Владимирова с сотрудниками, посвященным эволюции структуры при больших пластических деформациях. Оказалось, что дисклинации играют важную роль в процессах структурообразования и фрагментации. В работах было показано, что некоторые составляющие дислокационной плотности на границе зерна удобно представлять в виде дефектов ротационного типа – стыковых дисклинаций [59–61]. Согласно (1.20), наведенная в ходе деформации разориентировка определяется не только скачком поворотов  $[\boldsymbol{\omega}_{pl}]$ , но и скачком пластических деформаций  $[\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}]$  сопрягающихся кристаллов. Составляющая разориентировки  $\boldsymbol{\theta}_{[\boldsymbol{\omega}]}$  определяет, однородный поворот зерна как целого. В то же время вклад в разориентировку за счет  $[\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}]$ , как видно из (1.20), зависит от ориентации плоскости границы, что приводит к тому, что в стыке кристаллов возникает отличная от нуля невязка разориентировок, другими словами,

образуется стыковая дисклинация [62] с вектором Франка  $\mathbf{w}_d$ :

$$\mathbf{w}_d = \sum_i (\boldsymbol{\theta}_{[\varepsilon]})_i. \quad (1.21)$$

### 1.5 Классификация мезодефектов, возникающих на плоских участках границ зерен и в их объеме в 2D и 3D постановках

Подробная классификация типичных конфигураций мезодефектов, которые образуются на межфазных границах и границах зерен в результате протекания пластической деформации в поликристаллическом твердых телах, была проведена в работах [63,64] (под мезодефектом здесь и далее понимается упорядоченное распределение дислокаций). Показано, что данные мезодефекты образуют двумерную совокупность дислокаций Сомилианы (плоских источников напряжений) и дисклинационных диполей. Ниже приведена модификации данной классификации и введены обозначения удобные с точки зрения моделирования данных мезодефектов при численных расчетах.

**2D-модель.** Рассмотрим 2D случай накопления дислокационной плотности на малом участке границы зерна, в ходе пластического деформирования поликристаллического материала. Так как участок достаточно мал, то можно считать, что он плоский и накопившаяся на нем дислокационная плотность однородна. В двухмерном приближении дислокации представляются как бесконечные линии, вытянутые вдоль одной из осей, и имеют только краевую компоненту вектора Бюргерса (винтовые компоненты не учитываются так как рассматривается случай плоской деформации). Каждая дислокация характеризуется вектором направления дислокации  $\boldsymbol{\xi}$  (перпендикулярен плоскости рисунка и одинаков для все рассматриваемых дислокаций), вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ , и своим радиус-вектором  $\mathbf{x}$ . Проведем классификацию мезодефектов, возникающих на малых участках границы с точки зрения задания скачка тензора пластической дисторсии  $[\boldsymbol{\beta}_{pl}]$ , который в случае 2D приближения имеет вид:

$$[\boldsymbol{\beta}_{pl}] = [\beta_{11}](\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) + [\beta_{12}]\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + [\beta_{21}]\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1. \quad (1.22)$$

Теперь с учетом того, что нормаль к границе зерна имеет вид:

$$\mathbf{N} = N_1\mathbf{e}_1 + N_2\mathbf{e}_2,$$

и пользуясь выражением (1.17) для расчета тензора плотности вектора Бюргера  $\mathbf{V}$  наведенных пластической деформацией на границу зерна получаем:

$$\mathbf{V} = (N_2[\beta_{11}] - N_1[\beta_{21}])\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1 + (N_1[\beta_{11}] + N_2[\beta_{12}])\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2. \quad (1.23)$$

Далее согласно (1.19), составляющие тензора Ная  $\mathbf{V}_{[\varepsilon]}$ ,  $\mathbf{V}_{[\omega]}$  выражаются как:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{[\varepsilon]} &= (N_2[\varepsilon_{11}] - \frac{1}{2}N_1[\varepsilon_{12}])\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1 + (N_1[\varepsilon_{11}] + \frac{1}{2}N_2[\varepsilon_{12}])\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2, \\ \mathbf{V}_{[\omega]} &= [\omega_{12}](N_1\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1 + N_2\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2). \end{aligned} \quad (1.24)$$

В результате на малых участках границы образуются некоторые континуальные равномерно распределенные плотности дислокаций, которые в дальнейшем будем именовать планарными мезодефектами, а плотности их вектора Бюргера, согласно принятой в литературе терминологии, назовем мощностями этих мезодефектов.

Планарным сдвиговым мезодефектом назовем однородное континуальное распределение скользящих краевых дислокаций. Такой мезодефект будем характеризовать длиной прямолинейного участка границы  $2a$ , на которой он расположен и его мощностью  $\mathbf{w}_\tau$ , которая определяется как:

$$\mathbf{w}_\tau = (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{\tau}, \quad (1.25)$$

где  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{N} \times \boldsymbol{\xi}$  – единичный вектор, лежащий в плоскости рисунка и направленный вдоль участка границы (для правой тройки векторов).

Планарным нормальным мезодефектом назовем однородное континуальное распределение сидячих дислокаций. Такой мезодефект будем характеризовать длиной прямолинейного участка границы, на которой он расположен  $2a$  и его мощностью  $\mathbf{w}_\mathbf{N}$ , которая определяется как:

$$\mathbf{w}_\mathbf{N} = (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{N}) \mathbf{N}. \quad (1.26)$$

Нормальный мезодефект, с точки зрения полей упругих напряжений (смещений), эквивалентен диполю клиновых дисклинаций – линейных ротационных дефектов [58], вектор Франка каждой из которых определяется согласно сле-

дующих выражений:

$$\mathbf{w}_{\Delta}(\mathbf{r}_1) = \frac{\mathbf{w}_N \times (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad \mathbf{w}_{\Delta}(\mathbf{r}_2) = \frac{\mathbf{w}_N \times (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (1.27)$$

где  $\mathbf{w}_{\Delta}(\mathbf{r}_1)$  – вектор Франка дисклинации, находящейся в точке с радиусом вектором  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{w}_{\Delta}(\mathbf{r}_2)$  – вектор Франка дисклинации, находящейся в точке с радиусом вектором  $\mathbf{r}_2$ . Нетрудно получить и обратную связь  $\mathbf{w}_N(\mathbf{w}_{\Delta})$ . На рис. 1.5 приведены обозначения введенных планарных мезодефектов.

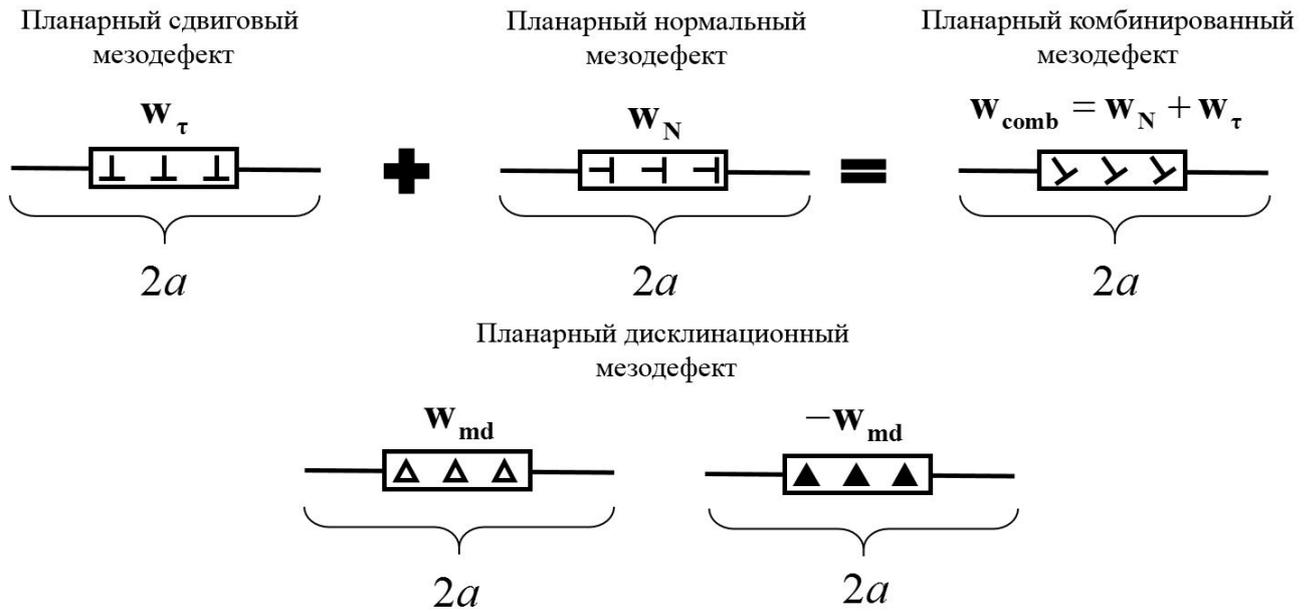


Рисунок 1.5 — Схематическое представление планарных мезодефектов, формирующихся на участках границ и в объеме зерен при пластической деформации в двумерной постановке задачи

Планарным комбинированным мезодефектом назовем совокупный мезодефект, состоящий из планарного сдвигового мезодефекта и планарного нормального мезодефекта, находящихся на одном участке границы  $2a$ . Мощность такого мезодефекта определяется как:

$$\mathbf{w}_{\text{comb}} = \mathbf{w}_{\tau} + \mathbf{w}_N. \quad (1.28)$$

Для характеристики дислокационной плотности в теле зерен используется система планарных дисклинационных мезодефектов, каждый из которых представляет однородное непрерывное распределение клиновых дисклинаций. Полигональная область материала, которая содержит однородную плотность непрерывных дислокаций, может быть представлена в виде системы планарных

дисклинационных мезодефектов, расположенных вдоль граней полигона. Плотность вектора Бюргерса этих дислокаций  $\boldsymbol{\rho}$  и мощность дисклинационного мезодефекта  $\mathbf{w}_{\text{md}}^{(i)}$ , расположенного на  $i$ -ой границе полигона с внешней нормалью  $\mathbf{N}^{(i)}$ , связаны соотношением:

$$\mathbf{w}_{\text{md}}^{(i)} = \boldsymbol{\rho} \times \mathbf{N}^{(i)}. \quad (1.29)$$

Планарным дисклинационным мезодефектом назовем однородное континуальное распределение клиновых дисклинаций. Такой мезодефект будем характеризовать длиной прямолинейного участка, на котором он расположен  $2a$  и его мощностью  $\mathbf{w}_{\text{md}}$ . На рис. 1.6 приведен простой пример представления однородно распределенной в объеме прямоугольника системы дислокаций через эквивалентную систему планарных дисклинационных мезодефектов расположенных на двух сторонах прямоугольника.

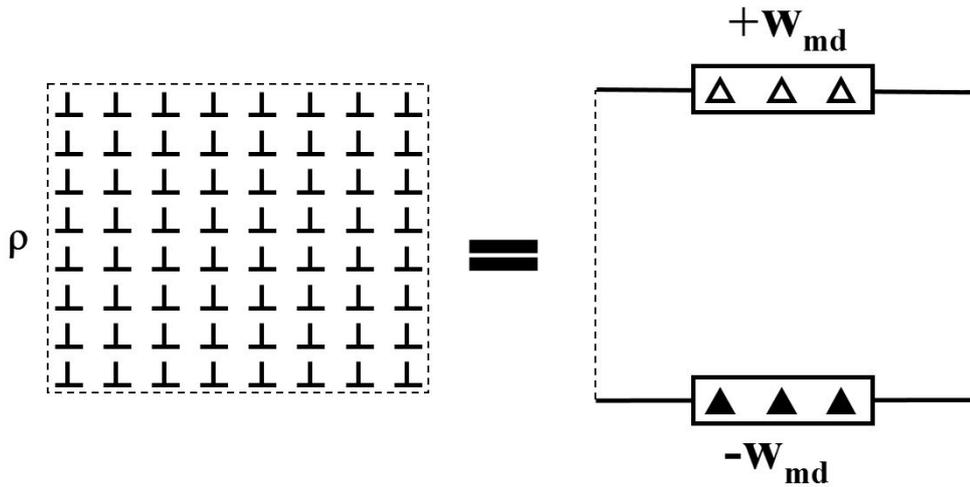


Рисунок 1.6 — Представление однородно распределенной в объеме прямоугольника системы дислокаций через эквивалентную систему планарных дисклинационных мезодефектов

В результате любую систему дислокаций однородно распределенных по некоторой полигональной области можно представить как совокупность планарных дисклинационных дефектов.

**3D-модель.** Рассмотрим прямоугольный сегмент с нормалью  $\mathbf{N}$  и двумя тангенциальными векторами  $\boldsymbol{\tau}$  и  $\boldsymbol{\xi}$ , такими что  $(\boldsymbol{\tau}, \mathbf{N}, \boldsymbol{\xi})$  образуют правую трой-

ку векторов. Пусть сегмент содержит некоторую однородную континуальную плотность дислокаций ориентационного несоответствия, накопленных в ходе пластической деформации, и характеризуется тензором плотности вектора Бюргера  $\mathbf{B}$ . В общем случае тензор  $\mathbf{B}$  содержит 9 ненулевых компонент, но при переходе в базис, связанный с сегментом (выбираемый базис таким образом, что один из его ортов равен  $\mathbf{N}$ , два других параллельны сторонам сегмента) количество таких компонент уменьшается до 6. При этом любое однородное распределение дислокаций на нем можно представить в виде двух семейств континуально распределенных по сегменту дислокационных отрезков, ориентированных вдоль сторон сегмента и, как следствие, повернутых друг относительно друга на  $90^\circ$  (рис. 1.7).

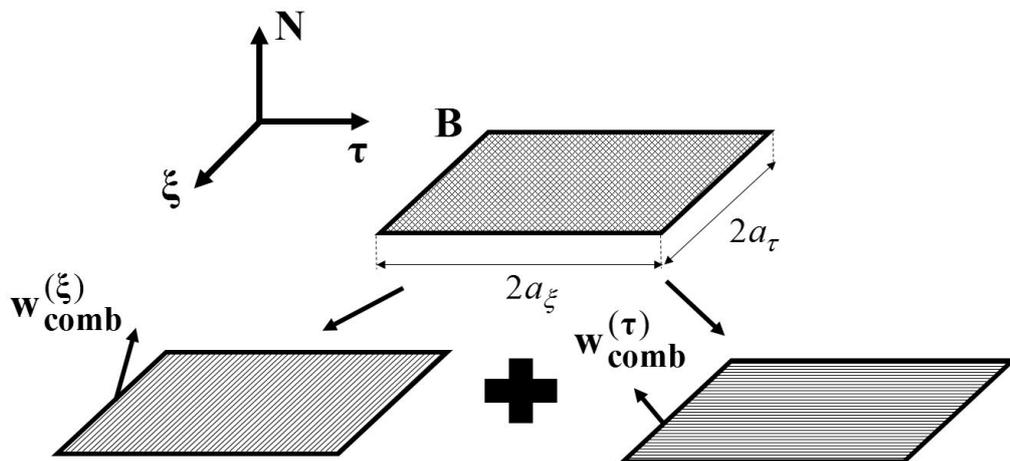


Рисунок 1.7 — Схема представления однородной дислокационной плотности на сегменте границы с помощью двух семейств дислокаций

При этом семейства отрезков, направленных вдоль  $\xi$  будет характеризоваться плотностью вектора Бюргера  $\mathbf{w}_{\text{comb}}^{(\tau)}$ , а семейство направленное вдоль  $\tau$  плотностью вектора Бюргера  $\mathbf{w}_{\text{comb}}^{(\xi)}$ . Введем следующие определения для дефектов в трехмерной постановке задачи:

Планарным сдвиговым мезодефектом назовем однородное континуальное распределение отрезков скользящих краевых дислокаций, расположенных на прямоугольном сегменте и ориентированных вдоль одной из сторон сегмента. Такой мезодефект будем характеризовать длиной дислокационных отрезков  $l$ , длиной плеча  $2a$  и плотностью вектора Бюргера этих отрезков  $\mathbf{w}_\tau$ , которую назовем его мощностью.

Планарным винтовым мезодефектом назовем однородное континуальное распределение отрезков винтовых дислокаций, расположенных на прямоугольном сегменте и ориентированных вдоль одной из сторон сегмента. Такой мезодефект будем характеризовать длиной дислокационных отрезков  $l$ , длиной плеча  $2a$  и плотностью вектора Бюргерса этих отрезков  $\mathbf{w}_\xi$ , которую назовем его мощностью.

Планарным нормальным мезодефектом назовем однородное континуальное распределение отрезков сидячих краевых дислокаций, расположенных на прямоугольном сегменте и ориентированных вдоль одной из сторон сегмента. Такой мезодефект будем характеризовать длиной дислокационных отрезков  $l$ , длиной плеча  $2a$  и плотностью вектора Бюргерса этих отрезков  $\mathbf{w}_N$ , которую назовем его мощностью.

Планарным комбинированным мезодефектом назовем однородное континуальное скопление дислокационных отрезков, расположенных на прямоугольном сегменте и ориентированных вдоль одной из сторон сегмента. Такой дефект можно представить в виде совокупности планарного сдвигового мезодефекта, планарного нормального мезодефекта и планарного винтового мезодефекта (рис. 1.8).

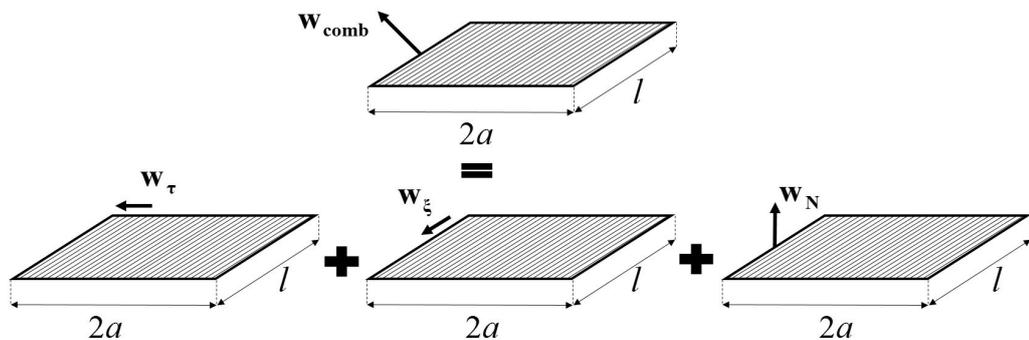


Рисунок 1.8 — Схематичные представления комбинированного мезодефекта

В результате два семейства однородно распределенных дислокационных отрезков приведенных на рис. представляются в виде двух комбинированных дефектов с мощностями  $\mathbf{w}^{(\xi)}$  и  $\mathbf{w}^{(\tau)}$  Формулы для определения мощностей дефектов приведены в таблице:

Таблица 1.1 – Выражения для мощностей мезодефектов

	Семейство ( $\xi$ )	Семейство ( $\tau$ )
Сдвиговой мезодефект	$\mathbf{w}_{\tau}^{(\xi)} = (\xi \cdot \mathbf{B} \cdot \tau)\tau$	$\mathbf{w}_{\tau}^{(\tau)} = (\tau \cdot \mathbf{B} \cdot \tau)\tau$
Нормальный мезодефект	$\mathbf{w}_{\mathbf{N}}^{(\xi)} = (\xi \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{N})\mathbf{N}$	$\mathbf{w}_{\mathbf{N}}^{(\tau)} = (\tau \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{N})\mathbf{N}$
Винтовой мезодефект	$\mathbf{w}_{\xi}^{(\xi)} = (\xi \cdot \mathbf{B} \cdot \xi)\xi$	$\mathbf{w}_{\xi}^{(\tau)} = (\tau \cdot \mathbf{B} \cdot \xi)\xi$

## 1.6 Мезодефекты сложной структуры

Будем считать, что в 2D приближении зерна имеют форму полигонов. Тогда отдельные ребра полигона будут моделировать прямолинейные участки границы зерна. Дефектное содержание такого участка будем описывать с помощью базовых планарных мезодефектов. Рассмотрим грань зерна, содержащую некоторую в общем случае неоднородную дислокационную плотность, накопленную в ходе пластической деформации. Разобьём данную грань на достаточно большое количество отрезков  $\{I_1, \dots, I_n\}$  (рис. 9, а), причем масштаб разбиения выберем таким образом, чтобы распределение дислокаций внутри каждого из отрезков было примерно однородным. Далее вычислив значение средней плотности вектора Бюргерса  $\bar{\rho}^{(k)}$  для каждого отрезка и заменив эти дислокации на соответствующие комбинированные мезодефекты с мощностью равной  $\mathbf{w}_{\text{comb}}^{(k)} = \bar{\rho}^{(k)}$ , получим эквивалентное представление дислокационной плотности в терминах мезодефектов.

Аналогичным образом поступим при рассмотрении 3D модели. При этом будем считать, что форма зерен в этом случае моделируются произвольными полиэдрами, отдельные грани которого представляют плоские участки границы зерна. Дефектное содержание такого плоского участка будем описывать с помощью совокупности планарных комбинированных мезодефектов, введенных выше. Для этого покроем данную грань набором брусов  $\{S_1, \dots, S_n\}$  (будем рассматривать покрытия без наложений за исключением множеств меры нуль) (рис. 1.9, б). Далее проводя аналогичные рассуждения, что и в 2D приближении получим представление дефектной структуры плоского участка границы зерна в терминах планарных мезодефектов.

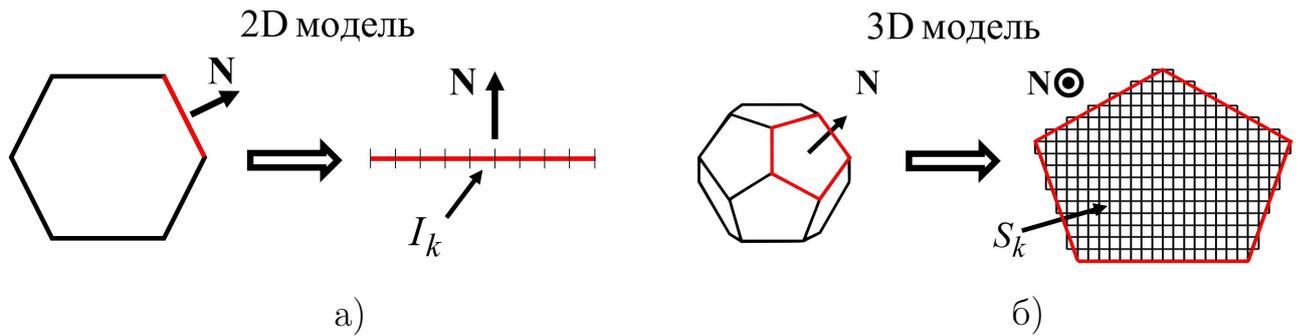


Рисунок 1.9 — Разбиение (покрытие) плоской грани зерна системой отрезков (брусков)

В общем случае количественное описание пространственного распределения дислокационной плотности, формирующейся на границах зерен в ходе пластических деформаций, требует привлечения достаточно сложных методов компьютерного моделирования, что ограничивает область их применения относительно небольшими деформациями. Однако некоторые закономерности и механизмы процессов, происходящих при больших пластических деформациях, таких как структурообразование, упрочнение, разрушение можно понять, используя упрощенные дефектную структуру плоских участков границы, например моделируя их однородными распределениями дислокаций – планарными мезодефектами, вдоль представительных участках границ зерен. Далее в главе приведены аналитические выражения для полей упругих напряжений от таких планарных мезодефектов в 2D и 3D постановках задачи.

### 1.7 Поля упругих напряжений, создаваемые планарными мезодефектами

*В данном параграфе диссертации использованы материалы статьи: Кириков С. В., Перевезенцев В. Н. К расчету внутренних напряжений от мезодефектов, накапливающихся на границах раздела при пластической деформации твердых тел // Проблемы прочности и пластичности. – 2019. – Т. 81. – № 2. – С. 212-221.*

*Kirikov S. V., Pupylin A. S., Svirina Yu. V. Analysis of local fields of elastic stress generated by rotational-shear meso defects near the junctions of grains // Problems of strength and plasticity. – 2021. – V. 83. – № 2. – P. 235-244.*

Известно, что создаваемые мезодефектами неоднородные поля внутренних напряжений существенно влияют на процессы структурообразования и реоло-

гию пластического течения поликристаллических металлов. Поэтому построение моделей механического поведения пластически деформируемых материалов: модели эволюции структуры, реологии пластического течения, разрушения, требует создания методов расчета внутренних полей напряжений от мезодефектов, накапливающихся на межзеренных и межфазных границах. Подробный обзор методов расчета внутренних полей напряжений дан в работе [65]. Для вычисления полей напряжений от зернограничных источников напряжений наиболее удобным является метод «виртуальных дислокаций» [66], где в качестве элементарных источников напряжений выступают планарные комбинированные мезодефекты. Следующий параграф посвящен расчету полей напряжений от таких элементарных источников. Поля упругих напряжений от планарных мезодефектов будем представлять в системе координат, связанной с этим мезодефектом. Такую систему координат будем называть локальной системой координат для заданного мезодефекта. Выражения для компонент тензора упругих напряжений от краевой дислокации и клиновой дисклинации приведены в работах [39, 58]. Локальные системы координат для планарных мезодефектов представлены на рис. 1.10.

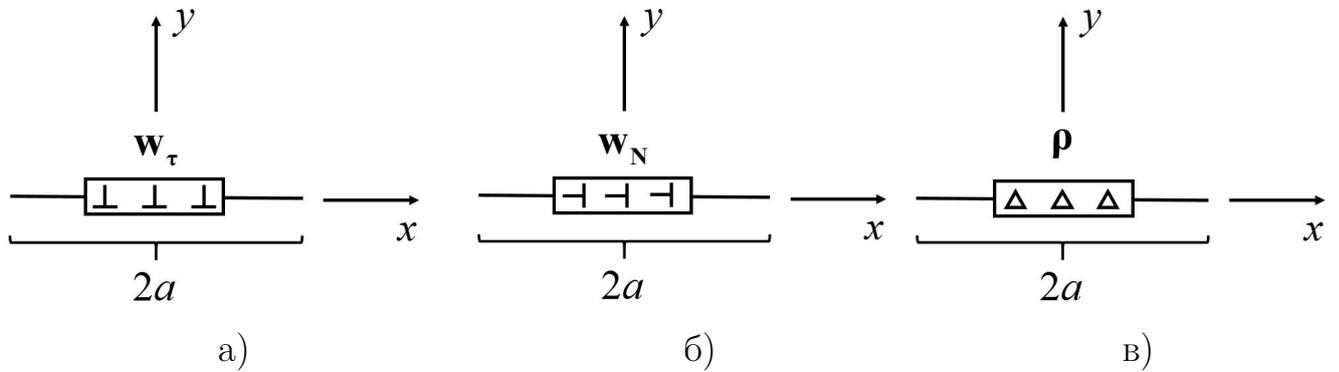


Рисунок 1.10 — Локальные системы координат для а) планарного сдвигового мезодефекта, б) планарного нормального мезодефекта, в) планарного дисклинационного мезодефекта

Интегрируя соответствующие компоненты от эквивалентной системы линейных дефектов с плотностью  $\rho(x')$  найдем поля напряжений от сдвигового, нормального и дисклинационного мезодефектов (1.31).

$$\sigma(x, y) = \int_{-a}^a \rho(x') \mathbf{G}(x - x', 0) dx', \quad (1.30)$$

где  $\mathbf{G}(x - x', 0)$  – функция напряжений от дислокации (дисклинации), расположенной в точке  $(x - x', 0)$  с единичным вектором Бюргерса (вектором Франка).

**Планарный сдвиговой мезодефект:**

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{2\pi(1-\nu)} \left[ 2 \left( \operatorname{arctg} \frac{x-a}{y} - \operatorname{arctg} \frac{x+a}{y} \right) + \frac{y(x+a)}{(x+a)^2+y^2} - \frac{y(x-a)}{(x-a)^2+y^2} \right]; \\ \sigma_{yy}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau y}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{x-a}{(x-a)^2+y^2} - \frac{x+a}{(x+a)^2+y^2} \right); \\ \sigma_{xy}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{y^2}{(x+a)^2+y^2} - \frac{y^2}{(x-a)^2+y^2} + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(x+a)^2+y^2}{(x-a)^2+y^2} \right] \right).\end{aligned}$$

**Планарный нормальный мезодефект:**

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^{(N)} &= \frac{Gw_N}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{y^2}{(x+a)^2+y^2} - \frac{y^2}{(x-a)^2+y^2} + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(x+a)^2+y^2}{(x-a)^2+y^2} \right] \right); \\ \sigma_{yy}^{(N)} &= \frac{Gw_N}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{y^2}{(x-a)^2+y^2} - \frac{y^2}{(x+a)^2+y^2} + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(x+a)^2+y^2}{(x-a)^2+y^2} \right] \right); \\ \sigma_{xy}^{(N)} &= \frac{Gw_N}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{(x-a)y}{(x-a)^2+y^2} - \frac{(x+a)y}{(x+a)^2+y^2} \right).\end{aligned}$$

**Планарный дисклинационный мезодефект:**

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^{(md)} &= \frac{Gw_{md}}{2\pi(1-\nu)} \left[ 2y \left( \operatorname{arctg} \frac{x-a}{y} - \operatorname{arctg} \frac{x+a}{y} \right) - 2a + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(x+a) \ln \left[ \frac{(x+a)^2+y^2}{R_a^2} \right] - \frac{1}{2}(x-a) \ln \left[ \frac{(x-a)^2+y^2}{R_a^2} \right] \right]; \\ \sigma_{yy}^{(md)} &= \frac{Gw_{md}}{2\pi(1-\nu)} \left[ \frac{1}{2}(x+a) \ln \left[ \frac{(x+a)^2+y^2}{R_a^2} \right] - \frac{1}{2}(x-a) \ln \left[ \frac{(x-a)^2+y^2}{R_a^2} \right] \right]; \\ \sigma_{xy}^{(md)} &= \frac{Gw_{md}}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(x-a)^2+y^2}{(x+a)^2+y^2} \right] \right).\end{aligned}\tag{1.31}$$

Аналогичные выражения компонент тензора упругих напряжений для сдвигового мезодефекта были получены в работе [67] с помощью функции напряжений Эри. Изолинии компонент полей упругих напряжений от планарных мезодефектов представлены на рис. 1.11.

В ряде задач физики пластичности необходимо знать структуру поля упругих напряжений в окрестности стыков и изломов границ зерен, содержащих ротационно-сдвиговые мезодефекты деформационного происхождения. Опреде-

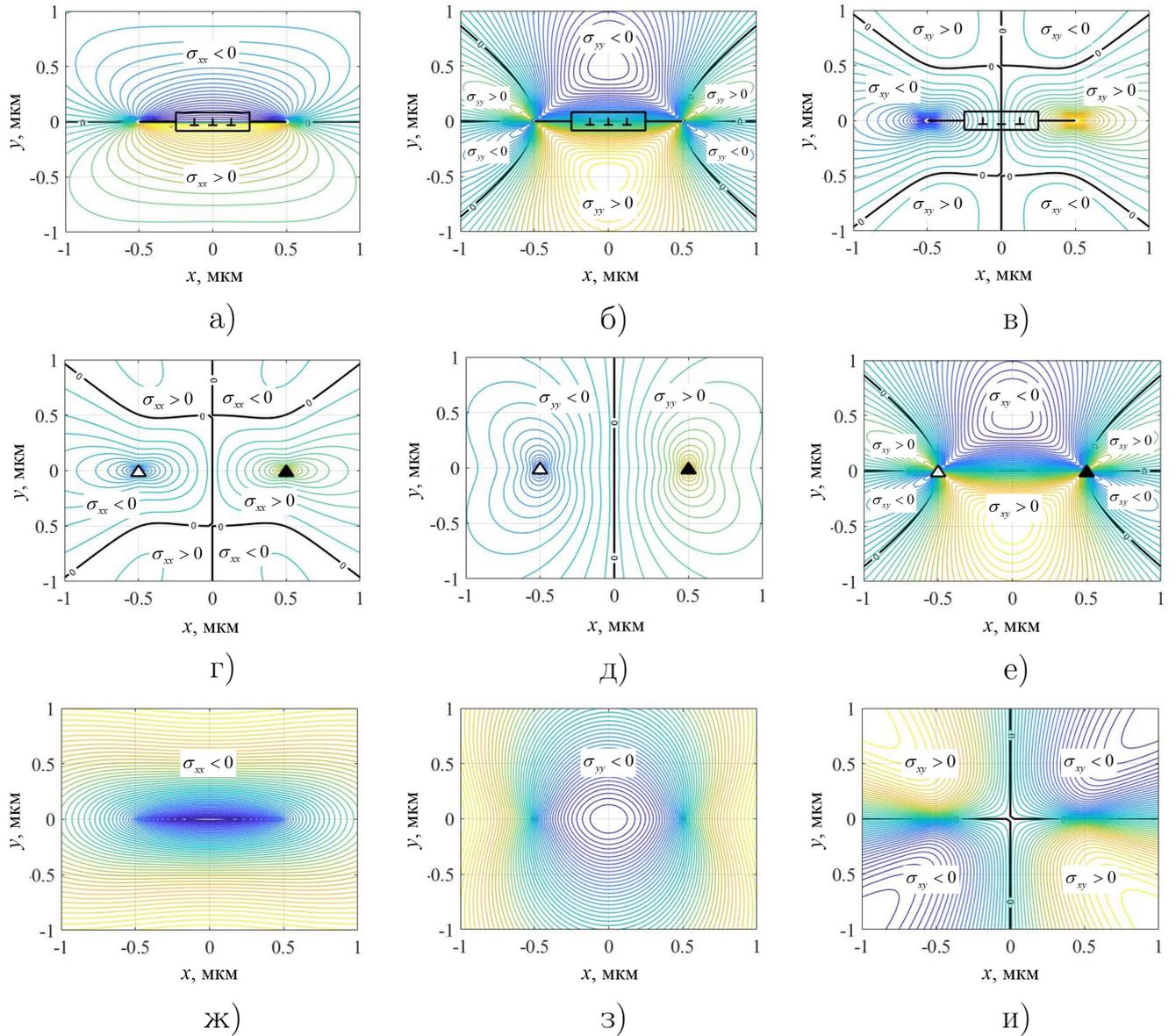


Рисунок 1.11 — Изолинии полей упругих напряжений от: планарного сдвигового мезодефекта мощности  $w_\tau = 0.01$  и длиной  $2a = 1$  мкм а)  $\sigma_{xx}^{(\tau)}$ , б)  $\sigma_{yy}^{(\tau)}$ , в)  $\sigma_{xy}^{(\tau)}$ ; нормального мезодефекта мощности  $w_N = 0.01$  и длиной  $2a = 1$  мкм г)  $\sigma_{xx}^{(N)}$ , д)  $\sigma_{yy}^{(N)}$ , е)  $\sigma_{xy}^{(N)}$ ; от планарного дисклинационного мезодефекта мощности:  $w_{md} = 0.01$  и длиной  $2a = 1$  мкм ж)  $\sigma_{xx}^{(md)}$ , з)  $\sigma_{yy}^{(md)}$ , и)  $\sigma_{xy}^{(md)}$  в локальных системах координат

лим асимптотические выражения для полей напряжений от одиночного планарного сдвигового мезодефекта и одиночного планарного нормального мезодефекта. Для расчета полей упругих напряжений выберем систему координат начало которой расположено на одном из концов планарного мезодефекта. Процедуру вывода выражений продемонстрируем на примере планарного сдвигового мезодефекта. Получение выражений для планарного нормального мезодефекта

проводится аналогично.

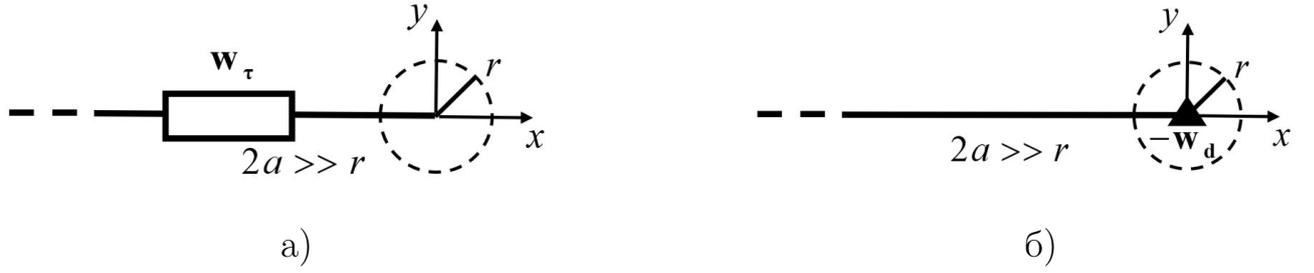


Рисунок 1.12 — Система координат для расчета локальных полей упругих напряжений вблизи одного из концов планарного мезодефекта, расположенного в начале координат от а) планарного сдвигового мезодефекта, б) планарного нормального мезодефекта

Рассмотрим планарный сдвиговый мезодефект мощности  $w_\tau$  и плечом  $2a$  и найдем выражения, описывающие поля упругих напряжений от него, локализованные вблизи одного из его концов, в области с характерным размером  $r \ll 2a$  (рис. 1.12). Используя выражения (1.31), сдвинем систему координат в точку с координатами  $(a, 0)$  и учтем, что  $r \ll 2a$ , следовательно  $x \ll 2a$  и  $y \ll 2a$ . В результате асимптотические выражения для полей напряжений от планарного сдвигового мезодефекта принимают вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{2\pi(1-\nu)} \left( \pi \operatorname{sgn}(y)(\operatorname{sgn}(x) - 1) - 2 \operatorname{arctg} \left( \frac{y}{x} \right) - \frac{yx}{x^2 + y^2} \right); \\ \sigma_{yy}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{yx}{x^2 + y^2} \right); \\ \sigma_{xy}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{2\pi(1-\nu)} \left( -\frac{y^2}{x^2 + y^2} + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{4a^2}{x^2 + y^2} \right] \right). \end{aligned} \quad (1.32)$$

Переведем данные выражения в полярную систему координат. В результате асимптотические выражения для компонент тензора упругих напряжений, создаваемых одиночным планарным сдвиговым мезодефектом и одиночным планарным нормальным мезодефектов в окрестности одного из концов этого мезодефекта в полярной системе координат, имеют вид:

**Планарный сдвиговой мезодефект:**

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{4\pi(1-\nu)} \left( 2 \cos^2 \varphi (C(\varphi) - 2\varphi) + \sin 2\varphi \left( \ln \left[ \frac{4a^2}{r^2} \right] - 1 \right) \right); \\ \sigma_{\varphi\varphi}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{4\pi(1-\nu)} \left( 2 \sin^2 \varphi (C(\varphi) - 2\varphi) - \sin 2\varphi \left( \ln \left[ \frac{4a^2}{r^2} \right] - 1 \right) \right); \\ \sigma_{r\varphi}^{(\tau)} &= \frac{Gw_\tau}{4\pi(1-\nu)} \left( 1 - \sin 2\varphi (C(\varphi) - 2\varphi) + \cos 2\varphi \left( \ln \left[ \frac{4a^2}{r^2} \right] - 1 \right) \right).\end{aligned}\quad (1.33)$$

**Планарный нормальный мезодефект:**

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}^{(N)} &= -\frac{Gw_d}{4\pi(1-\nu)} \left( 1 - \cos 2\varphi - 2 \ln \left[ \frac{r}{2a} \right] \right); \\ \sigma_{\varphi\varphi}^{(N)} &= \frac{Gw_d}{4\pi(1-\nu)} \left( 1 - \cos 2\varphi + 2 \ln \left[ \frac{r}{2a} \right] \right); \\ \sigma_{r\varphi}^{(N)} &= -\frac{Gw_d}{4\pi(1-\nu)} \sin 2\varphi.\end{aligned}$$

где  $w_d$  – проекция вектора Франка стыковой дисклинации на ось  $Oz$ .

Изолинии компонент тензора напряжений, определяемые этими выражениями приведены на рис. 1.13.

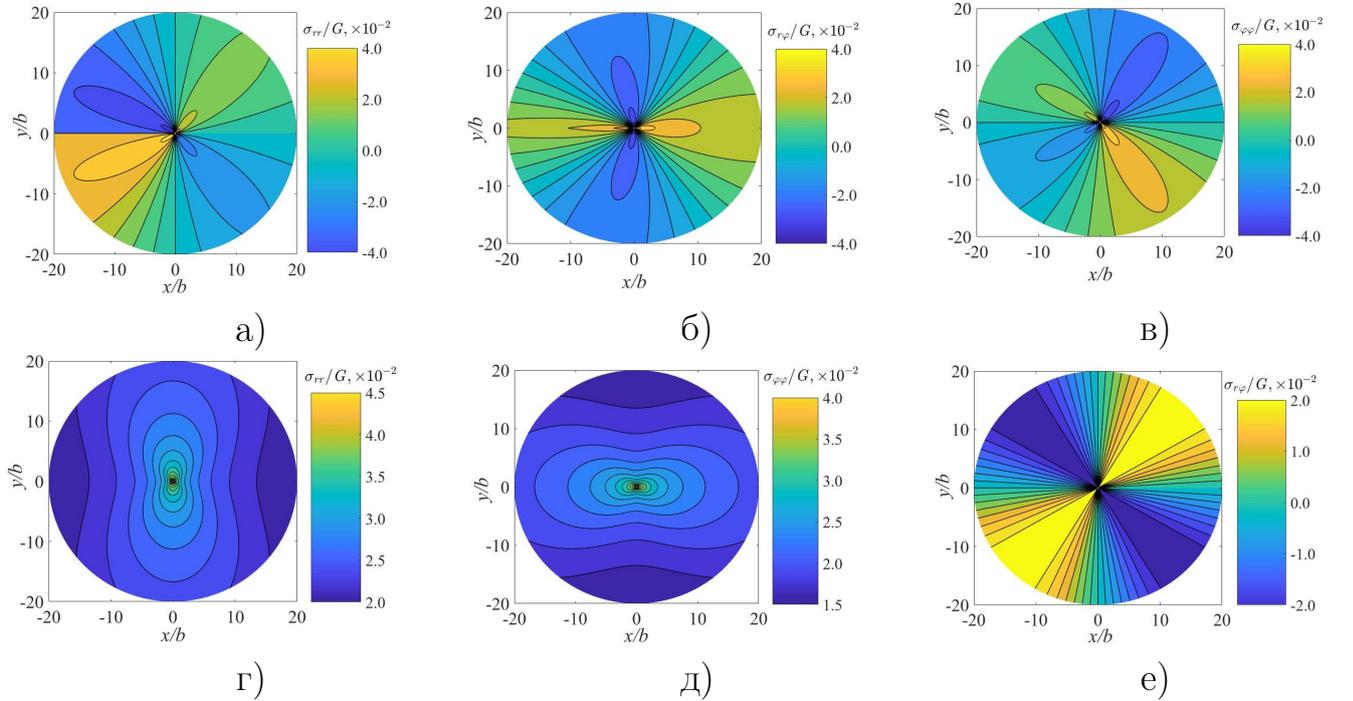


Рисунок 1.13 — Изолинии полей компонент тензора упругих напряжений в окрестности конца мезодефекта: от сдвигового мезодефекта мощности  $w_\tau = 0.02$  и длиной  $2a = 0.5$  мкм а)  $\sigma_{rr}^{(\tau)}$ , б)  $\sigma_{\varphi\varphi}^{(\tau)}$ , в)  $\sigma_{r\varphi}^{(\tau)}$ ; нормального мезодефекта мощности  $w_N = 0.02$  и длиной  $2a = 0.5$  мкм г)  $\sigma_{rr}^{(N)}$ , д)  $\sigma_{\varphi\varphi}^{(N)}$ , е)  $\sigma_{r\varphi}^{(N)}$

Из представленных эюр видно, что компоненты тензора упругих напряжений от планарного сдвигового мезодефекта вблизи стыка существенно неоднородны, однако проводя анализ полученных выражений, можно убедиться что тензор функция  $\sigma(r, \varphi)$  обладает определенной степенью симметрии – нечетностью по аргументу  $\varphi$ . Для определенного круга задач физики пластичности можно ограничиться усредненным полем вблизи стыка и в случае сдвигового мезодефекта усреднение по круговой области дает нулевое значение среднего поля напряжений. Из приведенных выражений и эюр для полей упругих напряжений от нормального мезодефекта, видно, что они отличаются от изотропного поля одиночной дисклинации. Величина вклада экранирующей дисклинации при вариации значений  $2a/r = 10^3 - 10^6$  составляет порядка 10% – 15%.

Далее найдем выражения компонент полей напряжений от планарного комбинированного мезодефекта в локальной системе координат в трехмерной постановке задачи. Система координат выбирается таким образом, чтобы ось  $Oz$  была направлена вдоль линии отрезков,  $Oy$  перпендикулярна сегменту, а  $Ox$  направлена так чтобы получилась правосторонняя система координат. Начало системы координат расположим в центре рассматриваемого мезодефекта, рис. 1.14.

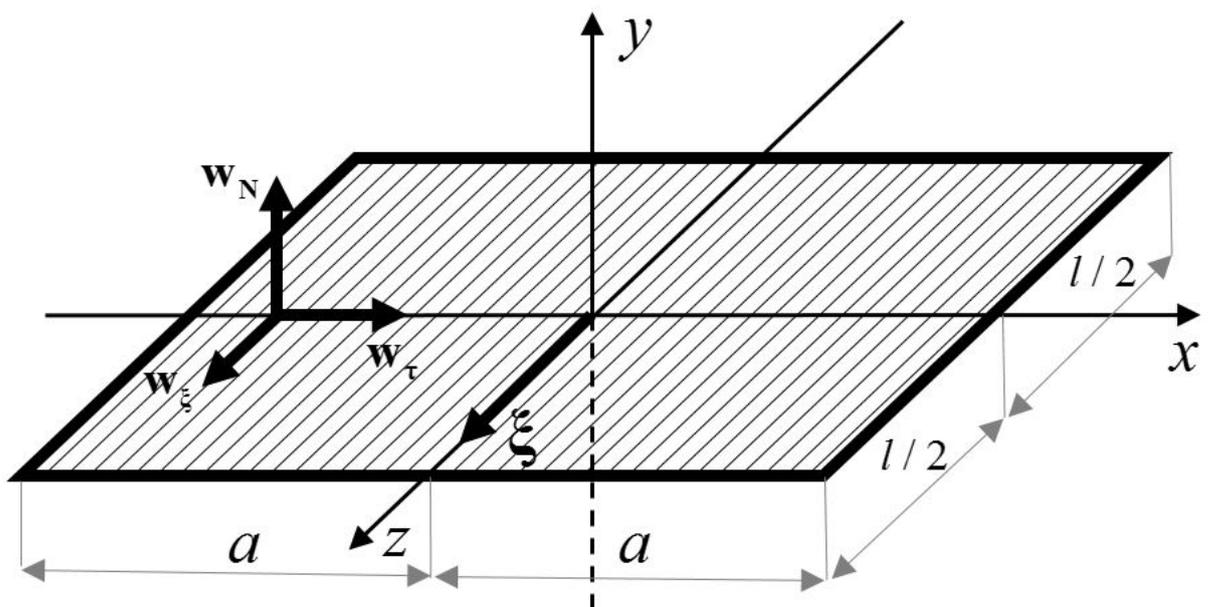


Рисунок 1.14 — Локальная системы координат для комбинированного планарного мезодефекта

В выражения для полей упругих напряжений от комбинированного мезодефекта в качестве параметров будут входить мощности мезодефектов  $\mathbf{W}_{\text{comb}}$ , длина дислокационных отрезков  $l$  и плечо сегмента  $a$ , по которому распределены эти отрезки. Компоненты поля упругих напряжений от планарных мезодефектов найдем, интегрируя соответствующие компоненты от эквивалентной системы равномерно распределенных дислокационных отрезков [39]. Результаты расчета представлены в выражении (1.34).

В качестве примера проведем расчет полей упругих напряжений от однородной плотности дислокационных отрезков, накопившихся на прямоугольном сегменте со сторонами  $a = 2.5$  мкм,  $l = 4.0$  мкм. Зададимся следующими параметрами сегмента: количество распределенных дислокационных отрезков  $n = 75$ , угол между линией дислокационного отрезка и стороной сегмента  $\alpha = 30^\circ$ , вектор Бюргерса дислокационных отрезков  $b = (2, 3, 1) \cdot 10^{-4}$  мкм,  $G = 45000$  МПа,  $\nu = 0.3$  (рис. 1.15, а). На рис. 1.15, б представлены изолинии компоненты  $\sigma_{yz}$  поля напряжений от сегмента в сечении  $z = 3$  мкм.

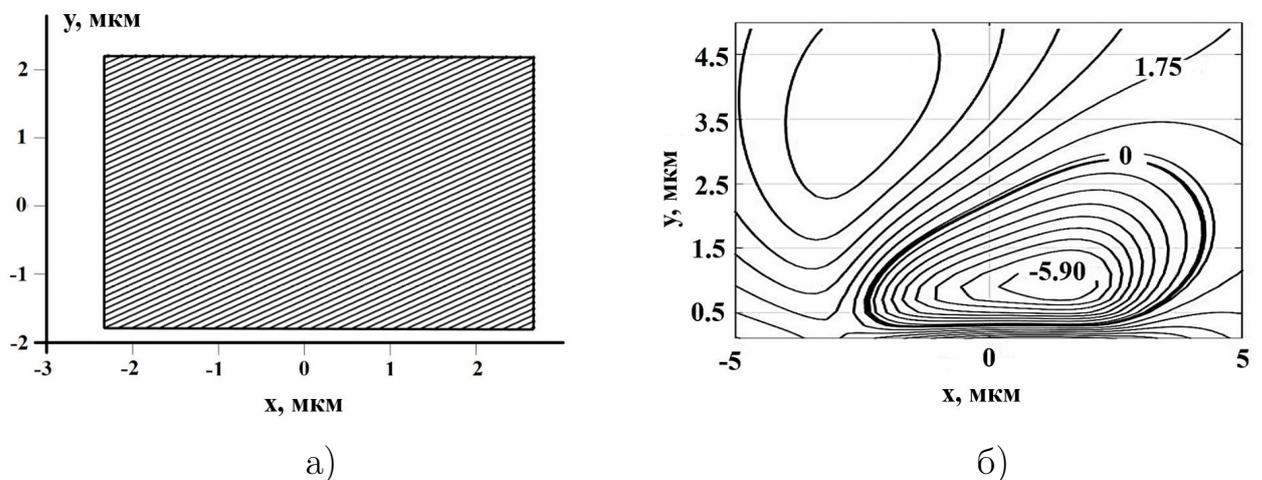


Рисунок 1.15 — а) Схематичное представление дислокационных отрезков, распределенных по сегменту, б) изолинии компоненты  $\sigma_{yz}$  полей упругих напряжений от данного сегмента

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_0} = \frac{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{\sigma_0}(z_k = \frac{l}{2}) - \frac{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{\sigma_0}(z_k = -\frac{l}{2}), \quad \sigma_0 = G/4\pi(1 - \nu) :$$

**Планарный сдвиговой мезодефект:**

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\sigma}_{xx}^{(\tau)}}{\sigma_0} &= w_\tau \left( 2 \operatorname{arctg} \left[ \frac{(x-a)\lambda}{yR_2} \right] - 2 \operatorname{arctg} \left[ \frac{(x+a)\lambda}{yR_1} \right] + \frac{y\lambda(x+a)}{\rho_1^2 R_1} - \frac{y\lambda(x-a)}{\rho_2^2 R_2} \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{yy}^{(\tau)}}{\sigma_0} &= \frac{w_\tau y \lambda}{y^2 + \lambda^2} \left( \frac{(x-a)(R_2^2 + y^2)}{\rho_2^2 R_2} - \frac{(x+a)(R_1^2 + y^2)}{\rho_1^2 R_1} \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{zz}^{(\tau)}}{\sigma_0} &= w_\tau \left( \frac{y\lambda}{y^2 + \lambda^2} \left[ \frac{x+a}{R_1} - \frac{x-a}{R_2} \right] + 2\nu \left( \operatorname{arctg} \left[ \lambda \frac{x-a}{yR_2} \right] - \operatorname{arctg} \left[ \lambda \frac{x+a}{yR_1} \right] \right) \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{xy}^{(\tau)}}{\sigma_0} &= w_\tau \left( \frac{y^2 \lambda}{\rho_1^2 R_1} - \frac{y^2 \lambda}{\rho_2^2 R_2} + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(\lambda + R_2)(\lambda - R_1)}{(\lambda - R_2)(\lambda + R_1)} \right] \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{xz}^{(\tau)}}{\sigma_0} &= w_\tau y \left( \frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{yz}^{(\tau)}}{\sigma_0} &= w_\tau \left( \frac{y^2}{y^2 + \lambda^2} \left[ \frac{x-a}{R_2} - \frac{x+a}{R_1} \right] + \nu \ln \left[ \frac{x+a+R_1}{x-a+R_2} \right] \right). \end{aligned}$$

**Планарный нормальный мезодефект:**

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\sigma}_{xx}^{(N)}}{\sigma_0} &= w_N \left( \frac{y^2 + \lambda^2}{\lambda} \left( \frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1} \right) + \frac{y^2}{\lambda} \left( \frac{R_1}{\rho_1^2} - \frac{R_2}{\rho_2^2} \right) + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(R_2 + \lambda)(R_1 - \lambda)}{(R_2 - \lambda)(R_1 + \lambda)} \right] \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{yy}^{(N)}}{\sigma_0} &= w_N \left( y^2 \lambda \left( \frac{1}{\rho_2^2 R_2} - \frac{1}{\rho_1^2 R_1} \right) + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(R_2 + \lambda)(R_1 - \lambda)}{(R_2 - \lambda)(R_1 + \lambda)} \right] \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{zz}^{(N)}}{\sigma_0} &= w_N \left( \frac{\lambda}{R_1} - \frac{\lambda}{R_2} + \nu \ln \left[ \frac{(R_2 + \lambda)(R_1 - \lambda)}{(R_2 - \lambda)(R_1 + \lambda)} \right] \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{xy}^{(N)}}{\sigma_0} &= w_N y \lambda \left( \frac{x-a}{\rho_2^2 R_2} - \frac{x+a}{\rho_1^2 R_1} \right); \quad \frac{\tilde{\sigma}_{yz}^{(N)}}{\sigma_0} = w_N y \left( \frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1} \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{xz}^{(N)}}{\sigma_0} &= w_N \left( \frac{x-a}{R_2} - \frac{x+a}{R_1} + (1 - \nu) \ln \left[ \frac{x+a+R_1}{x-a+R_2} \right] \right); \end{aligned}$$

**Планарный винтовой мезодефект:**

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\sigma}_{xz}^{(\xi)}}{\sigma_0} &= (1 - \nu) w_\xi \left( \operatorname{arctg} \left[ \frac{(x-a)\lambda}{yR_2} \right] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{(x+a)\lambda}{yR_1} \right] \right); \\ \frac{\tilde{\sigma}_{xy}^{(\xi)}}{\sigma_0} &= \frac{1 - \nu}{2} w_\xi \ln \left[ \frac{(\lambda + R_2)(\lambda - R_1)}{(\lambda - R_2)(\lambda + R_1)} \right]; \quad \frac{\tilde{\sigma}_{xx}^{(\xi)}}{\sigma_0} = \frac{\tilde{\sigma}_{yy}^{(\xi)}}{\sigma_0} = \frac{\tilde{\sigma}_{zz}^{(\xi)}}{\sigma_0} = \frac{\tilde{\sigma}_{xy}^{(\xi)}}{\sigma_0} = 0. \end{aligned}$$

(1.34)

где  $R_{1,2} = \sqrt{(x \pm a)^2 + y^2 + (z_k - z)^2}$ ,  $\rho_{1,2}^2 = (x \pm a)^2 + y^2$ ,  $\lambda = z_k - z$ .

## 1.8 Упругая энергия планарных мезодефектов

Для многих задач физики пластичности помимо знания упругих полей напряжений, создаваемых планарными мезодефектами необходимо знание упругой энергии этих мезодефектов и упругой энергии взаимодействия между ними в некоторой области. В общем случае процедура вычисления упругой энергии сводится к интегрированию упругого потенциала по некоторой двумерной или трехмерной области. В данном параграфе проведены вычисления собственной упругой энергии и энергии взаимодействия для планарных мезодефектов для упруго-изотропного бесконечного тела с изотропной экранировкой по углу на расстоянии  $R_a$ . Вначале приведем известные выражения для энергии упругого поля линейных дефектов.

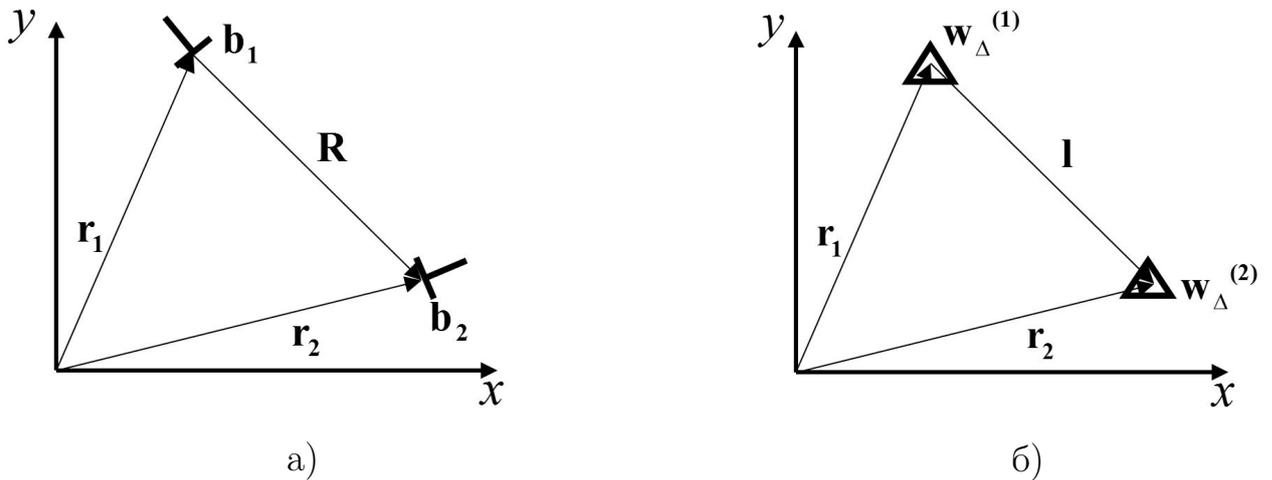


Рисунок 1.16 — Случай взаимодействия двух а) краевых дислокаций б) клинов-ных дисклинаций

Собственная энергия краевой дислокации  $E_\perp$  и клиновой дисклинации  $E_\Delta$  [39, 58] имеет вид:

$$E_\perp = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R_a}{r_0}, \quad E_\Delta = \frac{Gw_d^2 R_a^2}{16\pi(1-\nu)}, \quad (1.35)$$

где  $r_0$  – размер ядра дислокации. Энергия упругого взаимодействия краевых

дислокаций  $W_{\perp,\perp}$  [39] (рис. 1.16, а):

$$W_{\perp,\perp} = -\frac{G}{2\pi(1-\nu)} \left( (\mathbf{b}_1 \times \boldsymbol{\xi}) \cdot (\mathbf{b}_2 \times \boldsymbol{\xi}) \ln \left[ \frac{R}{R_a} \right] \right) - \frac{G}{2\pi R^2(1-\nu)} ((\mathbf{b}_1 \times \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{R}) ((\mathbf{b}_2 \times \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{R}). \quad (1.36)$$

Энергия упругого взаимодействия клиновых дисклинаций  $W_{\Delta,\Delta}$  [58] (рис. 1.16, б):

$$W_{\Delta,\Delta} = \frac{G\mathbf{w}_{\Delta}^{(1)} \cdot \mathbf{w}_{\Delta}^{(2)}}{8\pi(1-\nu)} \left( R_a^2 - l^2 - 2l^2 \ln \left[ \frac{R_a}{l} \right] \right), \quad (1.37)$$

где  $\mathbf{R}$  – радиус вектор между взаимодействующими дислокациями,  $\boldsymbol{\xi}$  – единичный вектор вдоль линии дислокации,  $\mathbf{l}$  – радиус вектор между взаимодействующими дисклинациями .

Получим выражения для энергии взаимодействия  $W_{\perp,\Delta}$  между краевой дислокацией с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  и клиновой дисклинацией с вектором Франка  $\mathbf{w}_{\Delta}$  . Систему координат свяжем с дислокацией, расположенной в начале координат (рис. 1.17). Энергию взаимодействия дислокации и дисклинации найдем, используя представление краевой дислокации с однородно распределенным ядром через эквивалентную систему клиновых дисклинаций (диполя дисклинаций). Дислокация с однородной плотностью вектора Бюргерса  $\mathbf{w}_{\mathbf{N}}$ , распределенной вдоль оси  $Oy$  по ядру с размером  $r_0 = 2a$  представляется как диполь клиновых дисклинаций, вектора Франка которых определяются согласно выражениям (1.27). Далее энергию взаимодействия диполя с дисклинацией  $W_{N,\Delta}$  представим как сумму энергий взаимодействия исходной дисклинации с положительной  $W_{\Delta,\Delta+}$  и отрицательной  $W_{\Delta,\Delta-}$  дисклинацией стенки. В результате получим:

$$W_{N,\Delta} = \frac{Gw_{\mathbf{N}}w_{\Delta}}{8\pi(1-\nu)} \left( l_-^2 - l_+^2 + 2l_-^2 \ln \left[ \frac{R_a}{l_-} \right] - 2l_+^2 \ln \left[ \frac{R_a}{l_+} \right] \right), \quad (1.38)$$

где  $w_{\Delta}$  – величина проекции  $\mathbf{w}_{\Delta}$  на ось  $Oz$  (направлена перпендикулярно плоскости рисунка),  $w_{\mathbf{N}}$  – величина проекции  $\mathbf{w}_{\mathbf{N}}$  на ось  $Ox$  . В рассматриваемой системе координат имеем следующие компоненты для векторов:  $l_- = (x_{\Delta}, y_{\Delta})$ ,  $l_+ = (x_{\Delta}, y_{\Delta} - 2a)$ , где  $r = (x_{\Delta}, y_{\Delta})$  – радиус вектор дисклинации в заданной си-

стеме координат (направленный от дислокации к дисклинации). Подставляя компоненты  $l_-$ ,  $l_+$ ) в выражение (1.38) получим:

$$W_{N,\Delta} = \frac{Gw_\Delta w_N}{8\pi(1-\nu)} \left( 4ay_\Delta - 4a^2 + 2(x_\Delta^2 + y_\Delta^2) \ln \left[ \frac{R_a}{\sqrt{x_\Delta^2 + y_\Delta^2}} \right] - \right. \\ \left. - 2(x_\Delta^2 + (y_\Delta - 2a)^2) \ln \left[ \frac{R_a}{\sqrt{x_\Delta^2 + (y_\Delta - 2a)^2}} \right] \right). \quad (1.39)$$

Разложим выражение (1.39) в ряд по степеням  $a$  вблизи точки 0 и, переходя к пределу  $2a \rightarrow 0$  и  $w_N = b/2a \rightarrow \infty$  при этом произведение  $2aw_N \rightarrow b$ , получим:

$$W_{N,\Delta} = \frac{Gw_\Delta(2aw_N)y_\Delta}{2\pi(1-\nu)} \ln \left[ \frac{R_a}{\sqrt{x_\Delta^2 + y_\Delta^2}} \right] + o(a). \quad (1.40)$$

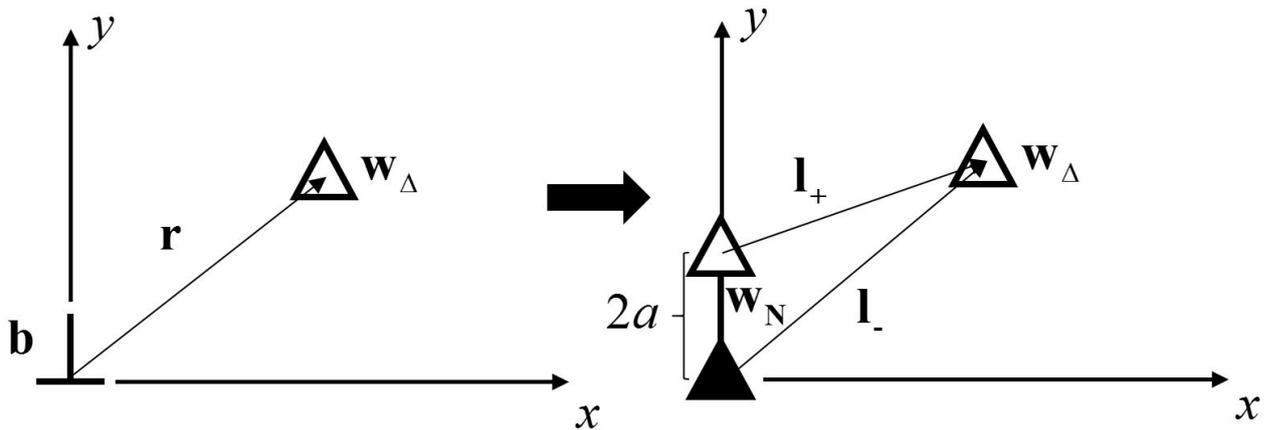


Рисунок 1.17 — Система координат для расчета энергии взаимодействия дислокации с дисклинацией и дислокации с однородно размазанным ядром (дисклинационного диполя) с дисклинацией

Очевидно, что все слагаемые порядка  $o(a)$  при вышеуказанном условии будут равны 0. Тогда получаем следующее выражение для энергии взаимодействия дислокации и дисклинации:

$$W_{\perp,\Delta} = \frac{Gw_\Delta by_\Delta}{2\pi(1-\nu)} \ln \left[ \frac{R_a}{\sqrt{x_\Delta^2 + y_\Delta^2}} \right]. \quad (1.41)$$

Несложно получить инвариантное относительно систем координат выражение для энергии взаимодействия дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  и дисклинации

с вектором Франка  $\mathbf{w}_\Delta$ :

$$W_{\perp,\Delta} = \frac{G(\mathbf{w}_\Delta \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{r}}{2\pi(1-\nu)} \ln \left[ \frac{R_a}{r} \right], \quad (1.42)$$

где  $\mathbf{r}$  – радиус вектор, направленный от дислокации к дисклинации.

Далее получим выражения для собственных энергий планарных мезодефектов, изображенных на рис. 1.18. Разберем метод вычисления на примере планарного сдвигового мезодефекта (рис.1.18, а).

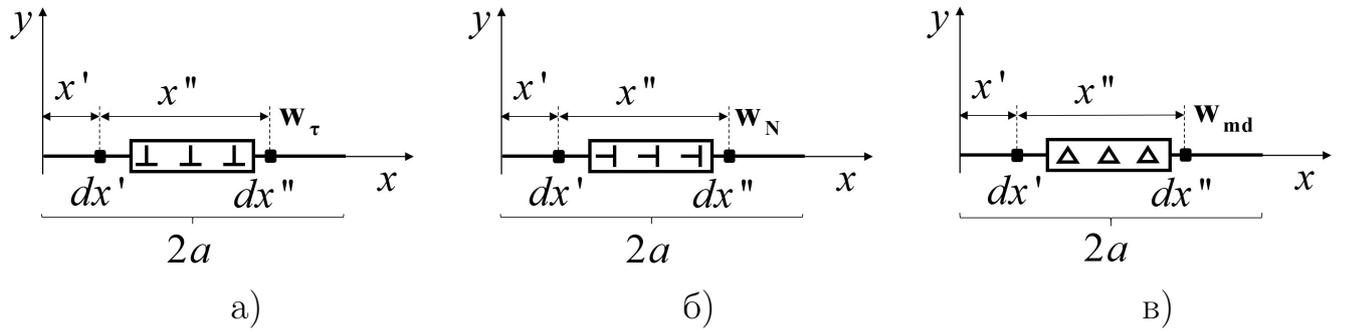


Рисунок 1.18 — Схематичное изображение планарных мезодефектов для расчета собственной энергии а) планарный сдвиговый мезодефект, б) планарный нормальный мезодефект, в) планарный дисклинационный мезодефект

По определению сдвиговый мезодефект есть система континуально распределенных по плоской границе краевых скользящих дислокаций с однородной плотностью вектора Бюргерса  $\mathbf{w}_\tau$ . Суммарная энергия такой системы состоит из собственной энергии дислокаций с бесконечно малым вектором Бюргерса  $\delta\mathbf{b}$  и энергии их взаимодействия. Нетрудно заметить, что первое слагаемое линейно зависит от количества дислокаций, в то время как второе квадратично, вследствие чего получаем что слагаемое, связанное с собственной энергией бесконечно малых дислокаций, стремится к нулю при стремлении к нулю  $\delta b$ . Принимая во внимание, что в выбранной системе координат  $\delta\mathbf{b} = \mathbf{w}_\tau dx'$ , получаем выражение для расчета собственной энергии сдвигового мезодефекта  $E_\tau$ :

$$E_\tau = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{2a} \int_{x'+\varepsilon}^{2a} w_\tau^2 W(x', x'') dx' dx'', \quad (1.43)$$

где  $W(x', x'')$  – энергия взаимодействия двух скользящих дислокаций с единичными векторами Бюргерса, которые расположены соответственно в точках

$(x', 0)$  и  $(x'', 0)$ . Подставляя выражение (1.36) для энергии взаимодействия дислокаций в (1.43) получаем:

$$E_\tau = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{2a} \int_{x'+\varepsilon}^{2a} \frac{Gw_\tau^2}{2\pi(1-\nu)} \ln \left[ \frac{x'' - x'}{R_a} \right] dx' dx''. \quad (1.44)$$

Переходя в (1.44) от двойного интеграла к повторному и устремляя  $\varepsilon \rightarrow 0$ , получаем выражение для собственной энергии планарного сдвигового мезодефекта с модулем мощности  $w_\tau$  и длиной  $2a$ :

$$E_\tau = \frac{Gw_\tau^2 a^2}{2\pi(1-\nu)} \left( 2 \ln \left[ \frac{R_a}{2a} \right] + 3 \right). \quad (1.45)$$

Собственная энергии планарного нормального мезодефекта с модулем мощности  $w_N$  и длиной  $2a$  равна:

$$E_N = \frac{Gw_N^2 a^2}{2\pi(1-\nu)} \left( 2 \ln \left[ \frac{R_a}{2a} \right] + 1 \right). \quad (1.46)$$

Собственную энергию нормального мезодефекта, можно получить другим способом – используя его эквивалентность диполю клиновых дисклинаций  $E_{dp}$ :

$$E_N = E_{dp} = 2E_\Delta + W_{\Delta^+, \Delta^-}. \quad (1.47)$$

где  $E_\Delta$  – собственная энергия положительной или отрицательной дисклинации диполя,  $W_{\Delta^+, \Delta^-}$  – энергия взаимодействия дисклинаций диполя. Подставляя в (1.47) выражения соответствующие выражения для слагаемых (1.35, 1.37) получим:

$$E_N = \frac{Gw_\Delta^2 R_a^2}{8\pi(1-\nu)} - \frac{Gw_\Delta^2}{8\pi(1-\nu)} \left( R_a^2 - 4a^2 - 8a^2 \ln \left[ \frac{R_a}{2a} \right] \right). \quad (1.48)$$

Упрощая данную формулу, получаем выражение (1.46).

Собственная энергии планарного дисклинационного мезодефекта с модулем мощности  $w_{md}$  и плечом  $2a$  равна:

$$E_{md} = \frac{Gw_{md}^2 a^2}{12\pi(1-\nu)} \left( 4a^2 \left( \ln \left[ \frac{2a}{R_a} \right] - 1 \right) + \left( 3R_a^2 - \frac{a^2}{3} \right) \right). \quad (1.49)$$

На рисунках 1.19 представлена зависимость полной энергии системы дискретно распределенных дислокаций (дисклинаций) эквивалентной соответствующему

планарному мезодефекту от количества дислокаций (дисклинаций) в системе. Видно, что при уменьшении масштаба разбиения их полная энергия асимптотически стремится к величине собственной энергии соответствующего планарного мезодефекта.

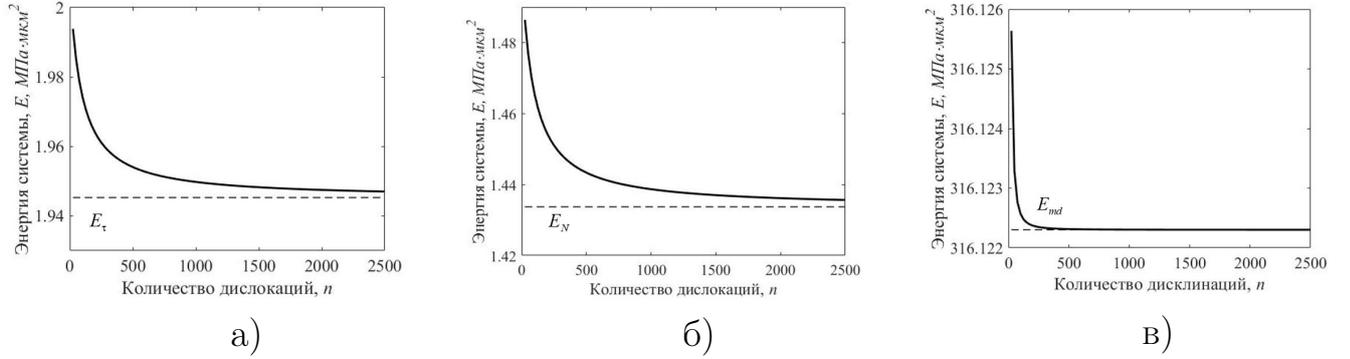


Рисунок 1.19 — Зависимости энергии системы дискретных дислокаций (дисклинаций), эквивалентной: а) планарному сдвиговому мезодефекту с мощностью  $w_\tau = 0.01$  и длиной  $2a = 1$  мкм, б) планарному нормальному мезодефекту с мощностью  $w_N = 0.01$  и длиной  $2a = 1$  мкм, в) планарному дисклинационному мезодефекту  $w_{md} = 0.05$  и длиной  $2a = 1$  мкм от количества дислокаций (дисклинаций) в системе

Найдем энергии взаимодействия планарного сдвигового мезодефекта с линейными дефектами в локальной системе координат (рис. 1.20). Очевидно, что в случае планарного нормального мезодефекта наиболее просто воспользоваться дисклинационным представлением этого мезодефекта и найти соответствующие выражения для энергий взаимодействия. Здесь же, в качестве примера, вычислим энергию взаимодействия планарного сдвигового мезодефекта и клиновой дисклинации. Для этого представим сдвиговой мезодефект системой непрерывно распределенных по плоской границе краевых дислокаций с однородной плотностью вектора Бюргерса  $\mathbf{w}_\tau$ . В результате энергия взаимодействия в системе координат, связанной с планарным мезодефектом (рис. 1.20, б), запишется как:

$$W_{\tau,\Delta} = \frac{Gw_\tau w_\Delta y_\Delta}{2\pi(1-\nu)} \int_{-a}^a \ln \left[ \frac{R_a}{\sqrt{(x_\Delta - x')^2 + y_\Delta^2}} \right] dx'. \quad (1.50)$$

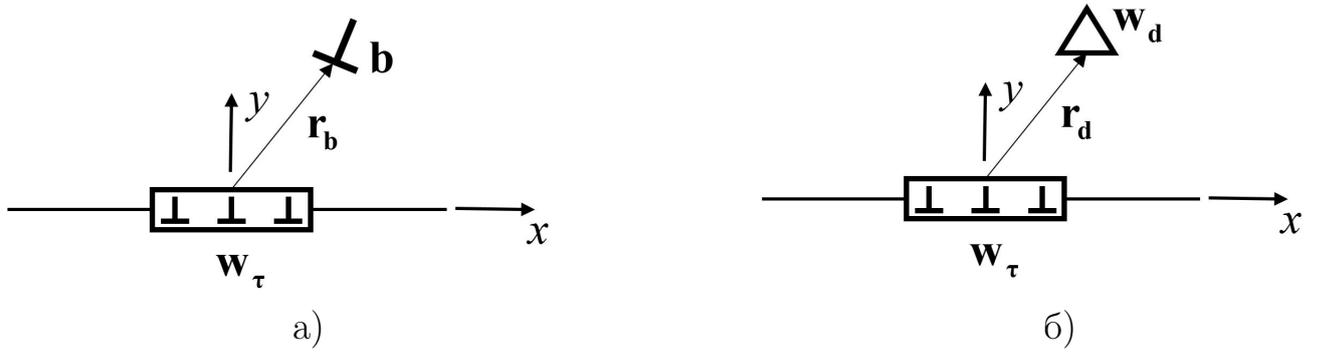


Рисунок 1.20 — Система координат для расчета энергии взаимодействия а) планарного сдвигового мезодефекта и краевой дислокации б) планарного сдвигового мезодефекта и клиновой дисклинации

Интегрируя данное выражение, получаем:

$$\begin{aligned}
 W_{\tau,\Delta} = & Dw_\tau w_\Delta y_\Delta \left( 2a + y_\Delta \left( \operatorname{arctg} \left[ \frac{x_\Delta - a}{y_\Delta} \right] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{x_\Delta + a}{y_\Delta} \right] \right) + \right. \\
 & \left. + (x_\Delta + a) \ln \left[ \frac{R_a}{\sqrt{(x_\Delta + a)^2 + y_\Delta^2}} \right] - (x_\Delta - a) \ln \left[ \frac{R_a}{\sqrt{(x_\Delta - a)^2 + y_\Delta^2}} \right] \right). \quad (1.51)
 \end{aligned}$$

Энергия взаимодействия планарного сдвигового мезодефекта и краевой дислокации в системе координат, связанной с планарным мезодефектом, имеет вид:

$$\begin{aligned}
 W_{\tau,\perp} = & Dw_\tau b_y y_b \ln \left[ \frac{r_1}{r_2} \right] + Dw_\tau b_x \left( (x_b + a) \left( \ln \left[ \frac{R_a}{r_1} \right] + 1 \right) - \right. \\
 & \left. (x_b - a) \left( \ln \left[ \frac{R_a}{r_2} \right] + 1 \right) + 2y_b \left( \operatorname{arctg} \left[ \frac{x_b - a}{y_b} \right] - \operatorname{arctg} \left[ \frac{x_b + a}{y_b} \right] \right) \right). \quad (1.52)
 \end{aligned}$$

где  $D = G/2\pi(1-\nu)$ ,  $\mathbf{r}_b = (x_b, y_b)$ ,  $r_1 = \sqrt{(x_b + a)^2 + y_b^2}$ ,  $r_2 = \sqrt{(x_b - a)^2 + y_b^2}$

Процедура получения аналитических выражений для энергии взаимодействия планарных мезодефектов друг с другом получаются, аналогично процедуре получения энергии взаимодействия планарных мезодефектов с линейными. Однако данные аналитические выражения (за исключением случая взаимодействия с нормальным мезодефектом) имеют достаточно внушительный вид, поэтому здесь не приводятся.

## Выводы по главе I

1. Проведена классификация планарных источников напряжений, накапливающихся на границах зерен и в приграничных областях при пластической деформации поликристаллических материалов.
2. Получены аналитические выражения для компонент тензора упругих напряжений от базовых планарных мезодефектов. Показано, что поле упругих напряжений от произвольного мезодефекта, наведенного пластической деформацией на границу зерна, можно представить в виде суперпозиции полей напряжений от совокупности базовых мезодефектов.
3. Получены аналитические выражения для собственных упругих энергий планарных мезодефектов, а также выражения для энергий взаимодействия данных мезодефектов с линейными дефектами: краевой дислокацией и клиновой дисклинацией.

## ГЛАВА 2.

### МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЗОДЕФЕКТОВ НА НАЧАЛЬНЫХ СТАДИЯХ ПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

#### 2.1 Механизмы накопления первичных мезодефектов на границах зерен

Как известно, упругие деформации от ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся в ходе пластической деформации, обеспечивают условия совместности полной деформации. При этом эволюция мезодефектной структуры продолжается до тех пор, пока действующее в каждой точке суммарное поле упругих напряжений не станет таким, чтобы обеспечить во всех микрообъемах поликристаллического материала, вне зависимости от их кристаллографической ориентации, равенство тензоров скорости пластической дисторсии  $\dot{\beta}(\mathbf{x})$ . На начальных этапах деформирования неоднородность протекания пластической деформации в основном связана с разной кристаллографической ориентацией соседних зерен. Вследствие этого при малых величинах пластической деформации наиболее интенсивное накопление мезодефектов наблюдается на границах зерен и в приграничных областях [68, 69]. Характеристики формирующейся на границе зерна дефектной структуры зависят от типа локализации пластической деформации, величины прошедшего через границу сдвига и ориентации относительно неё плоскостей скольжения дислокаций. В случае примерно однородного протекания пластической деформации по объему зерна, на плоских участках границы накапливаются сдвиговые мезодефекты, а ротационные мезодефекты наблюдаются на ранее сформированных морфологических особенностях: в стыках зерен, а также на ростовых фасетках и изломах, возникающих на стадии рекристаллизационного отжига. В работе [70] проведено исследование кинетики накопления первичных мезодефектов ротационного и сдвигового типов, формирующихся на границах и стыках зерен би- и три- кристаллов при пластической деформации. Показано, что по мере увеличения величины пластической деформации мощность мезодефектов монотонно увеличивается и выходит на насыщение. В случае ярко выраженной локализации пластической деформации, например в полосах сдвига или в одиночных плоских скоплениях решеточных дислокаций, образование мезо-

дефектной структуры будет сопровождаться изменением геометрии границы, связанным с формированием деформационных фасеток. Согласно экспериментальным данным, в ходе пластического деформирования на границах формируются довольно большие деформационные фасетки с характерным размером порядка микрона [71–73]. Очевидно, что для образования фасеток такой длины необходимо обеспечить условия прохождения через границу зерна значительного количества решеточных дислокаций. Различные аспекты взаимодействия локализованной пластической деформации с исходной границей зерна рассматривались в работах [74–79]. В данных работах теоретический анализ этого взаимодействия ограничивался случаем прохождения одиночных дислокаций через границы зерен специального типа, в результате чего на последних формировались ступеньки атомного размера [77]. Однако на данный момент теоретические исследования, посвященные моделям формирования фасеток мезоскопического масштаба, отсутствуют в научной литературе.

## **2.2 Механизмы формирования вторичных мезодефектов вблизи границ зерен**

Накапливающиеся на морфологических особенностях границ зерен первичные ротационно-сдвиговые мезодефекты создают предпосылки для формирования субструктуры, которая является результатом протекания аккомодационной пластической деформации, вызванной полями упругих напряжений от мезодефектов. В имеющихся на данный момент теоретических и экспериментальных работах подробно исследованы механизмы релаксации одиночных ротационных мезодефектов: клиновых дисклинаций и диполей дисклинаций. В данных работах было установлено, что одним из основных механизмов релаксации является формирование вблизи клиновых дисклинаций субструктур, представляющих из себя оборванные дислокационные стенки. В работах [80–82] методом компьютерного моделирования исследованы этапы эволюции оборванных дислокационных границ, формирующихся вблизи клиновой дисклинации и дисклинационного диполя. Рассмотрены случаи формирования дислокационной границы как под действием только внутреннего поля упругих напряжений, так и суммарного внешнего и внутреннего полей напряжений. Получены распределения плотности дислокаций, вблизи рассматриваемых дефектов и установлены условия формирования оборванных дислокационных границ в стыках и изломах гра-

ниц зерен. В работе [83] методом компьютерного моделирования изучен процесс формирования оборванной дислокационной границы, формирующейся вблизи отрицательной дисклинации при действии двух систем скольжения. Установлено, что ориентация сформированной малоугловой границы близка к ориентации оси растяжения. В работе [84] исследовали влияние упругого поля дисклинации на поведение дислокационного ансамбля и формирование оборванных дислокационных границ при генерации петель решеточных дислокаций в объеме зерен и зарождении дислокаций на границах зерна. Было показано, что во всех рассмотренных случаях вблизи дисклинации образуются области локализованного дислокационного заряда. Рассмотрены условия трансформации этих областей в устойчивые к снятию нагрузки оборванные дислокационные субграницы. Однако в том, что касается формы и размеров дислокационных границ, а также особенностей их дальнейшего роста, согласия между теорией и экспериментом достичь пока не удавалось. Проведенные в перечисленных работах теоретические исследования показывают, что вблизи дисклинаций образуются прямолинейные дислокационные границы длиной примерно равной половине диаметра зерна. Эксперименты же свидетельствуют о том, что оборванные границы на порядок короче, образуются не только на тройных стыках, но и на фасетированных участках межзеренных границ и, наконец, по мере роста ветвятся или резко меняют плоскость залегания (рис. 2.1).

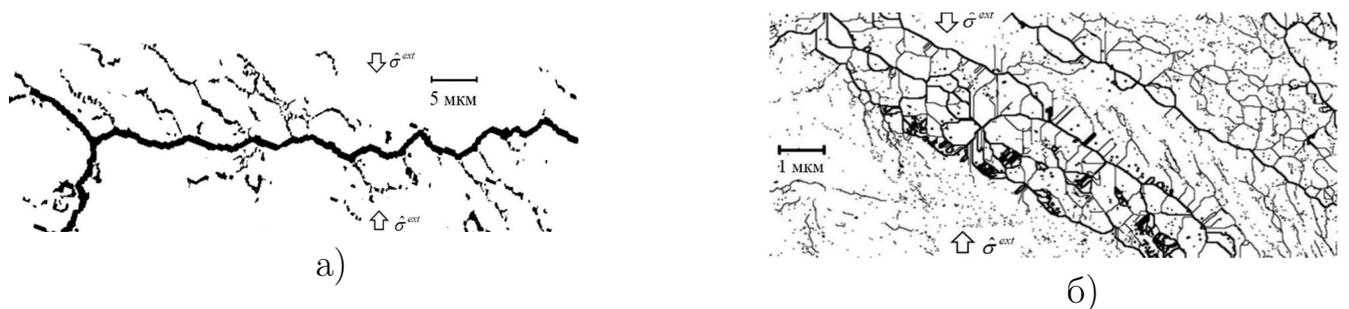


Рисунок 2.1 — EBSD карты, иллюстрирующие фрагментированную структуру деформированного поликристалла альфа-железа: а) одноосное сжатие,  $\varepsilon_{pl} = 1$ , скорость деформации  $10 \text{ с}^{-1}$  при  $400^\circ\text{C}$ , б) 2D ковка,  $\varepsilon_{pl} = 1$ , скорость деформации  $10 \text{ с}^{-1}$  при  $200^\circ\text{C}$

Поэтому разработка физической и математической модели, позволяющих хотя бы качественно объяснить наблюдаемые особенности морфологии оборванных дислокационных границ, является важной фундаментальной задачей физики фрагментированных структур.

Стоит отметить, что стыковые мезодефекты не всегда ограничиваются только ротационной составляющей. Известно, что при высокотемпературной деформации в материале может присутствовать дополнительная мода пластической деформации, связанная с зернограничным проскальзыванием. Наличие данной моды приводит к тому, что в тройных стыках помимо клиновых дисклинаций, формируются достаточно мощные дефекты сдвигового типа, которые могут приводить к зарождению микроскопических трещин [85] и последующему разрушению материала. Однако одновременно с зернограничным проскальзыванием в материале могут развиваться аккомодационные процессы, которые релаксируют напряжения от данных дефектов. Анализ и построению теоретических моделей таких процессов посвящены работы [86–93]. К числу основных механизмов аккомодации зернограничного скольжения относят эмиссию решеточных дислокаций из тройных стыков, ротационную деформацию, стимулированную деформацией расщепление и миграцию границ зерен.

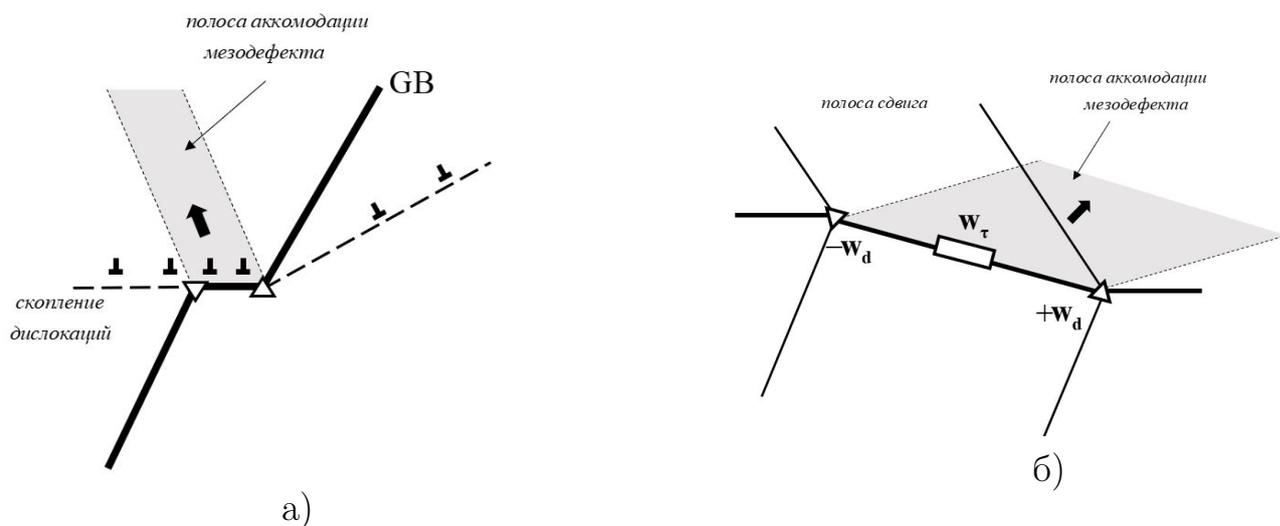


Рисунок 2.2 — Схематическое изображение аккомодационной полосы пластической деформации, формирующейся при релаксации мезодефектов, образованных на фасетке при прохождении через границу зерна а) дислокационного скопления, б) полосы сдвига

Что касается механизмов релаксации полей упругих напряжений от планарных сдвиговых мезодефектов за счет аккомодационной пластической деформации, то в настоящее время они изучены недостаточно. Например, не рассмотрен один из часто встречающихся в экспериментальных наблюдениях [94, 95] случаев, когда релаксация сдвигового мезодефекта связана с формированием вблизи границы зерна аккомодационной полосы скольжения. Наиболее вероят-

но, что формирование таких полос происходит под действием полей упругих напряжений от сдвигового мезодефекта, которое инициирует испускание границей в тело зерна решеточных дислокаций. К примеру, такой механизм может работать для мезодефектов, формирующихся на фасетках при прохождении через границу зерна дислокационного скопления или полосы сдвига (рис. 2.2). Поэтому представляет интерес рассмотреть его более подробно.

### 2.3 Характеристики мезодефектов, образующихся на деформационных фасетках в результате прохождения через границу зерна полосы сдвига или полосы скольжения

Рассмотрим кристаллогеометрические аспекты формирования деформационной фасетки, возникающей при прохождении через границу зерна полосы сдвига или полосы скольжения (рис. 2.3). Параметры полосы сдвига определяются следующими величинами: шириной полосы  $h$  в первом зерне, углом падения на границу зерна  $\alpha_1 \in (0, \pi/2)$  и углом выхода полосы во второе зерно  $\alpha_2 \in (-\pi/2, \pi/2)$  и величиной сдвиговой деформации в первом зерне  $\varepsilon$ . При взаимодействии локализованного сдвига с границей зерна может реализоваться один из следующих вариантов: сдвиг полностью тормозится на границе зерна, часть сдвига проходит во второе зерно, а часть остаётся на границе, сдвиг проходит полностью. В результате на границе зерна формируется фасетка, повернутая относительно исходного положения на некоторый угол  $\psi$  и содержащая мезодефекты. В общем случае данные мезодефекты состоят из системы решеточных дислокаций и системы дислокаций ориентационного несоответствия. В зависимости от энергетических условий реализуется конкретный из вышеперечисленных случаев.

Величины прошедшего через границу зерна сдвига  $\varepsilon_{pl}$  и заторможенного на границе сдвига  $\varepsilon - \varepsilon_{pl}$  рассматриваются как параметры модели. Далее рассмотрим случай, когда исходная граница зерна является границей наклона. При этом накопившиеся на границе дислокации (решеточные дислокации и дислокации ориентационного несоответствия) можно представить как комбинированный планарный мезодефект, состоящий из планарного сдвигового мезодефекта и планарного нормального мезодефекта.

Рассмотрим два случая: в первом из них, деформация в полосе осуществляется движением решеточных дислокаций в параллельных плоскостях сколь-

жения, во втором, деформация рассматривается как движение континуально и однородно распределенных в полосе виртуальных дислокаций.

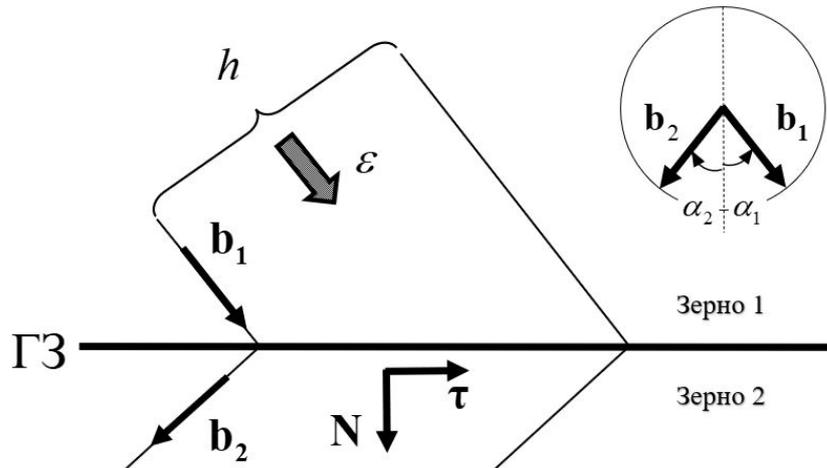


Рисунок 2.3 — Схема взаимодействия полосы сдвига с границей зерна (за положительное направление принято направление против часовой стрелки)

**Дискретная модель.** Процесс прохождения дислокаций через границу с нормалью  $\mathbf{N}$  можно представить в виде следующей модели. При прохождении решеточной дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  во второе зерно происходит его переориентация в вектор Бюргерса  $\mathbf{b}_2$ . В результате этого на границе зерна возникает дислокация ориентационного несоответствия с разностным вектором Бюргерса  $\delta\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2$  и перпендикулярная исходной границе ступенька высотой  $b_n$ , которая равна нормальной составляющей (по отношению к плоскости фasetки) прошедшего через границу пластического сдвига (совместная часть пластической деформации):

$$b_n = \min(b_{1n}, b_{2n}), \quad (2.1)$$

где  $b_{1n}, b_{2n}$  — величины проекций векторов Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  на нормаль к границе зерна  $\mathbf{N}$ . Введем двухмерный базис  $(\mathbf{N}, \boldsymbol{\tau})$  как показано на рис. 2.4. Векторы Бюргерса падающей  $\mathbf{b}_1$  и прошедшей  $\mathbf{b}_2$  дислокаций в этом базисе выразятся как:

$$\mathbf{b}_1 = b(\cos \alpha_1 \mathbf{N} + \sin \alpha_1 \boldsymbol{\tau}), \quad \mathbf{b}_2 = b(\cos \alpha_2 \mathbf{N} + \sin \alpha_2 \boldsymbol{\tau}). \quad (2.2)$$

При этом угол поворота  $\psi$  фасетки удовлетворяет следующему соотношению:

$$\operatorname{tg} \psi = -\frac{b_n}{\Delta h / \cos \alpha_1}. \quad (2.3)$$

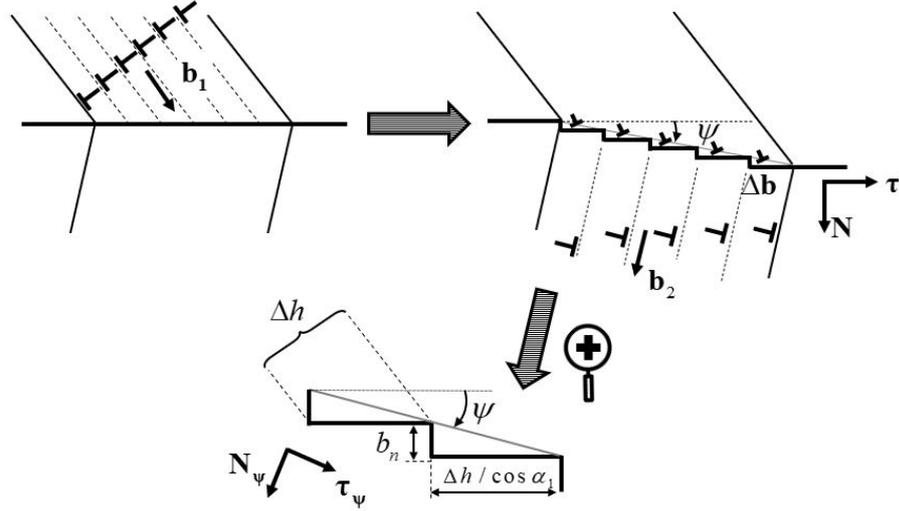


Рисунок 2.4 — Схематичное представление прохождения дискретизированного сдвига через границу зерна и формирование фасетки

Так как  $b_n = \min(b \cos \alpha_1, b \cos \alpha_2)$  и  $b/\Delta h = \varepsilon_{pl}$  необходимо рассмотреть два случая:

1)  $b_n = b \cos \alpha_1$ , тогда:

$$\psi = -\operatorname{arctg} \left[ \frac{b \cos \alpha_1}{\Delta h / \cos \alpha_1} \right] = -\operatorname{arctg} \left[ \varepsilon_{pl} (\cos \alpha_1)^2 \right], \quad (2.4)$$

2)  $b_n = b \cos \alpha_2$ , тогда:

$$\psi = -\operatorname{arctg} \left[ \frac{b \cos \alpha_2}{\Delta h / \cos \alpha_1} \right] = -\operatorname{arctg} \left[ \varepsilon_{pl} \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 \right]. \quad (2.5)$$

В силу малости высоты ступеньки по сравнению с шириной полосы конечную фасетку после прохождения сдвига, можно представить в виде прямого отрезка, длина которого равна:

$$l_\psi = \frac{h}{\cos(\alpha_1 - \psi)}. \quad (2.6)$$

Используя (2.4 – 2.6), найдем мощности мезодефектов формирующихся на данной фасетке. Вначале выразим разностный суммарный вектор Бюргера  $\Delta \mathbf{B}$ ,

формирующийся на границе зерна после прохождения сдвига и суммарный вектор Бюргерса заторможенных на границе решеточных дислокаций первого зерна  $\mathbf{B}_1$ :

$$\begin{aligned}\Delta\mathbf{B} &= \varepsilon_{pl}h [(\cos \alpha_1 - \cos \alpha_2)\mathbf{N} + (\sin \alpha_1 - \sin \alpha_2)\boldsymbol{\tau}], \\ \mathbf{B}_1 &= (\varepsilon - \varepsilon_{pl})h [\cos \alpha_1\mathbf{N} + \sin \alpha_1\boldsymbol{\tau}].\end{aligned}\quad (2.7)$$

В свою очередь вектор нормали  $\mathbf{N}_\psi$  и тангенциальный вектор  $\boldsymbol{\tau}_\psi$  к фасетке (рис. 2.4) в базисе  $(\mathbf{N}, \boldsymbol{\tau})$  выражаются следующим образом:

$$\mathbf{N}_\psi = \cos \psi\mathbf{N} + \sin \psi\boldsymbol{\tau}, \quad \boldsymbol{\tau}_\psi = -\sin \psi\mathbf{N} + \cos \psi\boldsymbol{\tau}.\quad (2.8)$$

Соответствующие выражения для мощностей нормального и сдвигового мезодефектов имеют вид:

$$\mathbf{w}_\mathbf{N} = \left( \frac{(\Delta\mathbf{B} + \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{N}_\psi}{l_\psi} \right) \mathbf{N}_\psi, \quad \mathbf{w}_\boldsymbol{\tau} = \left( \frac{(\Delta\mathbf{B} + \mathbf{B}_1) \cdot \boldsymbol{\tau}_\psi}{l_\psi} \right) \boldsymbol{\tau}_\psi.\quad (2.9)$$

**Континуальная модель.** Для описания характеристик деформационных фасеток, формирующихся в результате прохождения через границу зерна полосы скольжения можно воспользоваться континуальной моделью, в которой деформация в полосе рассматривается как результат движения однородно распределенных по полосе виртуальных дислокаций (рис. 2.5). При этом деформация в полосе осуществляется одновременно с поворотом фасетки и каждая новая порция сдвига взаимодействует уже с повернутой фасеткой. Бесконечно малый вектор Бюргерса континуально размазанных дислокаций, который в себе несет бесконечно малый сдвиг  $d\varepsilon_{pl}$  в первом  $d\mathbf{b}_1$  и во втором зернах  $d\mathbf{b}_2$  равен, соответственно:

$$d\mathbf{b}_1 = hd\varepsilon_{pl}(\cos \alpha_1\mathbf{N} + \sin \alpha_1\boldsymbol{\tau}), \quad d\mathbf{b}_2 = hd\varepsilon_{pl}(\cos \alpha_2\mathbf{N} + \sin \alpha_2\boldsymbol{\tau}).\quad (2.10)$$

В результате этого фасетка поворачивается на угол  $d\psi$ , для которого выполняется следующее соотношение:

$$d\psi = -\frac{\min(d\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{N}_\psi, d\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{N}_\psi)}{l_\psi},\quad (2.11)$$

где  $b_n = \min(d\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{N}_\psi, d\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{N}_\psi)$  – характеризует нормальную составляющую вектора Бюргерса дислокаций, осуществляющих сдвиг  $d\varepsilon_{pl}$ . Учитывая выражения для текущей нормали к фасетке  $\mathbf{N}_\psi$  и ее текущей длины  $l_\psi$  в базисе  $(\mathbf{N}, \boldsymbol{\tau})$

(2.6, 2.8) получим следующие дифференциальные соотношения для приращения угла  $d\psi$ :

$$d\psi = \begin{cases} -[\cos(\alpha_1 - \psi)]^2 d\varepsilon_{pl}, & b_n = \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{N}_\psi \\ -\cos(\alpha_1 - \psi) \cos(\alpha_2 - \psi) d\varepsilon_{pl}, & b_n = \mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{N}_\psi \end{cases} \quad (2.12)$$

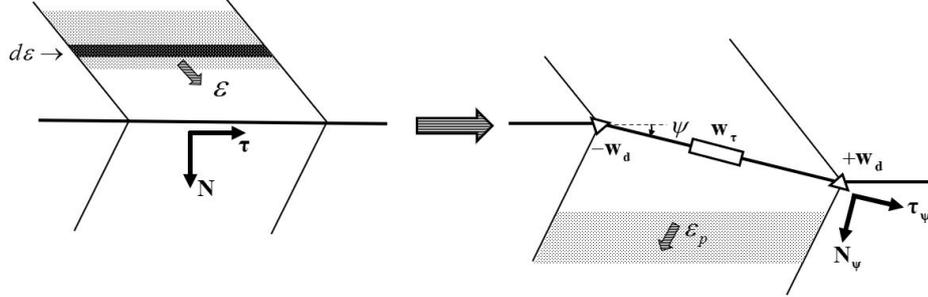


Рисунок 2.5 — Схематичное представление прохождения континуального сдвига через границу зерна и формирование фасетки

Решая задачу Коши для первого и второго случаев с начальным условием  $\psi(\varepsilon_{pl} = 0) = 0$ , получаем:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_1(\varepsilon_{pl}, \alpha_1) = \alpha_1 - \arctg(\varepsilon_{pl} + \operatorname{tg} \alpha_1), & b_n &= \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{N}_\psi \\ \psi &= \psi_2(\varepsilon_{pl}, \alpha_1, \alpha_2), & b_n &= \mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{N}_\psi \end{aligned} \quad (2.13)$$

где  $\psi_2(\varepsilon_{pl}, \alpha_1, \alpha_2)$  — неявно заданная функция:

$$\frac{1}{\sin(\alpha_2 - \alpha_1)} \ln \left[ \frac{\cos(\alpha_1 - \psi_2) \cos \alpha_2}{\cos(\alpha_2 - \psi_2) \cos \alpha_1} \right] - \varepsilon_{pl} = 0. \quad (2.14)$$

Далее определим границы углов, где действительно первое и второе решения. Углы перехода  $\psi_{cr}$  будут задаваться следующим соотношением:

$$db_{1n} = db_{2n} \rightarrow \cos(\alpha_1 - \psi_{cr}) = \cos(\alpha_2 - \psi_{cr}). \quad (2.15)$$

Решая данное уравнение, получаем следующие значения угла  $\psi_{cr}$ :

$$\psi_{cr} = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}, \quad -\frac{\pi}{2} < \psi_{cr} < \frac{\pi}{2}. \quad (2.16)$$

Будем рассматривать углы поворота принадлежащие интервалу  $\psi_{cr} \in (0, \pi/2)$ .

В итоге аналитическое решение будет иметь следующий вид:

1). при  $\cos \alpha_1 < \cos \alpha_2$  и  $\varepsilon_{pl} < \varepsilon_{cr}^{(1)} = \operatorname{tg}(\alpha_1 - \psi_{cr}) - \operatorname{tg} \alpha_1$  :

$$\psi = \psi_1(\varepsilon_{pl}, \alpha_1);$$

2). при  $\cos \alpha_1 \geq \cos \alpha_2$  и  $\varepsilon_{pl} < \varepsilon_{cr}^{(2)} = \frac{1}{\sin(\alpha_2 - \alpha_1)} \ln \left[ \frac{\cos(\alpha_1 - \psi_2) \cos \alpha_2}{\cos(\alpha_2 - \psi_2) \cos \alpha_1} \right]$  :

$$\psi = \psi_2(\varepsilon_{pl}, \alpha_1, \alpha_2);$$

3). при  $\cos \alpha_1 < \cos \alpha_2$  и  $\varepsilon_{pl} > \varepsilon_{cr}^{(1)}$  :

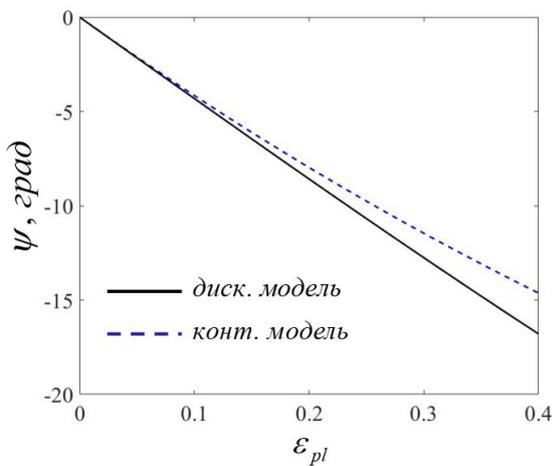
$$\psi = \psi_{cr} + \psi_2(\varepsilon_{pl} - \varepsilon_{cr}^{(1)}, \alpha_1 - \psi_{cr}, \alpha_2 - \psi_{cr});$$

4). при  $\cos \alpha_1 \geq \cos \alpha_2$  и  $\varepsilon_{pl} > \varepsilon_{cr}^{(2)}$  :

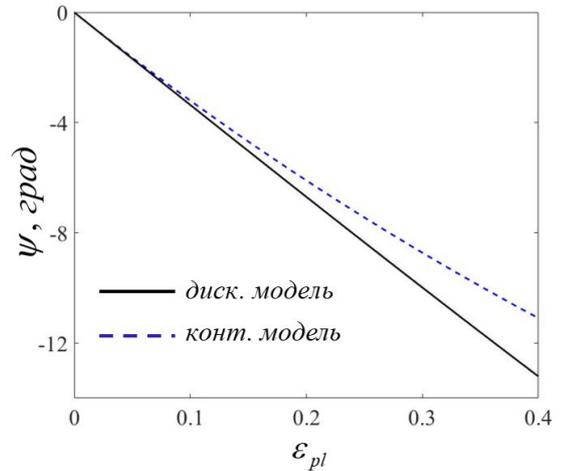
$$\psi = \psi_{cr} + \psi_1(\varepsilon_{pl} - \varepsilon_{cr}^{(2)}, \alpha_1 - \psi_{cr}).$$

(2.17)

Подставляя выражение для угла поворота фasetки  $\psi$ , определяемое с помощью (2.17), в выражения (2.6) и (2.9), легко найти характеристики мезодефектов. На рисунке 2.6 приведены зависимости угла поворота фasetки  $\psi$  от величины прошедшей пластической деформации  $\varepsilon_{pl}$  для дискретной и континуальной моделей.



а)



б)

Рисунок 2.6 — Зависимость угла поворота фasetки  $\psi$  от величины прошедшей пластической деформации  $\varepsilon_{pl}$  при а)  $\alpha_1 = 10^\circ$ ,  $\alpha_2 = 40^\circ$ ,  $h = 0.2$  мкм, б)  $\alpha_1 = 40^\circ$ ,  $\alpha_2 = 10^\circ$ ,  $h = 0.2$  мкм для дискретной и континуальной моделей

Как видно, при малых степенях деформирования зависимости  $\psi(\varepsilon_{pl})$  совпадают, однако при увеличении деформации скорость поворота фasetки в континуальной модели замедляется, что связано с переориентацией ее нормали к границе зерна.

## 2.4 Характеристики мезодефектов, образующихся на деформационных фасетках в результате прохождения через границу зерна дислокационного скопления

*В данном параграфе диссертации использованы материалы статьи:*  
*Perevezentsev V. N., Kirikov S. V., Svirina Y. V. Conditions of Strain-Induced Facet Formation during Interaction between a Lattice Dislocation Pile-Up and a Grain Boundary // The Physics of Metals and Metallography. – 2020. – V. 121. – № 10. – P. 929-935.*

Рассмотрим кристаллогеометрические аспекты формирования деформационной фасетки, возникающей при прохождении через границу зерна дислокационного скопления. Пусть дислокационное скопление, дислокации которого имеют вектор Бюргерса  $\mathbf{b}_1$ , располагается в первом зерне. На скопление действует внешнее сдвиговое напряжение  $\boldsymbol{\sigma}$ , в результате чего оно перемещается по телу зерна и тормозится границей зерна с разориентировкой  $\theta$ . Для простоты будем рассматривать границу наклона. При прохождении дислокаций скопления через эту границу во второе зерно вектор Бюргерса  $\mathbf{b}_1$  переориентируется в вектор Бюргерса  $\mathbf{b}_2$ , а на границе остается дислокация ориентационного несоответствия с вектором Бюргерса  $\delta\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2$ . Помимо этого на границе формируется ступенька, направленная вдоль исходной плоскости скольжения дислокаций первого зерна. Длина ступеньки  $\Delta l$  выражается через  $b$  как  $\Delta l = b \cos \theta$ . По мере прохождения скопления и ухода дислокаций  $\mathbf{b}_2$  во второе зерно, на границе формируется фасетка с длиной  $l_f = n \Delta l$ , где  $n$  – число ушедших во второе зерно дислокаций. Дефектная структура этой фасетки состоит из сидячих и скользящих планарных распределений дислокаций. В случае обычной границы зерна с неупорядоченным атомным строением, ядра расположенных на фасетке дислокаций делокализуются, в результате чего плотность таких дислокаций описывается некоторой непрерывной функцией. Далее для упрощения расчётов, будем представлять в виде континуально распределения не только дислокации, попавшие на фасетку, но и остальные дислокации поджатого скопления. Сформированное сидячими дислокациями распределение удобно представить в виде планарного нормального мезодефекта. В отличие от нормального мезодефекта, плотность вектора Бюргерса скользящих дислокаций распределена вдоль фасетки неоднородно.

Проанализируем условия прохождения пластического сдвига через грани-

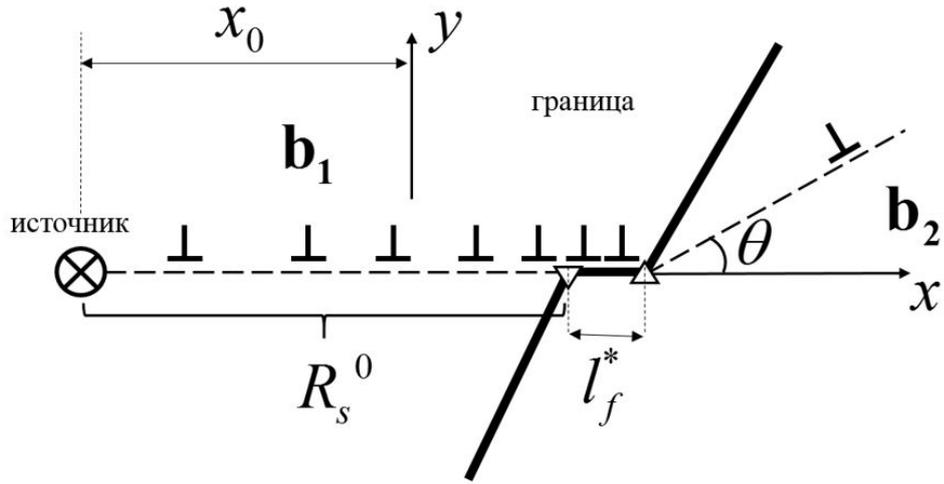


Рисунок 2.7 — Схематичное представление процесса прохождения скопления решеточных дислокаций через границу зерна

цу наклона и параметры формирующейся при этом фасетки. Рассмотрим случай, когда по мере ухода дислокаций во второе зерно заторможенное границей зерна скопление дислокаций пополняется за счёт срабатывания дислокационного источника в первом зерне. При этом будем считать заданными расстояние от источника до границы зерна  $R_s^0$ , критическое напряжение срабатывания источника  $\sigma_s$ , внешнее напряжение  $\sigma$  и разориентировку границы  $\theta$ . При дальнейших расчётах удобно также задать параметры, характеризующие систему на каждом этапе формирования фасетки, а именно, текущий суммарный вектор Бюргерса дислокаций скопления  $\mathbf{B} = (B, 0)$  и текущую длину фасетки  $l_f$ . Выберем систему координат, связанную с фасеткой зерна так, как показано на рис. 2.7 с началом координат, помещенным в центр дислокационного скопления. Поскольку диполь дисклинаций расположен в плоскости фасетки, ориентированной вдоль плоскости скольжения дислокаций первого зерна и, следовательно, не взаимодействует с дислокациями скопления, то длина скопления  $L$  и распределение модуля плотности вектора Бюргерса  $\rho(x)$  определяются известными выражениями [39]:

$$L = \frac{GB}{\pi(1-\nu)\sigma_1}, \quad \rho(x) = \frac{2(1-\nu)\sigma_1}{G} \sqrt{\frac{L/2+x}{L/2-x}}, \quad (2.18)$$

где  $\sigma_1$  — сдвиговое напряжение в плоскости скольжения дислокаций  $\mathbf{b}_1$ ,  $G$  и  $\nu$  — модуль сдвига и коэффициент Пуассона материала, соответственно. В рам-

ках рассматриваемой модели процесс прохождения пластического сдвига через границу зерна возможен при одновременном выполнении двух условий:

Критерий №1: энергетические затраты, необходимые для создания новых участков границы (по мере увеличения длины фасетки) и формирования скользящей решёточной дислокации в плоскости скольжения второго зерна (будем считать, что по завершению процесса отщепления дислокации, она расположена на расстоянии от границы равном удвоенному радиусу ядра дислокации  $r_c$ ) должны компенсироваться работой внешних напряжений.

Критерий №2: при выполнении критерия №1 должны обеспечиваться условия ухода дислокации во второе зерно. Это возможно в том случае, когда суммарная сила отталкивания, действующая на эту дислокацию со стороны скопления дислокаций и внешнего сдвигового напряжения в плоскости скольжения второго зерна, превышает силу притяжения между уходящей дислокацией и расположенным на фасетке диполем дисклинаций.

Первый критерий запишем в виде:

$$\left( E_p^{(2)} + E_{b_2} + E_{p,b_2} + E_{dp,b_2} + E_{dp,\Delta b} + E_\gamma^{(2)} \right) - \left( E_p^{(1)} + E_\gamma^{(1)} \right) - A_{pl} < 0, \quad (2.19)$$

где

$$E_p^{(i)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-L/2}^{L/2} 2\rho(x_\alpha)^{(i)} dx_\alpha \int_{x_\alpha + \varepsilon}^{L/2} \rho(x_\beta)^{(i)} W_{\alpha,\beta} dx_\beta, \quad (2.20)$$

упругая энергия скопления до ( $i = 1$ ) и после ( $i = 2$ ) осуществления процесса отщепления дислокации во второе зерно,

$$\rho(x)^{(1)} = \begin{cases} \rho(x), & -\frac{L}{2} \leq x < \frac{L}{2} \\ 0, & x < -\frac{L}{2}, x \geq \frac{L}{2} \end{cases}; \quad \rho(x)^{(2)} = \begin{cases} \rho(x), & -\frac{L}{2} \leq x < x_b \\ 2\rho(x) \sin \frac{\theta}{2}, & x_b \leq x < \frac{L}{2} \\ 0, & x < -\frac{L}{2}, x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (2.21)$$

В выражении (2.21) учтено то обстоятельство, что после отщепления дислокации во второе зерно в области фасетки ( $x_b, L/2$ ) остается дислокация ориентационного несоответствия с модулем плотности вектора Бюргерса  $2\rho(x) \sin \theta/2$ .

Величина  $x_b$  определяется из выражения:

$$b = \int_{x_b}^{L/2} \rho(x) dx. \quad (2.22)$$

В выражении (2.20)  $W_{\alpha,\beta}$  – функция погонной энергии взаимодействия двух единичных дислокаций с координатами  $(x_\alpha, y_\alpha)$  и  $(x_\beta, y_\beta)$  (1.36).  $E_\gamma^{(1)}$ ,  $E_\gamma^{(2)}$  – поверхностная энергия фасетки до и после осуществления процесса отщепления дислокации во второе зерно:

$$E_\gamma^{(1)} = 2\gamma l_f, \quad E_\gamma^{(2)} = 2\gamma(l_f + b \cos \theta), \quad (2.23)$$

где  $\gamma$  – удельная поверхностная энергия.  $E_{b_2}$  – упругая энергия дислокации  $\mathbf{b}_2$  с радиусом ядра  $r_c$ :

$$E_{b_2} = \frac{Db^2}{2} \ln \left[ \frac{R_a}{r_c} \right], \quad (2.24)$$

$E_{p,b_2}$  – энергия упругого взаимодействия скопления и отщепившейся во второе зерно дислокации. При численных расчетах эта дислокация рассматривается как равномерно распределенное скопление континуальных дислокаций с плотностью вектора Бюргерса  $\rho_{b_2} = b/2r_c$ :

$$E_{p,b_2} = \int_{-L/2}^{L/2} \rho(x_p)^{(2)} dx_p \int_0^{2r_c} \rho_{b_2}(x_{b_2}) W_{p,b_2} dx_{b_2}, \quad (2.25)$$

$E_{dp,b_2}$  – энергия взаимодействия диполя дисклинаций и дислокации  $\mathbf{b}_2$ :

$$E_{dp,b_2} = \int_{L/2-l_f}^{L/2} w_{dp} dx_d \int_0^{2r_c} \rho_{b_2} W_{dp,b_2} dx_{b_2}, \quad (2.26)$$

$E_{p,dp}$  – энергия упругого взаимодействия диполя дисклинаций с дислокацией ориентационного несоответствия  $\Delta \mathbf{b}$ :

$$E_{p,\Delta b} = \int_{L/2-l_f}^{L/2} w_{dp} dx_d \int_0^{2r_c} \rho(x)^{(2)} W_{dp,\Delta b} dx, \quad (2.27)$$

$A_{pl}$  – работа пластической деформации, осуществляемая при смещении дисло-

каций скопления на расстояние  $\Delta l = b \cos \varphi$  и перемещения дислокации  $\mathbf{b}_2$  на расстояние  $2r_c$  вдоль плоскости скольжения второго зерна:

$$A_{pl} = \sigma_1 B b \cos \theta + 2\sigma_2 b r_c, \quad (2.28)$$

где  $\sigma_2$  – сдвиговое напряжение в плоскости скольжения дислокации  $\mathbf{b}_2$ . Критерий ухода дислокации во второе зерно (критерий 2) запишем в виде:

$$\sigma_p(x, y) + \sigma_2 > \sigma_{dp}(x, y) + \sigma_P, \quad (2.29)$$

где  $\sigma_P$  – напряжение Пайерлса,  $\sigma_p(x, y)$  – сдвиговое напряжение от скопления в плоскости скольжения дислокации второго зерна:

$$\sigma_p(x, y) = \int_{-L/2}^{L/2} \rho(x') (\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{G}(x - x', y) \cdot \boldsymbol{\tau}_2) dx', \quad (2.30)$$

где  $\boldsymbol{\tau}_2, \mathbf{n}_2$  – единичные вектора, направленные вдоль и перпендикулярно  $\mathbf{b}_2$ , соответственно,  $\mathbf{G}(x - x', y)$  – функция напряжений от дислокации скопления, расположенной в точке  $(x', 0)$  с единичным вектором Бюргерса, направленным вдоль оси  $Ox$ ,

$$\sigma_{dp}(x, y) = \mathbf{n}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_{dp}(x, y) \cdot \boldsymbol{\tau}_2, \quad (2.31)$$

где  $\sigma_{dp}(x, y)$  – сдвиговое напряжение от диполя дисклинаций,  $\boldsymbol{\sigma}_{dp}(x, y)$  – функция тензора напряжений от диполя дисклинаций.

При расчёте длины фасетки считалось, что процесс её формирования прекращался, как только переставал действовать один из рассмотренных выше критериев. Численный анализ критериев прохождения дислокационного скопления через границу зерна и расчеты длины фасетки были проведены для следующих значений параметров и варьируемых величин:  $G = 45000$  МПа,  $\nu = 0.3$ ,  $b = 2.7 \cdot 10^{-4}$  мкм,  $r_c = b$ ,  $\sigma_s = 3.8 \cdot 10^{-3}G$ ,  $\sigma_P = 6 \cdot 10^{-5}G$ ,  $\theta \in [10^\circ, 60^\circ]$ ,  $\gamma = Gb/24$ ,  $B \in [10, 200] \cdot b$ ,  $R_s^0 \in [0.5, 10]$  мкм, внешнее напряжение:

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma (\boldsymbol{\tau}_1 \otimes \mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_1 \otimes \boldsymbol{\tau}_1),$$

где  $\boldsymbol{\tau}_1, \mathbf{n}_1$  – единичные вектора, направленные вдоль и перпендикулярно  $\mathbf{b}_1$ , соответственно,  $\sigma \in [5, 8] \cdot 10^{-3}G$ .

Результаты расчётов зависимости длины фасетки  $l_f^*$  от количества дисло-

каций в скоплении  $B/b$  при различных значениях угла разориентировки границы  $\theta$  и внешнего напряжения  $\sigma$  представлены на рис. 2.8 (далее везде будем опускать индекс у  $\sigma_1$ , обозначая  $\sigma_1 \equiv \sigma$ ).

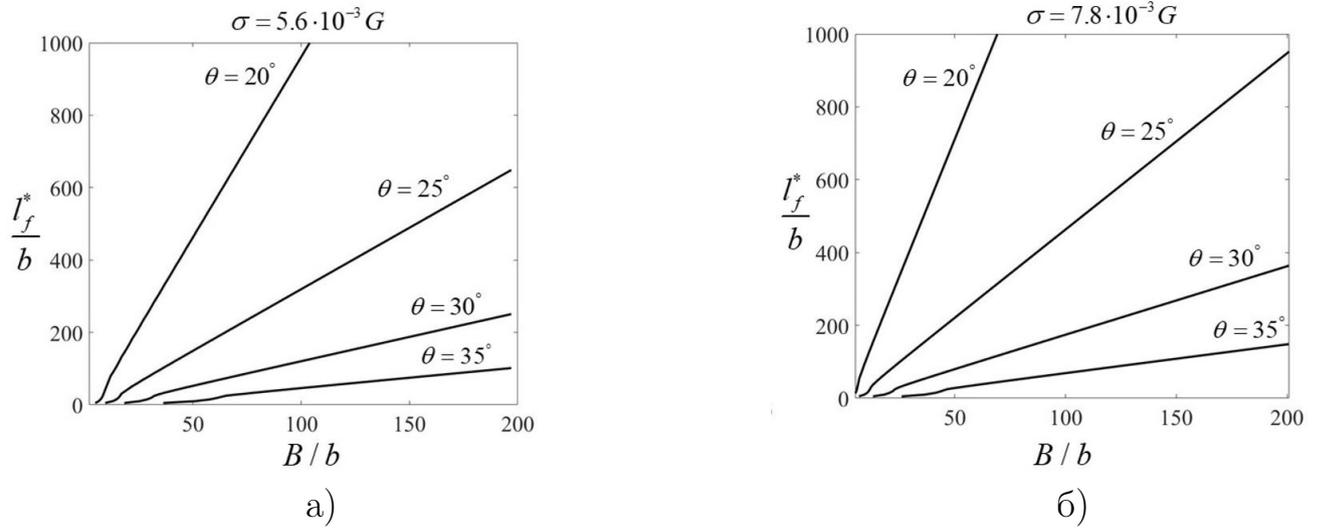


Рисунок 2.8 — Зависимости конечной длины фasetки  $l_f^*$  от количества дислокаций в скоплении  $B/b$  при различных значениях угла разориентировки границы  $\theta$  и внешнего напряжения  $\sigma$

Как показывают результаты расчета, появление фasetки на границе зерна при взаимодействии границы с плоским скоплением дислокаций возможно только при превышении суммарного вектора Бюргерса скопления некоторого критического значения, величина которого зависит от внешнего напряжения и разориентировки границы. В исследуемом диапазоне значений параметров критическое число дислокаций в скоплении относительно невелико (10 – 15 штук). При увеличении числа дислокаций в скоплении увеличивается и длина фasetки. Очевидно, что максимальное значение  $B$  и, соответственно, максимальная длина фasetки  $l_f^*$  связаны с расстоянием от дислокационного источника до границы зерна  $R_s^0$  и пороговым напряжением срабатывания источника  $\sigma_s$ . Связь этих величин можно определить из следующих соображений. Суммарный вектор Бюргерса  $B$  скопления связан с его длиной  $L$  соотношением (2.18), а суммарное сдвиговое напряжение  $\sigma^\Sigma$ , действующее в точке расположения дислокационного источника, связано с длиной скопления и координатой источника  $x_0$  выражением:

$$\sigma^\Sigma = \sigma_s = \sigma - \sigma \left( 1 - \sqrt{\frac{x_0 + L/2}{x_0 - L/2}} \right). \quad (2.32)$$

Выражая отсюда  $x_0$  и принимая во внимание что  $R_s^0 = |x_0| + L/2$  получим:

$$R_s^* = \frac{\sigma^2}{\sigma^2 - \sigma_s^2} L, \quad (2.33)$$

где  $R_s^*$  – расстояние от границы до источника после того, как процесс прохождения дислокаций через границу завершился. Найденная величина  $R_s^*$  связана с исходным расстоянием от источника до границы  $R_s^0$  выражением:

$$R_s^0 = R_s^* - l_f^* = \frac{\sigma^2}{\sigma^2 - \sigma_s^2} L - l_f^*. \quad (2.34)$$

Для того чтобы получить зависимость длины фасетки  $l_f^*$  от  $R_s^0$  при заданных  $\sigma$  и  $\theta$ , необходимо выразить  $L$  через  $l_f^*$ . Это можно сделать, используя выражение (2.18) и зависимости  $l_f^*(B)$ , полученные при моделировании. При достаточно большом количестве дислокаций в скоплении  $l_f^*(B)$  можно аппроксимировать линейной функцией:

$$l_f^* = \alpha(\sigma, \theta) B + \beta(\sigma, \theta) = \alpha(\sigma, \theta) \frac{\sigma}{2D} L + \beta(\sigma, \theta), \quad (2.35)$$

где коэффициенты  $\alpha(\sigma, \theta)$  и  $\beta(\sigma, \theta)$  находятся с помощью метода регрессии. Тогда:

$$L = \frac{2D}{\sigma \alpha(\sigma, \theta)} l_f^* + \frac{-2D}{\sigma \alpha(\sigma, \theta)} \beta(\sigma, \theta). \quad (2.36)$$

Подставляя данное выражение в (2.34) получим:

$$l_f^* = \frac{\chi}{1 - \chi} R_s^0 + \frac{\beta}{1 - \chi}, \quad \text{где } \chi = \frac{\alpha(\sigma, \theta) (\sigma^2 - \sigma_s^2)}{2D\sigma}. \quad (2.37)$$

Результаты расчета зависимости длины фасетки  $l_f^*$  от исходного расстояния источника до границы  $R_s^0$  при различных значениях  $\sigma$  и  $\theta$  приведены на рис. 2.9.

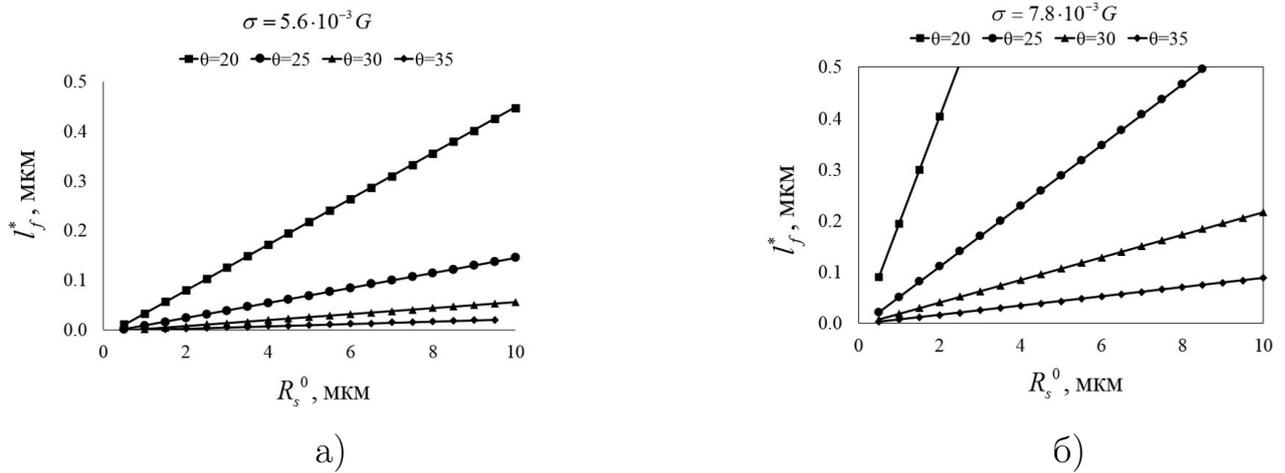


Рисунок 2.9 — Зависимости конечной длины фасетки  $l_f^*$  от исходного расстояния от источника до границы зерна  $R_s^0$  при различных значениях угла разориентировки границы  $\theta$  и внешнего напряжения  $\sigma$

В интервале использованных в расчётах значений  $\sigma$  и  $\theta$  размер фасеток составляет десятые доли  $R_s^0$  (рис. 2.9). Поскольку величина  $R_s^0$  не может превышать размер зерна поликристалла, то отсюда следует важный вывод о том, что при измельчении зеренной структуры материала склонность границ зёрен к деформационному фасетированию должна уменьшаться. Зависимость длины фасетки  $l_f^*$  от разориентировки границы  $\theta$  при разной величине внешнего напряжения  $\sigma$  и фиксированном суммарном векторе Бюргерса скопления  $B$  показаны на рис. 2.10.

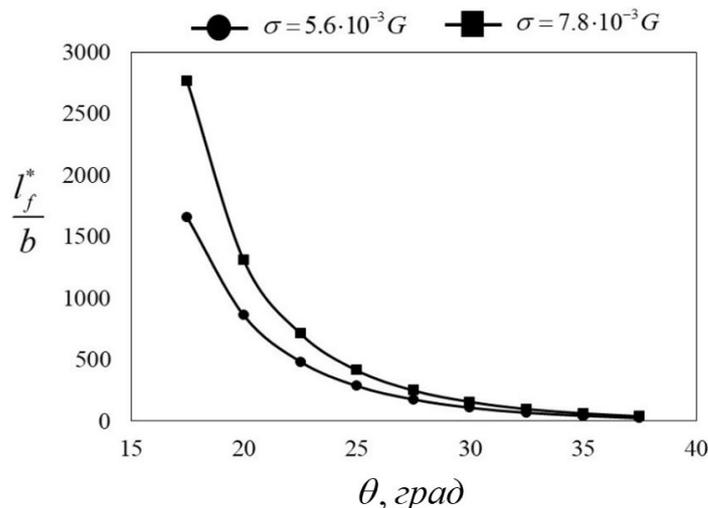


Рисунок 2.10 — Зависимости длины фасетки  $l_f^*$  от разориентировки границы  $\theta$  при различных значениях внешнего напряжения  $\sigma$  и фиксированном  $B = 90b$

Как видно из этого рисунка, длина фасетки уменьшается при увеличении

разориентировки границы. Таким образом, наибольшую склонность к фасетированию должны проявлять мало- и средне-угловые границы зёрен.

## 2.5 Релаксация полей упругих напряжений от мезодефектов за счет формирования оборванных дислокационных границ

*В данном параграфе диссертации использованы материалы статьи: Rybin V. V., Perevezentsev V. N., Kirikov S. V. Formation of strain-induced broken dislocation boundaries at faceted grain boundaries // The Physics of Metals and Metallography. – 2018. – V. 119. – № 5. – P. 421-429.*

Экспериментальные данные позволяют сформулировать качественную модель формирования оборванных дислокационных границ деформационного происхождения (ОДГ ДП). Можно утверждать, что зарождение дислокационных границ связано с процессами аккомодационной пластической деформации, которая протекает под действием полей внутренних напряжений от мезодефектов, накопленных на границе в ходе пластической деформации. Когда интенсивность сдвиговых полей напряжений от мезодефектов в аккомодационной системе скольжения превысит некоторую критическую величину, в вершине фасетки произойдёт зарождение оборванной дислокационной границы. Экспериментальные данные показывают, что вначале ориентация подрастающей дислокационной границы постоянна. Однако, по мере удаления от фасетированной границы интенсивность полей внутренних напряжений от первичных мезодефектов уменьшается и на некотором расстоянии, где становится актуальным поле  $\sigma^{ext}$ , плоскость залегания оборванной дислокационной границы испытывает излом. Схематически данную модель можно представить как расщепление первичной дисклинации (рис. 2.11), осуществляющееся посредством аккомодационного пластического течения.

Проведем моделирование формирования оборванных дислокационных границ деформационного происхождения методом динамики дискретных дислокаций. Рассмотрим модельный 2D бикристалл, содержащий фасетированный участок границы зерна (рис. 2.12). Пусть данная граница состоит из некоторого достаточно большого количества симметричных фасеток, характеризующихся длиной  $l$  и углом  $\psi$ , при этом размеры расчетной области выберем таким образом, чтобы было минимизировано влияние граничных условий на результаты моделирования. Систему координат  $Oxy$  и ассоциированный с ней базис

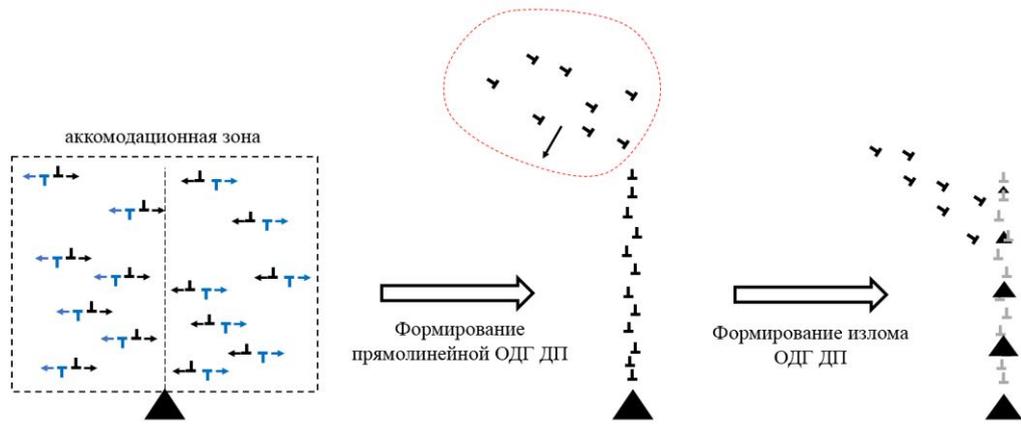


Рисунок 2.11 — Схема дислокационно-дисклинационных превращений процесса формирования оборванной дислокационной стенки на фасетированной границе зерна

$(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$  расположим в вершине одной из фасеток, как показано на рис. 2.12. Пусть пробный 2D кристалл имеет примитивную гексагональную решётку, которая содержит три системы скольжения. При этом будем рассматривать одноосное сжатие вдоль оси  $\mathbf{e}_2$ :

$$\sigma^{ext} = -P\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2. \quad (2.38)$$

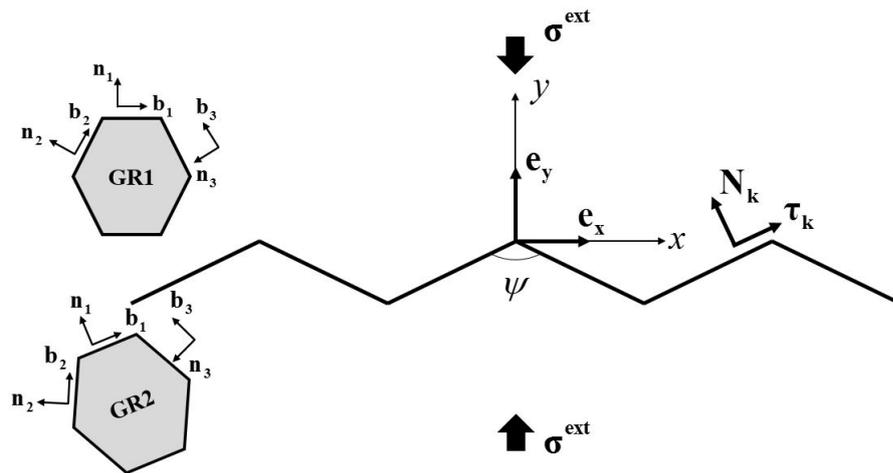


Рисунок 2.12 — Схематическое изображение участка фасетированной границы

Распределение мезодефектной структуры на фасетированной границе зададим параметрическим способом, используя скачок тензора пластической де-

формации  $[\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}]$  на границе зерна. Для упрощения расчетов, а также с учетом симметрии морфологических особенностей границы зерна и схемы деформации примем, что  $[\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}]$  однороден по границе и имеет следующую структуру:

$$[\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}] = [\varepsilon_{pl}]\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - [\varepsilon_{pl}]\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2. \quad (2.39)$$

Мощности нормальных  $\mathbf{w}_N$  и сдвиговых  $\mathbf{w}_\tau$  мезодефектов, сформированных на  $k$ -ой фасетки границы зерна определим с помощью выражений:

$$\mathbf{w}_N = (\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{N}_k) \mathbf{N}_k, \quad \mathbf{w}_\tau = (\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\tau}_k) \boldsymbol{\tau}_k, \quad (2.40)$$

где  $\mathbf{B}$  – тензор Ная, равный:

$$\mathbf{B} = -\mathbf{B} \times [\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}]. \quad (2.41)$$

Для моделирования эволюции ансамбля дислокаций воспользуемся квази-вязким приближением, согласно которому:

$$d\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{M}_i \cdot \mathbf{F}_i, \quad (2.42)$$

где  $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{M}_i$ ,  $\mathbf{F}_i$  – радиус вектор, тензор подвижности и сила, действующая на  $i$ -ую дислокацию, соответственно.

$$\mathbf{M}_i = M \mathbf{e}_{b,i} \otimes \mathbf{e}_{b,i}, \quad (2.43)$$

где  $\mathbf{e}_{b,i}$  – единичный вектор, направленный вдоль  $\mathbf{b}_i$ ,  $M$  – подвижность  $i$ -ой дислокации. Сила, действующая на  $i$ -ую дислокацию, имеет вид:

$$\mathbf{F}_i = \left( \boldsymbol{\sigma}^{\text{ext}} + \sum_j \boldsymbol{\sigma}_j^{\text{mes}}(\mathbf{r}_i) + \sum_{k \neq i} \boldsymbol{\sigma}_k^{\text{d}}(\mathbf{r}_i) \right) \cdot \mathbf{b}_i, \quad (2.44)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}_j^{\text{mes}}(\mathbf{r}_i)$  – напряжение от  $j$ -ого мезодефекта в точке  $\mathbf{r}_i$ ,  $\boldsymbol{\sigma}_k^{\text{d}}(\mathbf{r}_i)$  – напряжение от  $k$ -ой решеточной дислокации в точке  $\mathbf{r}_i$ .

При этом предполагается, что размножение дислокаций происходит за счет случайной по времени и однородной по объему генерации пар дислокаций противоположного знака. Аннигиляция противоположных дислокаций происходит, если они сближаются на некоторое достаточно малое расстояние  $r_a$ .

Численные расчёты проводились при следующих значениях параметров модели:  $G = 77$  ГПа,  $\nu = 0.3$ ,  $P = 0.7$  ГПа,  $\psi = 126^\circ$ ,  $l = 2.24$  мкм, возможные плоскости скольжения расположены в верхнем зерне (GR1) под углами  $\{0^\circ, 60^\circ, 120^\circ\}$ , а в нижнем (GR2) под углами  $\{20^\circ, 80^\circ, 140^\circ\}$  к направлению базисного вектора  $\mathbf{e}_1$ .

В качестве примера на рис. 2.13 представлены распределение компонент поля напряжений от мезодефектов  $\sigma^{\text{mes}}$ , сформированных на границе при величине разностной пластической деформации  $[\varepsilon_{pl}] = 0.04$ . Видно, что вблизи границы на расстоянии примерно равном размеру фасетки, возникает неоднородное поле внутренних напряжений, которое периодически меняется вдоль плоскости границы. При удалении от границы зерна, на расстояниях много больших размера фасетки, это поле становится пространственно-однородным.

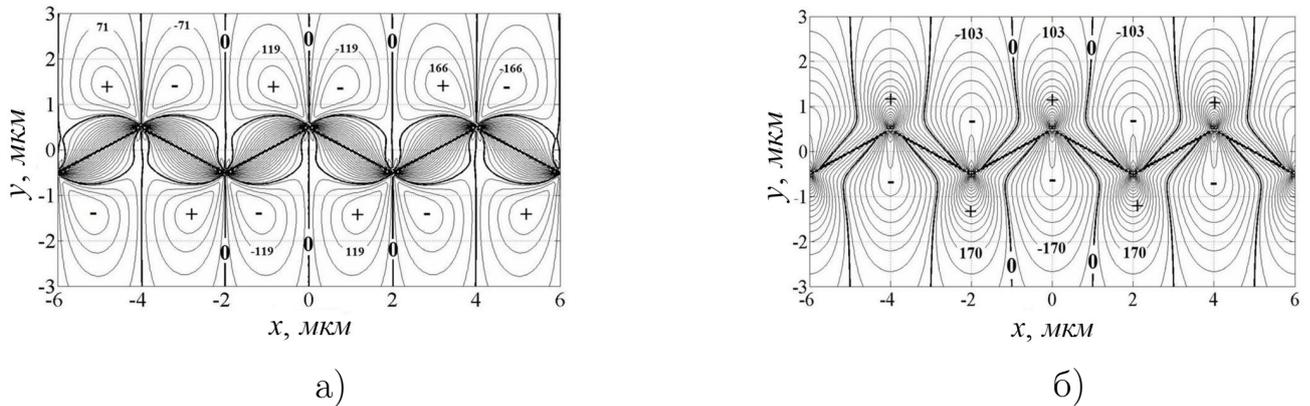


Рисунок 2.13 — Изолинии компонент поля напряжений а)  $\sigma_{xy}^{\text{mes}}$  и б)  $\sigma_{yy}^{\text{mes}}$ , генерируемых в окрестности фасетированной границы системой расположенных на ней сдвиговых и нормальных мезодефектов при  $[\varepsilon_{pl}] = 0.04$

Численные расчеты показывают, что по мере увеличения  $[\varepsilon_{pl}]$  происходит рост внутренних напряжений от наведенных на границу зерна сдвиговых и нормальных мезодефектов. В результате чего в приграничной зоне активируется аккомодационное движение дислокаций, которое осуществляется в плоскости  $(\mathbf{n}_1, \mathbf{b}_1)$  зерна GR1. При этом упругие поля от расположенных в вершинах фасеток дисклинаций разделяют дислокационные потоки и создают пространственно-локализованные области с повышенной плотностью дислокационного заряда. Далее из них постепенно формируются уходящие от вершин фасеток в тело зерна оборванные дислокационные границы. Характерная для этой стадии дислокационная структура показана на рис. 2.14, а. Видно, что

аккомодационная пластическая деформация приводит к формированию сопоставимых по размеру с длиной фасетки оборванных дислокационных границ, исходящих в тело зерна из вершин фасеток.

Согласно вышеизложенной схеме, процесс формирования оборванных дислокационных границ можно представить как отщепление от исходной дисклинации и уход в тело зерна частичных дисклинаций. Дисклинации упругими полями возмущают потоки решеточных дислокаций, движущихся из объема зерен по активным плоскостям скольжения по направлению к границе, вследствие чего на них могут зарождаться новые оборванные границы другой ориентации. Результаты моделирования дислокационной структуры, возникающей при взаимодействии потока решеточных дислокаций, движущихся в первичной системе скольжения ( $\mathbf{n}_2, \mathbf{b}_2$ ), с ранее сформированной оборванной дислокационной границей представлен на рис. 2.14, б).

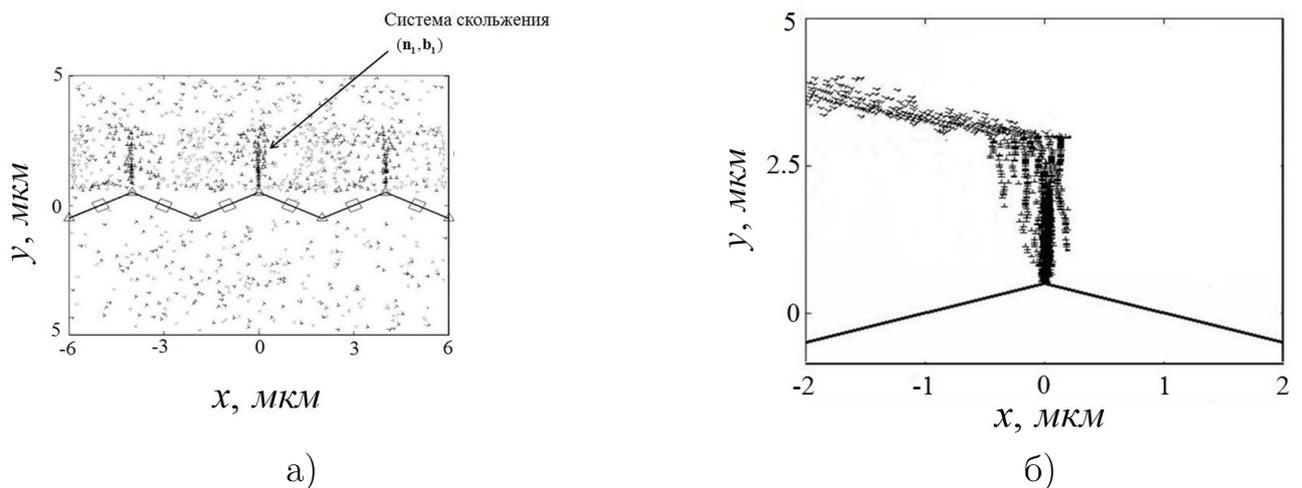


Рисунок 2.14 — Характерная дислокационная структура формирующаяся а) на начальной стадии образования дислокационных границ вблизи фасетированной границы в условиях одноосного сжатия бикристалла, б) на стыке фасеток при действии двух (основной и аккомодационной) систем скольжения

В результате, дислокационную структуру, сформировавшуюся на стыке фасеток при действии аккомодационной ( $\mathbf{n}_1, \mathbf{b}_1$ ) и первичной ( $\mathbf{n}_2, \mathbf{b}_2$ ) систем скольжения можно представить как единую оборванную дислокационную границу, состоящую из коротких участков, резко меняющих свое направление.

## 2.6 Релаксация упругих полей от мезодефектов за счет формирования полосы сдвига

*В данном параграфе диссертации использованы материалы статьи: Кириков С.В., Перевезенцев В.Н., Пупынин А.С. Модель аккомодации сдвигового планарного мезодефекта // Деформация и разрушение материалов. – 2022. – № 5. – С. 2-10.*

Рассмотрим процесс релаксации полей упругих напряжений от планарного сдвигового мезодефекта путем формирования аккомодационной полосы скольжения. Для этого в качестве модельного приближения возьмем сдвиговый мезодефект, который имеет длину  $2a$  и мощность  $\mathbf{w}_\tau$  (рис. 2.15, а). Декартову систему координат выберем таким образом, чтобы ее начало совпало с центром мезодефекта, а ось  $Ox$  была направлена вдоль плоскости его залегания. Проанализируем процесс аккомодации мезодефекта, осуществляемый путем отщепления дислокационных стенок с однородной плотностью вектора Бюргерса  $\mathbf{w}_{wall}$  под углом  $\varphi$  к оси  $Ox$ . Положим, что внешнее сдвиговое напряжение  $\sigma_\varphi$  ( $\equiv \sigma_{r\varphi}$ ) в полосе препятствует движению стенки. В рамках рассматриваемой модели испускаемые дислокационные стенки представим в виде двухосных диполей клиновых дисклинаций с модулем вектора Франка равным модулю плотности вектора Бюргерса исходных стенок.

При отщеплении дислокационные стенки под действием внутренних напряжений уходят в тело зерна и формируют полосу скольжения. При этом на месте исходного сдвигового мезодефекта формируется система комбинированных мезодефектов, характеристики которой зависят от положения, мощности и количества отщепленных дислокационных стенок. Для дальнейшего упрощения численных расчетов положения дислокационных стенок будем характеризовать обобщенными координатами  $q_i$ , которые будем представлять в виде вектор-строки  $\mathbf{q} = (q_1, q_2 \dots)$ , при этом будем считать, что  $q_i \geq q_j$  при  $i > j$ . При отщеплении каждой новой дислокационной стенки в конец вектор-строки будет добавляться обобщенная координата этой стенки.

Рассмотрим момент времени после отщепления  $n$  дислокационных стенок  $\mathbf{q} = (q_1, q_2 \dots, q_n)$  (рис. 2.15, б). Разделим стенки, на те которые отщепились полностью (записаны в вектор-строку координат  $\mathbf{q}'$ ) и те, которые остались

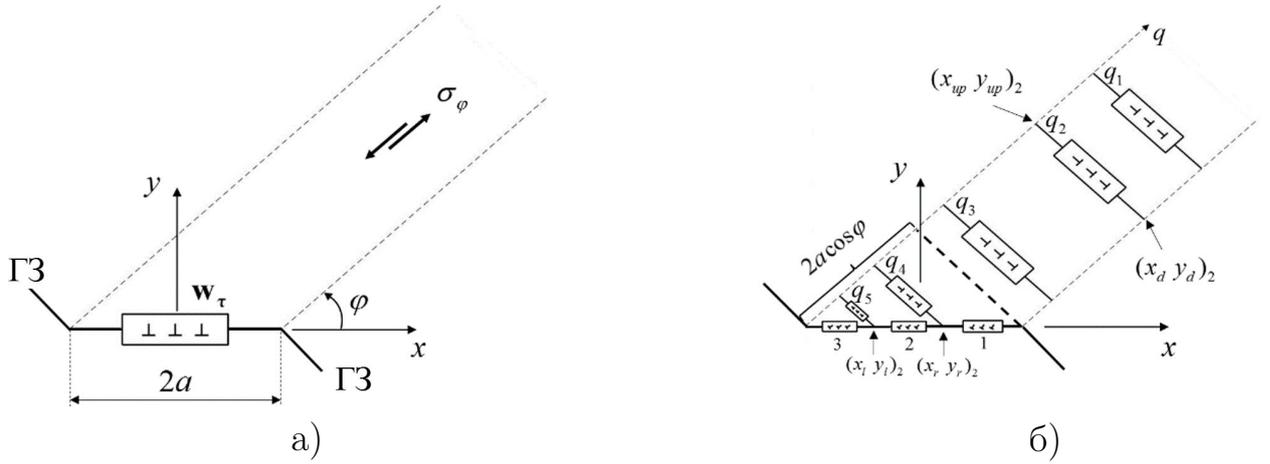


Рисунок 2.15 — Схематичное представление сдвигового мезодефекта а) в исходном состоянии, б) после релаксации

вблизи релаксирующего мезодефекта (записаны в вектор-строку координат  $\mathbf{q}''$ ):

$$\begin{aligned} \mathbf{q}' &= (q_i \mid q_i \geq 2a \cos \varphi), \quad \dim(\mathbf{q}') = n', \\ \mathbf{q}'' &= (q_i \mid q_i < 2a \cos \varphi), \quad \dim(\mathbf{q}'') = n'', \end{aligned} \quad (2.45)$$

где  $n'$  — количество отщепленных стенок,  $n''$  — количество стенок оставшихся вблизи релаксирующего мезодефекта. При этом на месте исходного сдвигового мезодефекта, сформируется система, состоящая из  $n'' + 1$  комбинированного мезодефекта (рис. 2.15, б). Координаты и мощности дислокационных стенок и комбинированных мезодефектов в лабораторной системе координат  $Oxy$  связаны с обобщенными координатами  $q_i$  следующим образом:

Плотность вектора Бюргерса дислокационной стенки:

$$\mathbf{w}_{\text{wall}} = w_{\text{wall}}(\cos \varphi \quad \sin \varphi). \quad (2.46)$$

Координаты границ дислокационных стенок:

$$\begin{aligned} (x_{up})_i &= -a + q_i \cos \varphi, & (y_{up})_i &= q_i \sin \varphi; \\ (x_d)_i &= \begin{cases} a + (q_i - 2a \cos \varphi) \cos \varphi, & q_i \geq 2a \cos \varphi, \\ -a + q_i / \cos \varphi, & q_i < 2a \cos \varphi, \end{cases} \\ (y_d)_i &= \begin{cases} (q_i - 2a \cos \varphi) \sin \varphi, & q_i \geq 2a \cos \varphi, \\ 0, & q_i < 2a \cos \varphi. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Мощности  $i$ -ого сдвигового и нормального мезодефектов (лежащих на одном

участке границы):

$$\begin{aligned} (w_\tau^{(c)})_i &= w_\tau - (n' + i - 1)w_{wall} \cos \varphi \sin \varphi, \\ (w_N^{(c)})_i &= w_N - (n' + i - 1)w_{wall} \sin \varphi \sin \varphi. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Координаты  $i$ -ого комбинированного мезодефекта:

$$\begin{aligned} (x_l)_i &= \begin{cases} q_i'', & i \neq n'' + 1 \\ -a, & i = n'' + 1 \end{cases}, \quad (x_r)_i = \begin{cases} q_{i-1}'', & i \neq 1 \\ a, & i = 1 \end{cases}, \\ (y_l)_i &= (y_r)_i = 0, \end{aligned} \quad (2.49)$$

где  $(x_r, y_r)_i$  и  $(x_l, y_l)_i$  – координаты правой и левой границы  $i$ -ого комбинированного мезодефекта.

Алгоритм поиска равновесной конфигурации представляет из себя итерационную процедуру. Рассмотрим  $n$ -ый шаг этой процедуры, который состоит из двух этапов. На первом этапе определяется возможность отщепления новой  $n$ -ой стенки. Для этого от актуального релаксирующего мезодефекта отщепляется дислокационная стенка и отводится на малую величину  $\delta q_n$ . Далее рассчитывается изменение упругой энергии  $\delta E$  с учетом работы внешнего напряжения  $A_{ext}(\delta q_n)$ :

$$\delta E = E_2(q_1, q_2, \dots, q_{n-1}, \delta q_n) - E_1(q_1, q_2, \dots, q_{n-1}) - A_{ext}(\delta q_n), \quad (2.50)$$

где  $E_1(q_1, q_2, \dots, q_{n-1})$ ,  $E_2(q_1, q_2, \dots, q_{n-1}, \delta q_n)$  – упругая энергия актуальной системы мезодефектов до и после отщепления  $n$ -ой стенки. Если величина  $\delta E < 0$ , то происходит испускание  $n$ -ой стенки, иначе равновесное положение системы стенок найдено. На втором этапе определяется равновесная конфигурация системы дислокационных стенок с учетом новой отщепленной  $n$ -ой стенки. Поиск равновесной конфигурации происходил методом последовательных приближений, включавший в себя многократный перебор по всем стенкам и поиск равновесного положения каждой из этих стенок при фиксированных положениях остальных стенок. Предполагалось, что равновесие системы стенок найдено, если после итерации по всем дислокационным стенкам их местоположение меняется незначительно, то есть выполняется условие:

$$\sum_{j=1}^n |\Delta q_j| \leq \varepsilon. \quad (2.51)$$

Величину упругой энергии  $E$  определяли как:

$$E = E_{\Sigma}^{(w)} + E_{\Sigma}^{(c)} + W_{\Sigma}^{(w)} + W_{\Sigma}^{(c)} + W_{\Sigma}^{(w,c)}, \quad (2.52)$$

где  $E_{\Sigma}^{(w)}$  – сумма всех собственных энергий дислокационных стенок,  $E_{\Sigma}^{(c)}$  – сумма всех собственных энергий комбинированных мезодефектов,  $W_{\Sigma}^{(w)}$  – суммарная энергия взаимодействия дислокационных стенок,  $W_{\Sigma}^{(c)}$  – суммарная энергия взаимодействия комбинированных мезодефектов,  $W_{\Sigma}^{(w,c)}$  – суммарная энергия взаимодействия дислокационных стенок с комбинированными мезодефектами. Выражения для этих энергий приведены в главе 1.

Численные расчеты были выполнены при следующих величинах параметров модели:  $G = 45000$  МПа,  $\nu = 0.3$ ,  $R_a = 20$  мкм. Перемещение дислокационных стенок происходило по дискретной сетки с шагом равным  $\Delta q = 2.7 \cdot 10^{-4}$  мкм. Длина сдвигового мезодефекта  $2a$ , его мощность  $w_{\tau}$ , величина внешнего напряжения  $\sigma_{\varphi}$ , мощность отщепляемой стенки  $w_{wall}$  варьировались в следующих диапазонах:  $2a \in [0.2, 0.4]$  мкм,  $w_{\tau} \in [0.03, 0.06]$ ,  $\sigma_{\varphi} = 30$  МПа или  $\sigma_{\varphi} = 50$  МПа,  $w_{wall} \in [0.01, 0.001]$ .

На рис. 2.16 показана зависимость нормированной упругой энергии системы дефектов  $E/E_0$  после процесса релаксации ( $E_0$  – упругая энергия исходного мезодефекта) от мощности испускаемых дислокационных стенок  $w_{wall}$  при  $w_{\tau} = 3 \cdot 10^{-2}$ ,  $2a = 0.2$  мкм,  $\sigma_{\varphi} = 30$  МПа,  $\varphi = 45^{\circ}$ . Из рисунка видно, что зависимость  $E/E_0(1/w_{wall})$  является монотонно убывающей функцией и при  $w_{wall} \rightarrow 0$  (или  $1/w_{wall} \rightarrow \infty$ ) имеет горизонтальную асимптоту. Аналогичное поведения  $E/E_0(1/w_{wall})$  проявляет и при других значениях параметров модели. В дальнейших расчетах будем считать, что величина  $w_{wall}$  достаточно мала ( $w_{wall} = 1.25 \cdot 10^{-3}$ ).

На рис. 2.17 приведены зависимости нормированной упругой энергии системы дефектов после процесса релаксации  $E/E_0$  от ориентации полосы скольжения  $\varphi$  при различных значениях: (а, б) характеристик начального мезодефекта, (в) внешнего запирающего напряжения. Видно, что релаксация мезодефекта происходит в определенном интервале ориентаций полосы скольжения  $\varphi \in [\varphi_0, \pi/2]$ . В случае если  $\varphi < \varphi_0$ , то аккомодационная пластическая деформация по механизму испускания дислокационных стенок оказывается невозможной. При выбранном шаге дискретизации  $2.7 \cdot 10^{-4}$  мкм по координате  $\varphi_0$

слабо зависит от характеристик исходного планарного сдвигового мезодефекта и примерно равна  $36^\circ$ . При увеличении угла  $\varphi$  энергия релаксированной системе  $E/E_0$  резко падает и при значении  $\varphi_{min} \approx 38^\circ$  достигает своего минимума. Дальнейшее увеличение угла  $\varphi$  приводит к росту энергии системы и когда  $\varphi$  близки к  $\pi/2$  мезодефект практически не релаксирует.

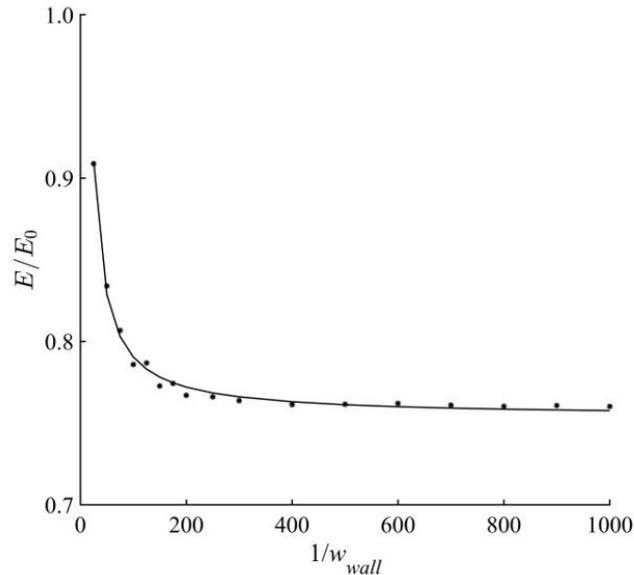


Рисунок 2.16 — Зависимость нормированной упругой энергии системы дефектов  $E/E_0$  после процесса релаксации от мощности стенок  $w_{wall}$  при  $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$ ,  $2a = 0.2$  мкм,  $\sigma_\varphi = 30$  МПа,  $\varphi = 45^\circ$

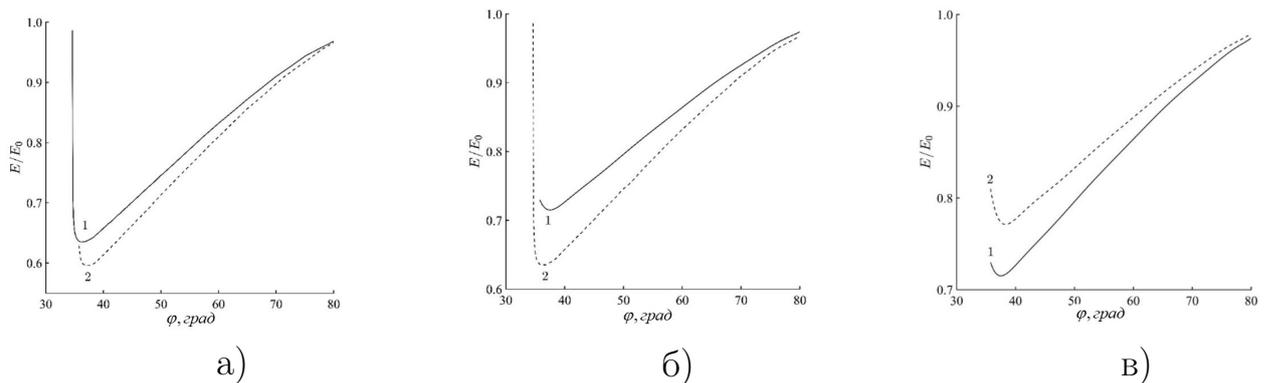


Рисунок 2.17 — Зависимости нормированной упругой энергии системы дефектов  $E/E_0$  после процесса релаксации от величины угла  $\varphi$  при различных величинах а) длины мезодефекта: 1 –  $2a = 0.2$  мкм, 2 –  $2a = 0.4$  мкм ( $w_\tau = 6 \cdot 10^{-2}$ ,  $\sigma_\varphi = 30$  МПа), б) мощности мезодефекта: 1 –  $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$ , 2 –  $w_\tau = 6 \cdot 10^{-2}$  ( $2a = 0.2$  мкм,  $\sigma_\varphi = 30$  МПа), в) величины внешнего запирающего напряжения: 1 –  $\sigma_\varphi = 30$  МПа, 2 –  $\sigma_\varphi = 50$  МПа ( $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$ ,  $2a = 0.2$  мкм)

На рис. 2.18 приведены зависимости длины аккомодационной полосы сколь-

жения  $q_{max}$  от угла  $\varphi$  при различных значениях: (а, б) характеристик начального мезодефекта, (в) внешнего запирающего напряжения. Как и следовало ожидать при увеличении  $w_\tau$  и  $2a$ , что соответствует увеличению суммарного вектора Бюргера мезодефекта, происходит увеличение длины полосы. При увеличении внешнего запирающего напряжения, которое слабо влияет на положение и величину минимума функции  $E(\varphi_{min})/E_0$ , однако может существенно изменять длину полосы скольжения  $q_{max}$ .

Отметим, что для появления явно выраженной полосы скольжения, ее длина должна заметно превосходить длину исходного мезодефекта. Это обстоятельство налагает ограничение на интервал углов  $\varphi$ , в котором можно было бы проводить сопоставление результатов расчетов с данными электронно-микроскопических наблюдений аккомодационных полос скольжения. Верхнюю границу интервала изменений угла наклона полосы скольжения можно условно определить как величину угла  $\varphi$ , при котором  $q_{max} \approx 2a$ . Следует отметить, что стенки могут отщепляться и с противоположного конца мезодефекта. При этом аккомодационная полоса скольжения будет располагаться под углом  $\varphi > \pi/2$ . В силу симметрии исходной конфигурации мезодефекта все сделанные ранее выводы будут справедливы и для этого случая.

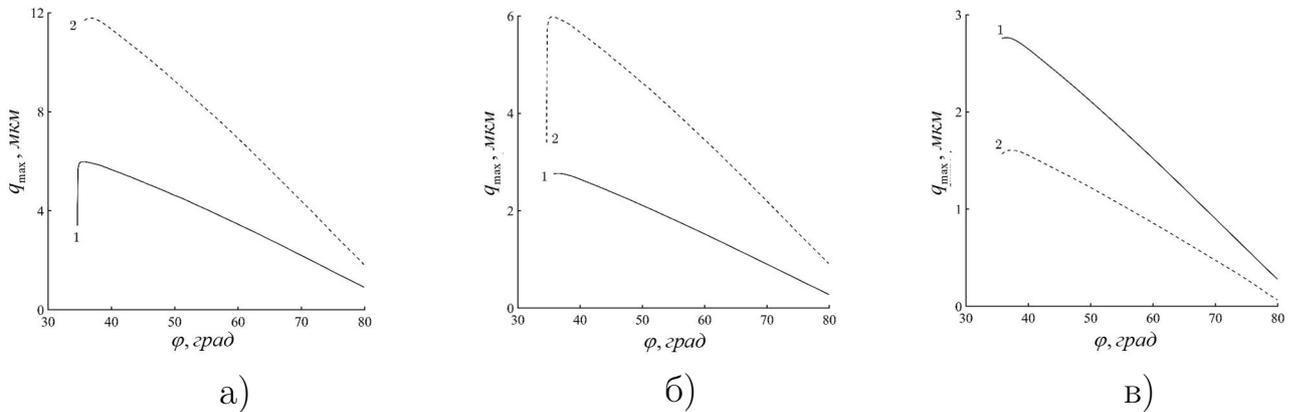


Рисунок 2.18 — Зависимости длины полосы скольжения  $q_{max}$  от угла  $\varphi$  при различных значениях а) длины исходного мезодефекта: 1 —  $2a = 0.2$  мкм, 2 —  $2a = 0.4$  мкм ( $w_\tau = 6 \cdot 10^{-2}$ ,  $\sigma_\varphi = 30$  МПа), б) мощности мезодефекта: 1 —  $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$ , 2 —  $w_\tau = 6 \cdot 10^{-2}$  ( $2a = 0.2$  мкм,  $\sigma_\varphi = 30$  МПа), в) внешнего тормозящего напряжения: 1 —  $\sigma_\varphi = 30$  МПа, 2 —  $\sigma_\varphi = 50$  МПа ( $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$ ,  $2a = 0.2$  мкм)

Распределение аккомодационной пластической деформации  $\varepsilon_{pl}$  в полосе скольжения иллюстрирует рис. 2.19.

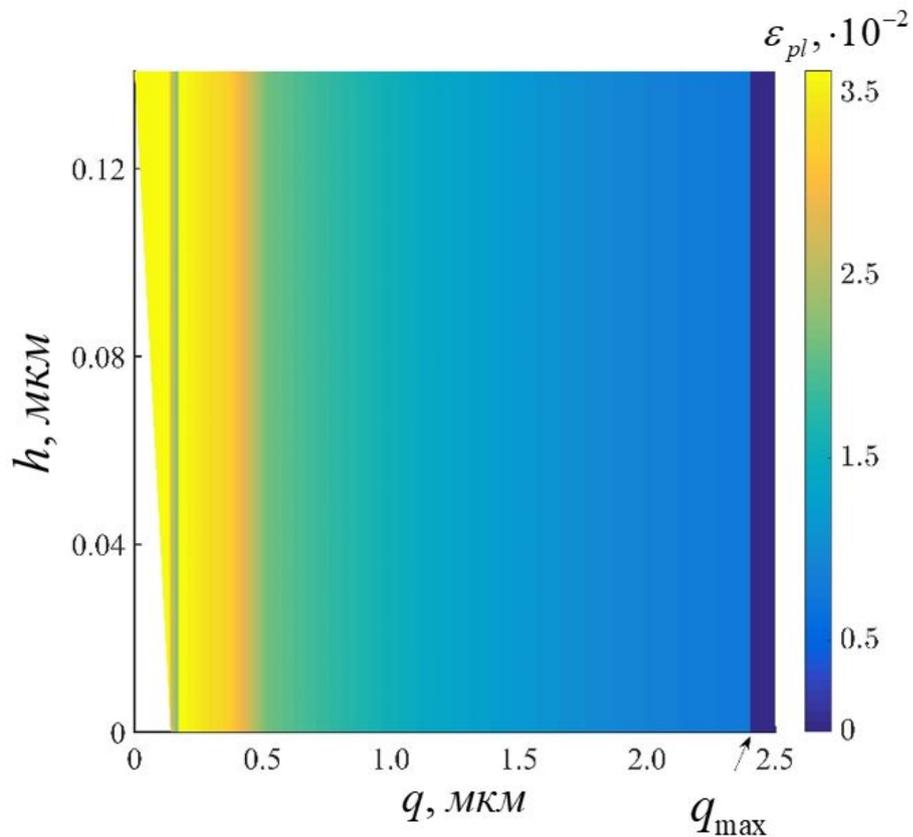


Рисунок 2.19 — Распределение величины пластической деформации по длине полосы скольжения при  $\varphi = 45^\circ$ ,  $w_\tau = 3 \cdot 10^{-2}$ ,  $2a = 0.2$  мкм,  $\sigma_\varphi = 30$  МПа

Следует отметить, что в данной модели дислокационные стенки рассматривались в континуальном приближении как диполи клиновых дисклинаций. В реальности в кристаллических твердых телах аккомодационная пластическая деформация должна осуществляться движением стенок, состоящих из решеточных дислокаций, консервативное движение которых возможно лишь по определенным кристаллографическим плоскостям (плоскостям скольжения). Поэтому в каждом конкретном случае имеется дискретный набор плоскостей аккомодационного решеточного скольжения, а, следовательно, и дискретный набор возможных ориентаций полосы скольжения. При этом может оказаться, что ни одна из них не соответствует найденному интервалу значений углов  $\varphi$ , при которых такой механизм аккомодации может быть энергетически выгодным. Однако статистически при случайном распределении ориентации зерен и ориентации деформационных фасеток на границах, содержащих планарные сдвиговые мезодефекты, можно ожидать, что всегда в ансамбле зерен пластически деформированного поликристалла найдутся зерна, в которых кристаллографические

плоскости скольжения совпадают с наиболее энергетически выгодными ориентациями аккомодационных полос скольжения. При этом наиболее выраженные (наиболее протяженные) полосы скольжения будут появляться в окрестности планарных сдвиговых мезодефектов достаточно большой мощности и протяженности. Отметим, что аккомодационные полосы скольжения наблюдаются на электронно-микроскопических снимках структуры деформированных поликристаллов.

## 2.7 Выводы по главе II

1. Рассмотрены модели образования ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границах зерен поликристаллического материала, при их взаимодействии с локализованной пластической деформацией: в полосах сдвига (скольжения) и в плоскости скольжения.
2. В результате проведенного геометрического и энергетического анализа процесса взаимодействия решеточных дислокаций с исходной границей зерна получены аналитические выражения, позволяющие по заданным параметрам решеточного скольжения рассчитать характеристики деформационных фасеток и ротационно-сдвиговых мезодефектов формирующихся на них.
3. Проанализированы типичные конфигурации оборванных дислокационных границ, формирующихся в ходе пластической деформации вблизи фасетированных границ зерен. Установлены причины их возникновения. Показано, что форма и размеры оборванных дислокационных границ деформационного происхождения определяются геометрией фасетированной границы и загрузкой актуальных систем скольжения решеточных дислокаций.
4. Предложена модель аккомодационной пластической деформации и релаксации упругой энергии планарных сдвиговых мезодефектов, возникающих на фасетках границ зёрен в процессе пластической деформации. Показано, что этот процесс может осуществляться путём последовательного отщепления от мезодефекта и ухода в тело зерна дислокационных стенок. Проанализирована зависимость энергии релаксированного состояния системы от характеристик исходного сдвигового мезодефекта (его длины и мощности), мощности отщепляемых стенок, величины запирающего внеш-

него напряжения и угла наклона аккомодационной полосы скольжения по отношению к плоскости мезодефекта. Показано, что аккомодационная пластическая деформация по механизму испускания дислокационных стенок возможна лишь в определённом интервале значений параметров рассматриваемой системы. Рассчитаны зависимости длины аккомодационной полосы скольжения от её угла наклона по отношению к границе зерна при разных величинах запирающего внешнего напряжения и характеристиках исходного сдвигового мезодефекта. Рассчитано пространственное распределение величины аккомодационной пластической деформации в окрестности мезодефекта.

## ГЛАВА 3.

### РОЛЬ МЕЗОДЕФЕКТОВ В ПРОЦЕССАХ ЗАРОЖДЕНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ МИКРОТРЕЩИН В ФРАГМЕНТИРОВАННОЙ СТРУКТУРЕ

#### 3.1 Релаксация упругих полей напряжений мезодефектов за счет формирования микротрещин

Согласно современным представлениям, высокие локальные напряжения, которые инициируют процесс разрушения, связаны не с концентрацией внешнего напряжения на неоднородностях сплошной среды (включениях, порах), а с протеканием неоднородной пластической деформации. Несовместность пластической деформации приводит к накоплению дефектов и росту внутренних растягивающих напряжений. В случае если их релаксация за счет протекания аккомодационной пластической деформации по каким-то причинам невозможна, то реализуется механизм сброса упругих напряжений, связанный с формированием микротрещин.

Первые модели зарождения трещин, связанные с несовместностью пластической деформации, появились в середине XX века. Одна из основополагающих идей в этом направлении была предложена Зинером, а математическая модель разработана Стро [96–99]. Суть идеи состоит в том, что скопление решеточных дислокаций тормозится около барьера, например, межфазной границы или границы зерна. В результате в голове скопления возникает высокая плотность дислокаций и как следствие высокие растягивающие напряжения, что и приводит к зарождению трещины. Однако данная модель имеет ряд недостатков: во-первых, для зарождения трещины требуются очень большие скопления дислокаций, которые не наблюдаются на эксперименте, во-вторых, необходимы очень прочные препятствия, способные затормозить скопления, не разрушившись, и в третьих, модель Стро не описывает формирование стабильных микротрещин, так как зародившиеся в соответствии с ней дислокационные трещины при действующих внешних напряжениях сразу превращаются в магистральные. Впоследствии были предложены различные модификации модели Стро [100–106], отчасти устраняющие недостатки последней.

В случае сильно фрагментированных структур, когда размер фрагментов

не превышает 0.2 – 0.3 микрон, приведенные выше классические модели зарождения трещин, основанные на представлениях о заторможенных границами зёрен плоских скоплениях решёточных дислокаций, становятся неприменимы (размер скопления ограничен размером фрагментов + внутри фрагментов нет дислокаций). При этом важной особенностью фрагментированной структуры является наличие в границах и стыках фрагментов мезодефектов. В этой связи в последние годы развиваются модели зарождения трещин в упругих полях мезодефектов: супердислокаций [107], прямолинейных клиновых (стыковых) дисклинаций [108–110], их диполях [111, 112] и более сложных комбинаций клиновых дисклинаций [113]. На рис. 3.1 приведен электронно-микроскопический снимок фрагментированной структуры, полученный в работе [114], с сформировавшейся в стыке фрагментов клиновидной микротрещиной.

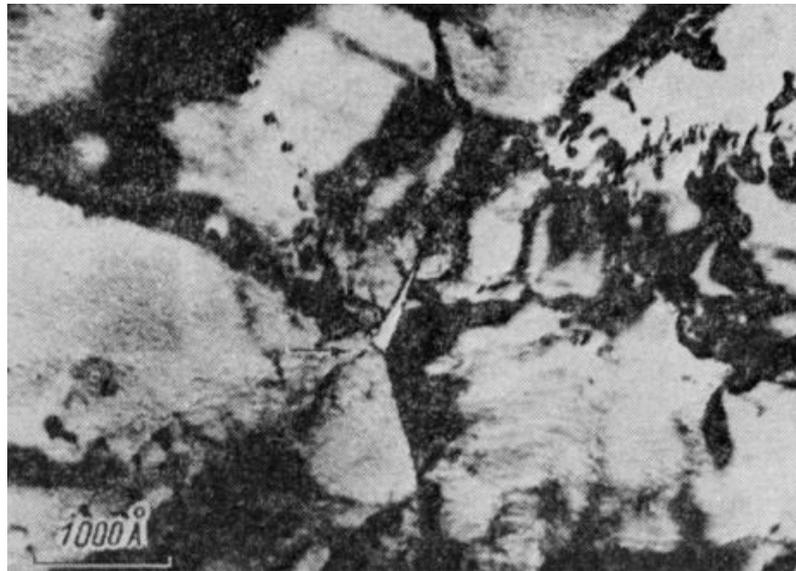


Рисунок 3.1 — Электронно-микроскопическое изображение фрагментированной структуры с микротрещиной, сформировавшейся в стыке границ фрагмента зерен ( $\text{Mo}$ ,  $\varepsilon_{pl} = 1.08$ )

Известно, что разрушение металлов и сплавов при больших пластических деформациях происходит путём накопления большого количества микротрещин в локальных областях материала – «очагах разрушения» и последующей стадии квазихрупкого разрушения, связанного с ослаблением живого сечения образца. Поэтому, наряду с моделями зарождения микротрещин, важным этапом построения теории разрушения сильнофрагментированных структур является вопрос о стабилизации зародившихся микротрещин. Ротационно-сдвиговые

мезодефекты в этом случае играют двойную роль: с одной стороны они способствуют зарождению трещин, а с другой могут препятствовать их дальнейшему распространению, создавая условия для накопления стабильных трещин, ограничивая их длины до размеров сопоставимых со средним размером фрагментов.

Как уже отмечалось, мезодефекты на границах и в стыках зерен могут также возникать в следствие собственного зернограницного атермического проскальзывания. Экспериментальные доказательства возможности проскальзывания при относительно низких температурах, при которых влиянием диффузионных процессов можно пренебречь, были получены в работах [115–120]. Авторы работы [115], используя один из наиболее достоверных методов выявления зернограницного проскальзывания – по разрыву предварительно нанесенных рисок, наблюдали проскальзывание при температуре  $\sim 0.15T_m$  в нелегированном титане ВТ1–0 с субмикроструктурной структурой, содержащей высокую долю неравновесных большеугловых границ зерен деформационного происхождения. Проскальзывание по границам зёрен наблюдалось при комнатной температуре в цинке [116], магнии [117], сплавах на их основе [118, 119] и титане [120]. Электронно-микроскопические исследования зернограницного проскальзывания в деформированном одноосным растяжением при комнатной температуре титановом сплаве Ti-6Al-4V [121] выявили его тесную связь с внутризёренным скольжением. Теоретические модели зарождения трещин в результате атермического зернограницного проскальзывания рассматривались в работах [122, 123]. Анализ условий зарождения трещин вблизи тройных стыков зёрен в поликристаллическом кремнии за счёт собственного зернограницного проскальзывания был проведен в работе [122]. В работе [123] рассмотрена модель зарождения трещины в упругом поле диполя клиновых дисклинаций, возникающего в стыке зёрен в процессе зернограницного проскальзывания.

Не смотря на обилие работ, посвященных тематике формирования микротрещин на мезодефектах, некоторые важные вопросы остались до сих пор не исследованы. Например, не изучено влияние сдвигового мезодефекта, на формирующуюся в стыке с отрицательной дисклинацией микротрещину. Что касается, атермического проскальзывания то известно, что оно инициируется в основном на тех участках границы, где происходит накопление решёточных дислокаций, например в местах выхода полос скольжения. Из этого очевидно, что наведенные пластической деформацией на границу мезодефекты, могут

влиять на интенсивность зернограничного проскальзывания и способствовать зарождению микротрещины. Этот вопрос так же до сих пор не рассматривался.

Всвязи с этим, в данной главе проведен анализ условий формирования стабильных микротрещин и их характеристик, образующихся во внутренних полях напряжений от планарного комбинированного мезодефекта и суммарном внешнем однородном поле и внутреннем поле от диполя дисклинаций. Далее рассмотрена модель зарождения трещины на фасетке, содержащей комбинированный мезодефект, путем атермического зернограничного проскальзывания. Отдельно исследовано условие стабилизации микротрещин упругими полями мезодефектов. Проведенный в работе анализ может быть полезен для построения более общих физических теорий накопления повреждений и разрушения поликристаллических материалов.

### 3.2 Метод конфигурационной силы

Для проведения анализа условий существования стабильных микротрещин и их характеристик воспользуемся энергетическим методом, согласно которому распространение трещины происходит в случае, если:

$$\frac{dE_{el}}{dl} + \frac{d\Gamma}{dl} \leq 0, \quad (3.1)$$

где  $dE_{el}$  – изменение (релаксация) упругой энергии системы при продвижении микротрещины на величину  $dl$ ,  $d\Gamma$  – изменение энергии системы, связанное с формированием берегов трещины, выделением тепла, формирование пластической зоны и т.д при продвижении микротрещины на величину  $dl$ .

Для расчета  $E'_{el}$  воспользуемся методом конфигурационной силы [107]. Для плоской деформации изотропного материала выражение для конфигурационной силы  $F$ , определяемой как величина упругой энергии, выделяющейся при продвижении трещины на единичный отрезок, имеет вид:

$$F(l) = -\frac{dE_{el}}{dl} = F_I(l) + F_{II}(l), \quad (3.2)$$

$$F_I(l) = \frac{l}{8D} \chi \bar{\sigma}_{\varphi\varphi}^2; \quad F_{II}(l) = \frac{l}{8D} \bar{\sigma}_{r\varphi}^2, \quad (3.3)$$

$D = G/2\pi(1 - \nu)$ ,  $G$  – модуль сдвига,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $l$  – длина трещины,  $\varphi$  – полярный угол, задающий ориентацию рассматриваемой трещины,

$\bar{\sigma}_{\varphi\varphi}, \bar{\sigma}_{r\varphi}$  – средневзвешенные суммарные напряжения в окрестности трещины:

$$\bar{\sigma}_{\varphi\varphi} = \frac{2}{\pi l} \int_0^l \sigma_{\varphi\varphi}(r, \varphi) \sqrt{\frac{r}{l-r}} dr, \quad \bar{\sigma}_{r\varphi} = \frac{2}{\pi l} \int_0^l \sigma_{r\varphi}(r, \varphi) \sqrt{\frac{r}{l-r}} dr, \quad (3.4)$$

$$\chi = \begin{cases} 1, & \bar{\sigma}_{\varphi\varphi} > 0, \\ 0, & \bar{\sigma}_{\varphi\varphi} \leq 0, \end{cases}$$

где  $\sigma_{\varphi\varphi}(r, \varphi), \sigma_{r\varphi}(r, \varphi)$  – компоненты напряжения в полярной системе координат. Взаимосвязь составляющих конфигурационной силы с коэффициентами интенсивности напряжений  $K_I(l)$  и  $K_{II}(l)$  дается следующими выражениями:

$$K_I(l) = \sqrt{2G \frac{F_I(l)}{1-\nu}}, \quad K_{II}(l) = \sqrt{2G \frac{F_{II}(l)}{1-\nu}}. \quad (3.5)$$

Будем считать, что вкладом диссипативных процессов в изменение энергии рассматриваемой системы при распространении трещины можно пренебречь. Так же исходя из того, что при больших пластических деформациях протекание пластической деформации внутри фрагмента затруднено, вследствие чего затруднена и релаксации напряжений в кончике трещины, то будем предполагать, что микротрещина распространяется без формирования пластической зоны. Тогда,  $d\Gamma$  запишется как:

$$d\Gamma = 2\gamma dl, \quad (3.6)$$

$\gamma$  – удельная энергия свободной поверхности (не зависит от длины микротрещины).

В результате сделанных предположений критерий распространения (схлопывания) микротрещины:

$$\begin{aligned} F(l) > 2\gamma & - \text{микротрещина растет,} \\ F(l) < 2\gamma & - \text{микротрещина схлопывается.} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Равновесные длины микротрещин для заданного направления  $\varphi$  будут определяться из соотношения  $F(l_{eq}, \varphi) = 2\gamma$ . При этом равновесная длина трещины  $l_{st}$  называется стабильной или устойчивой, если выполняется условие  $F'(l_{st}, \varphi) < 0$ , то есть дальнейший рост трещины является энергетиче-

ски невыгодным процессом. Равновесная длина трещины  $l_{un}$  называется нестабильной или неустойчивой, если выполняется условие  $F'(l_{un}, \varphi) > 0$ . В случае  $F'(l, \varphi) = 0$  (или существовании только односторонней производной) для исследования стабильности микротрещины необходимо проводить более детальный анализ.

В работе [107] было показано, что в зависимости от типа расходимости функции напряжений в месте локализации мезодефекта  $r^{-\alpha}$ , ( $\alpha > 0$ ), могут реализоваться три характерных случая (рис. 3.2):

- 1 тип –  $\alpha = 1/2$ : конфигурационная сила не зависит от длины трещины, при  $F > 2\gamma$  зарождение трещины и ее распространение происходит беспрепятственно;
- 2 тип –  $\alpha > 1/2$ : конфигурационная сила спадает по мере роста трещины, трещина достигает некоторой максимальной длины и останавливается;
- 3 тип –  $\alpha < 1/2$ : конфигурационная сила растет по мере увеличения роста трещины, наиболее сложным этапом разрушения является зарождение трещины.

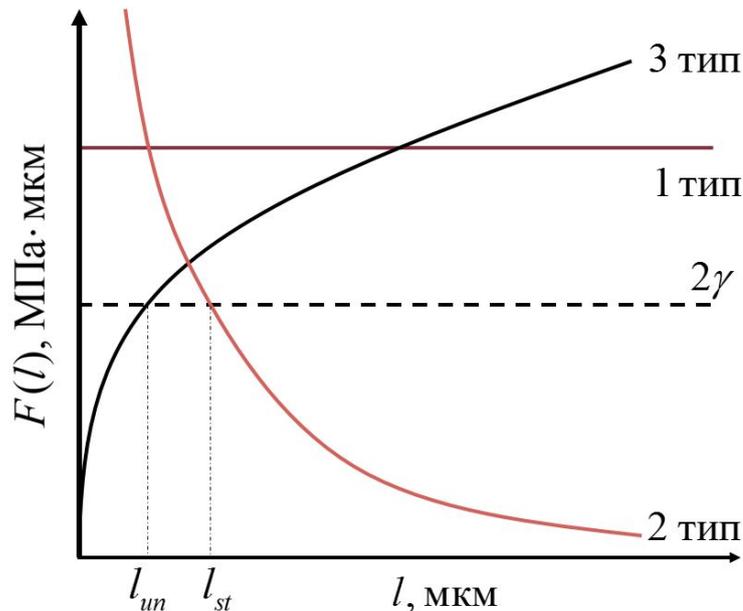


Рисунок 3.2 — Схематичное представление зависимостей конфигурационной силы  $F$  от длины трещины  $l$  при разных типах расходимости напряжений

В результате с помощью данного критерия можно исследовать не только условия устойчивости трещины, но и процесс ее зарождения. При этом критерий зарождения трещин достаточно прост:

$$\lim_{l \rightarrow 0} F(l) > 2\gamma. \quad (3.8)$$

С точки зрения физических воззрений предположение о том, что трещина может быть сколь угодно малой длины и при этом  $l \gg u$  неверно ( $u$  – максимальное раскрытие трещины), однако с точки зрения формальной теории принятой в механики разрушения это предположение ничему не противоречит. Далее при анализе условий зарождения микротрещин помимо критерия (3.8) в некоторых случаях будем использовать критерий слияния решеточных дислокаций.

### 3.3 Анализ условий существования стабильных микротрещин и их характеристик, формирующихся в полях напряжений от планарного комбинированного мезодефекта

*В данном разделе диссертации использованы материалы статьи:*

*Кириков, С. В., Перевезенцев В. Н. Анализ условий существования стабильных микротрещин в упругом поле напряжений от ротационно-сдвигового мезодефекта // Письма о материалах. – 2021. – Т. 11. – № 1(41). – С. 50-54.*

*Kirikov S. V., Perevezentsev V. N., Pupyurin A. S. On the Effect of External Stress on the Stability of a Crack Located near a Wedge Disclination Dipole // The Physics of Metals and Metallography. – 2021. – V. 122. – № 8. – P. 820-824.*

**Формирование микротрещины во внутреннем поле мезодефекта.** Проведем анализ условий существования стабильных микротрещин и их параметров, формирующихся на мезодефектах. Рассмотрим комбинированный мезодефект мощностью  $\mathbf{w}_{\text{comb}} = (w_\tau \ w_N)$  ( $w_\tau$  – мощность планарного сдвигового мезодефекта,  $w_N$  – мощность планарного нормального мезодефекта) расположенный на фасетке длиной  $2a$  (рис. 3.3).

Будем полагать, что микротрещина формируется вблизи отрицательной дисклинации диполя, создающей вблизи себя благоприятные для ее появления высокие растягивающие напряжения. В отсутствие сдвигового мезодефекта

та наиболее энергетически благоприятная ориентация совпадает с ориентацией фасетки. В случае, когда  $w_\tau \neq 0$ , микротрещина может располагаться под углом к фасетке. При этом будем исследовать только прямолинейное распространение трещины.

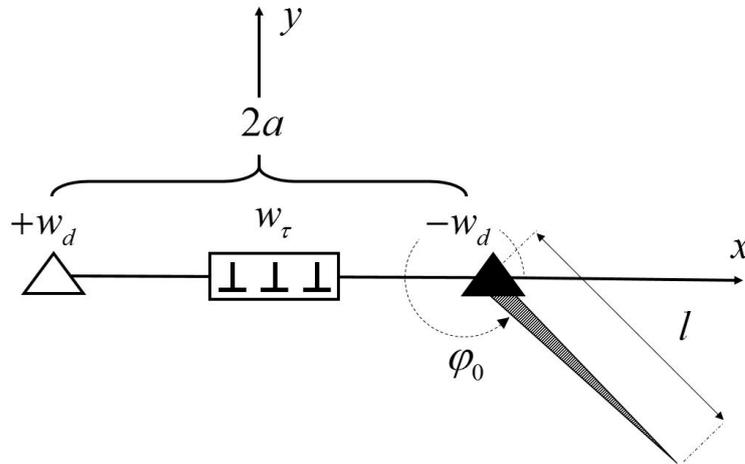


Рисунок 3.3 — Схематическое изображение комбинированного мезодефекта в системе координат, связанной с мезодефектом и микротрещиной, формирующейся вблизи отрицательной дисклинации диполя

Численные расчеты проводились при следующих значениях параметров:  $G = 45000$  МПа,  $\nu = 0.3$ ,  $\gamma = Gb/8$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-4}$  мкм,  $2a = 0.1 - 1$  мкм. Зависимости конфигурационной силы при фиксированных значениях параметров мезодефекта:  $w_\tau = w_N = 0.05$ ,  $2a = 0.4$  мкм от длины микротрещины  $l$ , рассчитанные при разных значениях угла  $\varphi$ , задающего ориентацию трещины, приведены на рис. 3.4. Как видно, зависимости конфигурационной силы имеют более сложный характер, чем зависимости, приведенные на рис. 3.2. Это объясняется тем, что характер спада поля упругих напряжений в этом случае меняется. Как показано в главе 1, вблизи стыка поля от мезодефектов имеют логарифмическую расходимость  $\sim \ln[r]$ , что верно как для диполя (или дисклинации), так и для сдвигового мезодефекта. Так как начиная с некоторого момента при приближении к полюсу логарифм растет медленнее, чем любая степенная функция, то в окрестности стыка вид конфигурационной силы будет соответствовать 3 типу. Следовательно процесс зарождения трещины, то есть ее роста до некоторой длины  $l_{un}$  связан с дополнительной энергетической активацией  $\delta E$ , которая при увеличении мощности мезодефектов может быть сколь

угодно малой. Так как вдали от мезодефектов их поля эквивалентны полю дислокации, то зависимость спадающих упругих напряжений постепенно меняется и переходит в  $\sim 1/r$ . Это соответствует второму типу зависимости, и трещина стабилизируется при некоторой длине  $l_{st}$ .

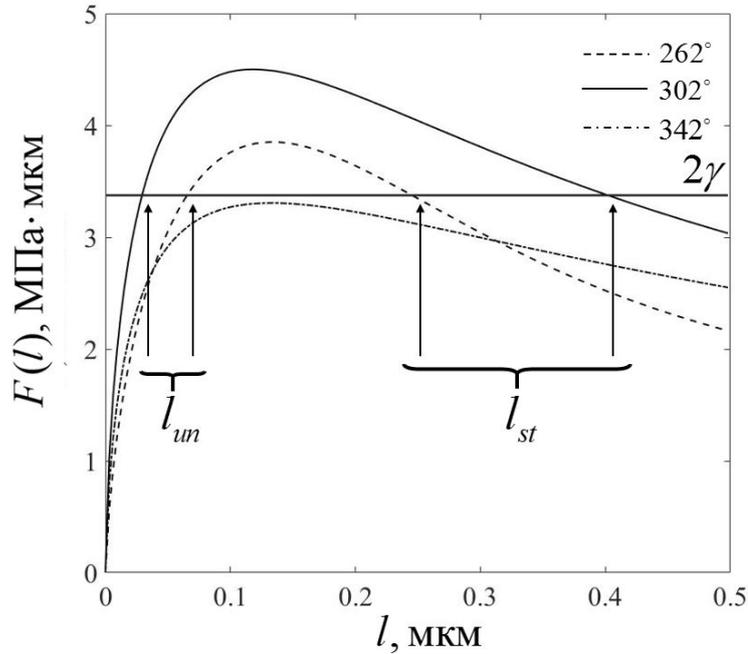


Рисунок 3.4 — Зависимости конфигурационной силы  $F$  от длины формирующейся на мезодефекте трещины  $l$ , рассчитанные при разных значениях  $\varphi$ . Параметры мезодефекта:  $w_\tau = w_N = 0.05$ ,  $2a = 0.4$  мкм

В первом приближении, можно предположить, что чем меньше длина трещины  $l_{un}$ , тем меньше величина энергии активации  $\delta E$ , и тем более вероятно зарождение микротрещины. Как видно из рисунка, величина  $l_{un}$  существенно зависит от ориентации трещины. В дальнейшем будем полагать, что раскрытие трещины происходит в направлении, совпадающем с такой ориентацией  $\varphi$ , при которой длина трещины  $l_{un}$  минимальна и, следовательно, минимальны энергетические затраты на ее образование. При дальнейших расчетах этот критерий использовался для нахождения ориентации трещины при каждом конкретном наборе остальных параметров системы.

При этом необходимое условие для формирования стабильной микротрещины вблизи рассматриваемого мезодефекта при заданных параметрах

$(w_\tau, w_N, 2a)$  можно записать в виде:

$$\max_{\varphi, l} \left[ F(l, \varphi) \Big|_{w_\tau, w_N, 2a} \right] \geq 2\gamma. \quad (3.9)$$

Исходя из этого критерия, в конфигурационном пространстве  $(w_\tau, w_N, 2a)$  можно найти области значений параметров мезодефекта, при которых такая трещина может существовать. Граничная поверхность трехмерной области возможного существования трещины соответствует критическим параметрам мезодефекта:  $w_\tau^{(cr)}$ ,  $w_N^{(cr)}$ ,  $2a^{(cr)}$ , при которых выполняется соотношение:

$$\max_{\varphi, l} \left[ F(l, \varphi) \Big|_{w_\tau^{(cr)}, w_N^{(cr)}, 2a^{(cr)}} \right] = 2\gamma. \quad (3.10)$$

На рис. 3.5, а показаны зависимости критического значения  $w_N^{(cr)}$  от длины дисклинационного диполя  $2a$ , полученные при различных значениях мощности сдвигового мезодефекта:  $w_\tau = 0$ ,  $w_\tau = 0.01$ ,  $w_\tau = 0.02$ . Области параметров, при которых возможно существование стабильных трещин, для каждого из приведенных значений  $w_\tau$  лежат выше соответствующих кривых  $w_N^{(cr)}$ .

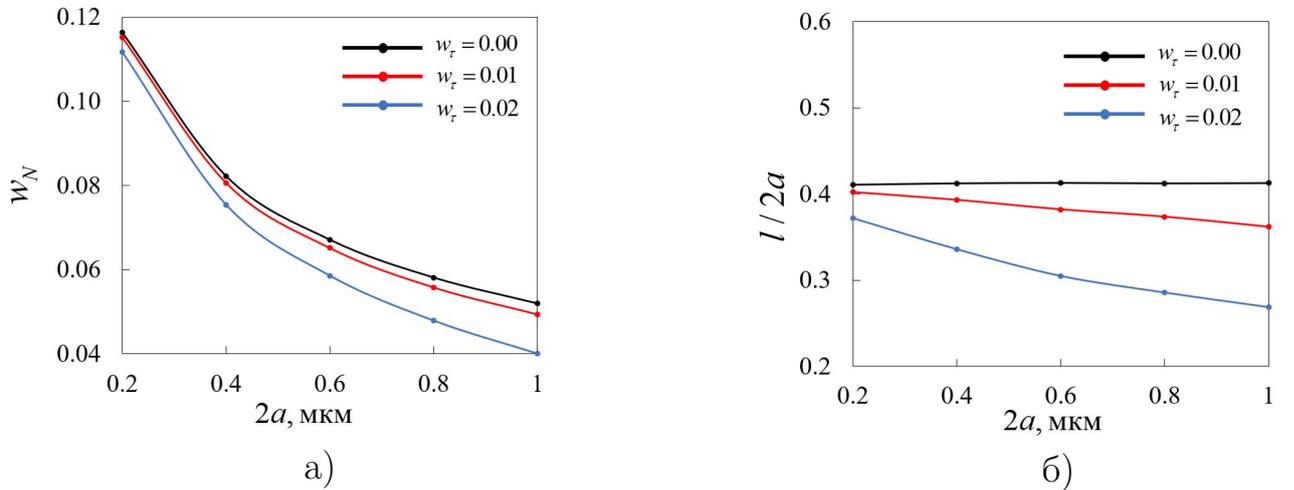


Рисунок 3.5 — Зависимости а) критической мощности  $w_N^{(cr)}(2a)$  от длины фasetки  $2a$ , б) нормированной критической длины микротрещины  $l^{(cr)}/2a$  от длины фasetки  $2a$  при разных значениях  $w_\tau$ :  $w_\tau = 0$ ,  $w_\tau = 0.01$ ,  $w_\tau = 0.02$

Видно, что величина критического значения  $w_N^{(cr)}$  уменьшается с ростом длины фasetки и с увеличением мощности сдвигового мезодефекта. Влияние сдвигового мезодефекта на величину критического значения  $w_N^{(cr)}$ , тем заметнее, чем больше длина фasetки. Зависимости критической длины микротрещи-

ны  $l^{(cr)}$  от длины фасетки при тех же значениях мощности сдвигового мезодефекта  $w_\tau$  приведены на рис 3.5, б.

**Формирование микротрещин в суммарном внешнем однородном поле и внутреннем поле мезодефекта.** Рассмотрим условия стабильности микротрещин в суммарном внешнем однородном поле и внутреннем поле мезодефекта. При этом, так как нормальный и сдвиговой мезодефект имеют аналогичные зависимости конфигурационной силы от длины микротрещины, за исключением того, что сдвиговой мезодефект может существенно изменять ориентацию микротрещины, без потери общности разберем случай, когда  $w_\tau = 0$ . Правостороннюю декартову систему координат выберем согласно рис. 3.6. Энергетически наиболее благоприятная ориентация микротрещины обычно зависит от напряженного состояния. Далее для простоты рассмотрим случай одноосного растяжения вдоль оси  $Oy$ , при этом ориентация микротрещины будет совпадать с ориентацией плеча диполя.

Проведем численные расчеты при следующих значениях параметров:  $G = 45000$  МПа,  $\nu = 0.3$ ,  $\gamma = Gb/8$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-4}$ ,  $2a = 0.1 - 1.5$  мкм,  $\sigma/G = (0 - 4) \cdot 10^{-3}$ . Зависимость конфигурационной силы  $F(l)$  при фиксированных значениях длины мезодефекта  $2a = 0.7$  мкм и внешнего напряжения  $\sigma/G = 2.2 \cdot 10^{-3}$ , рассчитанная при разных значениях мощности диполя клиновых дисклинаций  $w_N$  на рис. 3.7 (а, б).

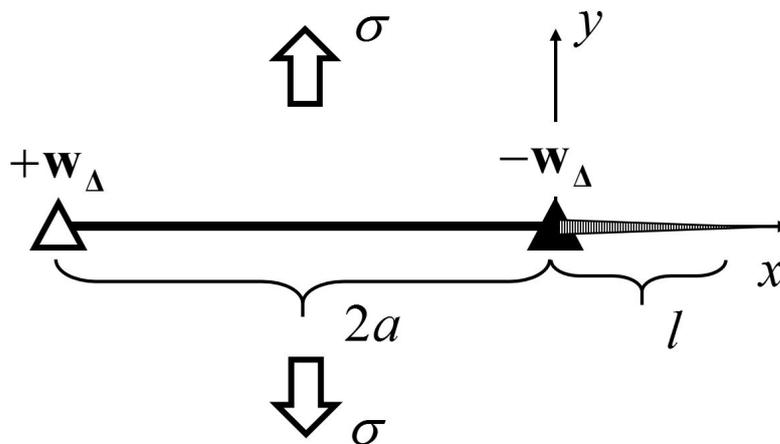


Рисунок 3.6 — Схематическое изображение формирования микротрещины на отрицательной дисклинации диполя

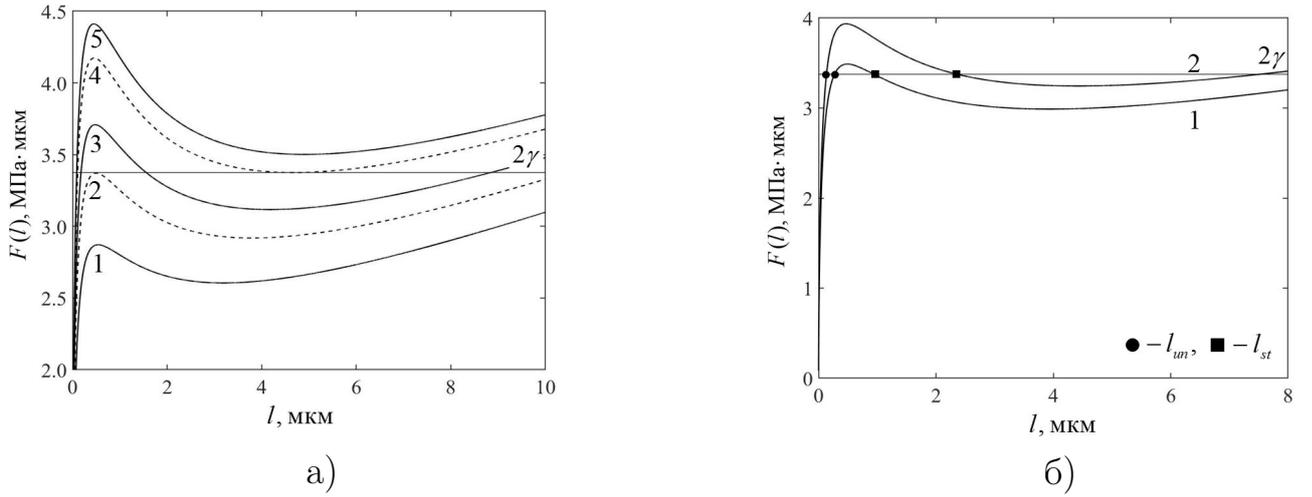


Рисунок 3.7 — Зависимости конфигурационной силы  $F$  от длины трещины  $l$ , рассчитанные для значений  $2a = 0.7$  мкм,  $\sigma/G = 2.2 \cdot 10^{-3}$  при различных значениях мощности диполя клиновых дисклинаций  $w_N$ : а) 1 —  $w_N = 0.05$ , 2 —  $w_N = 0.0549$ , 3 —  $w_N = 0.058$ , 4 —  $w_N = 0.062$ , 5 —  $w_N = 0.064$ ; б) 1 —  $w_N = 0.056$ , 2 —  $w_N = 0.06$

Анализ зависимости конфигурационной силы от длины трещины показывает, что при фиксированных значениях внешнего напряжения и длины диполя дисклинаций существование устойчивых равновесных трещин возможно лишь в определенном диапазоне значений  $w_N$ . Нижнее значение границы этого интервала  $w_N^{(d)}$  удовлетворяет соотношениям:

$$\begin{cases} F(l^{(d)}, w_N^{(d)})|_{2a, \sigma} = 2\gamma, \\ F'(l^{(d)}, w_N^{(d)})|_{2a, \sigma} = 0, \\ F''(l^{(d)}, w_N^{(d)})|_{2a, \sigma} < 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Кривая 2 на рис. 3.7, а показывает вид зависимости  $F(l)$  при  $w_N = w_N^{(d)}$ . Верхняя граница данного интервала  $w_N^{(u)}$ , удовлетворяет соотношениям:

$$\begin{cases} F(l^{(u)}, w_N^{(u)})|_{2a, \sigma} = 2\gamma, \\ F'(l^{(u)}, w_N^{(u)})|_{2a, \sigma} = 0, \\ F''(l^{(u)}, w_N^{(u)})|_{2a, \sigma} > 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

Кривая 4 на рис. 3.7, а показывает вид зависимости  $F(l)$  при  $w_N = w_N^{(u)}$ .

График зависимости  $F(l)$  для промежуточного значения  $w_N$  из интервала  $(w_N^{(d)}, w_N^{(u)})$  отображён на рис. 3.7, а в виде кривой 3. В этом случае по мере увеличения длины трещины при достижении некоторого значения  $l = l_{un}$

возникает положение неустойчивого равновесия трещины. При  $l > l_{un}$  трещина самопроизвольно раскрывается и достигает положения устойчивого равновесия  $l = l_{st}$ . При увеличении мощности диполя дисклинаций  $w_N$  внутри рассматриваемого интервала ( $w_N^{(d)}$   $w_N^{(u)}$ ) происходит уменьшение длины зародышевой трещины и увеличение длины стабильной трещины (рис. 3.7, б).

Проводя аналогичные расчёты зависимости конфигурационной силы  $F(l)$  от длины трещины  $l$  при разных значениях плеча диполя  $2a$  (при заданном значении внешнего напряжения) можно найти зависимости нижнего и верхнего значений границ интервала ( $w_N^{(d)}$   $w_N^{(u)}$ ) от длины диполя. Результаты приведены на рис. 3.8. Верхняя и нижняя кривые на рисунке представляют собой зависимости  $w_N^{(d)}(2a)$  и  $w_N^{(u)}(2a)$ , соответственно. В конфигурационном пространстве ( $w_N$   $2a$ ) кривые  $w_N^{(d)}(2a)$  и  $w_N^{(u)}(2a)$  отсекают области существования стабильных трещин (на рисунке они выделены серым фоном).

Проведенный анализ показывает, что при увеличении длины диполя происходит сужение интервала ( $w_N^{(d)}$   $w_N^{(u)}$ ) и стягивание его в точку при  $w_N^* = w_N^{(d)} = w_N^{(u)}$  и некотором значении длины плеча диполя  $2a = 2a^{(*)}$ .

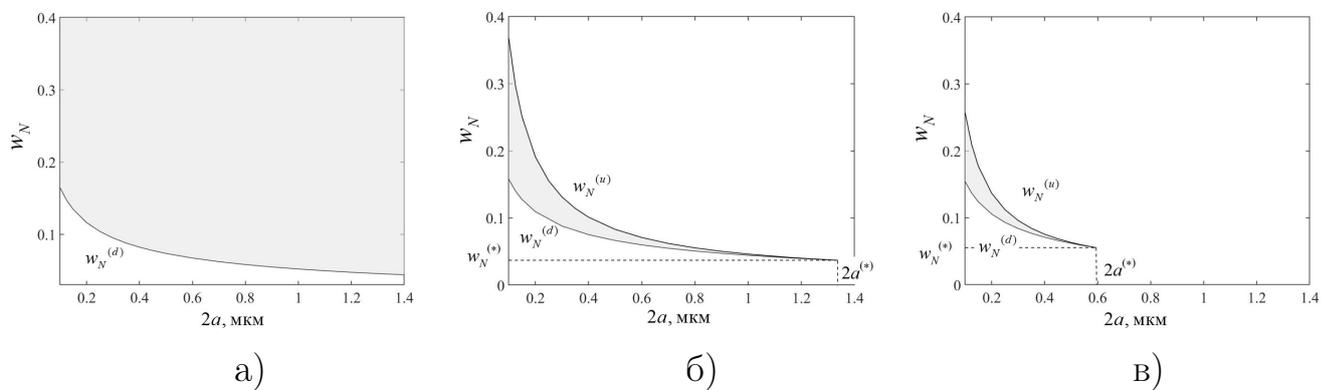


Рисунок 3.8 — Области существования стабильных трещин в конфигурационном пространстве параметров ( $w_N$   $2a$ ) при а)  $\sigma/G = 0.0$ , б)  $\sigma/G = 2.2 \cdot 10^{-3}$ , в)  $\sigma/G = 3.3 \cdot 10^{-3}$

На рис. 3.9 показана эволюция зависимостей  $F(l)$ , рассчитанных при значениях мощности диполя  $w_N = 0.5(w_N^{(d)} + w_N^{(u)})$  при увеличении  $2a$ . Видно, что при увеличении  $2a$  разность между значениями локального максимума  $F_{max}$  и локального минимума  $F_{min}$  на кривых  $F(l)$  уменьшается и при  $2a = 2a^{(*)}$  кривая с локальными максимумом и минимумом вырождается в кривую с перегибом (при этом  $F_{max} = F_{min} = 2\gamma$ ). При дальнейшем увеличении длины

мезодефекта существование стабильных трещин оказывается невозможным.

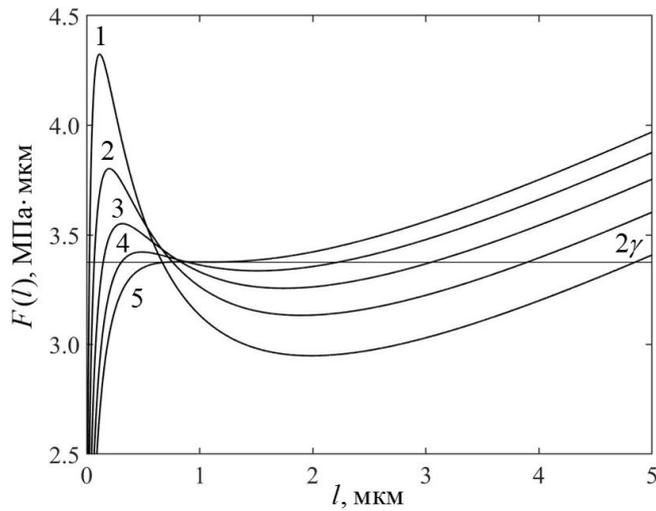


Рисунок 3.9 — Зависимости конфигурационной силы  $F$ , рассчитанные при различных значениях мощности  $w_N$  и плеча  $2a$  нормального мезодефекта при  $\sigma/G = 3.3 \cdot 10^{-3}$ : 1 —  $w_N = 0.12$ ,  $2a = 0.2$ , 2 —  $w_N = 0.09$ ,  $2a = 0.3$ , 3 —  $w_N = 0.07$ ,  $2a = 0.4$ , 4 —  $w_N = 0.06$ ,  $2a = 0.5$ , 5 —  $w_N = 0.056$ ,  $2a = 0.59$

Сравнение диаграмм, приведённых на рис. 3.8, показывает, что последовательное увеличение внешнего напряжения  $\sigma$  приводит к всё более выраженной локализации области существования стабильных микротрещин, зарождающихся в окрестности дисклинационного диполя, и её смещению в сторону меньших значений длины диполя.

Как было показано выше, при фиксированных внешнем напряжении и длине диполя длина стабильной трещины монотонно увеличивается с возрастанием мощности диполя. Поэтому все возможные значения длин стабильных трещин оказываются заключены в некотором интервале  $(l^{(d)} \ l^{(u)})$ , нижняя граница которого  $l^{(d)}$  соответствует значению мощности мезодефекта  $w_N^{(d)}$ , а верхняя  $l^{(u)}$  значению  $w_N^{(u)}$ . Области значений возможных длин стабильных трещин, рассчитанных при значениях внешнего напряжения:  $\sigma/G = 0.0$ ,  $\sigma/G = 2.2 \cdot 10^{-3}$ ,  $\sigma/G = 3.3 \cdot 10^{-3}$  приведены на рис. 3.10. Как и следовало ожидать, увеличение внешнего напряжения приводит к стягиванию интервалов значений длин стабильных трещин при каждом фиксированном значении плеча диполя и смещению верхней и нижней границ этого интервала в сторону меньших значений  $l$ . Проведенный анализ показывает, что появление стабильных микротрещин в окрестности отрицательной дисклинации диполя при заданной величине внеш-

него растягивающего напряжения возможно лишь в определенной области конфигурационного пространства параметров рассматриваемого мезодефекта.

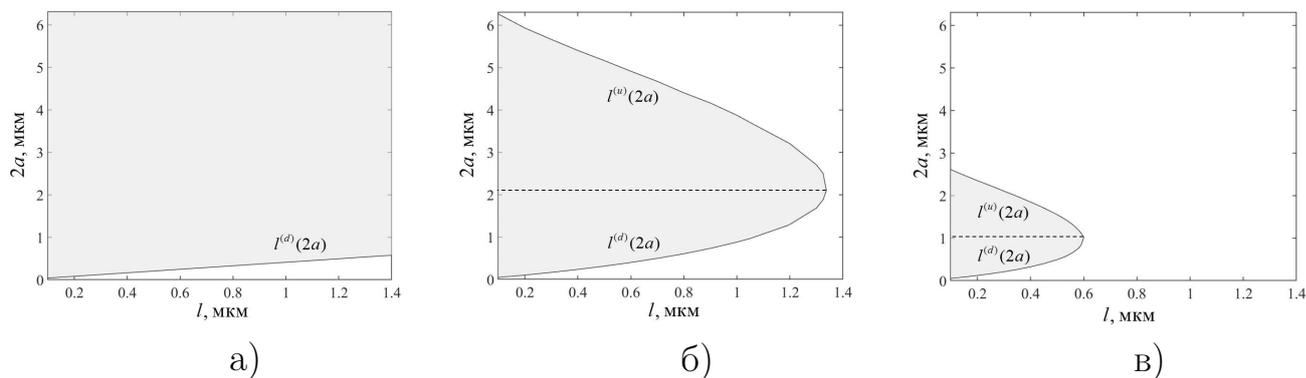


Рисунок 3.10 — Области значений длин стабильных трещин рассчитанные при а)  $\sigma/G = 0.0$ , б)  $\sigma/G = 2.2 \cdot 10^{-3}$ , в)  $\sigma/G = 3.3 \cdot 10^{-3}$

### 3.4 Зарождение трещины на комбинированном мезодефекте при потере устойчивости сдвигового мезодефекта

*В данном разделе диссертации использованы материалы статьи: Perevezentsev V. N., Kirikov S. V., Svirina Ju. V. The role of a shear planar mesodefect in the nucleation of a crack at a grain junction due to athermal grain boundary sliding // Lett. Mater. – 2021. – V. 11. – № 4(44). – P. 467-472.*

Из приведенного анализа следует, что самопроизвольное зарождение микротрещины на комбинированном мезодефекте невозможно. Однако в случае больших пластических деформаций, и как следствие больших внешних напряжений может происходить потеря устойчивости сдвиговой компоненты мезодефекта, связанная с атермическим зернограничным проскальзыванием.

Проанализируем условия необходимые для зарождения трещины в тройном стыке зёрен при атермическом проскальзывании вдоль такой границы. Будем полагать, что взаимное смещение зёрен вдоль любого локального участка рассматриваемой границы возможно лишь в том случае, когда действующее на нём сдвиговое напряжение превышает некоторое пороговое значение  $\tau_0$ . Для равновесной большеугловой границы зерна обычного типа, не имеющей упорядоченного атомного строения за величину  $\tau_0$  можно принять теоретическую прочность на сдвиг аморфной границы. Однако для неравновесных границ зёрен деформационного происхождения, содержащих высокую концен-

трацию деформационных вакансий или границ, содержащих примесные атомы, вызывающие ослабление межатомных связей поперёк границы, пороговое напряжение зернограничного проскальзывания может быть существенно меньше. Поэтому при дальнейшем рассмотрении будем считать  $\tau_0$  варьируемым параметром. Сдвиговое напряжение, действующее в произвольной точке границы, будем искать как сумму внешнего напряжения и внутреннего напряжения от дислокаций мезодефекта и от виртуальных дислокаций, возникающих в результате собственного проскальзывания, осуществляющегося путём зарождения пар скользящих виртуальных дислокаций противоположного знака. В результате проскальзывания и торможения пластического сдвига вблизи тройных стыков зёрен устанавливается равновесное распределение плотности вектора Бюргерса виртуальных скользящих дислокаций, при котором суммарное сдвиговое напряжение в каждой точке границы меньше или равно пороговому напряжению проскальзывания. Отметим, что диполь дисклинаций в рамках рассматриваемой конфигурации мезодефекта не создаёт сдвиговых напряжений в границе и при расчёте его можно не учитывать.

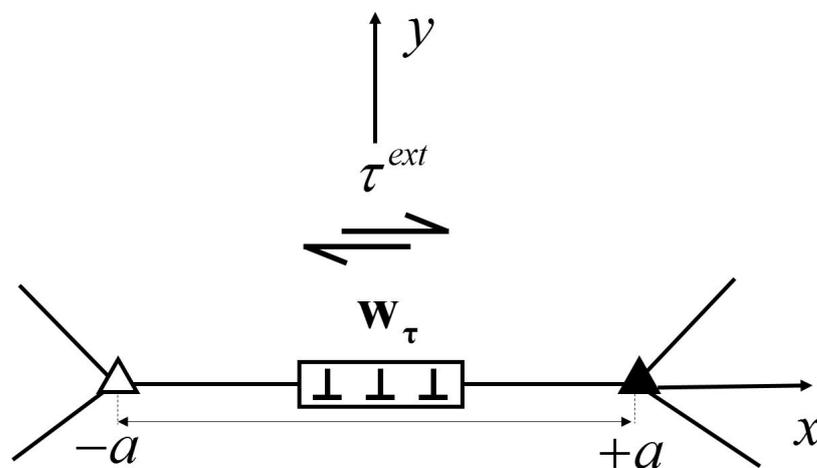


Рисунок 3.11 — Система координат, связанная с комбинированным мезодефектом, наведенным на границу зерна пластической деформацией

В качестве условия появления микротрещины воспользуемся критерием Стро, согласно которому микротрещина зарождается при слиянии двух головных дислокаций заторможенного скопления. В данном случае этот критерий удобно сформулировать как условие, необходимое для накопления суммарного вектора Бюргерса дислокаций равного  $2b$  в примыкающей к тройному стыку

области границы протяжённостью  $2b$  ( $b$  – величина вектора Бюргерса решёточной дислокации).

**Описание метода поиска равновесного положения системы.** Рассмотрим комбинированный мезодефект, расположенный на плоском участке границы зерна и состоящий из двухосного диполя стыковых дисклинаций мощности  $\mathbf{w}_N$  и сдвигового мезодефекта  $\mathbf{w}_\tau$  с плечом  $2a$ . Для моделирования атермического проскальзывания представим сдвиговой мезодефект в виде системы  $n$  дискретных эквидистантно распределённых виртуальных дислокаций с векторами Бюргерса  $\delta\mathbf{b} = 2a\mathbf{w}_\tau/n$ . Предположим, что сдвиговое напряжение атермического проскальзывания равно  $\tau_0$ .

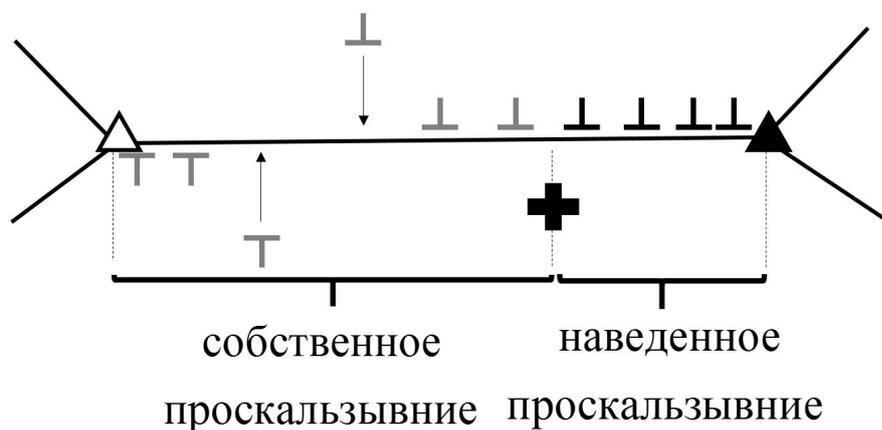


Рисунок 3.12 — Схематичное представление процедуры поиска равновесного положения дислокаций (темным цветом окрашены виртуальные дислокации сдвигового мезодефекта, серым цветом – виртуальные дислокации, осуществляющие собственное проскальзывание)

Ниже указана процедура квазистатического численного расчета равновесного положения.

**Этап 1.** Поиск равновесного положения виртуальных дислокаций методом последовательных приближений сводился к итерационной процедуре, которая на каждом шаге включает следующие операции:

1.1). Определение подвижных виртуальных дислокаций мезодефекта, то есть таких дислокаций, действующая сила на которые больше порогового значения. В случае если такие дислокации отсутствуют, положения равновесия для всех дислокаций мезодефекта можно считать найденными.

1.2). Определение равновесных положений для системы подвижных дислокаций, включающее в себя перебор подвижных дислокаций по степени убывания величины действующей на них силы, и поиск равновесного положения каждой из этих дислокаций при замороженных остальных.

**Этап 2.** В случае если дислокации мезодефекта в положении равновесия распределены не по всей длине границы, то на оставшийся ее части может реализоваться собственное зернограничное проскальзывание.

2.1) Последовательное добавление пар виртуальных дислокаций противоположных знаков той же дискретности, что и дислокации сдвигового мезодефекта, и определение координат дислокаций, при которых действующая на них сила равна  $\tau_0$  (рис. 3.12). Если таких координат не найдено, то итерационная процедура завершена.

2.2) Поиск равновесия полной системы дислокаций, включающей в себя как дислокации сдвигового мезодефекта, так и дислокации, реализующие собственное зернограничное проскальзывание, согласно процедуре, описанной в пунктах 1.1 и 1.2.

Аналогичные результаты получались и при динамическом подходе, при этом уравнение движения виртуальных дислокаций задавали в квазивязком приближении:

$$\frac{dx_i}{dt} = M(\tau_i)F(\tau_i) = M(\tau_i)\delta b\tau_i, \quad (3.13)$$

где  $x_i$  – координата  $i$ -ой дислокации,  $\tau_i$  – проекция суммарного сдвигового напряжения на ось  $Ox$ ,  $F_i$  – проекция суммарной силы на ось  $Ox$ , действующие на  $i$ -ую дислокацию,  $M(\tau_i)$  – функция подвижности  $i$ -ой дислокации. Суммарное сдвиговое напряжение  $\tau_i$  имеет следующий вид:

$$\tau_i = \tau^{ext} + \frac{G\delta b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{x_i - x_j}. \quad (3.14)$$

Вследствие того, что при атермическом проскальзывании движение дислокаций осуществляется только при сдвиговых напряжениях больших чем  $\tau_0$ , то зададим подвижность виртуальных дислокаций зависимостью в виде порога, которую будем аппроксимировать гладкой функцией (рис. 3.13):

$$M(\tau_i) = M_0 \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} (k (\tau_i^2 - \tau_0^2)) \right]. \quad (3.15)$$

В итоге динамика системы виртуальных дислокаций на границе зерна описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x}_i = M_0 \delta b \tau_i \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg [k(\tau_i^2 - \tau_0^2)] \right), \\ x_i(t=0) = -a + 2a(i-1)/(n-1). \end{cases} \quad (3.16)$$

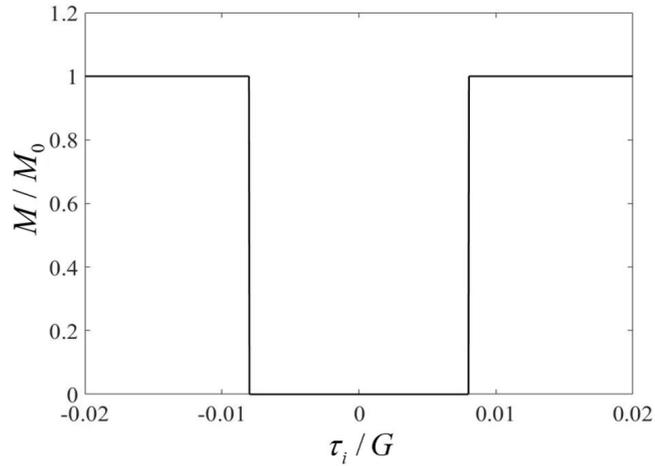


Рисунок 3.13 — Зависимость подвижности дислокации от суммарного сдвигового напряжения для  $\tau_0 = 0.8 \cdot 10^{-2}G$ ,  $k = 500 \text{ МПа}^{-2}$

Эквивалентность полученных равновесных распределений виртуальных дислокаций при динамическом и квазистатическом подходах свидетельствует о том, что при заданных начальных условиях равновесное положение не зависит от закона движения дислокаций и параметров подвижности.

Равновесную плотность проекции вектора Бюргерса  $\rho(x)$  получали при фиксированных значениях параметров  $(\mathbf{w}_\tau, 2a, \tau^{ext})$ , постепенно увеличивая внешнее напряжения  $\tau^{ext}$ . Эту процедуру продолжали до тех пор пока внешнее напряжение не становилось равным  $\tau^{ext} = \tau_{cr}$ , при котором суммарный вектор Бюргерса виртуальных дислокаций локализованных в интервале  $[a - 2b, a]$  становился равным  $2b$ . Следовательно при любых напряжениях больше чем  $\tau_{cr}$  выполнялось условие Стро и зарождалась микротрещина.

Зависимости критического внешнего напряжения  $\tau_{cr}$ , при достижении или превышении которого выполняется силовой критерий Стро зарождения микротрещины в голове заторможенного сдвига от длины границы  $2a$ , рассчитанные при различной мощности исходного планарного мезодефекта  $w_\tau$  при значении порогового напряжения  $\tau_0 = 0.8 \cdot 10^{-2}G$ , приведены на рис. 3.14. Видно, что

наличие в границе в исходном состоянии дислокаций сдвигового мезодефекта, реализующих наведённое проскальзывание приводит к значительному уменьшению  $\tau_{cr}$  по сравнению со случаем собственного проскальзывания в отсутствие мезодефекта.

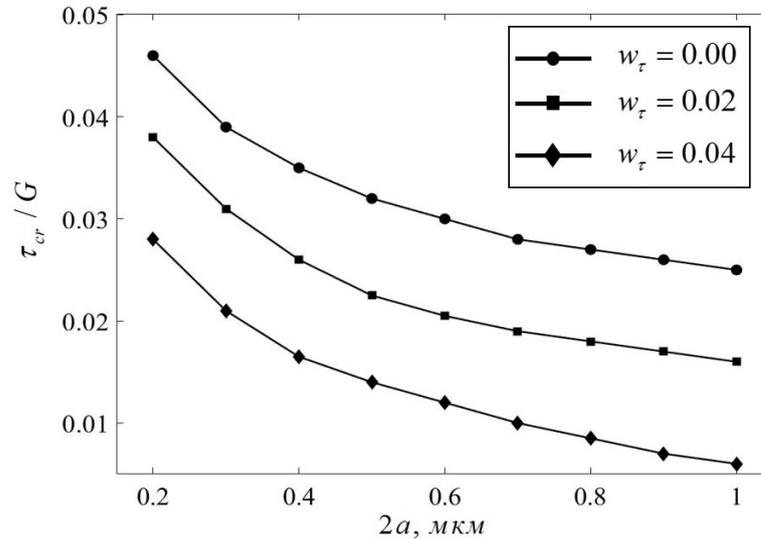
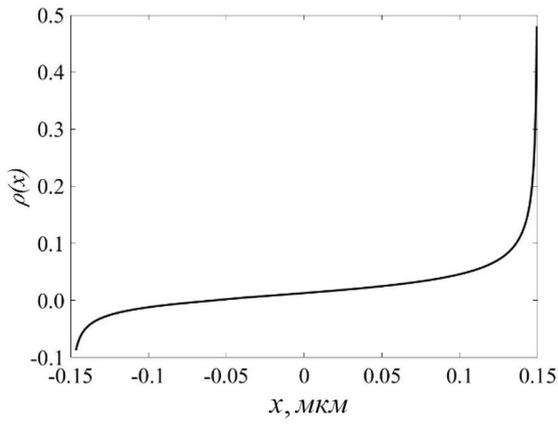
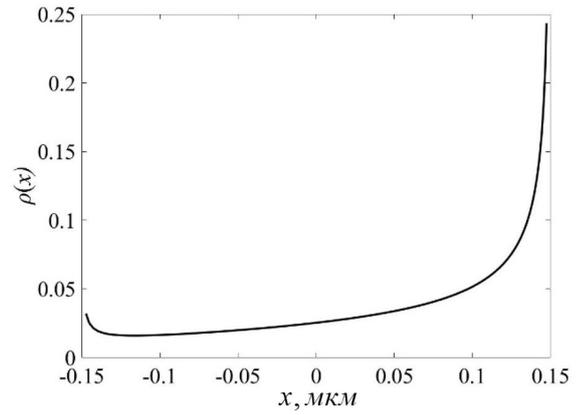


Рисунок 3.14 — Зависимости критического напряжения зарождения трещины  $\tau_{cr}$  от длины границы  $2a$  при различных значениях мощности мезодефекта  $w_\tau$  и фиксированном значении порогового напряжения  $\tau_0 = 0.8 \cdot 10^{-2}G$

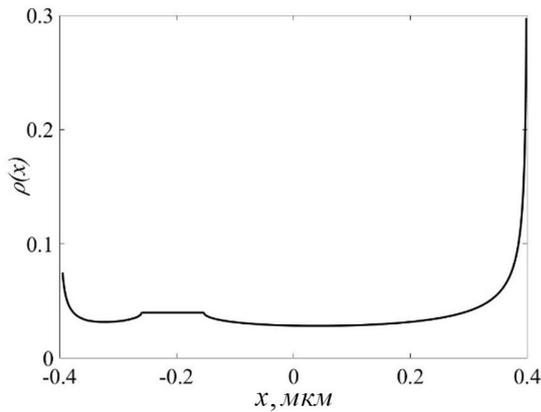
Отметим, что вид распределения плотности вектора Бюргерса виртуальных скользящих дислокаций, при достижении критической величины внешнего напряжения, может изменяться в зависимости от параметров рассматриваемой системы – рис. 3.15. Так, на рис. 3.15, а показан его вид при длине границы  $2a = 0.3$  мкм, значении порогового напряжения  $\tau_0 = 0.8 \cdot 10^{-2}G$  и мощности исходного мезодефекта  $w_\tau = 0.02$ . В рассматриваемом случае равновесное распределение дислокаций сдвигового мезодефекта, устанавливающееся в результате наведённого проскальзывания, не обеспечивает выполнения условий, при котором суммарное сдвиговое напряжение в каждой точке границы меньше или равно пороговому напряжению проскальзывания. Дислокации мезодефекта концентрируются вблизи одного из стыков зёрен, вследствие чего на участке границы зерна вблизи другого (противоположного) стыка напряжение от скопления дислокаций падает и создаются условия для инициации собственного проскальзывания. Появление вблизи одного из стыков отрицательной плотности вектора Бюргерса дислокаций обусловлено накоплением в этой области гра-



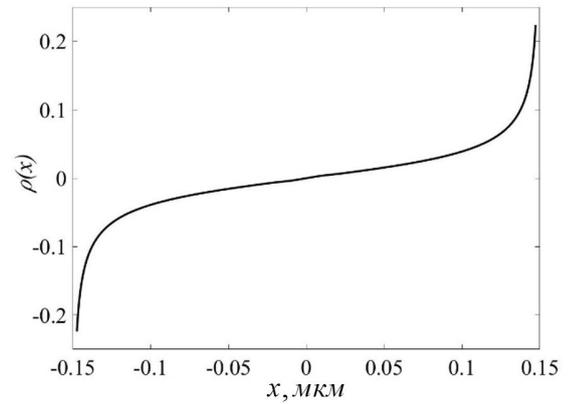
а)



б)



в)



г)

Рисунок 3.15 — Равновесные распределения плотности вектора Бюргерса  $\rho(x)$ , полученные при следующих параметрах системы: а)  $\tau^{ext} = \tau_{cr} = 3.1 \cdot 10^{-2}G$ ,  $2a = 0.3$  мкм,  $w_\tau = 0.02$ , б)  $\tau^{ext} = \tau_{cr} = 2.1 \cdot 10^{-2}G$ ,  $2a = 0.3$  мкм,  $w_\tau = 0.04$ , в)  $\tau^{ext} = \tau_{cr} = 8.5 \cdot 10^{-4}G$ ,  $2a = 0.8$  мкм,  $w_\tau = 0.04$ , г)  $\tau^{ext} = \tau_{cr} = 3.9 \cdot 10^{-2}G$ ,  $2a = 0.3$  мкм,  $w_\tau = 0$  (значение величины  $\tau_0$  для всех случаев одинаково и равно  $\tau_0 = 0.8 \cdot 10^{-2}G$ )

ности отрицательных дислокаций, возникающих в результате зарождения пар скользящих виртуальных дислокаций разного знака (см. рис. 3.12). В отличие от распределения, представленного на рис. 3.15, а распределение представленное на рис. 3.15, б, рассчитанное при большем значении мощности мезодефекта образуется только за счет наведенного проскальзывания. При этом наблюдается меньшее по интенсивности сгущение плотности вектора Бюргерса  $\rho(x)$  вблизи противоположного стыка с координатой  $x = -0.15$  мкм. На рис. 3.15, в представлено распределение  $\rho(x)$  для следующих параметров мезодефекта  $2a = 0.8$  мкм,  $w_\tau = 0.04$ . В целом форма распределения повторяет форму распределения, представленного на рис. 3.15, б с тем отличием, что на участке границы

имеется «полочка», связанная с неподвижными виртуальными дислокациями. Это связано с тем, что суммарное напряжение сдвига в любой точке на этом участке на каждом этапе расчета было ниже порогового напряжения и, следовательно, исходное равномерное распределение плотности вектора Бюргерса остается неизменным. Наконец, на рис. 3.15, г показано распределение в случае собственного проскальзывания ( $w_\tau = 0$ ). Стоит отметить, что это распределение отличается от известного решения для двустороннего скопления дислокаций [39] из-за наличия порогового напряжения.

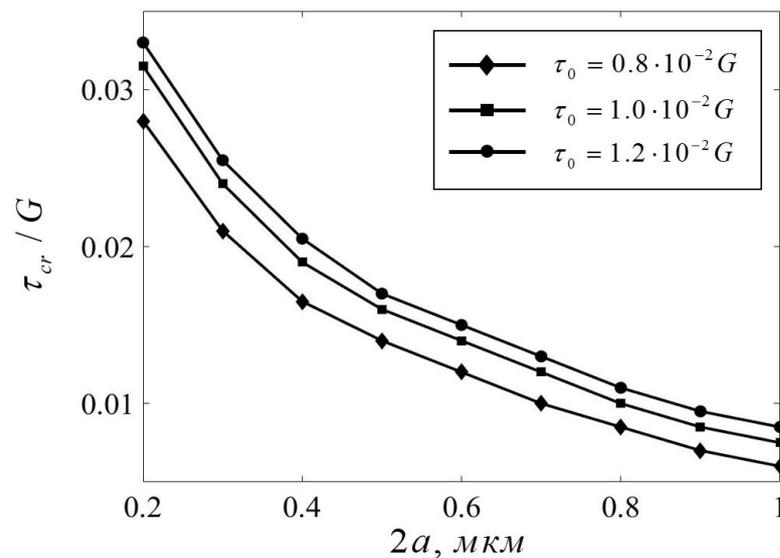


Рисунок 3.16 — Зависимости критического напряжения зарождения трещины  $\tau_{cr}$  от длины границы при различных значениях порогового напряжения ( $w_\tau = 0.04$ )

Влияние порогового напряжения проскальзывания  $\tau_0$  на величину критического напряжения зарождения трещины  $\tau_{cr}$  показано на рис. 3.16. Видно, что увеличение  $\tau_0$  и, следовательно, увеличение сопротивления проскальзыванию, приводит к росту внешнего напряжения, необходимого для выполнения критерия Стро и появления зародышевой трещины.

Отметим, что диполь клиновых дисклинаций не создаёт сдвиговых напряжений в границе и, следовательно, в рамках рассмотренной модели не влияет на движение скользящих дислокаций и выполнение критерия Стро. Однако поля напряжений от клиновых дисклинаций диполя могут влиять на энергетику зарождения, а также на ориентацию и длину формирующейся вблизи тройного стыка зёрен трещины.

### 3.5 Блокировка трещин полями ротационно-сдвиговых мезодефектов

В данном разделе диссертации использованы материалы статьи: Kirikov S.V., Perevezentsev V.N., Pupylin A.S., Svirina J.V. Crack arrest by the elastic field of wedge disclination and planar shear mesodefect // *Materials Physics and Mechanics*. – 2022. – № 1. – P. 33-39.

Рассмотрим случай торможения распространяющейся дислокационной трещины в полях ротационного и сдвигового мезодефектов. В случае блокировки трещины диполем клиновых дисклинаций, рассматривается элемент зёрненной структуры поликристалла, состоящий из двух тройных стыков зёрен с расположенными вдоль линий тройных стыков клиновыми дисклинациями противоположного знака. В совокупности эти дисклинации образуют двухосный диполь клиновых дисклинаций, расположенный вдоль границы зерна так, как показано на рис. 3.17, а.

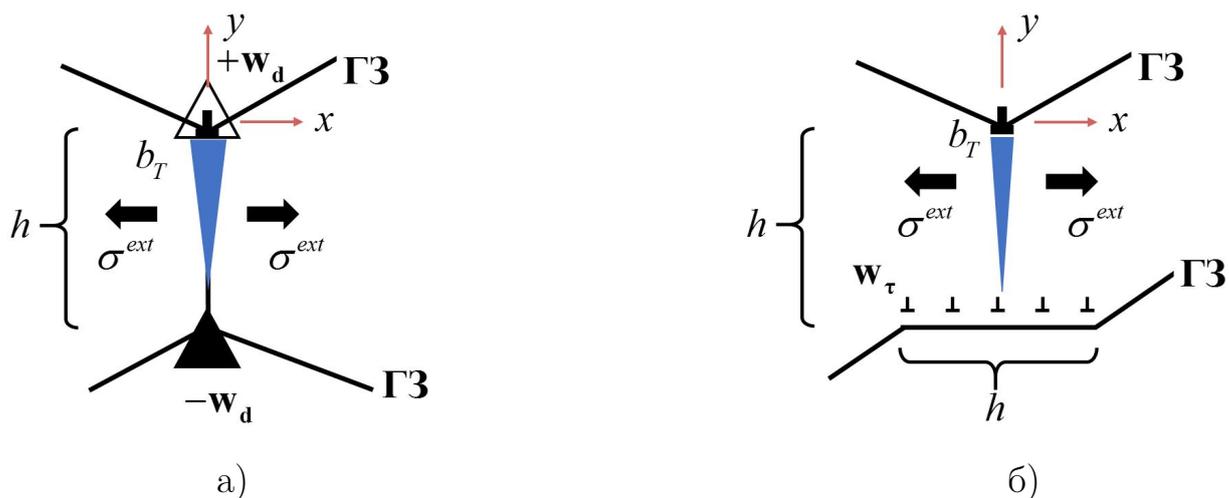


Рисунок 3.17 — Схема дислокационной трещины в случае ее блокировки а) диполем клиновых дисклинаций, б) сдвиговым мезодефектом

Мощность дисклинационного диполя характеризуется величиной проекции вектора  $w_N$  на ось  $Ox$ . В случае если величина проекции  $w_N > 0$ , микротрещина распространяется из стыка, содержащего положительную дисклинацию, создающую в окрестности стыка сжимающие напряжения. При  $w_N < 0$  трещина распространяется из стыка, содержащего отрицательную дисклинацию, создающую растягивающие напряжения.

В случае торможения трещины упругим полем сдвигового мезодефекта, рассматривается дислокационная трещина, распространяющаяся из стыка зё-

рен по нормали к плоскости мезодефекта, расположенного на расстоянии  $h$  от стыка зёрен (рис. 3.17, б). Будем считать мощность этого мезодефекта положительной, если величина проекции вектора  $\mathbf{w}_\tau$  на ось  $Ox$  положительна ( $w_\tau > 0$ ), и отрицательной в противном случае ( $w_\tau < 0$ ). Отметим, что в области  $-h < y < 0$  сдвиговый мезодефект с  $w_\tau > 0$  создаёт сжимающие напряжения, а мезодефект с  $w_\tau < 0$  – растягивающие напряжения.

Анализ устойчивости трещин проведем с помощью метода конфигурационной силы. Отметим, что для обоих рассматриваемых случаев сдвиговое напряжение в плоскости распространения трещины от мезодефектов равно нулю –  $\sigma_{xy} = 0$ , следовательно конфигурационная сила определяется следующим выражением:

$$F(l) = \frac{l}{8D} \bar{\sigma}_{xx}^2, \quad (3.17)$$

$$\bar{\sigma}_{xx} = \frac{2}{\pi l} \int_0^l (\sigma^{ext} + \sigma_{xx}^{dis}(y, x=0) + \sigma_{xx}^{mes}(y, x=0)) \sqrt{\frac{y}{l-y}} dy, \quad (3.18)$$

где  $\sigma_{xx}^{mes}$ ,  $\sigma_{xx}^{dis}$ ,  $\sigma^{ext}$  – компоненты растягивающих напряжений вдоль оси  $Ox$  от мезодефекта, дислокации в голове трещины и внешнего напряжения, соответственно:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{dis}(x=0, y) &= D \frac{b_T}{y}, \quad \sigma_{xx}^N(x=0, y) = Dw_N \ln \left| \frac{y}{y+h} \right|, \\ \sigma_{xx}^\tau(x=0, y) &= Dw_\tau \left( \frac{h(y+h)}{(h/2)^2 + (y+h)^2} - 4 \operatorname{arctg} \left[ \frac{h}{2(y+h)} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Численный алгоритм поиска длины стабильной трещины  $l_{st}$  заключался в следующем. Вначале фиксировалась некоторая достаточно малая длина трещины  $l_0$ , при которой конфигурационная сила  $F$  была заведомо больше чем  $2\gamma$ . Нетрудно показать, что такая длина всегда найдется, так как в случае дислокационной трещины  $F \rightarrow \infty$  при  $l \rightarrow 0$ . Далее задавалось малое приращение длины трещины  $\delta l = b$  и вновь рассчитывалась конфигурационная сила  $F(l_0 + \delta l)$ . Эта процедура повторялась до тех пор пока на некотором  $i$ -ом шаге не выполнялось неравенство  $F(l_0 + \delta l) < 2\gamma$ . Вследствие непрерывности функции  $F(l)$ , величина  $l_{st}$  должна лежать в интервале  $(l_0 + (i-1)\delta l, l_0 + i\delta l)$ , ее длина находилась методом дихотомии. После этого итерационная процедура прекращалась. Если в процессе итерационной процедуры неравенство  $F(l_0) < 2\gamma$  не выпол-

нилось в заданном достаточно большом интервале значений длин трещины, верхняя граница которого принималась равной  $4h$ , такие трещины относили к нестабильным и расчет прекращался.

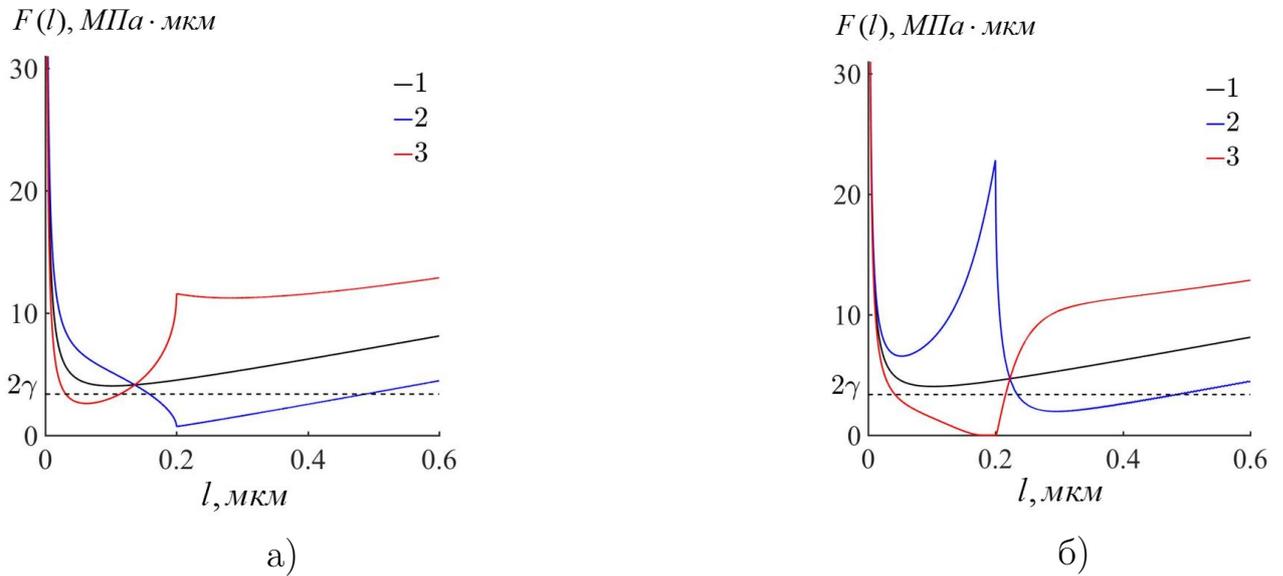


Рисунок 3.18 — Зависимости конфигурационной силы от длины трещины при  $\sigma^{ext}/G = 0.02$  и  $b_T = 15b$  а) при разных по величине и знаку мощностях дисклинационного диполя с длиной  $h = 0.2$  мкм (1 —  $w_N = 0$ , 2 —  $w_N = -0.04$ ; 3 —  $w_N = 0.04$ ); б) при разных величинах и знаках мощности сдвигового мезодефекта с длиной  $h = 0.2$  мкм (1 —  $w_\tau = 0$ , 2 —  $w_\tau = -0.04$ , 3 —  $w_\tau = 0.04$ )

Расчеты проводились при следующих значениях параметров:  $G = 45000$  МПа,  $\nu = 0.3$ ,  $\gamma = Gb/8$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-4}$  мкм, мощности дисклинационного диполя и планарного сдвигового мезодефекта варьировались в интервале  $[-0.08, 0.08]$ , а величина внешнего напряжения  $\sigma^{ext}/G$  в интервале  $[0, 0.03]$ . Величина вектора Бюргерса дислокационной трещины  $b_T$  зависит от конкретного механизма её зарождения и далее рассматривалась как параметр, варьируемый в интервале значений  $b_T \in [2, 30]b$ . Величины  $h = 0.2$  мкм и  $h = 0.3$  мкм выбирались из соображений их корреляции со средним размером фрагментов на развитой стадии фрагментации.

Вид зависимостей конфигурационной силы от длины трещины при  $\sigma^{ext}/G = 0.02$  и  $b_T = 15b$ , рассчитанных при различных мощностях и знаках дисклинационного диполя и планарного сдвигового мезодефектов, приведён на рис. 3.18. В отсутствие мезодефектов  $w_N = w_\tau = 0$  внешнее напряжение дестабилизирует трещины с векторами Бюргерса  $b_T > b_0 = 2\gamma/\sigma^{ext}$ . При величине внешнего напряжения  $\sigma^{ext}/G = 0.02$  трещина с вектором Бюргерса  $b_T = 15b$  неустойчива

и может самопроизвольно раскрываться в магистральную трещину. Наличие дисклинационного диполя или сдвигового мезодефекта с достаточно большой (по абсолютной величине) мощностью стабилизирует микротрещину. Результаты расчётов областей стабильности трещин в конфигурационном пространстве параметров  $(b_T, w_N)$  и  $(b_T, w_\tau)$  и карты распределения в этом пространстве длин стабильных трещин при различных значениях внешнего напряжения приведены на рис. 3.19 и 3.20.

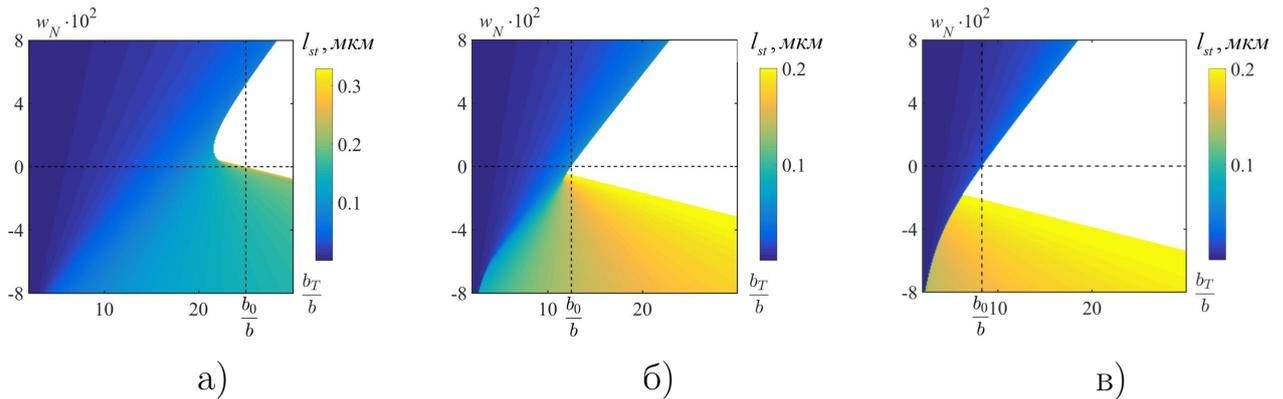


Рисунок 3.19 — Карты распределения длин стабильных трещин в случае их торможения дисклинационным диполем при различной величине внешних напряжений а)  $\sigma^{ext}/G = 0.01$ , б)  $\sigma^{ext}/G = 0.02$ , в)  $\sigma^{ext}/G = 0.03$

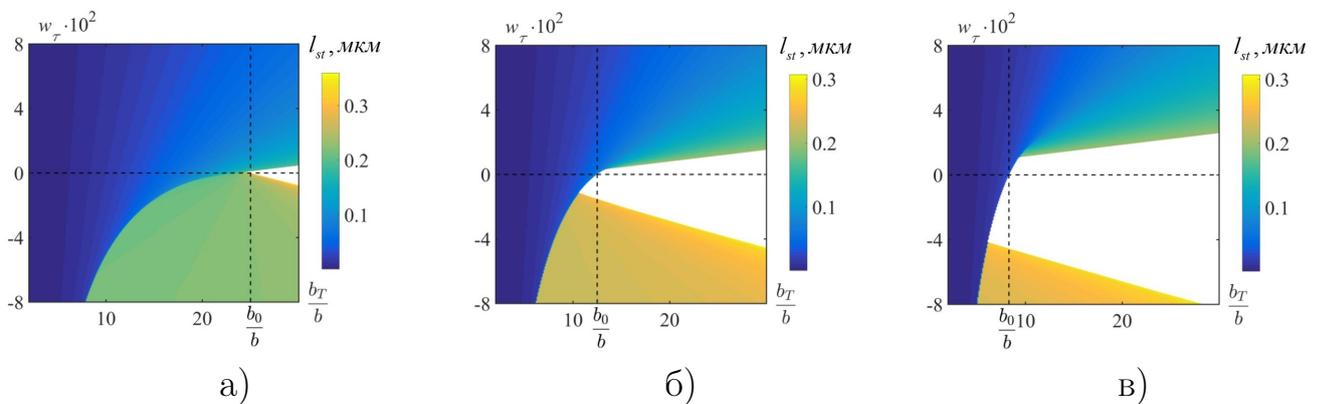


Рисунок 3.20 — Карты распределения длин стабильных трещин в случае их торможения сдвиговым мезодефектом при различной величине внешних напряжений а)  $\sigma^{ext}/G = 0.01$ , б)  $\sigma^{ext}/G = 0.02$ , в)  $\sigma^{ext}/G = 0.03$

Белым цветом на рисунках выделены те области, в которых стабильных трещин не существует. Видно, что как в случае дисклинационного диполя, так и в случае сдвигового мезодефекта, с увеличением внешнего напряжения области нестабильности трещин сдвигаются в сторону меньших значений  $b_T$  (в силу уменьшения  $b_0$ ) и расширяются в сторону больших значений мощности мезодефектов. При этом при фиксированных величинах  $b_T$  и  $\sigma^{ext}$  длины стабильных

трещин оказываются больше в интервале отрицательных значений мощности мезодефектов, чем в интервале их положительных значений.

Профиль одной из таких стабильных трещин, полученный при значениях параметров  $b_T = 20b$ ,  $w_\tau = -0.04$ ,  $\sigma^{ext}/G = 0.02$ , показан на рис. 3.21. Функцию нормальных смещений берегов трещины  $u_N(x)$  для произвольного напряженного состояния находили интегрированием выражения для функции смещений  $u(x, a)$  [125], полученной для случая нормальной к разрезу сосредоточенной силы  $dP = \sigma_{xx}(a)da$ , действующей в точке  $a$ :

$$u_N(y) = \frac{2(1-\nu)}{\pi G} \int_0^l \sigma_{xx}(a) \ln \left[ \frac{(l/2)^2 - ay + \sqrt{((l/2)^2 - a^2)((l/2)^2 - y^2)}}{l/2|y - a|} \right] da. \quad (3.20)$$

Заметное сужение трещины при её переходе через границу зерна, содержащую сдвиговый мезодефект с отрицательной мощностью, обусловлено тем обстоятельством что из зоны растягивающих напряжений от мезодефекта она попадает в зону сжимающих напряжений. Отметим, что такое характерное изменение профиля трещины при её переходе через границу наблюдалось *in situ* при деформации меди [126].

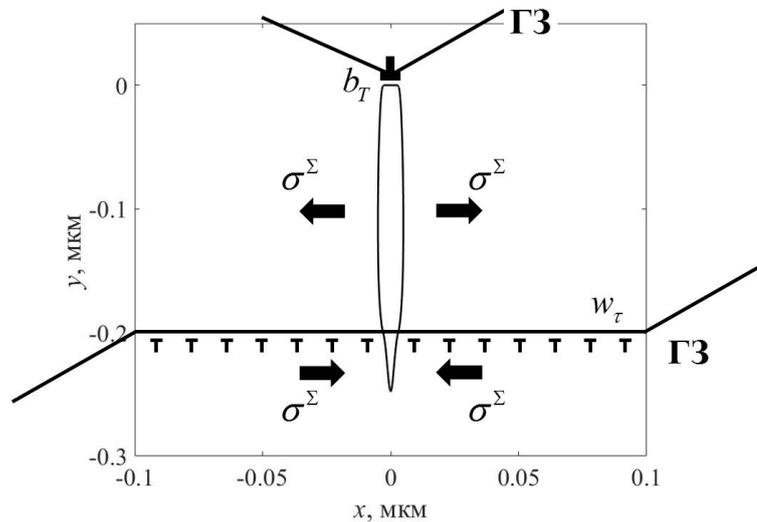


Рисунок 3.21 — Профиль стабильной дислокационной трещины, полученной при следующих значениях параметров:  $b_T = 20b$ ,  $w_\tau = -0.04$ ,  $\sigma^{ext}/G = 0.02$ ,  $l_{st} = 0.25$  мкм

Как показывает проведённый анализ, диполи клиновых дисклинаций и планарные сдвиговые мезодефекты могут блокировать распространение тре-

щин в фрагментированной структуре, способствуя тем самым их накоплению и созданию очагов разрушения в отдельных участках материала. При этом наиболее эффективными в этом качестве оказываются те мезодефекты, которые создают в области тройного стыка, в котором зарождается дислокационная трещина, сжимающие напряжения. При типичных для стадии предразрушения размерах фрагментов ( $h = 0.2$  мкм) и величинах внешнего напряжения  $(0.01 - 0.02)G$ , длина таких трещин оказывается сопоставимой с размером фрагментов и лежит в интервале значений  $0.1 - 0.3$  мкм.

### 3.6 Выводы по главе III

1. Проведен анализ влияния сдвигового мезодефекта на формирующуюся вблизи дисклинации микротрещину. Определены параметры системы (мощности мезодефектов и их длины), при которых могут появляться стабильные микротрещины. Рассчитаны зависимости критической мощности диполя дисклинаций от длины мезодефекта для различных значений мощности сдвигового мезодефекта. Показано, что мезодефекты сдвигового типа могут заметно влиять на ориентацию и длину стабильных микротрещин.
2. Проведён анализ условий существования равновесных устойчивых трещин в суммарном упругом поле двухосного диполя клиновых дисклинаций и внешнего напряжения. В конфигурационном пространстве параметров рассматриваемой системы определены области, в которых возможно появление таких трещин. Показано, что увеличение внешнего напряжения приводит к существенной локализации области существования стабильных микротрещин, зарождающихся в окрестности дисклинационного диполя, и её смещению в сторону меньших значений длины диполя. Определены области возможных значений длин стабильных трещин. Показано, что увеличение внешнего напряжения приводит к стягиванию интервалов значений длин стабильных трещин при каждом фиксированном значении плеча диполя и смещении верхней и нижней границы этого интервала в сторону меньших значений длин трещин.
3. Проведен анализ влияния комбинированного мезодефекта на зарождение микротрещины при атермическом зернограничном проскальзывании. Данное исследование показывает, что наведённое атермическое проскаль-

зывание, осуществляемое движением скользящих компонент дислокаций, накапливающихся на границах зерен в ходе внутризеренной пластической деформации, может рассматриваться как один из возможных механизмов зарождения микротрещин в ультрамелкозернистых материалах, содержащих большую долю неравновесных границ деформационного происхождения. На этапе появления зародышевой трещины основную роль в этом процессе играет планарный сдвиговый мезодефект. Зарождение трещины возможно при достижении некоторой критической величины внешнего напряжения, зависящей от параметров рассматриваемой системы.

4. Рассмотрены условия блокировки растущих под действием поля внешних напряжений дислокационных трещин упругими полями диполя клиновых дисклинаций и планарного сдвигового мезодефекта. С использованием метода конфигурационной силы в конфигурационном пространстве параметров: мощность мезодефекта – вектор Бюргера трещины определены области существования стабильных трещин и построены карты распределения в этом пространстве длин таких трещин при различных величинах внешнего напряжения. При типичных для стадии пред-разрушения материала размерах фрагментов и величинах внешнего напряжений длина таких трещин оказывается сопоставимой с размером фрагментов и лежит в интервале значений 0.1 – 0.3 мкм. Показано, что как в случае дисклинационного диполя, так и в случае планарного сдвигового мезодефекта, с увеличением внешнего напряжения области неустойчивости трещин сдвигаются в сторону меньших значений дислокационного заряда трещины и расширяются в сторону больших значений мощности мезодефектов. Сделан вывод о том, что рассмотренные мезодефекты могут эффективно блокировать распространение трещин в фрагментированной структуре, способствуя тем самым их накоплению в отдельных областях материала и созданию очагов разрушения.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей диссертационной работе получены следующие основные результаты и выводы:

1. Проведён систематический анализ ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границах зерен и в приграничных областях при пластической деформации поликристаллических материалов. Для наиболее типичных мезодефектов получены аналитические выражения для полей упругих напряжений, собственных упругих энергий и энергии их взаимодействия.
2. Рассмотрены модели образования ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границах зерен поликристаллического материала при их взаимодействии с локализованной пластической деформацией. Получены аналитические выражения, позволяющие по заданным параметрам решеточного скольжения рассчитать характеристики деформационных фасеток.
3. Методом динамики дискретных дислокаций проведено моделирование процессов формирования оборванных дислокационных границ на начальных стадиях фрагментации материала. Показано, что особенности морфологии и размеры оборванных дислокационных границ определяются геометрией фасетированной границы и загрузкой актуальных систем скольжения решеточных дислокаций.
4. Предложена модель аккомодационной пластической деформации и релаксации упругой энергии планарных сдвиговых мезодефектов, возникающих на границах зёрен в процессе пластической деформации поликристаллов. Показано, что аккомодационная подстройка структуры может осуществляться путём последовательного отщепления от мезодефекта и ухода в тело зерна дислокационных стенок. Рассчитаны зависимости длины аккомодационной полосы скольжения от её угла наклона по отношению к границе зерна при разных величинах запирающего внешнего напряжения и характеристиках исходного сдвигового мезодефекта. Получено простран-

ственное распределение величины аккомодационной пластической деформации в окрестности мезодефекта.

5. Определены характеристики комбинированного мезодефекта, при которых возможно существование стабильной микротрещины, формирующейся вблизи мезодефекта. Проведен анализ влияния характеристик мезодефекта на ориентацию и длину стабильной микротрещины.
6. Проведён анализ условий существования стабильных микротрещин в суммарном поле внешнего напряжения и напряжении от двухосного диполя клиновых дисклинаций. В конфигурационном пространстве параметров рассматриваемой системы определены области, в которых возможно появление таких трещин. Показано, что увеличение внешнего напряжения приводит к существенной локализации этих областей, а также к стягиванию интервалов значений длин стабильных микротрещин.
7. Предложена модель зарождения микротрещины в стыке зерен за счет атермического проскальзывания по большеугловой границе зерен, содержащей планарный сдвиговый мезодефект. Показано, что при превышении величины внешнего напряжения некоторого порогового значения, сдвиговой мезодефект теряет устойчивость. В результате наведенного проскальзывания, осуществляемого перемещением виртуальных скользящих дислокаций мезодефекта, вблизи стыка зёрен возникает концентратор напряжений, создающий условия для появления дислокационной трещины. Получены зависимости величины критического напряжения зарождения трещины от протяжённости границы зерна, мощности исходного сдвигового мезодефекта и величины порогового напряжения атермического проскальзывания зёрен вдоль границы.
8. Рассмотрены механизмы блокировки распространяющихся под действием внешних и внутренних напряжений дислокационных трещин упругими полями ротационных и сдвиговых мезодефектов. С использованием метода конфигурационной силы в конфигурационном пространстве параметров (мощность мезодефекта, вектор Бюргерса трещины, внешнее напряжение) определены области существования стабильных трещин и построены карты распределения длин таких трещин. При типичных для стадии

предразрушения материала размерах фрагментов и величинах внешнего напряжения длина таких трещин оказывается сопоставимой с размером фрагментов и лежит в интервале значений 0.1 – 0.3 мкм.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

- [1] Cao Y., Ni S., Liao X., Song M., Zhu Y. Structural evolutions of metallic materials processed by severe plastic deformation // Mater. Sci. Eng.: R: Reports – 2018. – V.133. – P. 1-59.
- [2] Vinogradov A., Estrin Y. Analytical and numerical approaches to modelling severe plastic deformation // Progress in Materials Science. – 2018. – V.95. – P. 172-242.
- [3] Ишлинский А. Ю., Ивлев Д. Д. Математическая теория пластичности. – М.: Физматлит, 2001. – 704 с.
- [4] Fleck N.A., Muller G.M., Ashby M.F., Hutchinson J.W. Strain gradient plasticity: Theory and experiment // Acta metall. mater. – 1994. – V.42. – №2. – P. 475-487.
- [5] Fleck N.A., Hutchinson J.W. Strain Gradient Plasticity. In: John WH, Theodore YW, editors // Advances in Applied Mechanics. – Elsevier, 1997. – P. 295-361.
- [6] Roters F., Eisenlohr P., Bieler T.R., Raabe D. Crystal plasticity finite element methods in materials science and engineering // Weinheim: Wiley-Vch, 2010. – p. 209.
- [7] Toth L.S, Estrin Y., Lapovok R., Gu C. A model of grain fragmentation based on lattice curvature // Acta Mater. –2010. – V. 58. – №5. – P. 1782-1794.
- [8] Gu C.F, Toth L.S. Texture development and grain refinement in non-equal-channel angular-pressed Al // Scripta Mater. – 2012. – V.67. – №1. – P. 33-36.
- [9] Huang X., Wang J., Zhao S., Yao Z., Liu C. High-resolution multiscale modeling of mechanical behavior of cold-drawn pearlitic steels // J. Mater. Res. Technol. – 2021. – V.15. – P. 5920-5935.
- [10] Sedighiani K., Shah V., Traka K., Diehl M., Roters F., Sietsma J., Raabe D. Large-deformation crystal plasticity simulation of microstructure and

- microtexture evolution through adaptive remeshing // *Int. J. Plasticity.* – 2021. – V.146.
- [11] Dunne F., Kiwanuka R. Wilkinson A. Crystal plasticity analysis of micro-deformation, lattice rotation and geometrically necessary dislocation density // *Proc. Math. Phys. Eng. Sci.* – 2012. – V.468. – P. 2509-2531.
- [12] Brown L. The Self-Stress of Dislocations and the Shape of Extended Nodes // *Philos. Mag.* – 1964. – V.10. – P. 441–466.
- [13] Bacon D. A Method for Describing a Flexible Dislocation // *Phys. Status Solidi* – 1967. – V.23. – P. 527-538.
- [14] Foreman A. The Bowing of a Dislocation Segment // *Philos. Mag.* – 1967. – V.15. – P. 1011-1021.
- [15] Kubin L., Canova G., Condat M., Devincere B., Pontikis V., and Bréchet Y. Dislocation Microstructures and Plastic Flow: A 3D Simulation // *Solid State Phenom.* – 1992. – V.23. – №24. – P. 455-472.
- [16] Van der Giessen E., Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model // *Model Simul. Mater. Sci. Eng.* – 1995. – V. 3. – P. 689-735.
- [17] Alder B.J., Wainwright T. Studies in molecular dynamics. I. General method // *J. Chem. Phys.* – 1959. – V.31. – №2. – 459 p.
- [18] Haile M.J. Molecular dynamics simulation - elementary methods. // N.Y.: Wiley interscience, 1992. – 386 p.
- [19] Fivel M.C., Canova G.R., Robertson C.F., Boulanger L. Three-dimensional modeling of indent-induced plastic zone at a mesoscale // *Acta Materialia.* – 1998. – V.46. – №17. – P. 6183–6194.
- [20] Robertson C.F., Fivel M.C. A study of the sub-micron indent-induced plastic deformation // *J. Mater. Res.* – 1999. – V.14. – №6. – P. 2251-2258.
- [21] Zbib H.M., Diaz de la Rubia T., and Bulatov V, A Multiscale Model of Plasticity Based on Discrete Dislocation Dynamics // *ASME J. Eng. Mater. Technol.* – 2002. – V.124. – №2. – P. 78-87.

- [22] Shin C.S. , Fivel M.C., Verdier M., Oh K.H. Dislocation–impenetrable precipitate interaction: a three-dimensional discrete dislocation dynamics analysis // *Phil. Mag.* – 2003. – V.83. – №31 - 34. – P. 3691-3704.
- [23] Rybin V.V., Perevezentsev V.N., Svirina Y.V. Structural transformations at the initial stages of fragmentation of plastically deformed polycrystals: A computer experiment // *Technical Physics.* – 2017. – V.62. – №5. – P. 745-754.
- [24] Liang S., Zhu Y., Huang M., Li Z. Studying dislocation-induced shielding effect on the crack-tip in polycrystal by discrete dislocation dynamics // *International Journal of Solids and Structures.* – 2019. – V.156-157. – P. 148-162.
- [25] Янилкин А.В., Куксин А.Ю., Стегайлов В.В. Атомистическое моделирование пластичности и разрушения нанокристаллической меди при высокоскоростном растяжении // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике.* – 2008. – Т. 7. – С. 29.
- [26] Wolf D., Yamakov V., Phillpot S.R., Mukherjee A., Gleiter H. Deformation of nanocrystalline materials by molecular-dynamics simulation: relationship to experiments? // *Acta Materialia.* – 2005. – V.53. – №1. – P. 1-40
- [27] Chavoshi S.Z., Xu S. Nanoindentation/scratching at finite temperatures: Insights from atomistic-based modeling // *Progress in Materials Science.* – 2019. – V.100. – P. 1-20.
- [28] Zhou K., Wu M.S. , Nazarov A.A. Atomistic simulations of the tensile strength of a disclinated bicrystalline nanofilm / // *Philosophical Magazine.* – 2008. – V.88. – №27. – P. 3181-3191.
- [29] Grabowski B., Zotov N. Thermally-activated dislocation mobility in bcc metals: An accelerated molecular dynamics study // *Computational Materials Science.* – 2021. – V.200. – P. 110804.
- [30] Baimova Y.A., Dmitriev S.V. , Nazarov A.A. Simulation of the effect of strengthening-phase particles on the plastic deformation of a two-dimensional polycrystal // *The Physics of Metals and Metallography.* – 2012. – V.113. – №3. – P. 302-311.

- [31] Рыжак Е.И. Бескоординатное тензорное исчисление для механики сплошных сред. М.: МФТИ, 2011. – 170 с.
- [32] Volterra V. Sur Léquilibre des corps élastique multiplement connexes Ecole Norm. Sup. Annat.Sci. – 1907. – V.24. – №4. – P.401-517.
- [33] Somigliana C. Sulla teoria delle distorsione elastiche. // Atti della Reale Accademia dei Lincei. Ser.5: Rendiconti, Classe sci. Fis., Mat., Natur. – 1914. – P.463-472.
- [34] Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. – М.: Изд-во иност. лит, 1963. – 247 с.
- [35] Де Вит Р. Континуальная теория дисклинаций. – М: Мир, 1977. – 208 с.
- [36] Крёнер Е. Общая континуальная теория дислокаций и собственных напряжений. – М: Мир, 1965. – 102 с.
- [37] Mura T. Micromechanics of Defects in Solids. – Dordrecht, Boston, Lancaster: Martinus Nijhoff Publishers, 1987. – 494 p.
- [38] Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. – М.: Мир, 1985. – 352 с.
- [39] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 599 с.
- [40] Колесникова, А.Л, Сорока Р.М., Романов А.Е. Дефекты в континуальной упругой среде: классификация, поля и физические аналоги // Физика и механика материалов. – 2013. – Т.17. – №1. – С. 71-91.
- [41] Колесникова А.Л., Орлова Т.С., Романов А.Е. Упругие модели дефектов в двумерных кристаллах // Физика твердого тела. – 2014. – Т.56. – №12. – С. 2480-2485.
- [42] Eshelby J.D. The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion and Related Problems // Proceedings of the Royal Society A. - 1957. – V.241. – P. 376-396.
- [43] Taylor G. The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals. Part I. Theoretical // Proc. Math. Phys. Eng. Sci. – 1934. – V.145. – P. 362-387.

- [44] Orowan E. Zur Kristallplastizitat // Z. Phys. – 1934. – V.89. – P.605-659
- [45] Polanyi M. Über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte // Z. Phys. – 1934. – V.89. – P. 660-664.
- [46] Burgers J.M. Some considerations of the field of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice // Proc. Kon. Nederl. Akad. Wetensch. – 1939. – V.42. – P. 293–325, 378-399.
- [47] Лихачев В.А., Рыбин В.В. Роль пластической деформации в процессе разрушения кристаллических тел // Изв. АН СССР. Сер.физ. – 1973. – Т.37. – №12. – С. 2433-2438.
- [48] Вергазов А.Н., Лихачев В.А., Рыбин В.В. Характерные элементы дислокационной структуры в деформированном поликристаллическом молибдене // ФММ. – 1976. – Т.42. – №12. – С. 146-154.
- [49] Лихачев В.А., Рыбин В.В. Дисклинационная модель пластической деформации и разрушения металлов // Вестник Ленинградского Университета – 1976. – №7. – С. 103-108.
- [50] Рыжак Е.И. Прямой бескоординатный вывод уравнения совместности для конечных деформаций // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2014. – №4. – С. 30-37.
- [51] Rice J.R. Inelastic constitutive relations for solids – An internal-variable theory and its application to metal plasticity // J. Mech. Phys. Solids – 1971. – V.19. – С. 433-455.
- [52] Asaro Rj. Micromechanics of Crystals and Polycrystals // Advances in Applied Mechanics. – 1983. – V.23 – С. 1-115
- [53] Голованов А.И. Кинематика конечных упругопластических деформаций // Известия высших учебных заведений. Математика. – 2010. – №7. – С. 16-30.
- [54] Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals // Acta Met. – 1953. – V.1. – P. 153-162.

- [55] Bilby B.A., Bullough R., Smith E. Continuous distribution of dislocations- a new application of the method of non-Riemannian geometry // Proc. Roy. Soc. – 1955. – V.A231. – № 1185. – P. 263-273.
- [56] Bullough R., Bilby B. A. Continuous distribution of dislocations: surface dislocations and the crystallography of martensitic transformation. // Proc. Roy. Soc. – 1956. – V.B69. – № 1185. – P. 1276-1286.
- [57] Romanov A.E., Vladimirov V.I. Disclinations in Crystalline Solids // in Dislocation in Solids edited by F.R.N. Nabarro. Elsevier. – 1992. – V.9. – P. 191.
- [58] Лихачев В.А., Хайров Р.Ю. Введение в теорию дисклинаций. – Л.: Изд. ЛГУ, 1975. – 183 с.
- [59] Рыбин В.В., Зисман А.А., Золоторевский Н.Ю. Стыковые дисклинации в пластически деформируемых кристаллах // ФТТ. – 1985. – Т.27. – С. 181-185.
- [60] Рыбин В.В., Золоторевский Н.Ю. Пластические повороты решетки в деформируемых поликристаллах // ФММ. – 1984. – Т.57. – С.380–390.
- [61] Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotorevsky N.Yu. Junction disclinations in plastically de-formed crystals // Acta Metall. Mater. – 1993. – V.41. – №7. – P. 2211-2217.
- [62] Вергазов А.Н., Лихачев В.А., Рыбин В.В. Исследование фрагментированной структуры, образующейся в молибдене при активной пластической деформации // ФММ. – 1976. – Т.42. – №7. – P. 1241-1246.
- [63] 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. – P. 403-407.
- [64] Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. The screening of mesodeflects stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation // Reviews on Advanced Materials Science. – 2012. – V.30. – №1. – P. 73-89.

- [65] Овидько И.А., Шейнерман А.Г. Упругие поля наноскопических включений в нанокompозитах // Физика и механика материалов. – 2010. – Т.10. – № 1-2. – С. 1–29.
- [66] Kroupa F. and Lubor L. Elastic field of cylindrical inclusion // Czechoslovak Journal of Physics B. – 1970. – V.20. – P. 1063-1080.
- [67] Сарафанов Г.Ф. Дислокации в кристаллах и эффекты экранирования их упругого поля. – Нижний Новгород: Изд. ННГУ, 2013. – 122 с.
- [68] Beausir B., Fressengeas C. Disclination densities from EBSD orientation mapping // International Journal of Solids and Structures. – 2013. – V.50. – №1. – P. 137-146.
- [69] Fressengeas C., Beausir B. Tangential continuity of the curvature tensor at grain boundaries underpins disclination density determination from spatially mapped orientation data // International Journal of Solids and Structures. – 2019. – V.156-157. – P. 210-215.
- [70] Кириков С.В., Перевезенцев В.Н., Свирина Ю.В. Компьютерное моделирование кинетики накопления первичных мезодефектов на границах и стыках зерен // Деформация и разрушение материалов. – 2018. – №3.– С. 20-25.
- [71] Bieler T.R., Eisenlohr P., Zhang C., Phukan H.J., Crimp M.A. Grain boundaries and interfaces in slip transfer // Current Opinion in Solid State and Materials Science. – 2014.– V.18. – №4. – P. 212-226.
- [72] Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Структура и свойства границ зерен. Нижний Новгород: Изд-во ННГУ, 2012. - 307 с.
- [73] Fernandes J.V., Gracio J.J., Schmitt J.H. Development and persistence of microbands in copper deformed under complex strain paths // Scripta Metal. Mater. – 1993. – V.28. – P. 1335-1340.
- [74] Guo Y., Britton T.B., Wilkinson A.J. Slip band-grain boundary interactions in commercial-purity titanium // Acta Mater. 2014. – V. 76. – P. 1-12.

- [75] Lee T.C., Robertson I.M., Birnbaum H.K. TEM in situ deformation study of the interaction of lattice dislocations with grain boundaries in metals // *Philosophical Magazine A*. – 1990. – V.62. – №1. – P. 131-153.
- [76] Guo Y., Collins D.M., Tarleton E. Dislocation density distribution at slip band-grain boundary intersections // *Acta Mater.* – 2020. – V.182. – P. 172-183.
- [77] Schneider M., George E.P., Manescau T.J., Zálezák T., Hunfeld J., Dlouhý A., Eggeler G., Laplanche G. Analysis of strengthening due to grain boundaries and annealing twin boundaries in the CrCoNi medium-entropy alloy // *Int. J. Plasticity*. – 2020. – V.124. – P. 155-169.
- [78] Bieler T.R., Alizadeh R., Peña-Ortega M., Llorca J. An analysis of (the lack of) slip transfer between near-cube oriented grains in pure Al // *Int. J. Plasticity*. – 2019. – V.118. – P. 269-290.
- [79] Zheng Z., Balint D.S., Dunne F.P.E. Investigation of slip transfer across HCP grain boundaries with application to cold dwell facet fatigue // *Acta Mater.* – 2017. – V.127. – P. 43-53.
- [80] Рыбин В.В., Перевезенцев В.Н., Свирина Ю.В. Модель формирования оборванных дислокационных границ на стыковых дисклинациях // *Журнал технической физики*. – 2016. – Т. 86. – № 6. – С. 100-105.
- [81] Сарафанов Г.Ф., Перевезенцев В.Н. Моделирование процессов зарождения и формирования оборванных субграниц // *Вопросы материаловедения*. – 2007. – №1(49). – С. 5-19.
- [82] Rybin V.V., Perevezentsev V.N., Svirina Y.V. Structural transformations at the initial stages of fragmentation of plastically deformed polycrystals: A computer experiment // *Technical Physics*. – 2017. – V.62. – №5. – P. 745–754.
- [83] Свирина Ю.В., Перевезенцев В.Н. Образование фасетированных субграниц в упругом поле дисклинации при действии двух систем скольжения // *Деформация и разрушение материалов*. – 2017. – №2. – С. 2-7
- [84] Перевезенцев В.Н., Свирина Ю.В., Кириков С.В. Моделирование дислокационных структур, формирующихся в процессе пластической дефор-

- мации в упругом поле дисклинации при различных способах генерации дислокаций // Деформация и разрушение материалов. – 2017. – №3. – С. 2-8.
- [85] Morozov N.F., Ovid'ko I.A., Petrov Yu.V., Sheinerman A.G. Generation and convergence of nanocracks in nanocrystalline materials deformed by grain boundary sliding // Reviews on Advanced Materials Science. – 2009. – V.19. – №1-2. – P. 63-72.
- [86] Поздняков В.А., Глезер А.М. Структурные механизмы пластической деформации нанокристаллических материалов // Физика твердого тела. – 2002. – Т. 44. – № 4. – С. 705-710.
- [87] Поздняков В.А., Глезер А.М. Механизмы пластической деформации и аномалии зависимости Холла-Петча металлических нанокристаллических материалов // Физика металлов и металловедение. – 2003. – Т.96. – №1. – С. 114-128.
- [88] Koch C.C., Ovid'ko I.A., Seal S., Verper S. Structural Nanocrystalline Materials. Fundamentals and Applications Cambridge University Press. 2007. – P.380
- [89] Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В., Чувильдеев В.Н. Локальная миграция границ и аккомодация межзеренного проскальзывания в условиях структурной сверхпластичности // Поверхность. Физика. Химия. Механика. – 1985. – №11. – С.101-108.
- [90] Bobylev S.V., Ovid'ko I.A., Mukherjee A.K. Transition from plastic shear into rotation deformation mode in nanocrystalline metals and ceramics // Reviews on Advanced Materials Science. – 2009. – V.19. – №1-2. – P. 103-113.
- [91] Перевезенцев В.Н., Рыбин В. В. Анализ дефектных структур и механизмов аккомодации при сверхпластическом течении поликристаллов // Физика металлов и металловедение. – 1981. – Т.51. – № 3. – С. 649-658.
- [92] Бобылев С.В., Овидько И.А. Аккомодация зернограничного скольжения и повышение трещиностойкости в деформируемых нанокристаллических

- материалах // Физика и механика материалов. – 2016. – Т.29. – №1. – С. 43-70.
- [93] Bobylev S.V., Morozov N.F., Ovid'ko I.A. Cooperative grain boundary sliding and nanograin nucleation process in nanocrystalline, ultrafine-grained, and polycrystalline solids // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 2011. – V.84. – №094103. – P. 1-10.
- [94] Kacher, J., Robertson, I.M. Quasi-four-dimensional analysis of dislocation interactions with grain boundaries in 304 stainless steel // Acta Mater. – 2012. – V.60. – P. 6657-6672.
- [95] Kacher, J., Eftink, B.P., Cui, B., Robertson, I.M. Dislocation interactions with grain boundaries // Current Opin. Solid State Mater. Sci. – 2014. – V.18. – P. 227-243.
- [96] Zener C.A theoretical criterion for the initiation of slip bands // Phys. Rev. – 1946. – V.69. – P. 128-129.
- [97] Zener C. Fracturing of metals // Trans. Amer. Soc. Metals. 1948. – №40. – P. 3-14.
- [98] Mott N.F. Dislocations plastic flow and creep // Proc. Roy. Soc. – 1953. – V. A220. – P. 1-14.
- [99] Stroh A. N. The formation of cracks as a result of plastic flow // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1954. – 223(1154). – P. 404-414.
- [100] Argon A.S., Orowan E. Crack nucleation in MgO single crystals // Phil. Mag. – 1964. – V.9. – №102. – P. 1023-1039.
- [101] Smith E., Barnby J.T. Crack nucleation in crystalline solids // Metal Sci.'J. – 1967. – V.1. – P. 56-64.
- [102] Владимиров В.И., Ханнанов Ш.Х. Пересекающиеся скопления краевых дислокаций // ФТТ. – 1970. – Т.12. – №3. – С. 856-859.
- [103] Владимиров В.И., Ханнанов Ш.Х. Актуальные задачи теории зарождения дислокационных трещин // ФММ. – 1970. – Т.30. – №3. – С. 490-510.

- [104] Владимиров В.И., Ханнанов Ш.Х. Образование трещин в заторможенной полосе скольжения // ФММ. 1971. – №31. – С. 838-842.
- [105] Владимиров В.И., Ханнанов Ш.Х. Зарождение трещин на встречных дислокационных скоплениях // Проблемы прочности. – 1973. – №5. – С. 62-65.
- [106] Ханнанов Ш.Х. О распределении дислокаций в пересекающихся скоплениях кристаллах кубической симметрии // ФММ. –1978. – Т.46. – №1. – С. 30-34.
- [107] Инденбом В.Л. О критериях разрушения в дислокационных теориях прочности // ФТТ. – 1961. – Т.3. – №7. – С. 2071-2079.
- [108] Рыбин В.В., Жуковский И.М. Дисклинационный механизм образования микротрещин // ФТТ – 1978. – Т.20. – №6. – С. 1829-1835
- [109] Nazarov A.A., Wu M.S., Zhou H. Computer simulation of crack formation in a nickel bicrystal nanowire containing a wedge disclination // The Physics of Metals and Metallography. – 2007. – V.104. – №3. – P. 274-280.
- [110] Ву М. С., Жоу К., Назаров А.А., Лим Б. К. Атомистическое моделирование дисклинационных трещин на тройных стыках в нанокристаллических металлах // Вопросы материаловедения. – 2007. – №4(52). – С. 240-245.
- [111] Wu M.S. Energy analysis of Zener-Griffith crack nucleation from a disclination dipole // International Journal of Plasticity. – 2018. – V.100. – P. 142-155.
- [112] Sarafanov G.F., Perevezentsev V.N. Conditions for the appearance of a stable microcrack in the elastic field of a screened disclination // Russian metallurgy (Metally). – 2016. – V.2016. – № 10. – P. 889-894.
- [113] Гуткин, М.Ю. Овидько И.А., Скиба Н.В. Влияние включений на гетерогенное зарождение трещин в нанокompозитных материалах // ФТТ. – 2007. – Т.49. – №2. – С. 252-257.
- [114] Жуковский И.М., Рыбин В.В. Равновесные трещины во фрагментированных кристаллах // ФТТ –1991. – Т.33. – №4. – С. 1286-1292.
- [115] Ivanov M.B., Kolobov Y.R., Manokhin S.S., Golosov E.V. Studies of structural-phase state of medical titanium alloys by contemporary methods

- of analytical electron microscopy // *Inorganic Materials*. – 2013. – V.49. – №15. – P. 1320-1330.
- [116] Matsunaga T., Kameyama T., Ueda S., Sato E. Grain boundary sliding during ambient-temperature creep in hexagonal close-packed metals // *Philos. Mag.* – 2010. – V.90. – P. 4041-4054.
- [117] Koike J., Ohyama R., Kobayashi T., Suzuki M., Maruyama K. Grain-boundary sliding in AZ31 magnesium alloys at room temperature to 523K // *Mater. Trans.* – 2003. – V.44. – P. 445–451.
- [118] Koike J. Enhanced deformation mechanisms by anisotropic plasticity in polycrystalline Mg alloys at room temperature // *Metall. Mater. Trans. A.* – 2005. – V.36. – P. 1689-1696.
- [119] Stanford N., Sotoudeh K., Bate P.S. Deformation mechanisms and plastic anisotropy in magnesium alloy AZ31 // *Acta Mater.* – 2011. – V.59. – №12. – P. 4866–4874.
- [120] Doquet V., Barkia B. AFM Combined SEM and crystal plasticity analysis of grain boundary sliding in titanium at room temperature // *Mech. Mater.* – 2016. – V.103. – P. 18-27.
- [121] Hémerly S., Tromas C., Villechaise P. Slip-stimulated grain boundary sliding in Ti-6Al-4 V at room temperature // *Materialia*. – 2019.– V.5. 100189
- [122] Овидько И.А., Шейнерман А.Г. Зарождение нанотрещин в поликристаллическом кремнии под действием зернограничного скольжения // *ФТТ*. – 2007. – Т.49. – № 6. – С. 1056-1060.
- [123] Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Triple junction nanocracks in deformed nanocrystalline materials // *Acta Materialia*. – 2004. – V.52. – № 5. – P. 1201-1209.
- [124] Irwin G.R. Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate // *Journal of Applied Mechanics*. – 1957. – V.24. – P. 361-364.
- [125] Kachanov M.L. Shafiro B., Tsurkov I. Handbook of elasticity solutions. – Springer Science and business media, 2003. – 330 p.

- [126] Kim S.W., Chew H.B., Kumar K.S. In situ TEM study of crack–grain boundary interactions in thin copper foils // *Scripta Materialia*. – 2013. – V.68. – P. 154-157.