

DOI: 10.21122/2227-1031-2016-15-3-247-260

УДК 539.21

Задача о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным двойником в зерне различной формы

Асп. Т. В. Дробышевская¹⁾, канд. физ.-мат. наук, доц. О. М. Остриков¹⁾¹⁾Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого (Гомель, Республика Беларусь)© Белорусский национальный технический университет, 2016
Belarusian National Technical University, 2016

Реферат. Изучено напряженно-деформированное состояние в зерне поликристалла, обусловленное наличием в его теле единичного микродвойника в случае различной формы зеренных границ. Разработана методика расчета полей смещений и напряжений для указанного напряженно-деформированного состояния для зерна в форме многоугольника. Выявлены узловые точки в зерне поликристалла, имеющие максимальные напряжения, способствующие зарождению разрушения. Целью данной работы стало изучение напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным микродвойником в зерне поликристалла и формой зеренных границ. Рассмотрены зерна поликристалла, имеющие форму правильного многоугольника и содержащие в своем теле единичный клиновидный двойник. Границы зерен поликристалла представлены в виде стенок полных дислокаций. Рассматриваемые зерна расположены вдали от поверхности двойникового материала. Разработанная методика расчета смещений и напряжений, создаваемых клиновидным двойником, основана на использовании принципа суперпозиции. Расчеты компонент тензора напряжений проведены для железа (Fe). Представленные результаты расчета полей напряжений указывают на правомерность использованной дислокационной модели. На полученных распределениях полей напряжений четко просматриваются как двойниковые, так и зеренные границы, являющиеся концентраторами напряжений. Максимальные нормальные напряжения наблюдаются на двойниковых границах; максимальные скальвающие напряжения σ_y локализованы в узловых точках двойника; скальвающие напряжения σ_x и σ_z максимальны на зеренных границах. В результате проведенного исследования изучено напряженно-деформированное состояние, обусловленное единичным клиновидным микродвойником в зерне поликристалла и формой зеренных границ. Выявлены области концентрации напряжений в зерне поликристалла при наличии остаточного механического клиновидного двойника. Разработан метод оценки данного состояния.

Ключевые слова: дислокационная модель, зеренные границы, двойникование, технология прогнозирования, детали машин, локация напряжений, двумерные дефекты, кристаллическая решетка

Для цитирования: Дробышевская, Т. В. Задача о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным двойником в зерне различной формы / Т. В. Дробышевская, О. М. Остриков // *Наука и техника*. 2016. Т. 15, № 3. С. 247–260

Method for Calculation of Stress-Strain State due to Single Twin in Grain of Various Forms

Т. В. Drabysheuskaya¹⁾, О. М. Ostrikov¹⁾¹⁾P. O. Sukhoi State Technical University of Gomel (Gomel, Republic of Belarus)

Abstract. The paper investigates a stress-strain state in a polycrystalline grain due to presence in its body of a single microtwin in case of various grain boundary forms. A methodology for calculation of displacement and stress fields for the specified stress-strain state of a polygon-shaped grain has been developed in the paper. Nodal points in a polycrystalline grain that have a maximum stresses contributing to initiation of destruction have been revealed in the paper. The aim of this work has

Адрес для переписки

Остриков Олег Михайлович
Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого
просп. Октября, 48,
246746, г. Гомель, Республика Беларусь
Тел.: +375 232 40-17-53
omostrikov@mail.ru

Address for correspondence

Ostrikov Oleg M.
P. O. Sukhoi State Technical University
of Gomel
48 Oktyabrya Ave.,
246746, Gomel, Republic of Belarus
Tel.: +375 232 40-17-53
omostrikov@mail.ru

been to study the stress-strain state due to a single micro-twin in the polycrystalline grain and form of grain boundaries. The paper describes polycrystalline grains having a regular polygon shape and containing a single wedge twin in their body. Polycrystalline grain boundaries are presented as walls with complete dislocation. The investigated grains are located far from the surface of twinning material. The developed methodology for calculation of displacement and stresses created by wedge twin is based on the principle of superposition. Calculations on stress tensor components have been carried out for iron (Fe). The presented results of calculations for stress fields have indicated to validity of the used dislocation model. Twin and grain boundaries being stress concentrators are clearly visible on the obtained distributions of stress fields. Maximum normal stresses are observed on the twin boundaries; σ_{xy} maximum shear stresses are located at nodal points of the twin; σ_{xy} and σ_{xz} shear stresses are maximum on the grain boundaries. The conducted investigations have resulted in study of the stress-strain state due to a single wedge-shaped micro-twin in the polycrystalline grain and form of the grain boundaries. Zones of stress concentration in the polycrystalline grain have been identified in the presence of residual mechanical wedge twin. A method for evaluation of the given state has been developed in the paper.

Keywords: dislocation model, grain boundaries, twinning, forecasting technology, machine parts, stress location, two-dimensional defects, crystal lattice

For citation: Drabysheuskaya T. V., Ostrikov O. M. (2016) Method for Calculation of Stress-Strain State due to Single Twin in Grain of Various Forms. *Science & Technique*. 15 (3), 247–260 (in Russian)

Введение

В связи с повышением требований современного потребителя к уровню качества и долговечности изделий машиностроения важной является разработка методик по прогнозированию и предотвращению связанного с двойникованием разрушения деталей машин. Соответственно важным представляется решение задачи о расчете напряженно-деформированного состояния, обусловленного единичным двойником в зерне поликристалла [1, 2]. При решении данной задачи важно учитывать не только напряжения, обусловленные наличием двойника в зерне, но и напряжения, возникающие на зеренных границах. Это объясняется тем, что границы являются основным дефектом в металлах; строение границы способствует скоплению у нее дислокаций, так как при переходе через границу ни плоскость скольжения, ни вектор Бюргерса не сохраняются неизменными [1–7].

Постановка задачи

Рассмотрим зерна поликристалла различной формы (правильные пятиугольник, шестиугольник и семиугольник), находящиеся вдали от поверхности двойнивающегося материала. Границы зерна поликристалла смоделируем в виде стенок полных дислокаций (рис. 1).

В теле зерна разместим единичный клиновидный двойник. Такие двойники обычно зарождаются у концентратора напряжений, который в рассматриваемом случае находится в точке O (рис. 1), на границе зерна. В решении поставленной задачи учтем напряжения,

создаваемые самим двойником, а также напряжения на границах зерна. При этом не будем учитывать напряжения, создаваемые концентратором напряжений, а также напряжения, обусловленные другими зернами поликристалла, так как все это приведет к громоздкости решения.

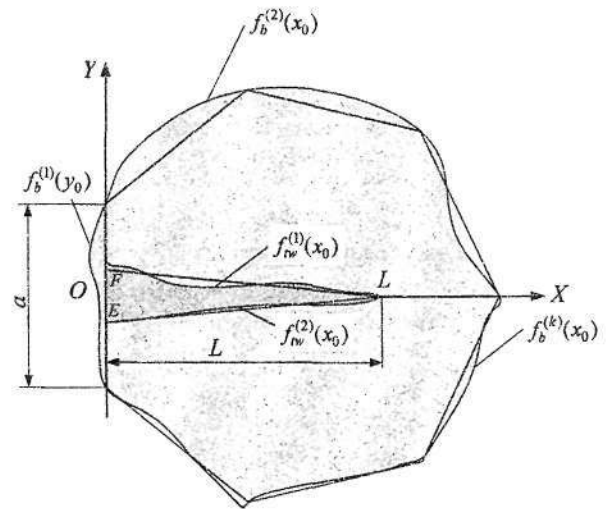


Рис. 1. Схематическое изображение зерна поликристалла и клиновидного двойника в нем

Fig. 1. Schematic representation of polycrystalline grain and wedge twin in it

Равновесие рассматриваемой системы может обеспечиваться большими силами сопротивления движению двойнивающих дислокаций и границ зерна, возникающих вследствие взаимодействия этих дефектов с, например, сидячими дислокациями. При этом следует отметить, что изучение вопросов равновесия в рассматриваемой системе не является целью исследования.

В общем случае в плоскости XOY форма границ зерна описывается функциями $f_b^{(1)}(y_0)$, $f_b^{(2)}(x_0)$, ..., $f_b^{(n)}(x_0)$, где n – количество зеренных границ; а форма границ клиновидного двойника – функциями $f_{tw}^{(1)}(x_0)$ и $f_{tw}^{(2)}(x_0)$ (рис. 1) [1, 3]. Примем, что дислокации на каждой из рассматриваемых границ параллельны друг другу и оси OZ , перпендикулярной плоскости рис. 1. Плотность полных дислокаций на границах зерна равна $\rho_b^{(1)}$, $\rho_b^{(2)}$, ..., $\rho_b^{(n)}$ соответственно. Плотность двойнивающих дислокаций на границах клиновидного двойника – $\rho_{tw}^{(1)}$, $\rho_{tw}^{(2)}$. Тогда смещения и напряжения, создаваемые рассматриваемым клиновидным двойником с учетом смещений на границах зерна, в соответствии с принципом суперпозиции [1] могут быть определены по формуле

$$\begin{pmatrix} u_i \\ \sigma_{ij} \end{pmatrix} = \sum_{m=1}^2 \begin{pmatrix} (u_i^{(m)})_{tw} \\ (\sigma_{ij}^{(m)})_{tw} \end{pmatrix} + \sum_{k=1}^n \begin{pmatrix} (u_i^{(k)})_b \\ (\sigma_{ij}^{(k)})_b \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где m – номер двойниковой границы; k – номер зеренной границы; i, j принимают значения x, y или z ; $(u_i^{(m)})_{tw}(x, y)$ – смещения, создаваемые двойниковыми границами; $(u_i^{(k)})_b(x, y)$ – то же, создаваемые зеренными границами; $(\sigma_{ij}^{(m)})_{tw}(x, y)$ – напряжения, создаваемые двойниковыми границами; $(\sigma_{ij}^{(k)})_b(x, y)$ – то же, создаваемые границами зерен.

Смещения и напряжения определяются с помощью криволинейных интегралов вдоль профилей соответствующих границ:

$$\begin{pmatrix} (u_i^{(m)})_{tw} \\ (\sigma_{ij}^{(m)})_{tw} \end{pmatrix} = \int \rho_{tw}^{(m)} \begin{pmatrix} (u_i^{(m,0)})_{tw} \\ (\sigma_{ij}^{(m,0)})_{tw} \end{pmatrix} ds; \quad (2)$$

$$\begin{pmatrix} (u_i^{(k)})_b \\ (\sigma_{ij}^{(k)})_b \end{pmatrix} = \int \rho_b^{(k)} \begin{pmatrix} \sum_j T_{ij} (u_j^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k) \\ \sum_{g,h} T_{ig} T_{jh} (\sigma_{gh}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k) \end{pmatrix} ds, \quad (3)$$

где g, h принимают значения x, y или z ; $(u_i^{(m,0)})_{tw}(x, y)$ и $(\sigma_{ij}^{(m,0)})_{tw}(x, y)$ – смещения и

напряжения, создаваемые отдельными дислокациями на двойниковых границах и определяемые в главной системе координат XYZ (рис. 2); $(u_j^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k)$ и $(\sigma_{gh}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k)$ – то же, создаваемые отдельными дислокациями на зеренных границах и определяемые во вспомогательных системах координат $X'_k Y'_k Z$, повернутых относительно системы координат XYZ (рис. 2); T – матрица преобразования.

В случае поворота правосторонней системы координат вокруг оси Z против часовой стрелки на угол α_k данная матрица принимает вид [7]

$$T = \begin{pmatrix} \cos(\alpha_k) & -\sin(\alpha_k) & 0 \\ \sin(\alpha_k) & \cos(\alpha_k) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

В соответствии с [3] и с учетом (4) криволинейные интегралы (2) и (3) можно представить в виде следующих определенных интегралов:

$$\begin{pmatrix} (u_i^{(m)})_{tw} \\ (\sigma_{ij}^{(m)})_{tw} \end{pmatrix} = \int_0^L \sqrt{\left(1 + (f_{tw}^{(m)}(x_0))'\right)^2} \rho_{tw}^{(m)} \times \begin{pmatrix} (u_i^{(m,0)})_{tw}(x, y, x_0) \\ (\sigma_{ij}^{(m,0)})_{tw}(x, y, x_0) \end{pmatrix} dx_0; \quad (5)$$

$$\begin{pmatrix} (u_x^{(k)})_b \\ (u_y^{(k)})_b \end{pmatrix} (x, y) = \int_{x_k}^{x_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \times \begin{pmatrix} (u_x^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \cos(\alpha_k) - \\ - (u_y^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(\alpha_k) \end{pmatrix} dx_0; \quad (6)$$

$$\begin{pmatrix} (u_x^{(k)})_b \\ (u_y^{(k)})_b \end{pmatrix} (x, y) = \int_{x_k}^{x_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \times \begin{pmatrix} (u_x^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(\alpha_k) + \\ + (u_y^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(\alpha_k) \end{pmatrix} dx_0; \quad (7)$$

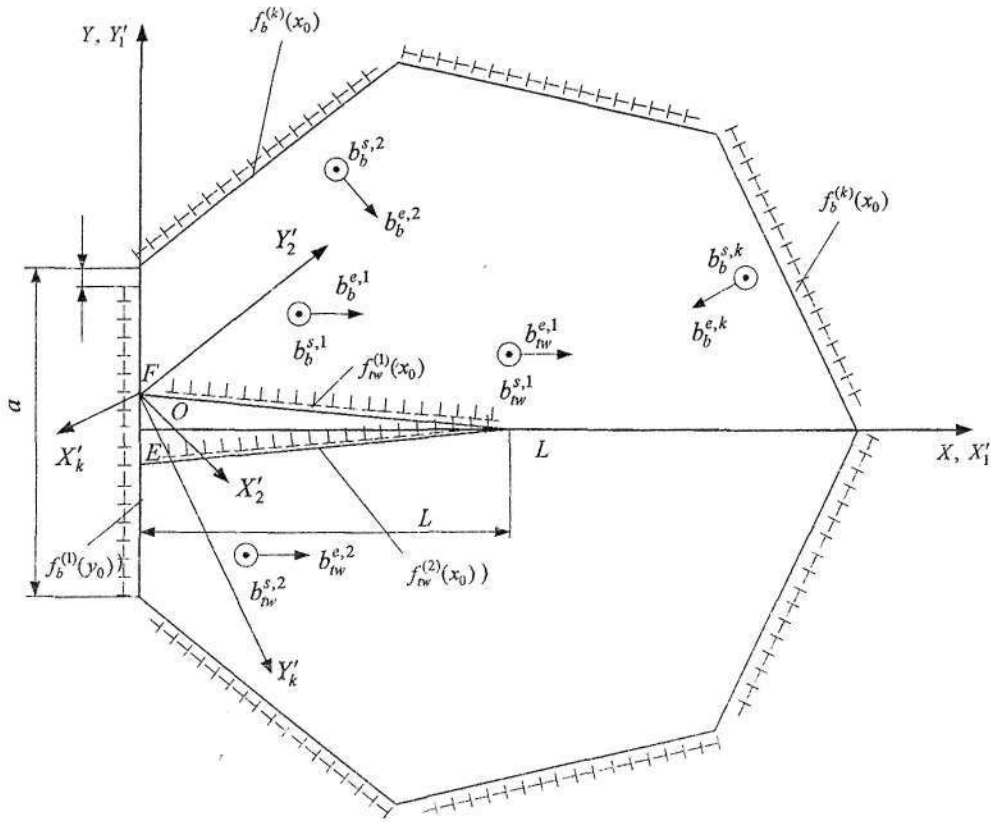


Рис. 2. Схема взаимного расположения дислокаций, компонент вектора Бюргерса и декартовых систем координат для расчета полей напряжений и смещений у клиновидного двойника в теле зерна

Fig. 2. Scheme of mutual arrangement of dislocations and Burgers vector component and Cartesian coordinate system for calculation of stress and displacement fields at wedge-shaped twin in grain body

$$(u_z^{(k)})_b(x, y) = \int_{x_k}^{x_{k+1}-\epsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)}(u_z^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) dx_0; \quad (8)$$

$$(u_x^{(k)})_b(x, y) = \int_{y_k}^{y_{k+1}-\epsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(y_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((u_{x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \cos(\alpha_k) - (u_{y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \sin(\alpha_k) \right) dy_0; \quad (9)$$

$$(u_y^{(k)})_b(x, y) = \int_{y_k}^{y_{k+1}-\epsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(y_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((u_{x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \sin(\alpha_k) + (u_{y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \cos(\alpha_k) \right) dy_0; \quad (10)$$

$$(u_2^{(k)})_b(x, y) = \int_{y_k}^{y_{k+1}-\epsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(y_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)}(u_z^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) dy_0; \quad (11)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xr}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{x_k}^{x_{k+1}-\epsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \cos^2(\alpha_k) + \right. \\ & \left. + (\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin^2(\alpha_k) - (\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(2\alpha_k) \right) dx_0; \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{yy}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{x_k}^{x_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin^2(\alpha_k) + \right. \\ & \left. + (\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \cos^2(\alpha_k) + (\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(2\alpha_k) \right) dx_0; \end{aligned} \quad (13)$$

$$(\sigma_{zz}^{(k)})_b(x, y) = \int_{x_k}^{x_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} (\sigma_{zz}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) dx_0; \quad (14)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xy}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{x_k}^{x_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \cos(\alpha_k) \sin(\alpha_k) - \right. \\ & \left. - (\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(\alpha_k) \cos(\alpha_k) + (\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \cos(2\alpha_k) \right) dx_0; \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xz}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{x_k}^{x_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k z}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \cos(\alpha_k) - \right. \\ & \left. - (\sigma_{y_k z}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(\alpha_k) \right) dx_0; \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{yz}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{x_k}^{x_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(x_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k z}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \sin(\alpha_k) + \right. \\ & \left. + (\sigma_{y_k z}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, x'_{k,0}) \cos(\alpha_k) \right) dx_0; \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xx}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{y_k}^{y_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(y_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \cos^2(\alpha_k) + \right. \\ & \left. + (\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \sin^2(\alpha_k) - (\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \sin(2\alpha_k) \right) dy_0; \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{yy}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{y_k}^{y_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(y_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \sin^2(\alpha_k) + \right. \\ & \left. + (\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \cos^2(\alpha_k) + (\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \sin(2\alpha_k) \right) dy_0; \end{aligned} \quad (19)$$

$$(\sigma_{zz}^{(k)})_b(x, y) = \int_{y_k}^{y_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(y_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} (\sigma_{zz}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) dy_0; \quad (20)$$

$$\begin{aligned} (\sigma_{xy}^{(k)})_b(x, y) = & \int_{y_k}^{y_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + (f_b^{(k)}(y_0))'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left((\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \cos(\alpha_k) \sin(\alpha_k) - \right. \\ & \left. - (\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \sin(\alpha_k) \cos(\alpha_k) + (\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)})_b(x'_k, y'_k, y'_{k,0}) \cos(2\alpha_k) \right) dy_0; \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \left(\sigma_{xz}^{(k)}\right)_b(x, y) = & \int_{y_k}^{y_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + \left(f_b^{(k)}(y_0)\right)'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left(\left(\sigma_{x'z}^{(k,0)}\right)_b \left(x'_k, y'_k, y'_{k,0}\right) \cos(\alpha_k) - \right. \\ & \left. - \left(\sigma_{y'z}^{(k,0)}\right)_b \left(x'_k, y'_k, y'_{k,0}\right) \sin(\alpha_k) \right) dy_0; \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \left(\sigma_{yz}^{(k)}\right)_b(x, y) = & \int_{y_k}^{y_{k+1}-\varepsilon} \sqrt{\left(1 + \left(f_b^{(k)}(y_0)\right)'\right)^2} \rho_b^{(k)} \left(\left(\sigma_{x'z}^{(k,0)}\right)_b \left(x'_k, y'_k, y'_{k,0}\right) \sin(\alpha_k) + \right. \\ & \left. + \left(\sigma_{y'z}^{(k,0)}\right)_b \left(x'_k, y'_k, y'_{k,0}\right) \cos(\alpha_k) \right) dy_0, \end{aligned} \quad (23)$$

где L – длина двойника, равна длине отрезка OL (рис. 1); α_k – угол поворота системы координат $X'_k Y'_k Z'$ относительно XYZ против часовой стрелки вокруг оси Z ; $x_k, x_{k+1}, y_k, y_{k+1}$ – параметры, определяемые конфигурацией зерна (координаты начальной и конечной точек k -й границы зерна); ε – малый параметр порядка межатомного расстояния.

Выбор формулы для расчета смещений и напряжений на зеренных границах зависит от способа задания функции соответствующей границы. В случае задания функции $f(x)$ ис-

пользуются формулы (5)–(8), (12)–(17), в случае $f(y)$ – формулы (9)–(11), (18)–(23).

При расчетах смещений и напряжений будем учитывать представленную на рис. 2 ориентировку винтовой и краевой составляющих векторов Бюргера. При условии нахождения рассматриваемого зерна вдали от поверхности смещения и напряжения, создаваемых единичными полными и двойникующими дислокациями, расположенными на соответствующей границе, могут быть определены из соотношений [3, 8]:

$$\begin{aligned} \left(u_x^{(m,0)}\right)_{tw} = & \frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y - f_{tw}^{(m)}(x_0)}{x - x_0} + \frac{(y - f_{tw}^{(m)}(x_0))(x - x_0)}{2(1-\nu) \left((y - f_{tw}^{(m)}(x_0))^2 + (x - x_0)^2 \right)} \right]; \\ \left(u_y^{(m,0)}\right)_{tw} = & -\frac{b_{tw}^e}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln \left((y - f_{tw}^{(m)}(x_0))^2 + (x - x_0)^2 \right) + \frac{(x - x_0)^2 - (y - f_{tw}^{(m)}(x_0))^2}{4(1-\nu) \left((y - f_{tw}^{(m)}(x_0))^2 + (x - x_0)^2 \right)} \right]; \\ \left(u_z^{(m,0)}\right)_{tw} = & \frac{b_{tw}^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y - f_{tw}^{(m)}(x_0)}{x - x_0}; \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \left(u_{x'_k}^{(k,0)}\right)_b = & \frac{b_b^e}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y'_k - f_b^{(k)}(x'_{k,0})}{x'_k - x'_{k,0}} + \frac{(y'_k - f_b^{(k)}(x'_{k,0}))(x'_k - x'_{k,0})}{2(1-\nu) \left((y'_k - f_b^{(k)}(x'_{k,0}))^2 + (x'_k - x'_{k,0})^2 \right)} \right]; \\ \left(u_{y'_k}^{(k,0)}\right)_b = & -\frac{b_b^e}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln \left((y'_k - f_b^{(k)}(x'_{k,0}))^2 + (x'_k - x'_{k,0})^2 \right) + \frac{(x'_k - x'_{k,0})^2 - (y'_k - f_b^{(k)}(x'_{k,0}))^2}{4(1-\nu) \left((y'_k - f_b^{(k)}(x'_{k,0}))^2 + (x'_k - x'_{k,0})^2 \right)} \right]; \end{aligned}$$

$$\left(u_{z_k}^{(k,0)}\right)_b = \frac{b_b^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y_k' - f_b^{(k)}(x_k')}{x_k' - x_{k,0}'}; \tag{25}$$

$$\left(u_{x_k}^{(k,0)}\right)_b = \frac{b_b^e}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{y_k' - y_{k,0}'}{x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')} + \frac{\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)\left(y_k' - y_{k,0}'\right)}{2(1-\nu) \left[\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)^2 + \left(y_k' - y_{k,0}'\right)^2\right]} \right];$$

$$\left(u_{y_k}^{(k,0)}\right)_b = -\frac{b_b^e}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2\pi} \ln \left[\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)^2 + \left(y_k' - y_{k,0}'\right)^2 \right] + \frac{\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)^2 + \left(y_k' - y_{k,0}'\right)^2}{4(1-\nu) \left[\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)^2 + \left(y_k' - y_{k,0}'\right)^2\right]} \right];$$

$$\left(u_z^{(k,0)}\right)_b = \frac{b_b^s}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y_k' - y_{k,0}'}{x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')}; \tag{26}$$

$$\left(\sigma_{xx}^{(m,0)}\right)_{tw} = -\frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right) \left[3(x-x_0)^2 + \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2\right]}{\left[(x-x_0)^2 + \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2\right]^2};$$

$$\left(\sigma_{yy}^{(m,0)}\right)_{tw} = \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right) \left[(x-x_0)^2 - \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2\right]}{\left[(x-x_0)^2 + \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2\right]^2};$$

$$\left(\sigma_{xy}^{(m,0)}\right)_{tw} = \frac{\mu b_{tw}^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x-x_0) \left[(x-x_0)^2 - \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2\right]}{\left[(x-x_0)^2 + \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2\right]^2};$$

$$\left(\sigma_{zz}^{(m,0)}\right)_{tw} = -\frac{\mu b_{tw}^e \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y - f_{tw}^{(m)}(x_0)}{(x-x_0)^2 + \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2};$$

$$\left(\sigma_{zx}^{(m,0)}\right)_{tw} = -\frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{y - f_{tw}^{(m)}(x_0)}{(x-x_0)^2 + \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2};$$

$$\left(\sigma_{zy}^{(m,0)}\right)_{tw} = \frac{\mu b_{tw}^s}{2\pi} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + \left(y - f_{tw}^{(m)}(x_0)\right)^2}; \tag{27}$$

$$\begin{aligned} \left(\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right) \left[3\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 + \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2\right]}{\left[\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 + \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2\right]^2}; \\ \left(\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right) \left[\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 - \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2\right]}{\left[\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 + \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2\right]^2}; \\ \left(\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(x_k - x_{k,0}\right) \left[\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 - \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2\right]}{\left[\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 + \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2\right]^2}; \\ \left(\sigma_{zz}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e \nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})}{\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 + \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2}; \\ \left(\sigma_{x_k z}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^s}{2\pi} \frac{y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})}{\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 + \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2}; \\ \left(\sigma_{y_k z}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^s}{2\pi} \frac{x_k - x_{k,0}}{\left(x_k - x_{k,0}\right)^2 + \left(y_k - f_b^{(k)}(x_{k,0})\right)^2}; \\ \left(\sigma_{x_k x_k}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(y_k - y_{k,0}\right) \left[3\left(x_k - f_b^{(k)}(y_{k,0})\right)^2 + \left(y_k - y_{k,0}\right)^2\right]}{\left[\left(x_k - f_b^{(k)}(y_{k,0})\right)^2 + \left(y_k - y_{k,0}\right)^2\right]^2}; \\ \left(\sigma_{y_k y_k}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(y_k - y_{k,0}\right) \left[\left(x_k - f_b^{(k)}(y_{k,0})\right)^2 - \left(y_k - y_{k,0}\right)^2\right]}{\left[\left(x_k - f_b^{(k)}(y_{k,0})\right)^2 + \left(y_k - y_{k,0}\right)^2\right]^2}; \\ \left(\sigma_{x_k y_k}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e}{2\pi(1-\nu)} \frac{\left(x_k - f_b^{(k)}(y_{k,0})\right) \left[\left(x_k - f_b^{(k)}(y_{k,0})\right)^2 - \left(y_k - y_{k,0}\right)^2\right]}{\left[\left(x_k - f_b^{(k)}(y_{k,0})\right)^2 + \left(y_k - y_{k,0}\right)^2\right]^2}; \end{aligned} \tag{28}$$

$$\begin{aligned} \left(\sigma_{z_k z}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^e \nu}{2\pi(1-\nu)} \frac{y_k' - y_{k,0}'}{\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)^2 + (y_k' - y_{k,0}')^2}; \\ \left(\sigma_{x_k z}^{(k,0)}\right)_b &= -\frac{\mu b_b^s}{2\pi} \frac{y_k' - y_{k,0}'}{\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)^2 + (y_k' - y_{k,0}')^2}; \\ \left(\sigma_{y_k z}^{(k,0)}\right)_b &= \frac{\mu b_b^s}{2\pi} \frac{x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')}{\left(x_k' - f_b^{(k)}(y_{k,0}')\right)^2 + (y_k' - y_{k,0}')^2}. \end{aligned} \tag{29}$$

Здесь ν – коэффициент Пуассона; μ – модуль сдвига; b_{tw}^e, b_{tw}^s – краевая и винтовая составляющие вектора Бюргера двойнивающей дислокации; b_b^e, b_b^s – модуль вектора Бюргера полной краевой и винтовой дислокаций; $f_b^{(k)}$ – функция, задающая форму k -й зеренной границы; x_k', y_k' – координаты в системе координат $X_k'Y_k'Z$.

Выбор формул для расчета смещений и напряжений на зеренных границах зависит от способа задания функции соответствующей границы. В случае задания функции $f(x)$ используются формулы (25), (28), в случае $f(y)$ – формулы (26), (29).

Координаты в системах $X_k'Y_k'Z$ определим в соответствии с (4) исходя из следующих зависимостей:

$$x_k' = x \cos(\alpha_k) + y \sin(\alpha_k); \tag{30}$$

$$y_k' = -x \sin(\alpha_k) + y \cos(\alpha_k); \tag{31}$$

$$x_{k,0}' = x_0 \cos(\alpha_k) + y_0 \sin(\alpha_k); \tag{32}$$

$$y_{k,0}' = -x_0 \sin(\alpha_k) + y_0 \cos(\alpha_k). \tag{33}$$

Рассмотрим случай, когда плотности дислокаций на всех зеренных границах постоянны и равны $(\rho_b^{(k)} = C_1)$, так же как и плотности дислокаций на двойниковых границах $(\rho_{tw}^{(m)} = C_2)$. С учетом [5] рассмотрим зерна различной фор-

мы, при этом для упрощения задачи без ущерба общности полученного результата границы зерен примем прямолинейными. Так, в плоскости XOY зерно будет в форме правильного многоугольника, имеющего n границ и вписанного в окружность радиусом R . Расположение системы координат XYZ выбираем таким образом, чтобы ось OY проходила через одну из границ зерна, а начало координат располагалось в точке, являющейся серединой данной границы (рис. 1, 2). Расположения систем координат $X_k'Y_k'Z$ выберем таким образом, чтобы начало координат k -й системы совпадало с началом координат системы XYZ , а ось OY_k' была параллельна k -й границе зерна. В данном случае уравнения границ зерен представим в следующем виде:

$$f_b^{(1)}(y_0) = 0; \tag{34}$$

$$f_b^{(2)}(x_0) = -\frac{a}{2} \frac{x_0}{\operatorname{tg}(\alpha_k)}; \tag{35}$$

$$\begin{aligned} f_b^{(k)}(x_0) &= f_b^{(k-1)}\left(a(\sin(\alpha_2) + \dots + \sin(\alpha_{k-1}))\right) - \\ &\frac{x_0 - a(\sin(\alpha_2) + \dots + \sin(\alpha_{k-1}))}{\operatorname{tg}(\alpha_k)}, \end{aligned} \tag{36}$$

где a – длина зеренной границы; α_k – угол поворота k -й зеренной границы относительно 1-й.

Длину и угол α определяем следующим образом:

$$a = 2R \sin\left(\frac{\pi}{n}\right); \tag{37}$$

$$\alpha_k = \pi - \frac{\pi(n-2)}{n}(k-1), \quad (38)$$

где R – радиус вписанной в зерно окружности; n – число граней у зерна.

Уравнения границ зерен в системе $X'_k Y'_k Z$ запишем с помощью (4):

$$f_b^{(k)}(y'_{k,0}) = x_0 \cos(\alpha_k) + f_b^{(k)}(y_0) \sin(\alpha_k); \quad (39)$$

$$f_b^{(k)}(x'_{k,0}) = -f_b^{(k)}(x_0) \sin(\alpha_k) + y_0 \cos(\alpha_k). \quad (40)$$

Границы двойника также примем прямолинейными. При этом форма двойника имеет вид равнобедренного треугольника EFL (рис. 2) с шириной у устья H . В таком случае форма границ двойника в плоскости XOY описывается следующими формулами [3]:

$$f_{nw}^{(1)}(x_0) = \frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L} \right); \quad (41)$$

$$f_{nw}^{(2)}(x_0) = -\frac{H}{2} \left(1 - \frac{x_0}{L} \right). \quad (42)$$

Результаты расчетов и их обсуждение

Расчеты проводили для железа (Fe). При этом принимали: $b_b^e = b_b^s = 0,248$ нм; $b_{nw}^e = b_{nw}^s = 0,124$ нм [9]; $\mu = 81$ ГПа [10]; $\nu = 0,29$ [9]; $R = 70$ нм; $n = 5, 6, 7$. Результаты расчетов полей напряжений, обусловленных наличием единичного двойника в теле зерна, представлены на рис. 3–5. При этом рассмотрены случаи зерен пяти- (рис. 3), шести- (рис. 4) и семиугольной (рис. 5) форм.

На распределениях полей напряжений (рис. 3–5) четко просматриваются как двойниковые, так и зеренные границы, являющиеся концентраторами напряжений. Максимальные нормальные напряжения наблюдаются на двойниковых границах (рис. 3а–с, рис. 4а–с, рис. 5а–с); максимальные скальвающие напряжения σ_{xy} локализованы в узловых точках двойника – у вершины и устья двойника (рис. 3d, рис. 4d, рис. 5d); скальвающие напряжения σ_{yz} , σ_{zx} максимальны на зеренных границах (за исключением вертикальной) (рис. 3е, f, рис. 4е, f, рис. 5е, f). Высокая концентрация напряжений в основном наблюдается у вершины двойника

(рис. 3а–d, рис. 4а–d, рис. 5а–d) и на границах зерен (рис. 3е, f, рис. 4е, f, рис. 5е, f).

Нормальные напряжения σ_{xx} (рис. 3а, рис. 4а, рис. 5а) и σ_{zz} (рис. 3с, рис. 4с, рис. 5с) знакопеременны. У одной из границ клиновидного двойника напряжения σ_{xx} и σ_{zz} сжимающие, а у другой – растягивающие. Нормальные напряжения σ_{yy} локализованы только в узловых точках зерна и двойника, при этом двойниковые напряжения перекрываются напряжениями на границах зерна. Максимальные значения нормальных напряжений σ_{yy} можно отметить в узловых точках зерна (рис. 3b, рис. 4b, рис. 5b).

Следует отметить тот факт, что границы зерен не являются концентраторами нормальных напряжений. Это обусловлено в первую очередь прямолинейностью границ [5].

Скальвающие напряжения σ_{xy} знакопеременны по отношению к оси, параллельной OY и проходящей через середину двойника. У вершины двойника данные напряжения отрицательны, а у устья – положительны. При этом в узловых точках зерна такие напряжения положительны (за исключением вершины, прилегающей к устью двойника). Максимальные значения скальвающих напряжений σ_{xy} наблюдаются у вершины двойника, а минимальные – в средней части двойника (рис. 3d, рис. 4d, рис. 5d).

Напряжения σ_{zy} (рис. 3е, рис. 4е, рис. 5е) локализованы на границах зерна. При этом на границах, близких к устью двойника, они имеют отрицательный знак, а на границах, близких к вершине двойника, – положительный. Максимальные значения напряжений можно отметить в узловых точках зерна.

Напряжения σ_{zx} (рис. 3f, рис. 4f, рис. 5f) локализованы на границах зерна (кроме вертикальных) и двойника. Данные напряжения знакопеременны относительно оси OX и отрицательны в первой и второй четвертях, а положительны – в третьей и четвертой. Максимальные значения напряжений при этом можно отметить в узловых точках зерна, расположенных по обе стороны от середины двойника.

Форма полей напряжений, обусловленных наличием единичного двойника в теле зерна, несущественно зависит от количества граней у зерна. Так, в рассмотренных вариантах (пяти-, шести- и семиугольник) поля напряжений имеют схожую конфигурацию (рис. 3–5).

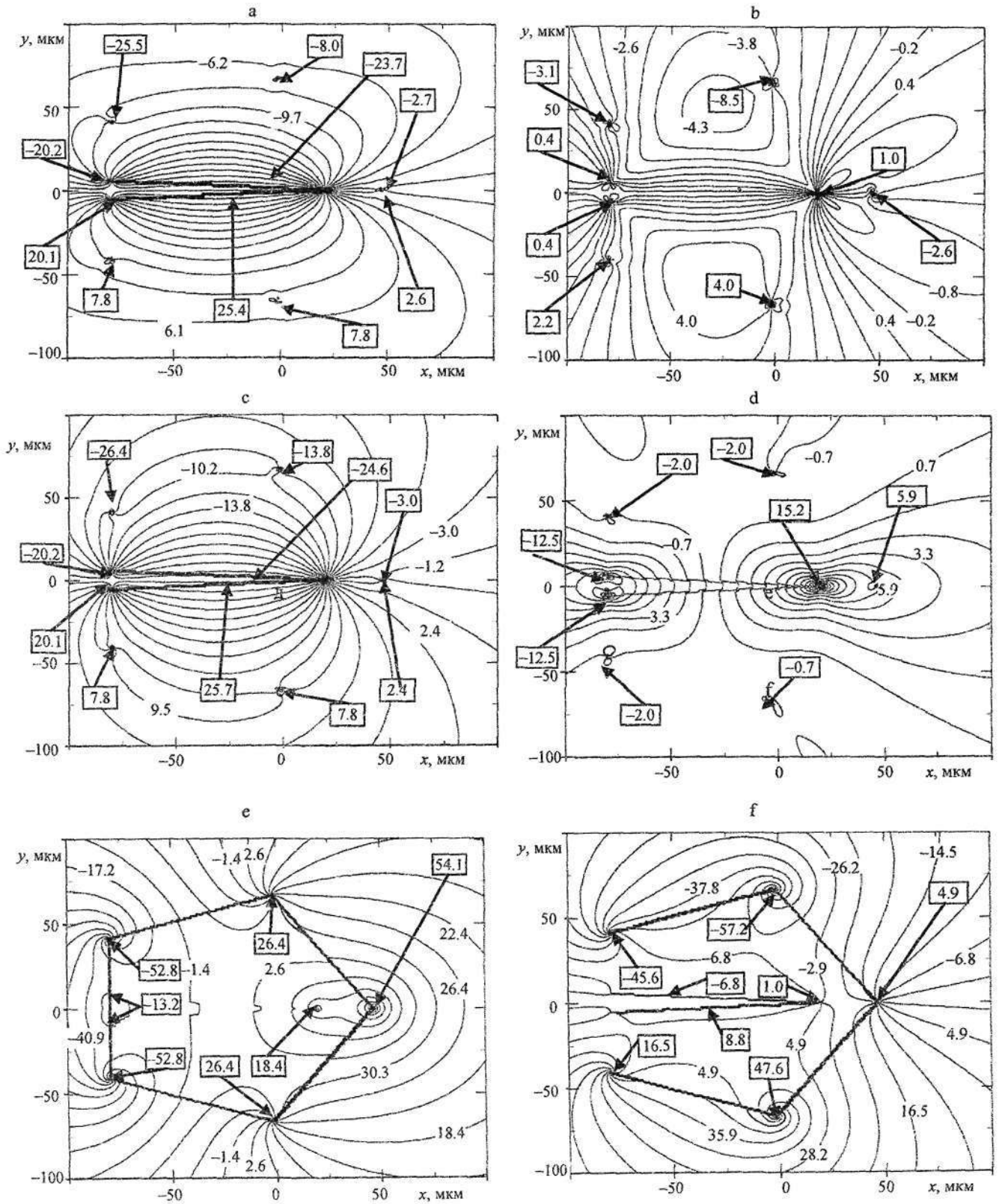


Рис. 3. Распределение напряжений, обусловленных единичным клиновидным двойником, в пятиугольном зерне поликристалла: а – $\sigma_{xx}(x, y)$; б – $\sigma_{yy}(x, y)$; в – $\sigma_{zz}(x, y)$; д – $\sigma_{xy}(x, y)$; е – $\sigma_{xz}(x, y)$; ф – $\sigma_{yz}(x, y)$

Fig. 3. The distribution of stresses in the pentagonal grain of a polycrystalline due to the presence of single wedge-shaped twin: а – $\sigma_{xx}(x, y)$; б – $\sigma_{yy}(x, y)$; в – $\sigma_{zz}(x, y)$; д – $\sigma_{xy}(x, y)$; е – $\sigma_{xz}(x, y)$; ф – $\sigma_{yz}(x, y)$

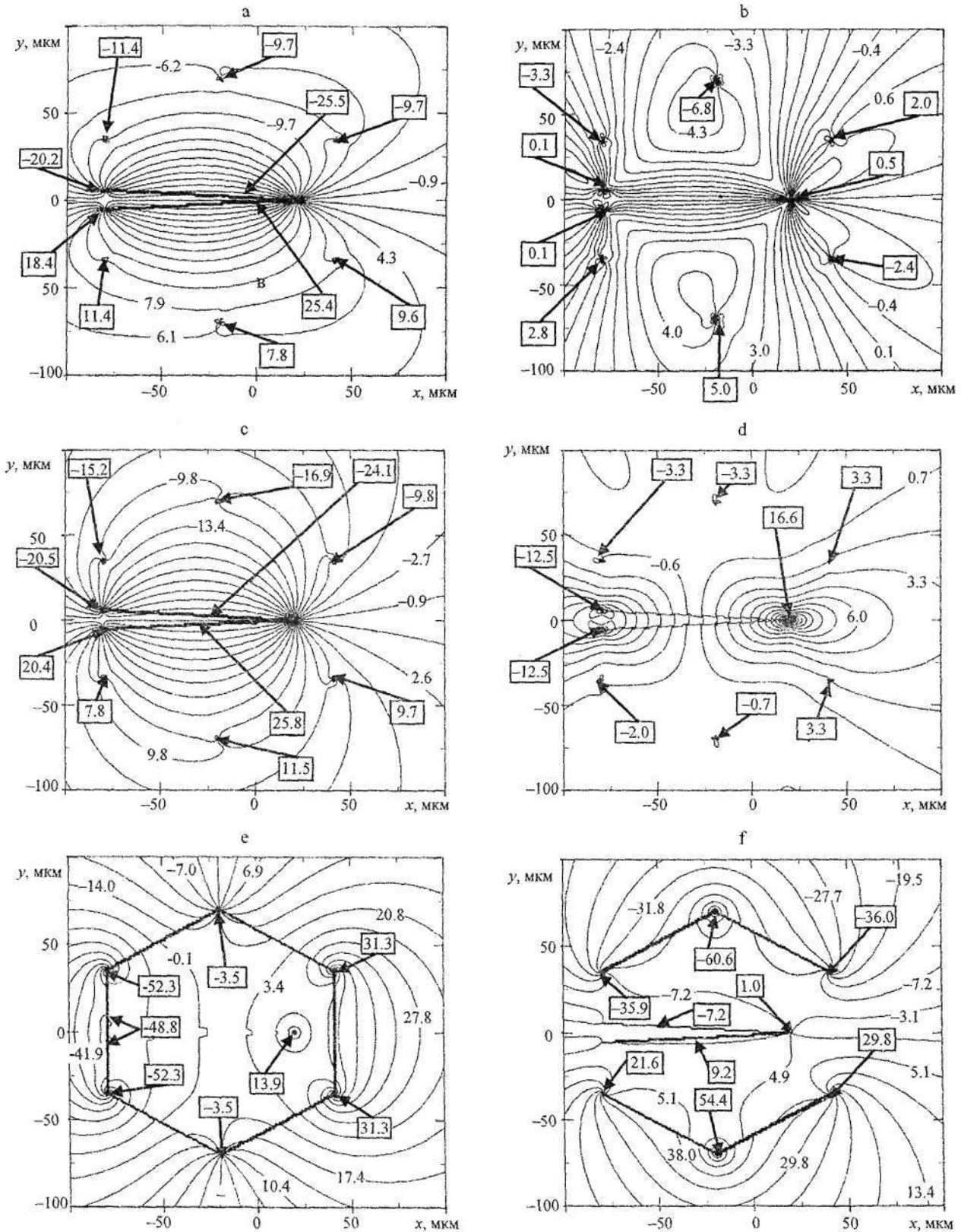


Рис. 4. Распределение напряжений, обусловленных единичным клиновидным двойником, в шестиугольном зерне поликристалла:

a - $\sigma_{xx}(x, y)$; b - $\sigma_{yy}(x, y)$; c - $\sigma_{zz}(x, y)$; d - $\sigma_{xy}(x, y)$; e - $\sigma_{xz}(x, y)$; f - $\sigma_{xz}(x, y)$

Fig. 4. The distribution of stresses in the hexagonal grain of a polycrystalline due to the presence of single wedge-shaped twin:

a - $\sigma_{xx}(x, y)$; b - $\sigma_{yy}(x, y)$; c - $\sigma_{zz}(x, y)$; d - $\sigma_{xy}(x, y)$; e - $\sigma_{xz}(x, y)$; f - $\sigma_{xz}(x, y)$

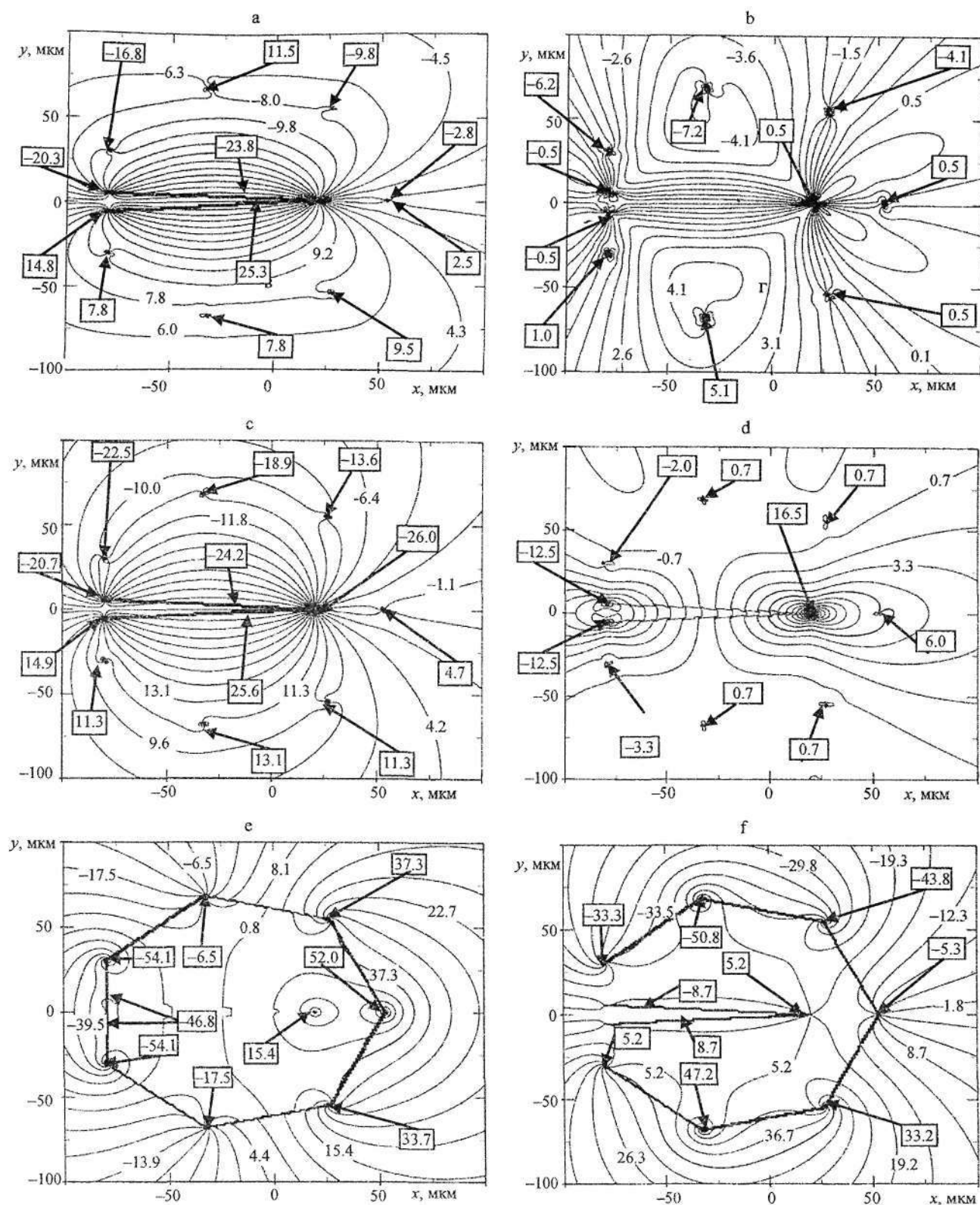


Рис. 5. Распределение напряжений, обусловленных наличием единичного клиновидного двойника, в семиугольном зерне поликристалла:

a – $\sigma_{xx}(x, y)$; b – $\sigma_{yy}(x, y)$; c – $\sigma_{zz}(x, y)$; d – $\sigma_{xy}(x, y)$; e – $\sigma_{yz}(x, y)$; f – $\sigma_{zx}(x, y)$

Fig. 5. The distribution of stresses in the heptagonal grain of a polycrystalline due to the presence of single wedge-shaped twin:

a – $\sigma_{xx}(x, y)$; b – $\sigma_{yy}(x, y)$; c – $\sigma_{zz}(x, y)$; d – $\sigma_{xy}(x, y)$; e – $\sigma_{yz}(x, y)$; f – $\sigma_{zx}(x, y)$

ВЫВОД

Результаты расчетов полей напряжений указывают на правомерность использования предложенной дислокационной модели. В процессе исследования изучено напряженно-деформированное состояние, обусловленное единичным микродвойником в зерне поликристалла и формой зеренных границ. Разработан метод оценки данного состояния. Выявлены области концентрации напряжений в зерне поликристалла при наличии остаточного механического клиновидного двойника.

ЛИТЕРАТУРА

1. Остриков, О. М. Дислокационная макроскопическая модель клиновидного двойника / О. М. Остриков // Вестник ГГТУ имени П. О. Сухого. 2006. № 2. С. 10–18.
2. Миркин, Л. И. Физические основы прочности и пластичности. Введение в теорию дислокаций / Л. И. Миркин. М.: Изд-во МГУ, 1968. 538 с.
3. Остриков, О. М. Механика двойникового твердых тел / О. М. Остриков. Гомель: ГГТУ имени П. О. Сухого, 2008. 301 с.
4. Косевич, А. М. Дислокационная теория упругого двойникового кристаллов / А. М. Косевич, В. С. Бойко // Успехи физических наук. 1971. Т. 104, № 2. С. 101–255.
5. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
6. Полухин, П. И. Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. М.: изд-во «Металлургия», 1982. 584 с.
7. Выгодский, М. Я. Справочник по высшей математике / М. Я. Выгодский. М.: АСТ, 2005. 991 с.
8. Гуткин, М. Ю. Пластическое течение и разрушение аморфных межкристаллитных прослоек в керамических нанокompозитах / М. Ю. Гуткин, И. А. Овидько // ФТТ. 2010. Т. 52, № 4. С. 718–727.
9. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. М.: Изд-во «Наука», 1978. 792 с.

10. Финкель, В. М. Разрушение кристаллов при механическом двойниковании / В. М. Финкель, В. А. Федоров, А. П. Королев. Ростов-на-Дону. 1990. 172 с.

Поступила 05.01.2015

Подписана в печать 10.03.2015

Опубликована онлайн 24.05.2016

REFERENCES

1. Ostrikov O. M. (2006) Dislocation Macroscopic Model of Wedge-Type Twin. *Vestn. Gomelskogo Gos. Tekhn. Un-ta Imeni P. O. Sukhogo* [Bulletin of Gomel State Technical University Named after P. O. Sukhoi], (2), 10–18 (in Russian).
2. Mirkin L. I. (1968) *Physical Basis of Strength and Plasticity. Introduction to Dislocation Theory*. Moscow, Publishing House of Moscow State University. 538 (in Russian).
3. Ostrikov O. M. (2008) *Mechanics of Twinning for Solid Bodies*. Gomel: Gomel State Technical University Named after P. O. Sukhoi. 301 (in Russian).
4. Kosevich A. A., Boyko V. S. (1971) Dislocation Theory for Elastic Crystal Twinning. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* [Achievements in Physical Sciences], 104 (2), 101–255 (in Russian).
5. Hirt J., Lothe J. (1972) *Theory of Dislocation*. Moscow, Atomizdat. 600 (in Russian).
6. Polukhin P. I., Gorelik S. S., Vorontsov V. K. (1982) *Physical Basis of Plastic Deformation*. Moscow, Metallurgiya. 584 (in Russian).
7. Vygodsky M. Ya. (2005) *Reference Book on Higher Mathematics*. Moscow, AST. 991 (in Russian).
8. Gutkin M. Yu., Ovidko I. A. (2010) Plastic Flow and Fracture of Amorphous Intercrystalline Layers in Ceramic Nanocomposites. *Physics of the Solid State*, 52 (4), 718–727. DOI: 10.1134/S1063783410040086.
9. Kittel Ch. (1978) *Introduction to Solid State Physics*. Moscow, Nauka. 792 (in Russian).
10. Finkel V. M., Fedorov V. A., Korolev A. P. (1990) *Destruction of Crystals During Mechanical Twinning*. Rostov-on-Don. 172 (in Russian).

Received: 05.01.2015

Accepted: 10.03.2015

Published online: 24.05.2016