

УДК 548.735.6: 552.112

О МЕТОДЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕКСТУРООБРАЗОВАНИЯ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВНЕШНИХ НАПРЯЖЕНИЯХ

Колесников В. И.¹, Бардушкин В. В.², Булах И. И.³, Сычёв А. П.⁴, Яковлев В. Б.⁵

ABOUT A METHOD OF TEXTURE FORMATION IN POLYCRYSTALS UNDER EXTERNAL MECHANICAL LOADINGS

Kolesnikov V. I., Bardushkin V. V., Bulakh I. I., Sychev A. P., Yakovlev V. B.

A simulation method of texture formation in polycrystals is discussed. It is based on the analysis of additional energy (as compared with the average one in a polycrystal). This additional energy appears as a result of the redistribution of external mechanical loadings. The work shows that various kinds of external mechanical loadings applied form differing areas in the Euler space of rotation with the increased strain energy leading to modifications and phase transitions of crystalline inhomogeneities and, as a result, modification of orientations of crystallographic axis of crystallites.

Значения напряжений и деформаций внутри кристаллитов поликристаллического материала при приложении внешних механических воздействий отличаются от одного кристаллита к другому, что обусловлено различием ориентаций их кристаллографических осей друг относительно друга. Эти отличия вызывают неоднородность протекания структурных изменений в кристаллитах при механической обработке. Наиболее часто встречающимся в практике случаем такой перестройки структуры является формирование новой кристаллографической текстуры образцов, т. е. изменение ориентаций их кристаллографических осей. Примерами текстурообразования в результате различного рода внешних воздействий в промышленности служат прокатка, протяжка, ковка материалов. На железнодорожном транспорте подобные процессы происходят при длительном взаимодействии колеса и рельса, что приводит к появлению в них дефектов и остаточных напряжений [1].

Вследствие неоднородности распределения полей напряжений и деформаций в объеме поликристалла, процессы изменения кристаллографической текстуры также будут происходить неоднородно. При этом особенно важными оказываются не значения самих локальных напряжений или деформаций, а величина дополнительной (по сравнению со средней по поликристаллу) энергии, являющейся вкладом локального перераспределения внешних механических воздействий. Большая, по сравнению со средней, энергия интенсифицирует процесс изменения текстуры, а меньшая приводит к торможению этого процесса. Следовательно, построение теоретических моделей перестройки структуры при различных внешних воздействиях, основывающихся на оценке локальной энергии, позволяет приблизиться к решению проблемы текстурообразования в поликристаллических средах и имеет большой практический интерес.

¹Колесников Владимир Иванович, академик РАН, Заслуженный деятель науки РФ, д-р технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Теоретическая механика», ректор Ростовского государственного университета путей сообщения.

²Бардушкин Владимир Валентинович, канд. физико-математических наук, доцент кафедры «Высшая математика № 2» Московского института электронной техники.

³Булах Ирина Игоревна, аспирант кафедры «Высшая математика № 2» Московского института электронной техники.

⁴Сычёв Александр Павлович, канд. физико-математических наук, заведующий лабораторией «Транспорт, энергетика и новые композиционные материалы» ЮНЦ РАН, доцент кафедры «Теоретическая механика» Ростовского государственного университета путей сообщения.

⁵Яковлев Виктор Борисович, д-р физико-математических наук, профессор кафедры «Высшая математика № 2» Московского института электронной техники.

Математически кристаллографическая текстура описывается при помощи функции распределения кристаллитов по ориентациям их кристаллографических осей (ФРО) [2–5]. Ориентация кристаллографических осей кристаллитов друг относительно друга в поликристаллическом материале может быть определена при помощи вращения которое задается тремя углами Эйлера $q = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$, где $0 \leq \varphi_1, \varphi_2 < 2\pi$, $0 \leq \Phi \leq \pi$. ФРО $f(q) = f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ определяет объемную долю кристаллитов материала, кристаллографическая система координат которых повернута относительно лабораторной на углы φ'_1 , Φ' и φ'_2 , лежащие внутри телесного угла $dq = \{\varphi_1 \leq \varphi'_1 \leq \varphi_1 + d\varphi_1; \Phi \leq \Phi' \leq \Phi + d\Phi; \varphi_2 \leq \varphi'_2 \leq \varphi_2 + d\varphi_2\}$:

$$\begin{aligned} \frac{dV(q)}{V} &= f(q) dq = \\ &= \frac{1}{8\pi^2} f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \sin \Phi d\varphi_1 d\Phi d\varphi_2. \end{aligned}$$

При этом

$$\begin{aligned} p(u) &= \int_u f(q) dq = \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int_u f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \sin \Phi d\varphi_1 d\Phi d\varphi_2 \end{aligned}$$

интерпретируется как вероятность обнаружения случайной ориентации $q = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ в некоторой области вращений u .

С целью получения информации о формировании структуры поликристалла при различных внешних воздействиях следует, как указывалось выше, рассмотреть локальную энергию деформации (объемную плотность энергии деформации)

$$E(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \sigma_{ij}(\mathbf{r}).$$

В данном выражении произведение тензоров напряжений $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ и деформаций $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ следует понимать как свертку по соответствующим индексам. С учетом $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = s_{ijkl}(\mathbf{r}) \sigma_{kl}(\mathbf{r})$, где $s_{ijkl}(\mathbf{r})$ — тензор податливости, получается

$$E(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} s_{ijkl}(\mathbf{r}) \sigma_{kl}(\mathbf{r}) \sigma_{ij}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Основой анализа распределения локальных значений упругой энергии является связь

между значениями напряжений внутри кристаллита определенной ориентации и внешними (средними) напряжениями, приложенными ко всему поликристаллу. Наиболее удобной характеристикой, позволяющей проводить подобный анализ, является оператор концентраций полей напряжений $K_{ijkl}^\sigma(\mathbf{r})$ (тензор четвертого ранга) [6–9], связывающий локальные значения тензора напряжений $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ с внешними $\langle \sigma_{kl}(\mathbf{r}) \rangle$ по материалу

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = K_{ijkl}^\sigma(\mathbf{r}) \langle \sigma_{kl}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (2)$$

Оператор концентраций зависит от структуры и свойств среды, но не зависит от величин прикладываемого воздействия. Воспользовавшись (2), выражение (1) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} s_{ijkl}(\mathbf{r}) K_{klpr}^\sigma(\mathbf{r}) K_{ijmn}^\sigma(\mathbf{r}) \times \\ &\times \langle \sigma_{pr}(\mathbf{r}) \rangle \langle \sigma_{mn}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (3) \end{aligned}$$

При моделировании изменения текстуры поликристалла в предлагаемом методе учитывается условие, что каждый кристаллит, изменяя ориентацию, стремится уменьшить свою энергию. Для того чтобы определить, какие именно кристаллиты будут поворачиваться, необходимо найти ориентации, при которых энергия кристаллита принимает экстремальное значение, т.е. становится выше некоторой пороговой энергии. Для этого необходимо описать энергию в каждой точке материала как функцию ориентации кристаллита, содержащего данную точку. Принимая, что в пределах кристаллита механическая энергия и другие величины постоянны, зависимость энергии кристаллитов от радиус-вектора будет определяться координатами эйлерового пространства

$$E(\mathbf{r}) = E(q), \quad q = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}.$$

Учитывая выражение для оператора концентраций напряжений в приближении Фойгта [6]

$$K_{klpr}^\sigma(\mathbf{r}) = c_{kl\zeta\xi}(\mathbf{r}) \langle c_{\zeta\xi pr}(\mathbf{r}) \rangle^{-1},$$

получим

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} s_{ijkl}(\mathbf{r}) c_{kl\zeta\xi}(\mathbf{r}) \langle c_{\zeta\xi pr}(\mathbf{r}) \rangle^{-1} c_{ij\mu\nu}(\mathbf{r}) \times \\ &\times \langle c_{\mu\nu mn}(\mathbf{r}) \rangle^{-1} \langle \sigma_{pr}(\mathbf{r}) \rangle \langle \sigma_{mn}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (4) \end{aligned}$$

Поскольку рассматривается поликристалл, упругие свойства которого зависят только от

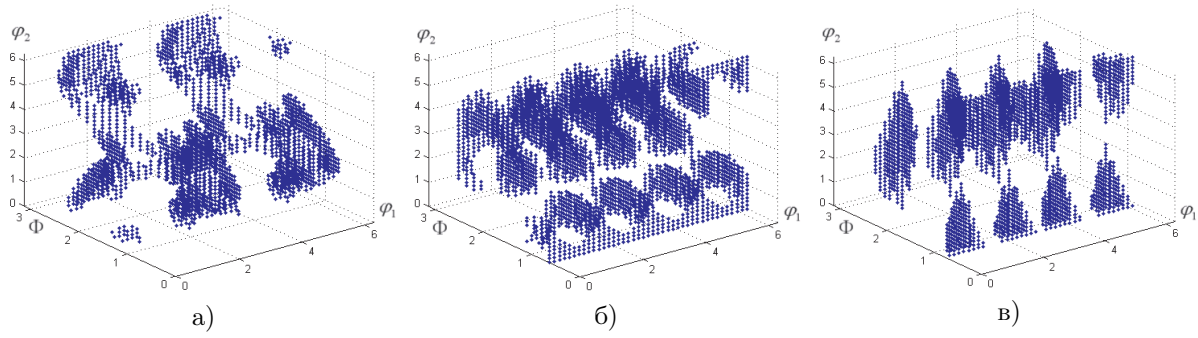


Рис. 1. Области эйлерова пространства, соответствующие ориентациям кристаллитов, при которых их энергия выше $E_{\text{пор}}$: а — осевой случай, б — сдвиговой случай, в — случай напряженно-деформированного состояния и объемного сжатия

ориентации $q = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ кристаллографических осей кристаллитов, то энергию (4) можно представить в виде

$$E(q) = \frac{1}{2} s_{ijkl}(q) c_{kl\zeta\xi}(q) \langle c_{\zeta\xi pr} \rangle^{-1} \times \\ \times c_{ij\mu\nu}(q) \langle c_{\mu\nu mn} \rangle^{-1} \langle \sigma_{pr} \rangle \langle \sigma_{mn} \rangle. \quad (5)$$

В выражении (5) $s_{ijkl}(q)$ и $c_{ijkl}(q)$ представляют собой тензоры соответственно податливости и упругости в эйлеровом пространстве вращений, а процедура усреднения для тензора упругости сводится к интегрированию по всевозможным эйлеровым углам $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ [9]

$$\langle c_{ijkl} \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \times \\ \times c_{ijkl}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \sin \Phi d\Phi d\varphi_1 d\varphi_2, \quad (6)$$

где $f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ — ФРО. Тензоры $s_{ijkl}(q)$ и $c_{ijkl}(q)$ выражаются через тензоры податливости s' и упругости c' в главных осях следующим образом:

$$s_{ijkl}(q) = \alpha_{ir} \alpha_{js} \alpha_{kq} \alpha_{lt} s'_{rstq},$$

$$c_{ijkl}(q) = \alpha_{ir} \alpha_{js} \alpha_{kq} \alpha_{lt} c'_{rstq},$$

при этом матрица α поворота кристаллита вокруг ортогональных осей представляется в виде суперпозиции поворотов на углы Эйлера

$$\alpha_{ij}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = \alpha_{il}(\varphi_1) \alpha_{lk}(\Phi) \alpha_{kj}(\varphi_2),$$

где

$$\alpha(\varphi_1) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\alpha(\Phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \Phi & \sin \Phi \\ 0 & -\sin \Phi & \cos \Phi \end{pmatrix},$$

а $\alpha(\varphi_2)$ аналогична $\alpha(\varphi_1)$.

Для моделирования текстуробразования в поликристаллическом материале был разработан комплекс программ в пакете MATLAB. В качестве примера рассмотрим макрооднородный нетекстурированный поликристалл кварца с изотропной ФРО, т.е. $f(q) = 1$. Тензор модулей упругости для монокристалла кварца в матричной форме имеет вид [6]

$$c = \|c_{ij}\| \text{ ГПа}, \quad i, j = 6,$$

где $c_{11} = c_{22} = 86,74$, $c_{33} = 107,20$, $c_{44} = c_{55} = 57,94$, $c_{66} = 39,88$, $c_{12} = c_{21} = 6,99$, $c_{13} = c_{23} = c_{31} = c_{32} = 11,91$, $c_{14} = -c_{24} = c_{41} = -c_{42} = -c_{56} = -c_{65} = 17,91$. Остальные элементы c_{ij} равны нулю.

Вводя сетку в эйлеровом пространстве и задавая пороговую энергию $E_{\text{пор}}$, по формуле (5) можно определить узлы сетки, которые при внешнем приложенном механическом напряжении $\langle \sigma \rangle$ соответствуют ориентациям кристаллитов поликристаллического образца, при которых их энергия выше $E_{\text{пор}}$. На рис. 1 приведены графики областей эйлерова пространства, содержащих такие узлы, в случаях осевого напряженно-деформированного состояния (рис. 1а)

$$\langle \sigma \rangle = \begin{pmatrix} 400 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ МПа},$$

$$E_{\text{пор}} = 1,683 \text{ МПа};$$

сдвигового напряженно-деформированного состояния (рис. 1б)

$$\langle \sigma \rangle = \begin{pmatrix} 400 & 0 & 0 \\ 0 & 400 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ МПа,}$$

$$E_{\text{пор}} = 2,369 \text{ МПа;}$$

и объемного сжатия (рис. 1в)

$$\langle \sigma \rangle = \begin{pmatrix} 400 & 0 & 0 \\ 0 & 400 & 0 \\ 0 & 0 & 400 \end{pmatrix} \text{ МПа,}$$

$$E_{\text{пор}} = 2,525 \text{ МПа.}$$

Из рисунков видно, что различные виды прикладываемого механического воздействия приводят к тому, что повышенная энергия деформации оказывается у кристаллитов, которые формируют различные, отличные друг от друга, области в эйлеровом пространстве вращений. Кристаллиты именно этих областей будут в первую очередь подвергаться модификации и фазовым превращениям с изменением ориентаций их кристаллографических осей, что и является основанием для формирования новой кристаллографической текстуры.

Литература

1. Виглин А. С. Количественная мера текстуры поликристаллического материала. Текстура функция // ФТТ. 1960. Т. 2. № 10. С. 2463–2476.
2. Roe R. J. Description of Crystallite Orientation in polycrystalline Materials. General Solution to Pole Figures Inversion // J. Appl. Phys. 1965. V. 36. № 6. P. 2024–2031.
3. Bunge H. J. Texture Analysis in Material Science. London: Butterworth. Pub., 1982. 400 p.
4. Савелова Т. И. Функции распределения зерен по ориентациям и их гауссовские приближения // Заводская лаборатория. 1984. Т. 50. № 5. С. 48–52.
5. Шермергор Т. Д., Яковлев В. Б. Концентрация связанных электромеханических полей на поверхности кристаллита в текстурированном поликристаллическом кварце // Изв. РАН. Физика Земли. 1993. № 6. С. 89–94.
6. Yakovlev V. B. Local Stress-Strain Conditions of Textured Polycrystals under High Pressure // High Pressure Research. 2000. V. 17. P. 375–383.
7. Бардушкин В. В., Никитин А. Н., Сычев А. П., Яковлев В. Б. Локальная концентрация напряжений и деформаций в поликристаллических материалах естественного происхождения // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2004. № 1. С. 30–38.
8. Колесников В. И., Бардушкин В. В., Никитин А. Н., Сычев А. П., Яковлев В. Б. Механические свойства оливиносодержащих пород при высоких давлениях // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2004. № 3. С. 11–18.
9. Шермергор Т. Д. Теория упругости микроненормальных сред. М.: Наука, 1977. 399 с.
10. Колесников В. И., Бардушкин В. В., Никитин А. Н., Сычев А. П., Яковлев В. Б. Механические свойства оливиносодержащих пород при высоких давлениях // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2004. № 3. С. 11–18.
11. Шермергор Т. Д. Теория упругости микроненормальных сред. М.: Наука, 1977. 399 с.

Статья поступила 1 декабря 2005 г.

Ростовский государственный университет путей сообщения

Московский институт электронной техники

Южный научный центр РАН

© Колесников В. И., Бардушкин В. В., Булах И. И., Сычёв А. П., Яковлев В. Б., 2006