МЕХАНИКА
ТВЕРДОГО ТЕЛА
№ 3 • 1995

УДК 539.214; 539.374

© 1995 г. И. Б. СЕВОСТЬЯНОВ, И. В. ФРОЛОВ

ОБ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Существует несколько способов определения пластических свойств поликристалла по известным свойствам образующих его монокристаллов. Проблема определения напряженно-деформированного состояния поликристалла как тела, состоящего из прилегающих друг к другу кристаллов (зерен) в виде неправильных многогранников разной формы в настоящее время пока не поддается решению без значительных упрощений. Одно из наиболее известных упрощений состоит в представлении зерен анизотропными эллипсоидами или даже сферами со случайным распределением осей анизотропии в пространстве. При определении эффективных упругих свойств поликристаллов, как показывает анализ результатов работы [1] и других исследований, такой подход дает весьма удовлетворительные результаты. В настоящей работе этот подход реализуется для определения упругопластических свойств поликристалла. Для этого используется обобщение результатов Эшелби о состоянии эллипсоидального включения в неограниченной упругой среде на случай, когда включение обладает любого рода физической нелинейностью и произвольной анизотропией [2].

Наиболее тонкий и важный вопрос заключается в выборе определяющих соотношений для материала включения (монокристалла). Хорошо известно, что атермическая пластическая деформация чистых монокристаллов связана с движением дислокаций в системах скольжения и их взаимодействием [3]. Проблема корректного описания пластической деформации и упрочнения таких кристаллов на основе реальных механизмов является темой отдельного исследования. Поэтому на вдаваясь в физику пластической деформации, удобно рассматривать монокристалл как упругопластическую среду с определенным типом симметрии (например, кубической или гексагональной). В настоящей работе используется условие пластичности, полученное в [4].

1. Пусть θ_* — удельная мощность диссипации и

$$\lambda(t) = \int_0^t \theta_*(t_1)\, dt_1 \tag{1.1}$$

«термодинамическое время», введенное в [5, 6]. Так как в соответствии со вторым началом термодинамики $\theta_* \geq 0$, причем $\theta_* = 0$ тогда и только тогда, когда процесс обратимый, определенное указанным образом λ всегда возрастает при необратимых процессах, позволяя тем самым отмечать последовательность состояний в каждом из них. Обратимые процессы в шкале λ являются мгновенными, что дает возможность использовать принцип суперпозиции Больцмана не только для вязкоупругих сред, но и для сред с любой допускаемой вторым началом реологией, в том числе для упругопластических [4, 5, 6]. Пластическая составляющая $\varepsilon^p = \varepsilon - \mathrm{E}^{-1} : \sigma$ тензора малых деформаций ε, где E^{-1} — тензор податливостей монокристалла, обратный тензору упругих модулей, σ — тензор напряжений, двумя точками обозначена операция свертки по двум индексам, на основе принципа суперпозиции определяется соотношением

$$\varepsilon^p = \int_0^\lambda \mathrm{H}(\lambda - \lambda_1) : \sigma(\lambda_1)\, d\lambda_1 \tag{1.2}$$

где H — тензор четвертого ранга, обладающий соответствующей симметрией и представляющий собой убывающую по λ функцию, что необходимо для удовлетворения принципа затухающей памяти; кроме того $\partial^2 H/\partial\lambda^2 \geq 0$. Поскольку пластическая деформация монокристалла имеет сдвиговой характер, а сдвиги не оказывают влияния на изменение объема, ε^p представляет собой девиатор, т. е. $sp\,(\varepsilon^p) = 0$. Это однако не означает, что и вместо тензора напряжений σ в (1.2) нужно использовать его девиаторную часть. Последнее становится возможным, только если материал изотропен или обладает кубической симметрией.

Продифференцируем (1.2) по «лабораторному» времени t учитывая, что согласно (1.1) $d/dt = \theta_* d/d\lambda$; тогда

$$\dot{\varepsilon}^p = \theta_* H_0 : (\sigma - \mu), \ \mu = \int_0^\lambda \Phi(\lambda - \lambda_1) : \sigma(\lambda_1)\, d\lambda_1 \qquad (1.3)$$

где $H_0 = H(0)$, $\Phi(\lambda) = -H_0^{-1} : \partial H/\partial\lambda$, так что $\Phi \geq 0$ и удовлетворяет принципу затухающей памяти. Поправочный тензор μ характеризует упрочнение монокристалла за счет действия напряжений третьего рода. Движущиеся дислокации на разных стадиях пластического деформирования чистых монокристаллов встречают различного типа препятствия, такие как барьер Пайерлса, дислокации «леса», «сидячие» дислокации и т. п. Поэтому на действие внешних сил, поджимающих дислокации к препятствию, накладывается реакция отпора от этого препятствия, которая и является основным источником напряжений третьего рода, а некоторое среднее от нее и представляет собой тензор μ.

Из (1.3) следует, что $\theta_* > 0 \Leftrightarrow \dot{\varepsilon}^p \neq 0$. Используя определение мощности диссипации для атермической пластической деформации $\theta_* = (\sigma - \mu) : \dot{\varepsilon}^p$ и соотношение (1.3), получаем для $\dot{\varepsilon}^p \neq 0$:

$$1 = (\sigma - \mu) : H_0 : (\sigma - \mu) \qquad (1.4)$$

Поскольку возможны состояния кристалла, при которых выполняется неравенство $1 > (\sigma - \mu) : H_0 : (\sigma - \mu)$, например, при обратимых процессах — разгрузке и последующем нагружении, когда $\dot{\varepsilon}^p = 0$. Тогда в общем случае условие пластичности будет иметь вид

$$1 \geq (\sigma - \mu) : H_0 : (\sigma - \mu) \qquad (1.5)$$

2. Рассмотрим теперь задачу о равновесии линейно-упругого пространства с монокристаллическим включением, занимающим эллипсоидальную область V, под действием заданного на бесконечности однородного поля поверхностных сил. И пусть упругие свойства матрицы и включения совпадают и характеризуются тензором модулей упругости $\mathbf{E}$. Соотношеие между полной деформацией и напряжением во включении получим подстановкой $\varepsilon^p = \varepsilon - \mathbf{E}^{-1} : \sigma$ в (1.2). В результате приходим к линейному интегральному уравнению Вольтерра второго рода относительно тензора напряжений

$$\sigma = \mathbf{E} : \varepsilon - \mathbf{E} : \int_0^\lambda H(\lambda - \lambda_1) : \sigma(\lambda_1)\, d\lambda_1$$

решение которого можно записать в виде

$$\sigma = \mathbf{E} : \varepsilon - \mathbf{E}^2 : \int_0^\lambda \Psi(\lambda - \lambda_1) : \varepsilon(\lambda_1)\, d\lambda_1 \qquad (2.1)$$

где Ψ — тензор 4-го ранга, резольвентный для $\boldsymbol{H}$ и обладающий такими же свойствами, $\mathbf{E}^2 = \mathbf{E} : \mathbf{E}$. Если обе рассматриваемые фазы (включение и матрица) по отдельности однородны, то для системы в целом

$$\sigma = \mathbf{E} : \varepsilon - \delta(V) \left(\mathbf{E}^2 : \int_0^\lambda \Psi(\lambda - \lambda_1) : \varepsilon(\lambda_1)\, d\lambda_1\right) \qquad (2.2)$$

где $\delta(V)$ — характеристическая функция области V. Будем считать выполненными обычные условия непрерывности вектора перемещений и нормальной составляющей тензора напряжений при переходе через границу раздела. Подставляя (2.1) в уравнение равновесия $\nabla\cdot\sigma = 0$ с учетом симметрии тензоров E и Ψ:

$$\nabla\cdot(\mathrm{E} : \nabla u) - \mathrm{F} = 0 \tag{2.3}$$

$$\mathrm{F} = -\nabla\cdot\left\{\delta(V)\,\mathrm{E}^2 : \int_0^\lambda \Psi(\lambda-\lambda_1) : \varepsilon(\lambda_1)\,d\lambda\right\} \tag{2.4}$$

Уравнение (2.3), понимаемое в смысле обобщенных функций, представляет собой уравнение равновесия линейноупругой среды под действием системы массовых сил F, распределенных по границе области V, записанное в перемещениях. Решение этого уравнения после ряда несложных преобразований сводится к решению интегрального уравнения

$$u(x) = u_0(x) + \int_{(v)} \nabla\mathrm{U}(x-x_1) : \left[\mathrm{E}^2 : \int_0^\lambda \Psi(\lambda-\lambda_1) : \nabla u(\lambda_1)\,d\lambda_1\right] dV(x_1) \tag{2.5}$$

с ядром, являющимся производной от тензора Грина (тензора влияния) для линейноупругой матрицы (в случае изотропной среды тензор влияния — это обычный тензор Кельвина — Сомилиано [7]); объемный интеграл берется по области, занятой кристаллитом. Слагаемое $u_0(x)$ в (2.4) является решением однородного уравнения, соответствующего (2.2), т. е. полем перемещения в среде без включения при тех же условиях на бесконечности.

Согласно результатам [2] поля напряжений и деформации внутри V при сформулированных выше условиях будут однородными, а интеграл по объему эллипсоида от производной тензора Грина представляет собой обыкновенную тензорную функцию, линейную относительно радиус-вектора x при любой симметрии матрицы, т. е.

$$u(x) = u_0(x) + x\cdot\mathrm{A}_0 : \left(\mathrm{E}^2 : \int_0^\lambda \Psi(\lambda-\lambda_1) : \nabla u(\lambda_1)\,d\lambda_1\right) \tag{2.6}$$

где A_0 — постоянный тензор четвертого ранга, вычисление которого сводится к интегрированию по поверхности единичной сферы с центром в точке x известной функции от тензора Грина U [8]: $\mathrm{A}_0 = \operatorname{def} \int_{(v)} \nabla\mathrm{U}(x-x_1)\,dV(x_1)$. Переходя далее к деформациям, получим уравнение

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_0(x) + \mathrm{A}_0 : E^2 : \int_0^\lambda \Psi(\lambda-\lambda_1) : \varepsilon(\lambda_1)\,d\lambda_1 \tag{2.6'}$$

решение которого имеет вид

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_0(x) - \mathrm{A}_0 : \mathrm{E}^2 : \int_0^\lambda \mathrm{H}_1(\lambda-\lambda_1) : \varepsilon_0(\lambda_1)\,d\lambda_1 \tag{2.7}$$

где резольвентное ядро H_1 известным образом связано с Ψ и, следовательно, с H.

3. Теперь на основании решения задачи об одиночном упругопластическом эллипсоиде в линейно-упругом пространстве можно получить макроскопические характеристики неоднородной среды, дискретная фаза которой удовлетворяет определяющему соотношению (2.1). Предположим, что объемная доля неоднородностей соответствует плотной упаковке, тогда в качестве предельного случая получаем задачу об определении пластических свойств поликристалла по известным пластическим свойствам кристаллитов. По прежнему полагаем, что упругие свойства матрицы и включений совпадают и равны некоторым средним значениям (определению упругих свойств поликристалла посвящено достаточно много работ, например [1, 9]). Для усреднения будем применять

метод из [10], хорошо зарекомендовавший себя в механике упругих матричных композитов в широком интервале концентраций включения и в то же время не требующий знания фундаментального решения для эффективной среды.

Напомним основные идеи метода Канауна: каждая неоднородность рассматривается как изолированный эллипсоид или шар, «впаянный» в основную среду; поле деформации ε_*, в котором находится каждый такой эллипсоид, складывается из внешнего поля ε_0 и поля, наведенного окружающими неоднородностями (соседними зернами); поле ε_* считается однородным по координатам.

С учетом последней гипотезы поле деформации внутри зерна будет описываться соотношением, аналогичным (2.7):

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_*(x) - A_0 : E^2 : \int_0^{\lambda} H_1(\lambda - \lambda_1) : \varepsilon_*(\lambda_1)\, d\lambda_1 \tag{3.1}$$

Уравнение для поля ε_* получается подстановкой (3.1) в (2.5), применением оператора симметризованного градиента def и последующим усреднением результата по ансамблю полей неоднородностей. В рассматриваемом случае, согласно эргодической гипотезе, усреднение будет производиться по всевозможным ориентациям кристаллографических осей относительно глобальной («лабораторной») системы координат

$$\varepsilon_0 \langle \delta(V) \rangle = \varepsilon_* \langle \delta(V) \rangle + E^2 : \left\langle A_0 : \int_0^{\lambda} H_1(\lambda - \lambda_1) : \varepsilon_*(\lambda_1)\, d\lambda_1 \delta(V) \right\rangle -$$

$$- \operatorname{def} \int_{(v)} \nabla U(x - x_1) : E^2 : \left\langle \int_0^{\lambda} \Psi(\lambda - \lambda_1) : \left[\varepsilon_*(\lambda_1) - \right.\right.$$

$$\left.\left. - E^2 : A_0 : \int_0^{\lambda_1} H_1(\lambda_1 - \lambda'') : \varepsilon_*(\lambda'')\, d\lambda'' \right] d\lambda_1 \delta(V)\, \delta(V_1) \right\rangle dV_1 \tag{3.2}$$

Поскольку $\langle \delta(V) \rangle = C_{in}$, где C_{in} — объемная доля зерен, то с учетом известной связи между ядром интегрального уравнения и его резольвентой (тензоры Ψ и H_1):

$$C_{in}\varepsilon_0 = C_{in}\varepsilon_* - E^2 : A_0 : \int_0^{\lambda} \langle H_1(\lambda - \lambda_1)\, \delta(V) \rangle : \varepsilon_*(\lambda_1)\, d\lambda_1 +$$

$$+ \operatorname{def} \int_{(v)} \nabla U(x - x_1) : E^2 : \int_0^{\lambda} \langle H_1(\lambda - \lambda_1)\, \delta(V)\, \delta(V_1) \rangle : \varepsilon_*(\lambda_1)\, d\lambda_1 dV_1 \tag{3.3}$$

Ограничимся изотропным распределением зерен, т. е. случаем, когда все ориентации осей кристаллитов равновероятны. Тогда, опуская промежуточные вычисления, проводимые в соответствии с [10], окончательно получим

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_* - E : (I - E : A_0) : \int_0^{\lambda} \langle H_1(\lambda - \lambda_1)\, \delta(V) \rangle : \varepsilon_*(\lambda_1)\, d\lambda_1 \tag{3.4}$$

где I — единичный тензор четвертого ранга. Принимая во внимание, что внешнее поле напряжений σ совпадает со средним по всему материалу [1, 9, 10], приходим к определяющему соотношению для поликристалла

$$\sigma = E : \varepsilon_* - E^2 : (I - E : A_0) : \int_0^{\lambda} \langle H_1(\lambda - \lambda_1)\, \delta(V) \rangle : \varepsilon_*(\lambda_1)\, d\lambda_1 \tag{3.5}$$

Отсюда

$$\varepsilon_* = E^{-1} : \sigma + (I - E : A_0) : \int_0^{\lambda} \langle \Psi_1(\lambda - \lambda_1)\, \delta(V) \rangle : \sigma(\lambda_1)\, d\lambda_1 \tag{3.6}$$

причем для резольвенты Ψ_1 ядра $\mathbf{H}_1$ имеем $\Psi_1(0) = \mathbf{H}_1(0) = \mathbf{H}(0)$. Представим теперь среднюю полную деформацию в виде суммы упругой и средней пластической составляющих $\varepsilon_* = \mathbf{E}^{-1} : \sigma + \varepsilon_*^p$, откуда

$$\varepsilon_*^p = (\mathbf{I} - \mathbf{E} : \mathbf{A}_0) : \int_0^\lambda \langle \Psi_1(\lambda - \lambda_1)\, \delta(V) \rangle : \sigma(\lambda_1)\, d\lambda_1 \tag{3.7}$$

Дифференцируя (3.7) по t и проводя преобразования, аналогичные *п.*1, получим условие пластичности поликристалла

$$1 = (\sigma - \langle \mu \rangle) : (\mathbf{I} - \mathbf{E} : \mathbf{A}_0) : \langle \mathbf{H}(0)\, \delta(V) \rangle : (\sigma - \langle \mu \rangle) \tag{3.8}$$

$$\langle \mu \rangle = \int_0^\lambda \Psi_2(\lambda - \lambda_1) : \sigma(\lambda_1)\, d\lambda_1, \quad \Psi_2(\lambda) = -\langle \mathbf{H}(0)\, \delta(V) \rangle^{-1} : \left\langle \frac{\partial \Psi_1}{\partial \lambda}\, \delta(V) \right\rangle$$

4. Рассмотрим в качестве примера случай, когда зерна являются шарами и пусть пластическая деформация каждого кристаллита связана со сдвигом только в одной плоскости скольжения (вариант известной теории скольжения Батдорфа — Будянского). Такое поведение характерно для Г.Ц.К. и Г.П.У. монокристаллов высокой частоты, ориентированных для одиночного скольжения [3]. Тогда, удельная мощность диссипации и «термодинамическое» время кристаллита совпадает с соответствующими характеристиками сдвига в системе скольжения, и, следовательно, можно применить принцип суперпозиции (п. 1 и [4]) к сдвигу γ^p и касательному напряжению τ, действующему в системе скольжения:

$$\gamma^p = \int_0^\lambda \psi(\lambda - \lambda_1)\, \tau(\lambda_1)\, d\lambda_1 \tag{4.1}$$

Пространственная ориентация системы скольжения определяется парой единичных ортов — нормали $\mathbf{n}$ к плоскости скольжения и направления скольжения $\mathbf{b}$, зависящих от углов Эйлера. Касательное напряжение τ определяется следующим образом: $\tau = \mathbf{P} : \sigma$, где $\mathbf{P} = 1/2\,(\mathbf{nb} + \mathbf{bn})$ — тензор, полученный симметрированием диады $\mathbf{nb}$, и $sp\,(\mathbf{P}) = 0$. Тогда, учитывая, что $\mathbf{D}^p = \gamma^p \mathbf{P}$ — девиатор пластической деформации, соотношения (4.1), (2.1), получаем

$$D_\sigma = 2G\left(\mathbf{D}_\varepsilon - 2G \int_0^\lambda \Psi(\lambda - \lambda_1) : \mathbf{D}_\varepsilon(\lambda_1)\, d\lambda_1\right) \tag{4.2}$$

где $\mathbf{D}_\sigma$ — девиатор тензора напряжений, $\mathbf{D}_\varepsilon$ — девиатор тензора полной деформации, G — модуль сдвига, Ψ — тензор 4-го ранга: $\Psi = \psi \mathbf{PP}$ (где $\mathbf{PP} = \mathbf{P} \otimes \mathbf{P}$, $\otimes$ — тензорное произведение). Для матрицы имеем

$$\mathbf{D}_\sigma = 2G\,(1/2\,(\mathbf{C}_2 + \mathbf{C}_3) - 1/3\,\mathbf{I}) : \mathbf{D}_\varepsilon = 2G\mathbf{C}_D : \mathbf{D}_\varepsilon \tag{4.3}$$

где $\mathbf{C}_2$ и $\mathbf{C}_3$ — известные изомеры единичного тензора 4-го ранга в [7], $\mathbf{C}_D$ — тензор 4-го ранга, фигурирующий в разложении [9]. Поскольку изменение объема чисто упругое и одинаково как для матрицы, так и для включения, то оно рассматриваться ниже не будет.

Тензор A_0, входящий в (2.6), в этом случае имеет вид

$$\mathbf{A}_0 = \frac{1}{20G(1-\nu)}\left[-\frac{2}{3}\mathbf{I} + \mathbf{C}_2 + \frac{-17 + 20\nu}{3}\mathbf{C}_3\right] \tag{4.4}$$

где ν — коэффициент Пуассона.

Усреднение по всем возможным ориентациям дает

$$\left\langle \int_0^\lambda \psi_1(\lambda - \lambda')\, \mathbf{PP}\delta(V) : \mathbf{D}_\sigma(\lambda')\, d\lambda' \right\rangle = C_{in}\mathbf{P} : \int_0^\lambda \psi_1(\lambda - \lambda')\, \mathbf{D}_\sigma(\lambda')\, d\lambda' \tag{4.5}$$

где $\mathbf{P}$ — изотропный тензор 4-го ранга: $\mathbf{P} = -\frac{1}{30}\mathbf{I} + \frac{1}{20}(\mathbf{C}_2 + \mathbf{C}_3)$. Соотношение (3.7) перепишется тогда следующим образом:

$$\mathbf{D}^{o}_{*} = C_{in}(\mathbf{C}_D - 2G\mathbf{A}_0) : \mathbf{P} : \int_0^{\lambda} \psi_1(\lambda - \lambda') : \mathbf{D}_\sigma(\lambda')\, d\lambda' \tag{4.6}$$

и получаем окончательное условие пластичности для поликристалла:

$$\frac{1}{2}\frac{22 - 25\nu}{75(1-\nu)} C_{in} \mathrm{J}_2(\mathbf{D}_\sigma - \langle \mathbf{D}_\mu \rangle) = \tau_c^2 \tag{4.7}$$

где J_2 — квадратичный инвариант тензора, стоящего в скобках; а $\tau_c = [\psi(0)]^{-1/2}$ — напряжение, при котором начинается сдвиг в данной системе скольжения (напряжение Шмида).

При $\nu = 0{,}32$, соответствующего Cu и Al, и максимальной возможной концентрации $C_{in} = 0{,}74$, из (4.7) получим, что $[\mathrm{J}_2(\mathbf{D}_\sigma - \langle \mathbf{D}_\mu \rangle)]^{1/2} = 3{,}138\tau_c$, т. е. предел текучести поликристалла в 3.138 раза больше напряжения Шмида, что согласуется с экспериментальными данными [3] и вычислениями другими способами. Например, непосредственное усреднение по направлениям соотношения (1.4) приводит в данном примере практически к такой же оценке предела текучести поликристалла $[\mathrm{J}_2(\mathbf{D}_\sigma - \mathbf{D}_\mu')]^{1/2} = 3{,}161\tau_c$, но последнее соотношение справедливо для любого материала, а поправочный тензор $\mathbf{D}_\mu'$ в нем определяется иначе, чем $\langle \mathbf{D}_\mu \rangle$.

Авторы выражают благодарность А. А. Вакуленко за ряд важных замечаний и советов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kröner E.* Berechnung der elastichen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls// Z. Phys. 1958. V. 151. № 4. P. 504—518.
2. *Вакуленко А. А., Севостьянов И. Б.* Включение с нелинейными свойствами в упругой среде.// Исследования по механике строительных конструкций и материалов. Л.: ЛИСИ, 1991. С. 8—16.
3. *Хоникомб Р.* Пластическая деформация металлов. М.: Мир, 1971. 408 с.
4. *Вакуленко А. А.* Связь микро- и макросвойств в упругопластических средах//Итоги науки и техники. ВИНИТИ. 1991. Т. 22. С. 3—54.
5. *Вакуленко А. А.* К теории необратимых процессов//Вестник ЛГУ. Сер. Мат. Мех. Астрон. 1969. № 27, С. 84—90.
6. *Вакуленко А. А.* Суперпозиция в реологии сплошной среды.//Изв. АН СССР. МТТ. 1970. № 1. С. 69—71.
7. *Лурье А. И.* Теория упругости. М.: Наука, 1970. 939 с.
8. *Кунин И. А., Соснина Э. Г.* Эллипсоидальная неоднородность в упругой среде.//Докл. АН СССР. 1971. Т. 199. № 3. С. 571—574.
9. *Шермергор Т. Д.* Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977. 399 с.
10. *Канаун С. К.* О приближении самосогласованного поля для упругой композитной среды//ЖПМТФ. 1977. № 2. С. 160—169.

Санкт-Петербург

Поступила в редакцию
19.VI.1992