ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ОПИСАНИЕ ФЛУКТУИРУЮЩИХ ПОЛЕЙ ДЕФОРМАЦИЙ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Ташкинов А.А., Шавшуков В.Е.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

Поликристаллические материалы имеют сложную гетерогенную структуру стохастической природы. На мезоскопическом масштабе механические поля (деформаций и напряжений) являются быстроосциллирующими и сильно флуктуирующими случайными функциями координат. Флуктуации обусловлены как случайной микроструктурой поликристалла так и упругим взаимодействием зерен. Упругое взаимодействие по своей природе является дальнедействующим, поэтому теоретические модели описания поведения поликристаллов должны учитывать взаимодействие большого числа зерен.

Некоторые макроскопические механические свойства поликристаллов (например, упругие модули), слабо зависят от размеров флуктуаций полей, тогда как другие, такие как зарождение трещин в режиме сверхвысокоциклового усталости, определяются почти исключительно экстремальными флуктуациями, возникающими в отдельных зернах специфических кластеров микроструктуры. Для нахождения таких больших флуктуаций нужно проанализировать все возможные состояния всех зерен поликристалла во всевозможных конфигурациях микроструктуры. В настоящей работе такая задача решается с помощью теоретико-полевого подхода в механике поликристаллических материалов [1].

Для неоднородных мезодеформаций в зернах $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi)$, где верхний индекс ξ нумерует зерна, получена точная система интегральных уравнений [2]

$$\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C_{klmn}'^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) + \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) C_{klmn}'^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta) \varepsilon_{mn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \quad (1)$$

в которой второй и третий члены в правой части отражают внутризеренное и межзеренное взаимодействие деформаций, а ε_{ij}^* есть однородная макродеформация. Для приближенного решения (1) разбиваем каждое зерно на большое количество субзерен и представляем внутризеренные мезодеформации в виде суперпозиции субзеренных полей, каждое из которых полагаем постоянным в пределах субзерна, с помощью индикаторных функций субзерен (латинские индексы нумеруют субзерна) $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \sum_{a=1}^n \lambda_a(\vec{r}_\xi) \varepsilon_{ij}^{(a)(\xi)}$. В

результате система интегральных уравнений (1) для локальных полей трансформируется в систему линейных алгебраических уравнений для сублокальных полей

$$\left[I_{ijmn} - B_{ijmn}^{(aa)(\xi)} \right] \varepsilon_{mn}^{(a)(\xi)} = \varepsilon_{ij}^* + \sum_{b \neq a} B_{ijmn}^{(ab)(\xi)} \varepsilon_{mn}^{(b)(\xi)} + \sum_{\eta \neq \xi} \sum_{e=1}^n B_{ijmn}^{(ae)(\eta)} \varepsilon_{mn}^{(e)(\eta)}, \quad (2)$$

где I_{ijmn} - единичный тензор, а коэффициенты

$$B_{ijmn}^{(ab)(\xi)} \equiv \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) \cdot C_{klmn}'^{(\xi)} \text{ и } B_{ijmn}^{(ae)(\eta)} \equiv \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) \cdot C_{klmn}'^{(\eta)} \quad (3)$$

описывают взаимодействие субзерен в одном зерне и в разных зернах соответственно и находятся численно для каждой конкретной микроструктуры поликристалла. Коэффициенты (3) медленно уменьшаются с расстоянием, лишь на расстоянии в 6-7 средних диаметров зерна интенсивность взаимодействия падает до 1-3% от взаимодействия ближайших соседних зерен.

Система (2) решается с помощью теории возмущений по межзеренному взаимодействию. С точностью в несколько процентов можно ограничиться первым порядком по взаимодействию. При этом в суммах правой части необходимо оставить значительное число зерен-соседей, в силу дальнедействующего характера взаимодействия. Решение (2) в

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

нулевом порядке по взаимодействию дает решение Эшелби для одиночного включения. Вклад взаимодействия отдельных зерен аддитивен.

Для поиска экстремальных состояний зерен и микроструктур при заданной макродеформации сначала в нулевом приближении находятся ориентации зерен с максимальными мезодеформациями. Затем ищутся максимальные аддитивные вклады от взаимодействия с соседними и удаленными зернами. Аддитивность вкладов сокращает размер статистических выборок при поиске экстремальных состояний отдельного зерна и окружающей микроструктуры на много порядков. Для сферического зерна при одноосном макрорастяжении максимальная деформация в зерне, обусловленная взаимодействием, превышает макродеформацию более чем в три раза (для разных анизотропий). Абсолютный максимум достигается вблизи границ зерна. Максимуму в любой точке зерна соответствует вполне определенная конфигурация окружающей микроструктуры поликристалла. Эти микроструктуры образуют симметричные паттерны. Паттерны содержат до 3000 и более зерен. Характерной особенностью паттернов является наличие в их центральных областях субкластера одинаково ориентированных зерен вокруг рассматриваемого зерна. Субкластер фактически есть одно большое зерно с размером 3-4 средних диаметра. Экспериментально подтверждено зарождение микротрещин в таких субкластерах [3]. Вероятность случайного образования экстремальных паттернов при получении поликристаллов достаточно мала (порядка нескольких тысячных процента). Однако, это может быть одной из причин большого разброса экспериментальных значений усталостных характеристик поликристаллических материалов в высокоцикловых и сверхвысокоцикловых режимах.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Пермского края грантами 18-01-00675 и 17-41-590433-р_а.

1. V.Shavshukov and A.Tashkinov. Quantum Field Theory Approach to Mechanics of Polycrystals // Solid State Phenomena. 2016. Vol.243. Pp 131-138.
2. Шавшуков В.Е. Экстремальные флуктуации деформаций в поликристаллических материалах // Физическая мезомеханика. 2018. Т.21. № 5. С. 67-75.
3. M.Oja, K.S.R. Chandran and R.J.Tyron. Orientation Imaging Microscopy of Fatigue Crack Formation in Waspaloy: Crystallographic conditions for crack nucleation // Int. J. Fatigue. 2010. V.32. Pp 551-556.