МЕХАНИКА
ТВЕРДОГО ТЕЛА
№ 6 • 2005

УДК 539.374:51.001.572

 Ф.Ф. САТДАРОВА

СОСТОЯНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ И ЭВОЛЮЦИЯ ТЕКСТУРЫ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ЛИСТА

Анализируется динамика поликристаллической системы с кубической симметрией кристаллов и ромбической текстурой в условиях механического воздействия. Выявлена высокая устойчивость текстуры металлического листа. Деформированная текстура сохраняет симметрию равновесной.

1. Введение. Цель работы – создание математической модели деформационных процессов в поликристаллической системе для изучения анизотропии пластических свойств металлического листа, связанной с его кристаллографической текстурой.

Существенными особенностями поликристаллической системы, подвергающейся механическому воздействию, являются неравномерное анизотропное упрочнение кристаллов и перераспределение их ориентировок.

Представим состояние деформирующейся поликристаллической системы в виде статистического ансамбля микропластических состояний случайно ориентированных кристаллов. Ориентировки кристаллов описываются координатами $\mathbf{g}$ в пространстве трехмерных вращений. Микросостояния определяются значениями тензора скорости пластических деформаций $\dot{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{g})$, или вектора $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{g}) = (\dot{\varepsilon}_{11}, \dot{\varepsilon}_{22}, \dot{\varepsilon}_{33}, \dot{\varepsilon}_{23}, \dot{\varepsilon}_{31}, \dot{\varepsilon}_{12})^T$ ("T" – символ транспонирования). Вид статистического ансамбля микросостояний полностью определен распределением вероятностей ориентировок кристаллов – текстурной функцией $f(\mathbf{g})$.

Движение микропластических состояний, наблюдаемое по изменениям $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{g})$, контролируется деформационным упрочнением кристаллов. Соотношения микропластических состояний в ансамбле, создающие микронапряжения s_{ij}, регулируются упругой релаксацией в поликристаллической среде с текущей формой зерна (кристаллита). Параметры различно ориентированных кристаллов, реагирующие на состояние поликристаллической системы, являются собственными параметрами наблюдаемых $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{g})$ на группе вращений трехмерного евклидова пространства G.

Состояние поликристаллической системы в целом характеризуется тензором скорости макроскопической деформации

$$\langle\dot{\varepsilon}_{ij}\rangle = \int\limits_G \dot{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{g}) f(\mathbf{g}) d\mathbf{g}$$

В усреднении по ансамблю участвует текущее распределение вероятностей кристаллографических ориентировок, движение которых вызвано взаимодействиями в ансамбле. Элементы тензора $\langle\dot{\varepsilon}_{ij}\rangle$ образуют интегральную наблюдаемую $\langle\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}\rangle$. Тензор макроскопических напряжений $\langle s_{ij}\rangle$, порождающий движение в системе, – особая наблюдаемая, явно связанная со временем величина.

Требуется построить уравнение неравновесной поликристаллической системы, однозначно определяющее ее состояние в текущий момент времени. Это векторное уравнение должно содержать: уравнение динамики системы, описывающее эволюцию наблюдаемых $\dot{\varepsilon}(\mathbf{g})$ регулируемую их собственными динамическими параметрами; основное кинетическое уравнение статистической механики, описывающее эволюцию распределения вероятностей – $f(\mathbf{g})$.

2. Феноменологическое описание микропластических состояний поликристаллической системы. Для упругопластичного состояния материалов установлены следующие фундаментальные соотношения:

1. Линейная зависимость между напряжениями и упругими деформациями, напряжениями и скоростями неупругих деформаций [1]:

$$s_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon^{e}_{kl} + w_{ijkl}\dot{\varepsilon}^{p}_{kl} \tag{2.1}$$

где s_{ij} – сумма упругого и “диссипативного” тензоров напряжений; ε^{e}_{kl} – тензор упругих деформаций; $\dot{\varepsilon}^{p}_{kl}$ – тензор скорости пластических деформаций; c_{ijkl}, w_{ijkl} – тензоры упругости и вязкости. (Пластическая составляющая уравнения (2.1) следует из общего выражения для диссипативной функции деформируемых тел, описывающей внутреннее трение, и лишь формально совпадает с вязким тензором напряжений в жидкости [1]).

2. Линейная реакция на возмущения в ансамбле взаимосвязанных микропластических состояний [2]:

$$(\dot{s}_{ij} - \langle \dot{s}_{ij} \rangle) = -\chi_{ijkl}(\dot{\varepsilon}^{p}_{kl} - \langle \dot{\varepsilon}^{p}_{kl} \rangle) \tag{2.2}$$

где $\dot{s}_{ij}$ и $\langle \dot{s}_{ij} \rangle$ – тензоры, характеризующие скорость изменения локальных (неоднородных) и макроскопических (средних) напряжений; χ_{ijkl} – коэффициенты релаксации неравновесной системы, зависящие от ее внутренней структуры. (Теория линейной реакции утверждает, что неравновесное состояние стремится перейти в равновесное точно так, как в равновесии всякое отклонение от среднего стремится в среднем к нулю [3].)

Изучение механических свойств металлов показывает [4]: упругое равновесие при нагружении наступает практически мгновенно, поэтому $\dot{\varepsilon}^{e}_{ij} = 0$; изменение упругих модулей при деформации пренебрежимо мало, т.е. $c_{ijkl} \approx \text{const}$; при статическом нагружениии влияние скорости деформации $(10^{-4} \le \dot{\varepsilon}^{p}_{ij} \le 10^{-1})$ на способность сопротивляться (холодной) деформации несущественно, так что $(\partial w/\partial t) \approx (\partial w/\partial \varepsilon)\dot{\varepsilon}$ (w и ε – фиксированные компоненты тензоров w_{ijkl} и ε^{p}_{kl}).

Уравнение движения микропластических состояний получим, объединив фундаментальные уравнения (2.1), (2.2) при согласующихся с опытом допущениях

$$\frac{\partial}{\partial t}\dot{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{g}) = h_{ijkl}(\mathbf{g})\{\langle \dot{s}_{kl} \rangle - \chi_{klmn}(\mathbf{g})[\dot{\varepsilon}_{mn}(\mathbf{g}) - \langle \dot{\varepsilon}_{mn} \rangle]\} \tag{2.3}$$

где h_{ijkl} – тензор пластичности, обратный тензору w_{ijkl} (индекс p опускаем, так как далее в уравнениях участвуют только пластические деформации).

Зернистую структуру металлического листа будем моделировать эллипсоидами, главные оси которых ($a_1 \ge a_2 > a_3$) параллельны осям ромбической симметрии листа, а они совпадают с осями (x, y, z) естественной системы координат (x – направление прокатки, z – нормаль к плоскости листа). Для описания взаимосвязи деформаций анизотропного кристалла в форме эллипсоида и его анизотропного поликристаллического окружения, с не очень сильно отличающимися упругими свойствами, используем модель эллипсоидального включения, претерпевающего превращение в матрице [5].

Локальная флуктуация деформации $(\dot{\varepsilon}_{ij} - \langle \dot{\varepsilon}_{ij} \rangle)dt$ в условиях стеснения создает прирост напряжения в зерне

$$(\dot{s}_{ij} - \langle \dot{s}_{ij} \rangle)dt = c_{ijkl}(\Gamma_{klmn} - \delta_{km}\delta_{ln})(\dot{\varepsilon}_{mn} - \langle \dot{\varepsilon}_{mn} \rangle)dt$$

отсюда сразу следует, что

$$\chi_{ijkl} = -c_{ijmn}(\Gamma_{mnkl} - \delta_{km}\delta_{ln}) \qquad (2.4)$$

а также вызывает однородный поворот внутри него

$$\Omega_{ij}(t)dt = \Pi_{ijkl}(\dot{\varepsilon}_{kl} - \langle \dot{\varepsilon}_{kl} \rangle)dt$$

$$\mathbf{\Omega}(t) = \left\| \begin{matrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{matrix} \right\| \qquad (2.5)$$

который ведет к изменению распределения кристаллографических ориентировок. Здесь Γ_{ijkl}, Π_{ijkl} – коэффициенты стесненной деформации, зависящие от формы эллипсоида [5][1]; $\mathbf{\Omega}$ – оператор бесконечно малых вращений, связанный с угловой скоростью $\boldsymbol{\omega} = \omega_1\mathbf{i} + \omega_2\mathbf{j} + \omega_3\mathbf{k}$ в момент времени t [6]; δ_{ij} – символ Кронекера.

Пренебрежение различием упругих свойств выделенного зерна и его окружения, как в модели [5], означает пренебрежение возмущениями полей напряжений и деформаций на границах зерен – по сравнению с флуктуациями по кристаллографическим ориентировкам.

3. Физические и структурные параметры слабо неравновесной поликристаллической системы. В кристаллах кубической симметрии есть три упругих $\mathbf{c} = (c_1, c_2, c_3)^T$ и две пластических $\mathbf{h} = (h_1, h_2)^T$ константы ($c_1 = \hat{c}_{1111}$, $c_2 = \hat{c}_{1122}$, $c_3 = \hat{c}_{1212}$; $2h_1 = \hat{h}_{1111}$, $1/4h_2 = \hat{h}_{1212}$, $\hat{h}_{1122} = -1/2\hat{h}_{1111}$; имеется в виду базис кристалла) [7–8].

При переходе к внешней системе координат тензоры упругости и пластичности кубических кристаллов преобразуются по формулам

$$c_{ijkl}(\mathbf{g}) = c_2\delta_{ij}\delta_{kl} + c_3(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + (c_1 - c_2 - 2c_3)\rho_{ijkl}(\mathbf{g})$$

$$h_{ijkl}(\mathbf{g}) = -h_1\delta_{ij}\delta_{kl} + 1/4h_2(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + (3h_1 - 1/2h_2)\rho_{ijkl}(\mathbf{g})$$

$$\rho_{ijkl}(\mathbf{g}) = \sum_{n=1}^{3} A_{in}A_{jn}A_{kn}A_{ln}$$

где ρ_{ijkl} – оператор линейного преобразования тензоров четвертого ранга при повороте базиса кубического кристалла, описываемом матрицей $\mathbf{A}(\mathbf{g})$ [9].

Пластический потенциал кристаллов кубической симметрии представлен функцией [8]:

$$2\Theta = h_1[(s_{11} - s_{33})^2 + (s_{33} - s_{11})^2 + (s_{11} - s_{22})^2] + h_2(s_{23}^2 + s_{31}^2 + s_{12}^2)$$

[1] При сдвиговых деформациях $\Gamma_{ijij} = \Gamma_{jiij}$, $0 \le 2\Gamma_{ijij} \le 1$; из уравнения (2.4) видим, что $0 \le \chi_{ijkl} \le c_{ijkl}$. Коэффициенты релаксации $\chi_{ijkl}(\mathbf{g})$ приближаются к своему наибольшему значению $c_{ijkl}(\mathbf{g})$, когда зерно по форме становится сравнимо с тонкой пластинкой ($a_1 \ge a_2 \gg a_3$).

Условием стационарного пластического течения является 2Θ = const. Следовательно, по возрастанию сопротивления пластическому течению s_{ij} можно судить о падении коэффициентов пластичности (h_1, h_2), связанном с деформационным упрочнением кристалла. Как следует из условия текучести, скорость изменения вектора коэффициентов пластичности $\mathbf{h} = (h_1, h_2)^T$ подчиняется уравнению

$$\frac{d}{dt}\mathbf{h} = -\mathbf{K}(3\mathbf{h} - \mathbf{h}_0)\dot{\mathbf{e}}$$

$$K_1 = \frac{1}{s_1^0}\left(\frac{\partial s_1}{\partial e_1}\right), \quad K_2 = \frac{1}{s_2^0}\left(\frac{\partial s_2}{\partial e_2}\right), \quad \mathbf{h}_0 = \begin{Vmatrix} h_1^0 \\ h_2^0 \end{Vmatrix} = M\begin{Vmatrix} 1/2(1/s_1^0)^2 \\ 3(1/s_2^0)^2 \end{Vmatrix}$$

Здесь $\mathbf{K} = (K_1, K_2)^T$ – вектор констант; s_1^0 и s_2^0 – измеренные пределы упругости, $(\partial s_1/\partial e_1)$ и $(\partial s_2/\partial e_2)$ – коэффициенты деформационного упрочнения при растяжении монокристалла по направлениям $\langle 100\rangle$ и $\langle 111\rangle$; $\mathbf{h}_0$ – вектор начальных коэффициентов пластичности (M – метрический коэффициент в единицах измерения s_{ij}); $\dot{\mathbf{e}} = (\dot{e}_1, \dot{e}_2)^T$ – вектор скоростей деформации в кристаллографических направлениях $\langle 100\rangle$ и $\langle 111\rangle$. (Предполагается, что в исследуемой области упругопластичных состояний $(h_p^0 - h_p)/2h_p \ll 1$ $(p = 1, 2)$).

При деформации $\varepsilon > 10^{-3}$ пластическое течение осуществляется уже путем множественного скольжения в кристаллах [10], поэтому в качестве оценки коэффициентов деформационного упрочнения в области упругопластичных состояний возьмем обобщенные данные для стадии быстрого упрочнения на кривой растяжения монокристаллов. Согласно этим данным $K_1 \approx 10^{-3}E_1/s_1^0$, $K_2 \approx 10^{-3}E_2/s_2^0$, где E_1 и E_2 – модули упругости кристалла при растяжении по направлениям $\langle 100\rangle$ и $\langle 111\rangle$.

Чтобы определить скорость деформации $\dot{\mathbf{e}}$ в заданном кристаллографическом направлении при ориентировке кристалла $\mathbf{g}$, необходимо обратное преобразование тензора $\dot{\varepsilon}_{ij}$ к кристаллографическому базису: $\dot{e}_{kl} = A_{ik}A_{lj}\dot{\varepsilon}_{ij}$. Скорость $\dot{e}_1$ растяжения по $\langle 100\rangle$ найдем как среднюю по всем симметричным вращениям куба компоненту $\bar{\dot{e}}_{11}(\mathbf{g})$, а скорость $\dot{e}_2$ растяжения по $\langle 111\rangle$ как проекцию $\bar{\dot{e}}_{11}(\mathbf{g})$ на это направление (при этом $\Sigma A_{ik}A_{kj} = \delta_{ij}$ $(k = 1, 2, 3)$; $\Sigma\dot{\varepsilon}_q = 0$ $(q = 1, 2, 3)$ – из условия постоянства объема при пластической деформации).

В результате получаем уравнение, определяющее тензор пластичности деформирующегося кристалла с ориентировкой $\mathbf{g}$:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{h}(\mathbf{g}) = -1/2\boldsymbol{\gamma}(3\mathbf{h}(\mathbf{g}) - \mathbf{h}_0)\sum_{q=1}^{3}|\dot{\varepsilon}_q(\mathbf{g})|$$
$$\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2)^T, \quad \gamma_1 \approx 10^{-3}E_1/s_1^0, \quad \gamma_2 \approx (1/\sqrt{3})\cdot 10^{-3}E_2/s_2^0 \qquad (3.1)$$

На согласованность микропластических деформаций в поликристаллической среде влияют коэффициенты релаксации $\gamma_{ijkl}(\mathbf{g})$ (2.4), которые зависят от формы зерна.

Допустим, что эллипсоидальная форма зерен с упорядоченным направлением главных осей (a_1, a_2, a_3) параллельно осям симметрии в системе при деформации сохраняется (в сопротивляющемся окружении зерно не поворачивается как целое). Для вычисления коэффициентов стесненной деформации $\mathbf{\Gamma} = \{\Gamma_{ijkl}\}$, $\mathbf{\Pi} = \{\Pi_{ijkl}\}$ [5] построим матрицу формы зерна по его текущим размерам $a_q(t) = a_q(0)[1 + \varepsilon_q(t)]$ $(q = 1, 2, 3)$:

$$\mathbf{D}(t) = \begin{Vmatrix} 1 & (a_2/a_1)^2 & (a_3/a_1)^2 \\ (a_1/a_2)^2 & 1 & (a_3/a_2)^2 \\ (a_1/a_3)^2 & (a_2/a_3)^2 & 1 \end{Vmatrix}$$

В условиях неоднородности размеров зерен есть интервал изменения макродеформации $\langle\boldsymbol{\varepsilon}(t)\rangle$, в пределах которого видимых (по матрице $\mathbf{D}(t)$) изменений в структуре нет – текущие значения коэффициентов $\mathbf{\Gamma}(\mathbf{D}(t))$, $\mathbf{\Pi}(\mathbf{D}(t))$ неразличимы. Для реальной системы динамика коэффициентов $\mathbf{\Gamma}$ и $\mathbf{\Pi}$, а следовательно и параметров $\chi_{ijkl}(\mathbf{g})$, управляющих связями в системе, представляется как дискретные переходы на новые значения в точках $\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle_\tau$ $(\tau = 1, 2, \dots)$ удовлетворяющих условию

$$\tau = (3\upsilon_a)^{-1}\sum_{q=1}^{3}|\langle\varepsilon_q\rangle|$$

где υ_a – наблюдаемый коэффициент вариации размеров зерен, имеющих средние значения:

$$\langle\bar{a}_q(t)\rangle = \int_V a_q(0)\eta(a_q)da_q\int_G [1 + \varepsilon_q(t, \mathbf{g})]f(\mathbf{g})d\mathbf{g} = \bar{a}_q(0)[1 + \langle\varepsilon_q(t)\rangle]$$

при логарифмически нормальном законе распределения $\eta(a_q)$ $(q = 1, 2, 3)$ в объеме материала V.

Коэффициент Пуассона ν, необходимый для расчета $\mathbf{\Gamma}$, оценим по изотропной части модулей упругости c°_{ijkl} [11]. Для кристаллов кубической симметрии $\nu \approx c^{\circ}_{1122}/(c^{\circ}_{1111} + c^{\circ}_{1122}) = c_3/2(c_1 - c_2 + c_3)$. Принятый подход согласуется с тем обстоятельством, что в расчете коэффициентов $\mathbf{\Gamma}$ участвует единая форма зерна для всех кристаллографических ориентировок $\mathbf{g}$.

4. Распределение вероятностей ориентировок кристаллов в деформирующейся поликристаллической системе. При любых изменениях распределения вероятностей кристаллографических ориентировок $f(\mathbf{g})$ должно соблюдаться условие сохранения вероятности

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_G f(\mathbf{g})d\mathbf{g} = 0$$

Рассмотрим уравнение непрерывности для плотности вероятностей

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{r}) = -\operatorname{div}\mathbf{q}(\mathbf{r})$$

где $\mathbf{r}$ – вращающийся вектор трехмерного евклидова пространства, которому ставится в соответствие ориентировка кристалла $\mathbf{g}$ (поворот вектора можно описать как поворот координатного базиса, в котором он представлен).

Вектор тока вероятности $\mathbf{q}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})d\mathbf{r}/dt$ должен быть построен так, чтобы выполнялось равенство

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V f(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int_V \frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{r})d\mathbf{r} = -\int_V \operatorname{div}\mathbf{q}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = -\int_S \mathbf{q}(\mathbf{r})\cdot d\mathbf{s} = 0$$

Согласно уравнению преобразования векторов $\mathbf{r}$ при непрерывном трехмерном вращении имеем $\mathbf{q}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})[\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}]$ [6]. Так как векторный элемент поверхности $d\mathbf{s}$ направлен по $\mathbf{r}$, то $(\mathbf{q}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s}) = 0$ – поток вероятности через ограничивающую объем V поверхность S отсутствует, что доказывает сохранение вероятности ориентировок.

Таким образом, уравнение скорости изменения распределения вероятностей ориентировок имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{r}) = -[\mathbf{r} \times \nabla] \cdot (f(\mathbf{r})\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}))$$

$$[\mathbf{r} \times \nabla] = \left\| \begin{matrix} y(\partial/\partial z) & -z(\partial/\partial y) \\ z(\partial/\partial x) & -x(\partial/\partial z) \\ x(\partial/\partial y) & -y(\partial/\partial x) \end{matrix} \right\| = \left\| \begin{matrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{matrix} \right\|$$

где компоненты вектора $[\mathbf{r} \times \nabla]$ есть явные дифференциальные выражения инфинитезимальных операторов, соответствующих однопараметрическим подгруппам вращений вокруг координатных осей (x, y, z) [12]; их представление в углах Эйлера (ψ, θ, φ) вектора вращений $\mathbf{r}$ следующее [13]:

$$J_1 = \frac{1}{i}\left(-\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi} + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$J_2 = \frac{1}{i}\left(\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi} + \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$J_3 = \frac{1}{i}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Введя вектор-оператор $\mathbf{J} = J_1\mathbf{i} + J_2\mathbf{j} + J_3\mathbf{k}$, перейдем к более удобной форме уравнения, которому должно удовлетворять распределение вероятностей $f(\mathbf{g})$:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{g}) = -\mathbf{J} \cdot (f(\mathbf{g})\boldsymbol{\omega}(\mathbf{g}))$$

Свяжем это феноменологическое уравнение, описывающее эволюцию макроскопической функции распределения ориентировок[2], с необратимыми микропроцессами, идущими в рассматриваемой системе.

Из выражения (2.5), определяющего поворот кристаллической решетки в условиях стесненной деформации зерна, следует соотношение между компонентами угловой скорости вращения $\boldsymbol{\omega}$ и тензором скорости деформации

$$\omega_q = -1/2e_{qij}\Omega_{ij} = -1/2e_{qij}\Pi_{ijkl}(\dot{\varepsilon}_{kl} - \langle\dot{\varepsilon}_{kl}\rangle)$$

[2] В [14] для описания эволюции текстурной функции приспособлено уравнение гидродинамики (вращение кристаллов уподобляется течению жидкости) без определения дивергенции в системе криволинейных координат образованной углами Эйлера.

где e_{ijk} – символ Леви-Чивита, ненулевые элементы которого $e_{123} = e_{231} = e_{312} = 1$; $e_{132} = e_{321} = e_{213} = -1$. Если допустить, что коэффициенты Π_{ijkl} не зависят от $\mathbf{g}$, то после подстановки выражения для $\boldsymbol{\omega}$ уравнение кинетики распределения ориентировок кристаллов в деформирующейся поликристаллической системе будет следующим:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{g}) = 1/2e_{qij}\Pi_{ijkl}J_q[f(\mathbf{g})(\dot{\varepsilon}_{kl}(\mathbf{g}) - \langle\dot{\varepsilon}_{kl}\rangle)] \tag{4.1}$$

При существующей неоднородности размеров зерен добавочными флуктуациями размеров от неравномерной деформации кристаллов с различными ориентировками $\mathbf{g}$ можно пренебречь – для описания реальных систем естественно взять коэффициенты стесненной деформации Π_{ijkl} для средней в данный момент формы зерна.

5. Фурье-представление уравнения неравновесной поликристаллической системы. Примем в качестве характеристики микросостояний системы бесконечномерный вектор коэффициентов $\dot{\mathbf{E}} = \{\dot{\mathbf{E}}_\mathbf{l}\}$ разложения наблюдаемых переменных $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{g})$ по обобщенным сферическим функциям:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{g}) = \sum\dot{\mathbf{E}}_\mathbf{l}T_\mathbf{l}(\mathbf{g}), \quad T_\mathbf{l}(\mathbf{g}) \equiv T^l_{mn}(\mathbf{g}) = P^l_{mn}(\cos\theta)e^{-i(m\psi+n\varphi)}$$

где $\mathbf{l} = (l, m, n)$ – вектор индексов сферических гармоник степени l; $P^l_{mn}(z)$ – обобщенные полиномы Лежандра. Интегральную наблюдаемую состояний системы получим в виде суммы бесконечного ряда

$$\langle\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}\rangle = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)^{-1}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{n=-l}^{l}\dot{\mathbf{E}}_{lmn}U_{lmn}$$

Здесь $\{U_{lmn}\} \equiv \{U_\mathbf{l}\}$ – сферические гармоники распределения вероятностей ориентировок кристаллов, т. е. коэффициенты разложения $f(\mathbf{g}) = \Sigma U_\mathbf{l}T_\mathbf{l}(\mathbf{g})$.

Фурье-представление уравнений внутренней динамики системы (2.3), (3.1) при принятом допущении, что коэффициенты $\boldsymbol{\Gamma}$ не зависят от $\mathbf{g}$, приводится к виду

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\dot{E}^\mathbf{l}_{ij} &= -\delta_{ij}\{\langle\dot{s}_{pp}\rangle\delta(\mathbf{l}) + \lambda_{ppuv}[\dot{E}^\mathbf{l}_{uv} - \langle\dot{\varepsilon}_{uv}\rangle\delta(\mathbf{l})]\} * H^\mathbf{l}_1 + \\ &+ 1/2\{\langle\dot{s}_{ij}\rangle\delta(\mathbf{l}) + \mu_{ijuv}[\dot{E}^\mathbf{l}_{uv} - \langle\dot{\varepsilon}_{uv}\rangle\delta(\mathbf{l})]\} * H^\mathbf{l}_2 + \\ &+ 3\{\langle\dot{s}_{pq}\rangle\delta(\mathbf{l}) + \lambda_{pquv}[\dot{E}^\mathbf{l}_{uv} - \langle\dot{\varepsilon}_{uv}\rangle\delta(\mathbf{l})]\} * (H^\mathbf{l}_1 * R^\mathbf{l}_{ijpq}) - \\ &- 1/2\{\langle\dot{s}_{pq}\rangle\delta(\mathbf{l}) + \mu_{pquv}[\dot{E}^\mathbf{l}_{uv} - \langle\dot{\varepsilon}_{uv}\rangle\delta(\mathbf{l})]\} * (H^\mathbf{l}_2 * R^\mathbf{l}_{ijpq})\end{aligned} \tag{5.1}$$

$$\lambda_{pquv}/(c_1 - c_2) = \mu_{pquv}/2c_3 = \Gamma_{pquv} - \delta_{up}\delta_{vq}$$

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\mathbf{H}_\mathbf{l} = -1/2\gamma\sum_{q=1}^{3}\operatorname{sign}(\langle\dot{\varepsilon}_q\rangle)[3\mathbf{H}_\mathbf{l} - \mathbf{h}_0\delta(\mathbf{l})] * \dot{E}^\mathbf{l}_q \\ &\operatorname{sign}(x) = \begin{cases}1, & x > 0\\ 0, & x = 0\\ -1, & x < 0\end{cases}\end{aligned} \tag{5.2}$$

Здесь $\mathbf{H} = \{\mathbf{H_l}\} = \{H_1^{\mathbf{l}}, H_2^{\mathbf{l}}\}^T$ – вектор коэффициентов разложения $\mathbf{h}(\mathbf{g}) = \sum \mathbf{H_l} T_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})$; $R_{ijkl}^{\mathbf{l}}$ – фурье-коэффициенты оператора $\rho_{ijkl}(\mathbf{g})$ осуществляющего преобразование тензоров $c_{ijkl}(\mathbf{g})$, $h_{ijkl}(\mathbf{g})$ при вращении кристалла; $\delta(\mathbf{l})$ – дельта-функция Дирака (предполагается, что $\operatorname{sign}(\dot{\varepsilon}_q(\mathbf{g})) = \operatorname{sign}(\langle \dot{\varepsilon}_q \rangle)$ – по условию сохранения сплошности среды); символ $(*)$ означает свертку фурье-образов, формула которой для произведения функций на группе трехмерных вращений G дается ниже.

5.1. Формула свертки фурье-представлений в пространстве обобщенных сферических функций. Пусть $x(\mathbf{g})$, $y(\mathbf{g})$ – функции, заданные на группе G вращений трехмерного евклидова пространства. Требуется найти фурье-образ функции $z(\mathbf{g}) = x(\mathbf{g})y(\mathbf{g})$:

$$Z_{lmn} = 1/2(2l+1)\int_G x(\mathbf{g})y(\mathbf{g})\bar{T}_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})d\mathbf{g}$$

где $T_{\mathbf{l}}(\mathbf{g}) \equiv T_{mn}^{l}(\mathbf{g})$ – обобщенные сферические функции; $\bar{T}_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})$ – комплексно сопряженная функция ($\mathbf{l} \equiv (l, m, n)$).

Представим $x(\mathbf{g})$ и $y(\mathbf{g})$ в виде разложений по обобщенным сферическим функциям:

$$x(\mathbf{g}) = \sum X_{\mathbf{l}} T_{\mathbf{l}}(\mathbf{g}), \quad y(\mathbf{g}) = \sum Y_{\mathbf{l}} T_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})$$

и перепишем формулу интегрального преобразования с подстановкой этих разложений:

$$Z_{\mathbf{l}} = \sum_{\mathbf{l}_1}\sum_{\mathbf{l}_2} X_{\mathbf{l}_1} Y_{\mathbf{l}_2} \left\{ 1/2(2l+1)\int_G \bar{T}_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})[T_{\mathbf{l}_1}(\mathbf{g})T_{\mathbf{l}_2}(\mathbf{g})]d\mathbf{g} \right\}$$

Используем в подынтегральном выражении разложение произведения обобщенных сферических функций в ряд Клебша – Гордана [13]:

$$T_{\mathbf{l}_1}(\mathbf{g})T_{\mathbf{l}_2}(\mathbf{g}) = \\ = \sum_{l'=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} C(l_1, l_2, l'; m_1, m_2, m_1+m_2)C(l_1, l_2, l'; n_1, n_2, n_1+n_2)T^{l'}_{(m_1+m_2)(n_1+n_2)}(\mathbf{g})$$

Благодаря ортонормированности базисных функций [12]:

$$1/2(2l+1)\int_G \bar{T}_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})T_{\mathbf{l}'}(\mathbf{g})d\mathbf{g} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}$$

суммирование в выражении для $Z_{\mathbf{l}}$ по индексам l', $m_2 = m' - m_1$, $n_2 = n' - n_1$ дает следующую формулу свертки фурье-образов для произведения функций на группе трехмерных вращений G:

$$Z_{\mathbf{l}} = X_{\mathbf{l}} * Y_{\mathbf{l}} = \\ = \sum_{l_1=0}^{\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{l_1}\sum_{n_1=-l_1}^{l_1} X_{l_1 m_1 n_1} \sum_{l_2=\max(|m-m_1|,|n-n_1|)}^{\infty} C(l_1, l_2, l; m_1, m-m_1, m)\times \\ \times C(l_1, l_2, l; n_1, n-n_1, n) \times Y_{l_2(m-m_1)(n-n_1)}, \; [|l_1-l_2| \le l \le (l_1+l_2)]$$

При $Y_{\mathbf{l}} = \delta(\mathbf{l})$ имеем $X_{\mathbf{l}} * Y_{\mathbf{l}} = X_{\mathbf{l}} * \delta(\mathbf{l}) = X_{\mathbf{l}}$.

Вычисляемый по гармоникам $\dot{\mathbf{E}}$ и $\mathbf{H}$ средний квадрат флуктуаций вектора скорости деформаций $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{g})$ и вектора коэффициентов пластичности $\mathbf{h}(\mathbf{g})$:

$$Q_{\dot{\varepsilon}} = \int_G \left|\dot{\varepsilon}_q(\mathbf{g}) - \bar{\dot{\varepsilon}}_q\right|^2 d\mathbf{g} = \sum_{l=4}^{\infty}(2l+1)^{-1}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{n=-l}^{l}\dot{E}_q^{lmn}\dot{E}_q^{lmn} \quad (q = 1, \ldots, 6)$$

$$Q_{\mathbf{h}} = \int_G \left|h_p(\mathbf{g}) - \bar{h}_p\right|^2 d\mathbf{g} = \sum_{l=4}^{\infty}(2l+1)^{-1}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{n=-l}^{l}H_p^{lmn}H_p^{lmn} \quad (p = 1, 2)$$

есть мера неравномерности пластического течения и деформационного упрочнения различно ориентированных кристаллов.

Фурье-представление уравнения кинетики распределения ориентировок кристаллов – это уравнение скорости изменения сферических гармоник $f(\mathbf{g})$:

$$\frac{d}{dt}U_{\mathbf{l}} = -n(2\Pi_{1212})U_{\mathbf{l}} * [\dot{E}_{12}^{\mathbf{l}} - \langle\dot{\varepsilon}_{12}\rangle\delta(\mathbf{l})] \tag{5.3}$$

вывод которого дается ниже.

5.2. Уравнение кинетики распределения ориентировок кристаллов в фурье-представлении. Применим к обеим частям уравнения (4.1) интегральное преобразование с ядром $1/2(2l + 1)\bar{T}_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})$ предварительно представив функции под инфинитезимальным оператором J_q в виде разложений по обобщенным сферическим функциям. Получим следующее выражение для скорости изменения гармоник текстурной функции:

$$\frac{d}{dt}U_{\mathbf{l}} = 1/2e_{qij}\Pi_{ijuv}\sum_{\mathbf{l}_1}\sum_{\mathbf{l}_2}U_{\mathbf{l}_1}[\dot{E}_{uv}^{\mathbf{l}_2} - \langle\dot{\varepsilon}_{uv}\rangle\delta(\mathbf{l}_2)]1/2(2l+1)\int_G\bar{T}_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})J_q[T_{\mathbf{l}_1}(\mathbf{g})T_{\mathbf{l}_2}(\mathbf{g})]d\mathbf{g} =$$

$$= 1/2e_{qij}\Pi_{ijuv}\sum_{l_1=0}^{\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{l_1}\sum_{n_1=-l_1}^{l_1}U_{l_1m_1n_1}\sum_{l_2=0}^{\infty}\sum_{m_2=-l_2}^{l_2}\sum_{n_2=-l_2}^{l_2}[\dot{E}_{uv}^{l_2m_2n_2} - \langle\dot{\varepsilon}_{uv}\rangle\delta(l_2)]\times$$

$$\times\sum_{l'=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}C(l_1, l_2, l'; m_1, m_2, m_1+m_2)C(l_1, l_2, l'; n_1, n_2, n_1+n_2)\Theta_q^{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$$

$$\Theta_q^{\mathbf{l}\mathbf{l}'} = 1/2(2l+1)\int_G\bar{T}_{\mathbf{l}}(\mathbf{g})J_qT_{\mathbf{l}'}(\mathbf{g})d\mathbf{g}$$

Здесь использовано разложение произведения обобщенных сферических функций в ряд Клебша – Гордана.

Вследствие отображений [13]:

$$J_1T_{mn}^l(\mathbf{g}) = i1/2\{[(l-n)(l+n+1)]^{1/2}T_{m(n+1)}^l(\mathbf{g}) -$$
$$-[(l+n)(l-n+1)]^{1/2}T_{m(n-1)}^l(\mathbf{g})\}$$

$$J_2T_{mn}^l(\mathbf{g}) = 1/2\{[(l-n)(l+n+1)]^{1/2}T_{m(n+1)}^l(\mathbf{g}) +$$
$$+[(l+n)(l-n+1)]^{1/2}T_{m(n-1)}^l(\mathbf{g})\}$$

$$J_3T_{mn}^l(\mathbf{g}) = -nT_{mn}^l(\mathbf{g})$$

и условия ортонормированности обобщенных сферических функций (см. 5.1) имеем

$$\Theta_1^{\mathrm{ll}'} = i\delta_{ll'}\delta_{mm'}1/2\{[(l'-n')(l'+n'+1)]^{1/2}\delta_{n(n'+1)} -$$
$$-[(l'+n')(l'-n'+1)]^{1/2}\delta_{n(n'-1)}\}$$

$$\Theta_2^{\mathrm{ll}'} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}1/2\{[(l'-n')(l'+n'+1)]^{1/2}\delta_{n(n'+1)} +$$
$$+[(l'+n')(l'-n'+1)]^{1/2}\delta_{n(n'-1)}\}$$

$$\Theta_3^{\mathrm{ll}'} = -n'\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}$$

где $m' = m_1 + m_2$, $n' = n_1 + n_2$ – по определению коэффициентов Клебша – Гордана.

В системе с кубической симметрией кристаллов отличны от нуля только гармоники U_{lmn} порядка $n = 4k$ ($k = 0, 1, \ldots$) [17], поэтому слагаемые, включающие $\Theta_1^{\mathrm{ll}'}$ и $\Theta_2^{\mathrm{ll}'}$, при суммировании по индексам $\mathbf{l}_1$ и $\mathbf{l}_2$ обратятся в нуль.

В итоге уравнение скорости изменения текстурных гармоник будет следующим:

$$\frac{d}{dt}U_{\mathrm{l}} = -n(2\Pi_{1212})\sum_{l_1=0}^{\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{l_1}\sum_{n_1=-l_1}^{l_1}U_{l_1m_1n_1}\times$$
$$\times\sum_{l_2=\max(|m-m_1|,\,|n-n_1|)}^{\infty}C(l_1,l_2,l;m_1,m-m_1,m)C(l_1,l_2,l;n_1,n-n_1,n)\times$$
$$\times[\dot{E}_{12}^{l_2(m-m_1)(n-n_1)} - \langle\dot{\varepsilon}_{12}\rangle\delta(l_2)]$$

Здесь учтено, что при $q = 3$ множество значений индексов $i \neq j$ в символе e_{qij}, а значит и $u \neq \upsilon$ в коэффициентах $\Pi_{iju\upsilon}$ составляет (1, 2) и что $\Pi_{ijij} = -\Pi_{jiij}$ [5].

Это и есть уравнение (5.3) в развернутой записи свертки сферических гармоник $U_{\mathrm{l}} * [\dot{E}_{12}^{\mathrm{l}} - \langle\dot{\varepsilon}_{12}\rangle\,\delta(\mathbf{l})]$ (см. 5.1).

Условие сходимости ряда Фурье для наблюдаемой $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{g})$:

$$\int_G \dot{\varepsilon}_q(\mathbf{g})\dot{\varepsilon}_q(\mathbf{g})d\mathbf{g} = \sum_{l=4}^{\infty}(2l+1)^{-1}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{n=-l}^{l}\dot{E}_q^{lmn}\dot{E}_q^{lmn} = \|\dot{\mathbf{E}}\|^2 < +\infty$$

выполнено, если система диссипативна (норма любого вектора, определяющего состояние диссипативной системы, ограничена [15]). Для данной нелинейной системы, где возрастающее внутреннее сопротивление ослабляет внешнее воздействие, указанное условие выполнено.

Можно утверждать, что при ожидаемой устойчивости пластического течения в системе с деформационным упрочнением решение кинетического уравнения в фурье-представлении (5.1)–(5.3), которое описывает саморегулирующийся деформационный процесс, должно сходиться к решению исходного уравнения системы. Область пространства состояний, где существуют структурные условия неустойчивости, находится вне области ограничений рассматриваемой задачи.

Уравнение скорости изменения гармоник текстурной функции $f(\mathbf{g})$ (5.3) позволяет сделать вывод о стабильности кристаллографической текстуры: растяжение по осям симметрии металлического листа не влияет на кристаллографическую текстуру[3] (при

[3] Такой результат был получен экспериментально на тонкой металлической ленте [16].

ориентированной по осям ромбической симметрии зернистой структуре приращения деформаций $\dot{\varepsilon}_{11}dt$, $\dot{\varepsilon}_{22}dt$, $\dot{\varepsilon}_{33}dt$ не вызывают поворот внутри зерна); к сдвигам параллельно плоскости листа кристаллографическая текстура инвариантна (слагаемые, зависящие от $\dot{\varepsilon}_{31}$ и $\dot{\varepsilon}_{32}$ исчезают в силу свойств симметрии кристаллов); сдвиги параллельно направлению прокатки ($\dot{\varepsilon}_{12}$) в системе с кристаллами кубической симметрии не затрагивают гармоники текстурной функции $U_{\rm l} \equiv U_{lmn}$ степени $l \leq 10$ (по условиям кубической симметрии при $l \leq 10$ есть только одна независимая гармоника n-го порядка: $n = 0$ [17], поэтому скорость изменения гармоник U_{lmn} степени $l \leq 10$ равна нулю). Но гармоники U_{lmn} большой степени описывают уже острую часть текстурного максимума[4].

6. Заключение. Как следует из гармонического анализа кинетики распределения ориентировок кристаллов, кристаллографическую текстуру нельзя постепенно создать из неупорядоченного состояния поликристаллической системы (образуется только ближний порядок, судя по локальным флуктуациям распределения: $\dot{U}_{lmn} \neq 0$ при $l > 10$). Упорядочение ориентировок кристаллов должно быть групповым, чтобы скачкообразно возникла кристаллографическая симметрия. Образование механически неустойчивых структур деформации (фрагментация кристаллов при деформациях близких к критическим) [18]–[20] предвещает такой мгновенный переход в новое устойчивое структурное состояние [21].

Обобщая имеющиеся сведения, приходим к представлению об образовании кристаллографической текстуры как о кинетическом фазовом превращении в момент потери устойчивости пластического течения. Возникающая новая структура (с собственными свойствами симметрии) не претерпевает затем коренных изменений, пока вновь не создались критические условия: ограниченной подвижностью кристаллографической текстуры при деформации металлического листа на практике можно пренебречь.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика Т. 7. Теория упругости. М.: Наука, 1965. 204 с.
2. *Hill R.* Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. // J. Mech. Phys. Solids. 1965. V. 13. № 2. P. 89–101.
3. *Рёпке Г.* Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1990. 320 с.
4. *Фридман Я.Б.* Механические свойства металлов. / 1. Деформация и разрушение. М.: Машиностроение, 1974. 472 с.
5. *Эшелби Дж.* Континуальная теория дислокаций. М.: изд-во иностр. лит., 1963. С. 103–139.
6. *Корн Г.* Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1974. 832 с.
7. *Най Дж.Ф.* Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц. М.: Мир, 1967. 385 с.
8. *Olszak W., Urbanowski W.* The plastic potential and the generalized distortion energy in the theory of non-homogeneous anisotropic elastic-plastic bodies. // Archive Mech. Stos. 1956. V. 8. № 4. P. 671–694.
9. *Шермергор Т.Д.* Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977. 400 с.
10. *Kröner E.* Zur plastischen verformung des vielkristalls. // Acta Metallurg. 1961. V. 9. № 2. P. 155–161.

[4] На экспериментальных полюсных фигурах тонкой металлической ленты [16] после растяжения до разрушения в направлениях 25 и 45 град к направлению прокатки наблюдается исходная симметрия текстуры (если ось координат выбрать по направлению прокатки, а не по направлению растяжения); изменилась лишь форма максимумов плотности полюсных векторов.

11. *Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н.* К теории упругих свойств поликристаллов. // ЖЭТФ. 1946. Т. 16. Вып. 11. С. 967–980.
12. *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике. М.: Мир, 1983. Т. 1. 368 с.; Т. 2. 416 с.
13. *Виленкин Н.Я.* Специальные функции и теория представлений групп. М.: Наука, 1965. 588 с.
14. *Clément A., Coulomb P.* Eulerian simulation of deformation textures. // Script. Metallurg. 1979. V. 13. № 7. P. 899–901.
15. *Гленсдорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. 280 с.
16. *Хаютин С.Г.* Анизотропия пластичности текстурованной металлической ленты. // Цветные металлы. 1983. № 3. С. 80–83.
17. *Roe R.-J.* Inversion of pole figures for materials having cubic crystal symmetry. // J. Appl. Phys. 1966. V. 37. № 5. P. 2069–2072.
18. *Золотаревский И. Ю., Рыбин В. В.* Деформация фрагментирующихся поликристаллов и текстурообразование. // Физика металлов и металловедение. 1985. Т. 59. Вып. 3. С. 440–449.
19. *Золотаревский И.Ю., Рыбин В.В., Жуковский И.М.* Теория текстур деформации фрагментирующихся металлов. // Физика металлов и металловедение. 1989. Т. 67. Вып. 2. С. 221–232.
20. *Засимчук Е.А., Исайчев В.И.* Механическая неустойчивость фрагментированной структуры в терминах нелинейной термодинамики. // Докл. АН СССР. 1988. Т. 302. № 5. С. 1101–1104.
21. *Эбелинг В.* Образование структур при необратимых процессах. Введение в теорию диссипативных структур. М.: Мир, 1979. 279 с.

Москва

Поступила в редакцию
1.07.2003