На правах рукописи

Емельянова Евгения Сергеевна

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ И РАЗВИТИЯ ДЕФОРМАЦИОННОГО РЕЛЬЕФА В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ТИТАНЕ НА РАЗНЫХ МАСШТАБНЫХ УРОВНЯХ

1.1.8. Механика деформируемого твердого тела

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2023

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» и в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики прочности и материаловедении Сибирского отделении Российской академии наук.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Романова Варвара Александровна

Официальные оппоненты:

Швейкин Алексей Игоревич, доктор физико-математических наук, доцент, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», проректор по науке
Смолин Игорь Юрьевич, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория нелинейной механики метаматериалов и многоуровневых систем, заведующий лабораторией
Сорокова Светлана Николаевна, кандидат физико-математических наук, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», отделение машиностроения, доцент

Защита состоится 22 декабря 2023 г. в 12 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета «НИ ТГУ.1.1.01», созданного на базе физико-технического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36 (учебный корпус № 10 ТГУ, компьютерный класс № 1).

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке и на официальном сайте федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» www.tsu.ru.

Материалы по защите диссертации размещены на официальном сайте ТГУ: https://dissertations.tsu.ru/PublicApplications/Details/3a7fc094-96e5-48f1-a3d7-104702e94828

Автореферат разослан « ___ » ноября 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Усанина Анна Сергеевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Одной из ключевых проблем механики является прогнозирование деформационного отклика материалов и разработка критериев аттестации напряженно-деформированного состояния (НДС) для диагностики и предотвращения потенциально опасных ситуаций. В основе любых методов неразрушающего контроля нагруженных деталей заложены знания о закономерностях процессов деформации и разрушения и установление их корреляции с определенными измеряемыми параметрами (например, сигналами акустической эмиссии, полями перемещений, количественными и качественными изменениями микроструктуры и текстуры и др.) и историей нагружения.

Многочисленные экспериментальные и численные исследования показывают, что важная информация может быть получена из наблюдений за деформационным рельефом, возникающим в процессе нагружения на изначально плоской поверхности материала, свободной от действия внешних сил. В отличие от шероховатости поверхности, вызванной непосредственным внешним воздействием (например, при термическом и механическом воздействиях и др.), деформационный рельеф на свободной поверхности является результатом эволюции НДС в объеме деформируемого материала и, таким образом, связан с внутренними механизмами деформации.

Изменения морфологии поверхности при нагружении могут служить индикатором внутреннего состояния материала и использоваться при разработке методов неразрушающего контроля в процессе эксплуатации конструкции. Большинство экспериментальных и теоретических исследований деформационного рельефа, возникающего на поверхности металлов в процессе нагружения, было выполнено на алюминиевых сплавах и сталях, имеющих кубическую решетку. Существующие знания о явлениях деформационного рельефа в металлах, характеризующихся гексагональной плотноупакованной (ГПУ) кристаллической решеткой, в частности в титане, основаны на довольно ограниченных данных. Вместе с тем такие исследования представляют как академический, так и практический интерес поскольку титан и его сплавы являются важными конструкционными материалами, широко использующимися в разных отраслях промышленности, благодаря своим уникальным свойствам. Поэтому исследования, направленные на выявление закономерностей процессов деформации и определение характеристик, которые могли бы служить для аттестации деформируемого состояния материалов с ГПУ решеткой на разных масштабных уровнях, являются актуальными.

Степень разработанности темы исследования. В настоящее время в области исследования роли поверхности в формировании деформационного отклика нагруженных твердых тел накоплен обширный экспериментальный материал. Классическими в этой области считаются работы В.П. Алехина, А.Я. Беленького, М.А. Васильева, А. Зангвила, Л.Г. Орлова, В.И. Веттегреня и др. Представления о поверхностных слоях нагруженных твердых тел как о

самостоятельной функциональной подсистеме получили существенное развитие в работах академика В.Е. Панина и его научной школы.

Деформационный рельеф формируется на разных масштабных уровнях. Классификация многомасштабных механизмов формирования деформационного рельефа была дана в работах Д. Раабе, В.Е. Панина, Д.В. Лычагина и др. В работах К. Йошиды, П. Ву, Д. Ллойда и др. отмечается интенсификация микро- и мезоскопического деформационного рельефа в областях локализации пластической деформации. На основании этого в работах В.А. Романовой и Р.Р. Балохонова было выдвинуто предположение о том, что деформационный рельеф, развивающийся на мезоуровне, может служить ранним предвестником локализации деформации на макроуровне и последующего разрушения, что может быть использовано в методах неразрушающего контроля материалов и изделий.

Значительный вклад в изучение организации рельефных образований в металлах с кубической решеткой был сделан в работах Д.В. Лычагина, Е.Э. Засимчук, П.В. Кузнецова, В.А. Старенченко и др. Также следует упомянуть работы зарубежных ученых Р. Хоникомба, Р. Бернера, Р. Беккера, Д. Раабе, Х. Кронмюллера, С. Харрена, Л. Кина, К. Адама, Д. Филда, М. Стаудта, З. Жао и др. При этом существующие знания о явлениях деформационного рельефа в металлах, характеризующихся гексагональной плотноупакованной кристаллической решеткой, основаны на довольно ограниченных данных.

В настоящей работе численно исследуются закономерности формирования и развития деформационного рельефа в поликристаллическом титане, характеризующимся гексагональной плотноупакованной решеткой, на разных масштабных уровнях.

Цель и задачи работы. Цель данной работы – выявить связь между НДС в поликристаллическом технически чистом титане и характеристиками мезоскопического деформационного рельефа, формирующегося на свободной поверхности в процессе пластического деформирования.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе были поставлены и решены следующие задачи:

1. Экспериментально исследовать эволюцию мезоскопического деформационного рельефа в образцах технически чистого титана в условиях одноосного растяжения и выявить корреляцию морфологических характеристик поверхности со степенью пластической деформации;

2. Разработать определяющие соотношения для кристаллов с ГПУ решеткой с учетом упругопластической анизотропии, связанной с кристаллическим строением, и построить конечно-элементную модель поликристаллического титана с явным учетом геометрии и кристаллографической ориентации зерен;

3. Численно исследовать закономерности эволюции НДС и деформационного рельефа в модельных образцах при одноосном растяжении, влияние микроструктуры, текстуры и состояния поверхностного слоя на локализацию пластической деформации и характеристики деформационного рельефа на мезоуровне.

Научная новизна полученных результатов заключается в следующем:

1. Установлена взаимосвязь между НДС в технически чистом титане и характеристиками мезоскопического деформационного рельефа;

2. Предложена методика аттестации поверхности деформируемого материала на мезоуровне в терминах безразмерного параметра интенсивности деформационного рельефа, позволяющая установить корреляцию характеристик рельефа со степенью пластической деформации;

3. Разработана микромеханическая модель поликристаллического титана, учитывающая особенности зеренной структуры на мезоуровне и упругопластическую анизотропию на микроуровне, связанную с кристаллическим строением, и позволяющая описать явление деформационного рельефа в поликристаллическом титане;

4. Получены новые результаты о влиянии характеристик зеренной структуры и текстуры поверхностного слоя на процессы локализации пластической деформации и формирования деформационного рельефа в технически чистом титане.

Теоретическая и практическая значимость работы. Выводы о влиянии микроструктуры и текстуры на процессы локализации пластической деформации в микрообъемах материала способствуют более глубокому пониманию деформационных процессов на микро- и мезоуровнях. Разработанные модели и подходы могут быть использованы в научных исследованиях и инженерных приложениях для моделирования деформации поликристаллических материалов с гексагональной плотноупакованной решеткой с явным учетом систем скольжения, для оценки влияния вкладов микро- и мезомасштабных механизмов деформации в формирование макроскопического отклика материала в заданных условиях нагружения. Выявленные закономерности формирования и эволюции мезоскопического деформационного рельефа на свободной поверхности нагруженных материалов, могут быть использованы для разработки методов неразрушающего контроля материалов и конструкций.

Работа выполнена в рамках проекта FWRW-2021-0002 «Научные основы создания цифровых двойников материалов и сред с иерархической композиционной структурой и программные средства для их виртуального тестирования в условиях статических и динамических термомеханических воздействий» государственного задания ИФПМ СО РАН на 2021-2025 годы, проекта РНФ № 20-19-00600 «Закономерности формирования и эволюции деформационного рельефа в пластически деформируемых поликристаллах на разных масштабных уровнях», проекта III.23.1.1. «Мезомеханика самоорганизации процессов в мультискейлинге нелинейных иерархических структур и научные основы аддитивных технологий создания многослойных материалов» государственного задания ИФПМ СО РАН на 2018-2020 годы, а также проекта РФФИ № 17-08-00643 А «Закономерности развития мезоскопического деформационного рельефа на поверхности поликристаллического титана».

Методология и методы исследования. Экспериментальное исследование эволюции мезоскопического деформационного рельефа на свободной поверхности в процессе одноосного растяжения проводилось в соответствии с

методикой остановки при определенной стадии нагружения. При достижении заданной степени деформации, образцы извлекались из испытательной машины для исследования поверхности методами контактной профилометрии и сканирующей электронной микроскопии. Затем образцы вновь помещались в испытательную машину и их нагружение продолжалось до следующей заданной степени деформации. На этапах активного нагружения поверхность образца, обработанная контрастом, снималась с помощью цифровой оптической системы Vic3D для исследования полей смещений и деформаций в плоскости поверхности методом корреляции цифровых изображений (digital image correlation в англоязычной литературе или DIC). Для выбранных участков мониторинга, демонстрирующих различную степень пластической деформации, были выполнены дополнительные исследования рельефа поверхности с помощью оптического интерференционного профилометра.

Численное моделирование проводилось в рамках подходов механики структурно-неоднородных сред с явным учетом внутренних границ раздела. Трехмерные поликристаллические структуры были сгенерированы методом пошагового заполнения. Упругопластический отклик зерен описывался в рамках моделей анизотропной упругости и физической теории пластичности кристаллов (crystal plasticity в англоязычных источниках). Краевые задачи одноосного растяжения построенных моделей решались методом конечных элементов (МКЭ), с использованием конечно-элементного пакета ABAQUS. Расчеты квазистатического нагружения трехмерных структур проводились в динамической постановке с применением алгоритмов параллельных вычислений.

На защиту выносятся:

1. Методика аттестации поверхности пластически деформируемых поликристаллов в терминах безразмерного параметра интенсивности деформационного рельефа, позволяющая установить корреляцию характеристик рельефа со степенью пластической деформации.
2. Положение о том, что безразмерный параметр интенсивности мезоскопического деформационного рельефа в образцах технически чистого титана в условиях одноосного растяжения линейно коррелирует со степенью пластической деформации участков мониторинга.
3. Микромеханическая модель поликристаллического титана с явным учетом зеренной структуры и особенностей дислокационного скольжения в гексагональных кристаллах, позволяющая численно воспроизводить экспериментально наблюдаемый деформационный рельеф на мезоуровне.
4. Совокупность расчетных и экспериментальных данных по исследованию закономерностей формирования и развития мезоскопического деформационного рельефа в технически чистом титане при одноосном растяжении, показывающих, что сильная базисная текстура и измельчение зерна в поверхностном слое подавляют деформационный рельеф на микро- и мезоуровнях, а размер зерна оказывает меньшее влияние на формирование деформационного рельефа, по сравнению с текстурой.

Степень достоверности результатов. Корректность математической постановки задачи обеспечивается использованием современных теорий и

методов решения, а также непротиворечивостью получаемых результатов. Достоверность полученных результатов обеспечивается применением апробированных численных методов, согласием с аналитическими оценками и экспериментальными результатами, в том числе полученными другими авторами.

Апробация результатов исследования. Результаты работы докладывались и обсуждались на более чем 30 международных и всероссийских конференциях, включая: Международную конференцию «Физическая мезомеханика» (Томск, 2019, 2020, 2021, 2022 г.); XVI Международную конференцию «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 2022 г.); LXIV Международную конференцию «Актуальные проблемы прочности» (АПП-2022) (Екатеринбург, 2022 г.); 11th International online symposium on materials in external fields (ISMEF 2022) (Новокузнецк, 2022 г.); 2nd International Workshop on Plasticity, Damage and Fracture of Engineering Materials (Анкара, Турция, 2021 г.); 4th International Conference on Structural Integrity and Durability – ICSID 2020, Summer School – Fatigue and Fracture Modeling and Analysis (Дубровник, Хорватия, 2020 г.); EUROMAT 2019: European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (Стокгольм, Швеция, 2019 г.); XXIII Всероссийскую конференцию молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (YM-2022) (Новосибирск, 2022 г.); Всероссийскую школу-конференцию «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2019, 2020, 2021, 2022 г.); Всероссийскую школу-конференцию молодых ученых «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии» (Новосибирск-Шерегеш, 2020, 2021 г.); Всероссийскую молодежную научную конференцию «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики» (Томск, 2019 г.); Всероссийскую конференцию по численным методам решения задач теории упругости и пластичности (Томск, 2019 г.).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 23 работы, в том числе 9 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (из них 6 статей в зарубежных научных журналах, входящих в Web of Science, 3 статьи в российских научных журналах, переводные версии которых входят в Web of Science), 11 статей в сборниках материалов конференций, представленных в изданиях, входящих Web of Science и / или Scopus; получено 3 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.

Личный вклад соискателя. Автор самостоятельно подготовил обзор литературных данных по теме диссертации, провел эксперименты и численное моделирование, обработал и проанализировал полученные данные. Совместно с научным руководителем были сформулированы цель, задачи и основные положения диссертационной работы, проводилось обсуждение полученных результатов и написание статей на их основе. Все результаты, представленные в диссертации, получены автором самостоятельно.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав основной части, заключения, списка сокращений и списка использованной

литературы (244 наименования), содержит 59 рисунков, 8 таблиц, всего 154 страницы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснованы актуальность и новизна диссертационного исследования. Сформулированы цель и задачи работы, описаны объекты и методы исследования, изложены положения, выносимые на защиту, раскрыта теоретическая и практическая значимость результатов. Обоснована достоверность результатов и выводов, приведены сведения об апробации диссертационного исследования, личном вкладе автора, структуре и кратком содержании кандидатской диссертации.

В первой главе представлен обзор литературных источников, связанных с различными аспектами исследований деформационного рельефа на поверхности нагруженных материалов.

Вторая глава посвящена экспериментальному исследованию мезоскопического деформационного рельефа на поверхности технически чистого титана в процессе одноосного растяжения. Приводятся данные о микроструктуре исследуемого материала, подготовке образцов и методике эксперимента.

Экспериментальные образцы были изготовлены из пластин методом электроискровой резки в виде лопаток для одноосного растяжения вдоль и поперек направления прокатки с размерами рабочей части 50×8×3 мм (рисунок 1).

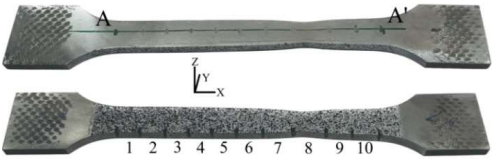


Рисунок 1 – Поверхности экспериментального образца, подготовленные для исследований методами контактной профилометрии (сверху) и корреляции цифровых изображений (снизу) после растяжения до 25%

Обе поверхности образцов подвергались шлифовке. Одна из поверхностей образца была подготовлена для снятия профилограмм контактным профилометром Alpha-Step IQ. Для этого она подвергалась полировке с последующей разметкой участков мониторинга вдоль оси растяжения. На противоположную поверхность наносился спекл по всей области рабочей части для исследования методом корреляции цифровых изображений. Для сопоставления с результатами контактной профилометрии соответствующая разметка была дополнительно нанесена на боковые части лопаток. В качестве примера экспериментальный образец с подготовленными для исследования поверхностями приведен на рисунке 1.

Эволюция мезоскопического деформационного рельефа на полированной поверхности в процессе одноосного растяжения исследовалась по методике

нагружения с остановкой при определенной степени деформации. Растяжение образцов осуществлялось на электромеханической испытательной машине BISS Nano 15 kN со скоростью перемещения подвижного захвата 1 мм/мин. При достижении заданной степени деформации, образцы извлекались из испытательной машины для регистрации профилограмм поверхности с помощью контактного профилометра Alpha-Step IQ. Затем образцы вновь помещались в испытательную машину и их нагружение продолжалось.

Профилограммы снимались вдоль средней линии образца (A-A', рисунок 1). На этапе остановки растяжения и снятия нагрузки пластическая деформация участков мониторинга определялась по изменению расстояния между реперными точками по формуле линейного удлинения

$$\varepsilon_{sub}=(L_{sub}/L_{sub0}) - 1, \quad (1)$$

где L_{sub} и L_{sub0} – текущая и начальная длины участков.

На этапах активного нагружения поверхность образца, обработанная спеклом (рисунок 1 снизу), снималась с помощью цифровой оптической системы Vic3D для исследования полей смещений и деформаций в плоскости поверхности методом корреляции цифровых изображений. Результаты, полученные методом DIC (рисунок 2а), сопоставлялись с результатами контактной профилометрии для выявления взаимосвязи между деформацией в плоскости и деформационным рельефом.

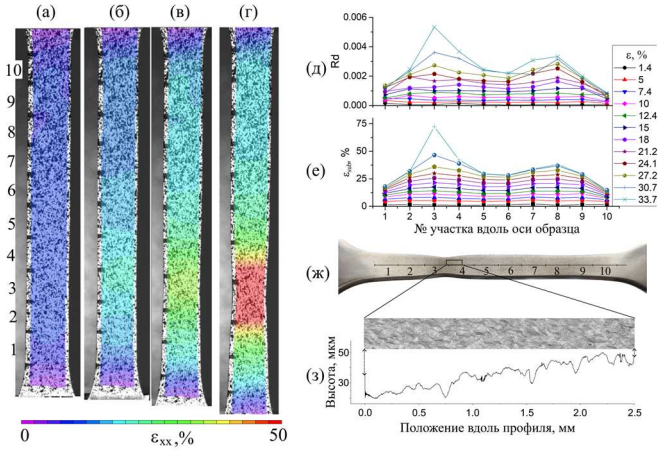
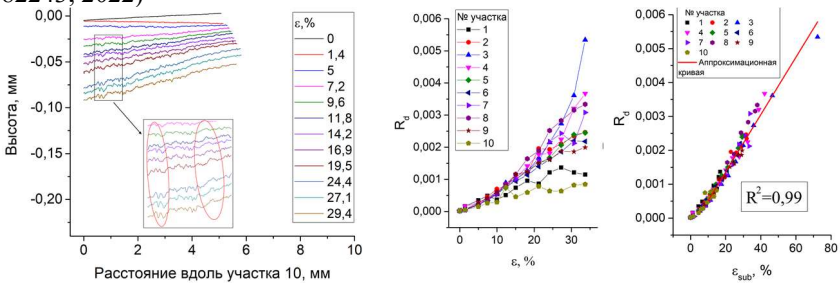


Рисунок 2 – Поля деформаций ε_{xx}, полученные методом DIC для образца 1 (поставка, X||TD) при деформациях растяжения 10% (а), 15% (б), 20% (в) и 25%(г). Эволюция интенсивности деформационного рельефа (д) и локальных деформаций (е) в процессе растяжения в образце (ж) и рельеф поверхности на участке шейки, деформированном до 33.7% (з)

Методом контактной профилометрии профили поверхности были получены в диапазоне деформаций от начала нагружения до момента образования шейки с интервалом 2–5% (рисунок 3а). Для выбранных участков мониторинга, демонстрирующих различную степень пластической деформации, были

выполнены дополнительные исследования рельефа поверхности с помощью оптического интерференционного профилометра New view 6200. Для автоматизации обработки профилограмм была разработана компьютерная программа на языке Python (Св-во о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2022682243, 2022)



(а) (б) (в)

Рисунок 3 – Профили поверхности (а), зависимости параметра R_D от степени растяжения образца (б) и от пластической деформации участков мониторинга в плоскости растяжения (в)

Для количественной оценки рельефных образований для полученных профилограмм был определен безразмерный параметр интенсивности деформационного рельефа R_D, представляющий собой отношение длины профиля поверхности L_p к длине проекции профиля на плоскость L_e

$$R_D=L_p/L_e-1. \quad (2)$$

Принципиальным отличием определения безразмерного параметра интенсивности деформационного рельефа R_D от традиционных методов оценки шероховатости является отсутствие фильтрации полученных профилограмм. Таким образом обеспечивается учет вкладов механизмов деформации на всей иерархии масштабов, присутствующих в области измерения. При этом высокочастотные осцилляции малой амплитуды, связанные с дислокационными ступеньками в зернах, отфильтровываются естественным образом, в результате ограниченной разрешающей способности контактного профилометра, латеральное разрешение которого составляет 1 мкм.

В качестве примера распределения значений R_D и соответствующих деформаций участков мониторинга вдоль оси растяжения приведены на рисунках 2д, е, 3б для разных стадий растяжения. Рельеф поверхности и соответствующий профиль, снятый вдоль средней линии на участке шейки, приведены на рисунке 2з.

Во всех образцах уже на самых ранних стадиях пластической деформации на поверхности формировался мезоскопический деформационный рельеф в виде системы складок различной геометрии и масштаба. Пики и впадины, сформированные на начальном этапе пластического течения, в процессе деформирования изменяли свою амплитуду, но не меняли положение друг относительно друга, что хорошо прослеживается на профилограммах (см.

рисунок 3а). При этом начальная шероховатость поверхности не влияла на формирование и последующую эволюцию деформационного рельефа.

Наиболее важным результатом является установление корреляции между интенсивностью мезоскопического деформационного рельефа R_D и степенью локальной пластической деформации в плоскости растяжения. С этой целью для каждого из исследованных экспериментальных образцов были построены графики, где значения R_D и соответствующие им значения локальных деформаций участков мониторинга приведены во всем диапазоне нагружения (характерный график приведен на рисунке 3в). Для всех образцов была получена корреляция интенсивности деформационного рельефа со степенью деформации в плоскости растяжения с коэффициентом детерминации 0.84-0.99, что свидетельствует о сильной зависимости между этими величинами.

Выявленная зависимость между интенсивностью деформационного рельефа R_d и локальной деформацией в плоскости нагружения была дополнительно подтверждена сопоставлением с результатами исследований методом корреляции цифровых изображений. Во всех исследованных образцах по результатам DIC и по интенсивности деформационного рельефа области формирования шейки определялись на ранних стадиях до видимых проявлений локализации на макроуровне. Полученные результаты подтверждают сделанное предположение о возможности оценки накопленной в плоскости растяжения пластической деформации на основе аттестации мезоскопического деформационного рельефа.

Третья глава посвящена разработке численной модели для описания зарождения и эволюции деформационного рельефа в гексагональных кристаллах. В разделе 3.1 приводится динамическая постановка краевой задачи, формулируются граничные условия и рассматривается модель упругопластического поведения, основанная на физической теории пластичности кристаллов. В рамках этой теории с учетом призматических, базисных и <*c*+*a*> пирамидальных систем скольжения формулируются определяющие соотношения для гексагональных кристаллов относительно локальных ортогональных систем координат, оси которых совпадают с кристаллографическими направлениями [210], [010] и [001]. Обобщенный закон Гука в скоростной форме записывается с учетом аддитивного разложения тензора скоростей полных деформаций на упругую и пластическую составляющие

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}\left(\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^{p}\right), \tag{3}$$

Соотношения (3) были записаны для ГПУ металлов с учетом симметрии кристаллической решетки, в соответствии с которой матрица упругих модулей C_{ijkl} содержит 5 независимых модулей. Скорости полных деформаций $\dot{\varepsilon}_{kl}$ связаны с компонентами вектора скорости известными кинематическими соотношениями. Скорости пластических деформаций определяются в рамках физической теории пластичности с учетом геометрии дислокационного скольжения в ГПУ кристаллах

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{p} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha}\dot{\gamma}^{(\alpha)}\Theta_{ij}^{(\alpha)}\ , \tag{4}$$

где Θ_{ij} – тензор, задающий ориентацию системы скольжения α в кристаллической решетке, определяется через вектор нормали к плоскости скольжения и вектор направления скольжения. Суммирование в (4) ведется по всем активным системам скольжения. Количество и геометрические особенности систем скольжения зависят от типа кристаллической решетки. Скорость пластических сдвигов $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ в системе скольжения α определяется в рамках вязкопластического закона

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_{CRSS}^{(\alpha)}} \right|^{\nu} \operatorname{sgn}\left(\tau^{(\alpha)}\right), \tag{5}$$

где основными параметрами являются начальная скорость сдвига $\dot{\gamma}_0$, сдвиговое напряжение τ, действующее в системе скольжения, и его критическое значение $\tau_{CRSS}^{(\alpha)}$ (critical resolved shear stress), при достижении которого система скольжения становится активной. Критические напряжения, активирующие сдвиг на системах скольжения, определялись с учетом аддитивных вкладов деформационного и зернограничного упрочнения

$$\tau_{CRSS}^{(\alpha)} = \tau_0^{(\alpha)} + kD^{-1/2} + f\left(\varepsilon_{eq}^{p}\right), \tag{6}$$

где первый член суммы $\tau_0^{(\alpha)}$ — критическое напряжение сдвига в системе скольжения α в монокристалле. Второй член суммы учитывает повышение напряжений течения за счет зернограничного упрочнения в поликристаллах через закон Холла-Петча, где размер зерна D определялся для каждого зерна в явном виде, через занимаемый им объем. Последний член суммы представляет собой аппроксимационную функцию деформационного упрочнения от накопленной в элементе пластической деформации ε_{eq}^{p}.

Определяющие соотношения вводились в конечно-элементный пакет ABAQUS/Explicit с помощью разработанной процедуры VUMAT. Для решения системы уравнений (3)-(6) применялся метод простых итераций. Для минимизации вычислительных затрат краевые задачи решались в динамической постановке с использованием явных схем интегрирования по времени.

В разделе 3.2 рассматриваются процедура генерации поликристаллических структур и особенности их введения в краевую задачу. В разделе 3.3 проводится определение параметров, ответственных за скоростную чувствительность, а также верификация разработанной модели для монокристаллов различной ориентации и поликристаллов путем сравнения численных расчетов с аналитическими данными, полученными согласно закону Шмида, и экспериментальными данными. Для определения констант материала и параметров определяющих соотношений был проведен анализ имеющихся литературных данных по микроструктуре, механическим свойствам и механизмам деформации в технически чистом титане. Определение критических сдвиговых напряжений, инициирующих сдвиг на различных системах

скольжения в титане, представляет собой сложную задачу из-за отсутствия надежных экспериментальных данных, полученных на монокристаллах. В технически чистом титане потенциально активными системами скольжения являются 3 призматические, 3 базисные, 6 <*a*>-пирамидальных, 12 <*c*+*a*>-пирамидальных 1 рода и 6 <*c*+*a*>-пирамидальных 2 рода. Имеющиеся в литературе данные о величине критических напряжений на различных системах скольжения, приведенные в разных работах, различаются на порядок. Тем не менее, большинство авторов приходят к выводу, что величина критических напряжений на базисных системах скольжения в 2 раза, а на пирамидальных системах – в 3 раза выше, чем на призматических. Таким образом, первичными системами скольжения в α-титане являются призматические, вторичными – базисные. Вопрос о вкладе пирамидальных систем скольжения является дискуссионным. В предположении, что текстурированный материал деформируется аналогично монокристаллам соответствующей ориентации, Won et al.[1] идентифицировали режимы скольжения, активируемые в α-титане, и оценили критические приведенные напряжения сдвига, действующие на призматических и базисных системах скольжения, когда нагрузка прикладывалась в разных направлениях. На основе этих данных в модели были заданы значения критических сдвиговых напряжений на различных семействах систем скольжения и построены функции упрочнения. Согласно экспериментальным данным, коэффициент деформационного упрочнения на базисных и призматических системах на развитой стадии пластического течения изменяется незначительно, а деформационное упрочнение может быть представлено экспоненциальной функцией. С учетом этого для всех систем скольжения была задана экспоненциальная функция деформационного упрочнения $f\left(\varepsilon_{eq}^{p}\right)$, где коэффициент деформационного упрочнения был подобран для каждого семейства систем скольжения на основе экспериментальных данных:

$$f(\varepsilon_{eq}^{p}) = a\left(1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_{eq}^{p}}{b}\right)\right) \tag{7}$$

Для верификации модели и тестирования корректности численной реализации была проведена серия расчетов одноосного растяжения двенадцати монокристаллов с различной кристаллографической ориентацией без учета деформационного упрочнения. В этом случае деформация локализуется уже на начальном этапе пластического деформирования в полосах, соответствующих линиям пересечения активных плоскостей скольжения с поверхностями образца. Геометрическая модель размерами 10×5×5 мм аппроксимировалась конечно-элементной сеткой, содержащей 250000 гексагональных элементов (C3D8R).

[1] Anisotropic yielding behavior of rolling textured high purity titanium / J. W. Won, K. T. Park, S. G. Hong, C. S. Lee // Materials Science and Engineering: A. – 2015. – Vol. 93. – P. 012042-1–012042-5.

Проводился анализ набора активных систем скольжения при различных ориентациях и сравнение с аналитически ожидаемыми результатами из анализа соответствующих полюсных фигур (рисунок 4).

Сравнение напряжений начала пластического течения в монокристаллах различной ориентации с аналитическими оценками, полученными из закона Шмида, показало расхождение менее 0,5% для титана, что также свидетельствует о корректности расчетов.

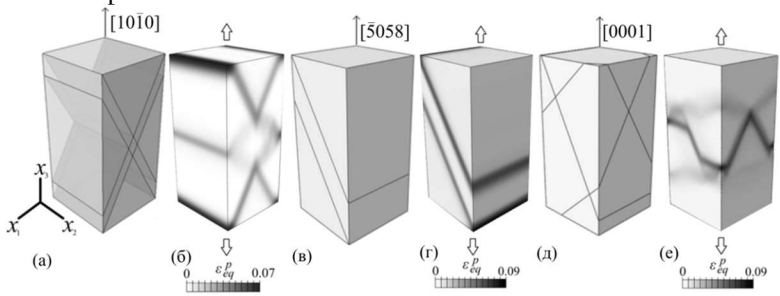


Рисунок 4 – Схема монокристаллов титана выбранной ориентации (а, в, д) и соответствующие распределения интенсивности пластических деформаций, полученные в расчетах (б, г, е)

Тестовые расчеты для поликристаллов проводились на модели, содержащей 1000 зерен, построенной на основе экспериментальных данных EBSD анализа технически чистого титана[2]. EBSD анализ выявил структуру с равноосными зернами со средним размером 70 мкм. Анализ полюсных фигур показал наличие слабой базисной текстуры с углом рассеяния около 40°, характерной для прокатанного титана. Модельная структура была сгенерирована методом пошагового заполнения на сетке, содержащей $1{,}125\times10^6$ кубических элементов, и содержала 1000 квазиравноосных зерен со средним размером 70 мкм. В качестве входных параметров генерации зародыши были распределены случайным образом, рост зерен осуществлялся с одинаковой скоростью в соответствии со сферическим законом. Размер поликристаллической модели составлял 0,105×0,105×0,0525 см. Ориентация зерен воспроизводила базисную текстуру в соответствии с экспериментальными данными (рисунок 5).

Условия растяжения вдоль оси RD задавались на боковых поверхностях в скоростях. На нижней поверхности задавались условия симметрии относительно оси ND. Здесь и далее направление прокатки, поперечное направление и направление, нормальное к плоскости прокатки, обозначаются как RD (rolling direction), TD (transverse direction) и ND (normal direction), соответственно. Остальные поверхности считались свободными от действия внешних сил.

---

[2] Early Prediction of Macroscale Plastic Strain Localization in Titanium from Observation of Mesoscale Surface Roughening / V. Romanova, R. Balokhonov, E. Emelianova [et al.] // International Journal of Mechanical Sciences. – 2019. – Vol. 161–162. – 105047.

Расчеты проводились в динамической постановке, что позволяет существенно минимизировать вычислительные затраты при решении задач микромеханики с явным рассмотрением структуры. Условиями, при которых динамическая постановка задачи обеспечивает статическое решение с высокой степенью точности, являются плавное нагружение и использование моделей материала, нечувствительных к скорости нагружения. Для выполнения первого условия во всех расчетах скорость растяжения на поверхностях нагружения линейно наращивалась до заданного значения, а затем поддерживалась постоянной. Время наращивания скорости нагружения до постоянного значения, обеспечивающее минимизацию волновых эффектов, задавалось с учетом геометрических особенностей каждой построенной модели.

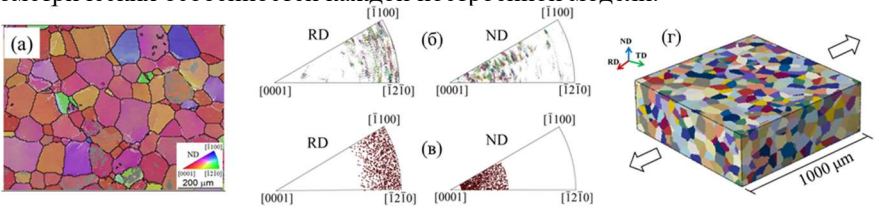


Рисунок 5 – EBSD изображение зеренной структуры, приведенное в шкале обратных полюсных фигур для направления ND (а). Экспериментальные (б) и модельные (в) обратные полюсные фигуры, и модельный поликристалл с соответствующей системой координат RD-TD-ND (г). Стрелками показано направление растяжения

Для подбора параметров модели, обеспечивающих нечувствительность материала к скорости нагружения, была проведена серия расчетов одноосного растяжения поликристаллической структуры со ступенчатым изменением амплитудного значения скорости деформации в процессе растяжения в диапазоне от 10 $с^{-1}$ до 10^3 $с^{-1}$. Было получено, что выбор начальной скорости сдвига в виде линейной функции от интенсивности скорости полной деформации в элементе эффективно минимизирует скоростную чувствительность в диапазоне скоростей деформации до 10^3 $с^{-1}$. При этом скорость пластических сдвигов становится автоматически выше в областях локализации деформации, где скорость деформации может существенно превышать средний уровень. Значение показателя степени ν в соотношении (5) для скоростей пластических сдвигов принималось равным 5.

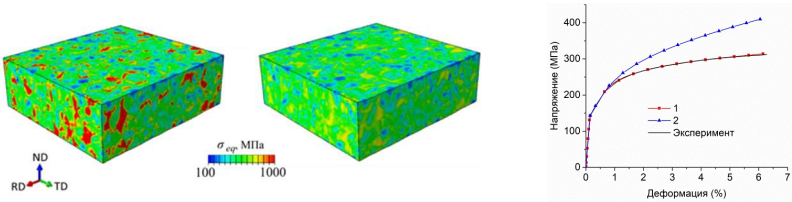
Для выбора оптимальных параметров численных экспериментов, обеспечивающих воспроизведение деформационного рельефа на мезоуровне с достаточной степенью подробности при минимальных вычислительных затратах была проведена серия расчетов для поликристаллических моделей, построенных на сетках 75×25×75, 150×50×150, 240×80×240 и 300×100×300. Все структуры имели одинаковую геометрию и кристаллографическую ориентацию зерен. Для исследования сеточной сходимости расчеты проводились до 7% растяжения. Были проведены сравнения полей напряжений, пластических деформаций и деформационного рельефа, полученных на разных сетках. Расчеты показали, что

аппроксимация 500 элементов на зерно обеспечивает достаточно аккуратное воспроизведение деформационного рельефа на мезоуровне. При необходимости описания внутризеренной деформации необходимо использование более подробных сеток.

В разделе 3.4 обсуждается вклад различных систем скольжения α-титана в формирование деформационного отклика модельного поликристалла, характеризующегося слабой базисной текстурой. Особое внимание уделялось вопросу о необходимости учета пирамидальных систем скольжения.

Экспериментальные данные показывают, что ГПУ кристаллы титана характеризуются существенной анизотропией пластических свойств в зависимости от их ориентации по отношению к нагрузке. Зерна, у которых призматическая ось перпендикулярна направлению нагрузки, проявляют наибольшую тенденцию к скольжению. В зернах с ориентацией призматической оси параллельно нагрузке в соответствии с законом Шмида сдвиг по призматическим и базисным системам скольжения невозможен. Пластическая деформация в этом направлении может быть реализована только по пирамидальным системам скольжения либо двойникованием. Деформация двойникованием в модели не учитывалась, поскольку, согласно литературным данным, она характерна лишь для специфических условий нагружения (повышенных температурах, высокоскоростном нагружении, интенсивной пластической деформации). Вместе с тем, сдвиг по пирамидальным системам скольжения может быть основным механизмом деформации при нагружении вдоль призматической оси гексагональных кристаллов. Соответственно, учет пирамидальных систем скольжения при моделировании может значительно повлиять на адекватность описания деформационного отклика материала с базисной текстурой.

Серия расчетов была проведена для поликристаллического титана для оценки вкладов различных систем скольжения в деформационный отклик на микро- и макроуровне. Сравнительный анализ полей напряжений и пластических деформаций на уровне зерен показал, что без учета пирамидальных систем скольжения в неблагоприятно ориентированных зернах поликристалла может развиваться существенно завышенный уровень напряжений (рисунок 6а). Так уже при 5% деформации в локальных областях концентрации интенсивность напряжений может достигать 2000 МПа и больше, что не характерно для пластически деформируемых металлов. Снижение уровня напряжений может быть достигнуто за счет учета пирамидальных систем скольжения, по которым в локальных областях и будет развиваться пластическая деформация (рисунок 6б). Аналогичные выводы были сделаны из анализа кривых нагружения, описывающих макроскопический отклик материала (рисунок 6в). На начальном этапе нагружения, где преимущественно активируются призматические и базисные системы скольжения, кривые нагружения совпадают, однако на развитой стадии пластического течения моделирование без учета пирамидальных систем скольжения дает завышенные значения напряжений. С учетом этого в дальнейших расчетах учитывался вклад призматических, базисных и пирамидальных систем скольжения.



(а) (б) (в)

Рисунок 6 – Распределение интенсивностей напряжений без учета (а) и с учетом (б) пирамидальных систем скольжения и кривые «напряжение-деформация», полученные с учетом (кривая 1) и без учета (кривая 2) вклада пирамидальных систем скольжения в сравнении с экспериментом (в)

В разделе 3.5 обсуждается вопрос об определении размера представительного объема модели с точки зрения воспроизведения деформационных явлений на мезоуровне. С этой целью была сгенерирована периодическая структура, содержащая 1000 зерен на сетке 150×150×50 с шагом 7 мкм, которая затем транслировалась в направлениях X и Y в соотношениях 3×2, 4×2, 4×3. Для всех полученных моделей были проведены расчеты одноосного растяжения вдоль оси X до степеней деформации, максимально возможных для каждой геометрии. На нижней поверхности задавались условия симметрии, на верхней и боковых поверхностях – условия свободных поверхностей.

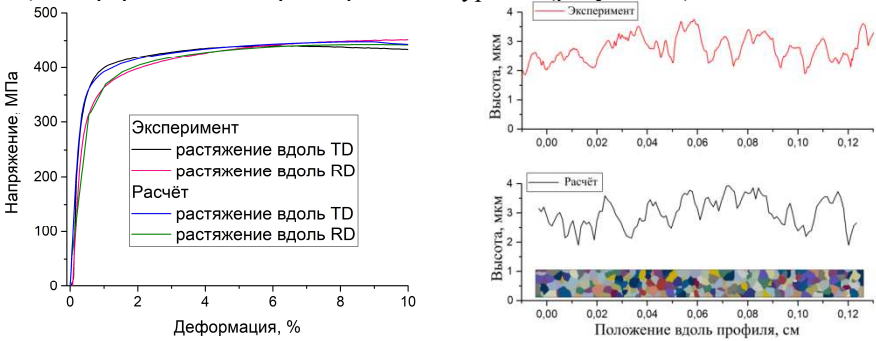
Для всех моделей была проанализирована эволюция локальных напряжений, деформаций и деформационный рельеф, осредненные кривые нагружения (макроскопический отклик) и построены зависимости интенсивности деформационного рельефа на верхней и боковой поверхностях от степени деформации. На основании проведенного анализа был сделан вывод, что диапазон применимости модели определенного размера коррелирует с возможной степенью приложенной деформации, которая, в свою очередь, определяется иерархией масштабов локализации, которые могут быть реализованы в модели.

В четвертой главе обсуждаются результаты численных исследований деформационного поведения технически чистого титана в процессе одноосного растяжения. Раздел 4.1 посвящен результатам моделирования на основе экспериментов, описанных в главе 2.

На основе выводов о размерах представительного мезообъема и разрешении расчетных сеток было сгенерировано 2 модели, состоящие из 12 000 и 36 000 равноосных зерен на сетках 600×450×50 элементов с шагом по сетке 2 мкм и 6 мкм, соответственно. Меньшая модель размером 1,2×0,9×0,1 мм была построена с разрешением приблизительно 1000 элементов на зерно для анализа микро- и мезомасштабных полей напряжений, деформаций и смещений до 10% деформации растяжения. Более крупная модель размером 3,6×2,7×0,3 мм была аппроксимирована с разрешением 350 элементов на зерно и позволила исследовать общие тенденции эволюции деформационного рельефа вплоть до

образования шейки, хотя и не воспроизводила локальные характеристики напряжения-деформации с достаточной степенью детализации.

Для тестирования модели и входящих в нее параметров были проведены расчеты растяжения построенной модельной микроструктуры вдоль RD и TD. Верификация параметров модели была выполнена на основе сравнения экспериментальных и расчетных диаграмм нагружения на макроуровне (рисунок 7а) и деформационного рельефа на мезоуровне (рисунок 7б).



(а) (б)

Рисунок 7 – Экспериментальные и расчетные кривые нагружения (а) и профили шероховатости (б) при 5% деформации растяжения

Кривые нагружения, полученные численно и экспериментально, совпадают с высокой степенью точности для обоих направлений растяжения, что свидетельствует о корректности модели на макроуровне. Сравнение расчетных и экспериментальных профилей шероховатости поверхности показало, что отклонение пиков и впадин от среднего уровня, а также характерный период частотных составляющих профилограмм при одинаковых степенях деформации изменялись в одинаковых пределах в эксперименте и расчете (рисунок 7б), что подтверждает корректность модели на мезоуровне.

Аналогично экспериментальным исследованиям, для моделей с разными ориентациями зерен относительно оси растяжения и поверхности были построены зависимости интенсивности деформационного рельефа R_D от степени деформации. На основе анализа совокупности полученных результатов были выявлены общие закономерности развития деформационного рельефа в экспериментальных и модельных структурах ГПУ поликристаллов.

На рисунке 8 представлены поля интенсивности напряжений и пластических деформаций, а также соответствующие им картины деформационного рельефа для 0,22% и 5% деформации растяжения. Сравнение деформационного рельефа с зеренной структурой показало, что небольшие неровности поверхности образуются из-за смещения отдельных зерен или их частей относительно поверхности материала. Данные смещения и деформации зерен, у которых фактор Шмида наибольший на призматических системах скольжения, происходят на ранних стадиях пластической деформации (0,2%),

задолго до того, как средние напряжения на кривой нагружения достигают макроскопического предела текучести (рисунок 7а), и отвечают за микроуровень.

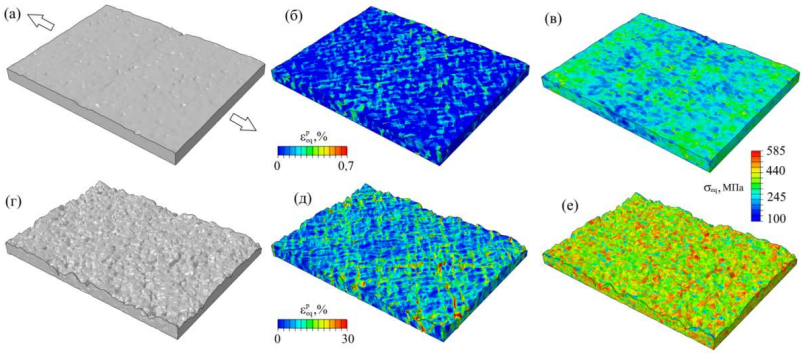


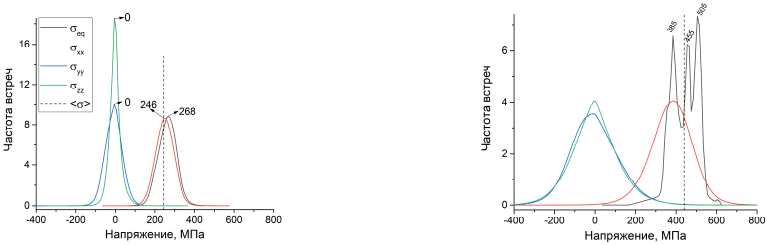
Рисунок 8 – Картины деформационного рельефа (а, г), эквивалентные пластические деформации (б, д) и эквивалентные поля напряжений (в, е), для 0,22% (а-в) и 5% (г-е) деформации (вертикальные смещения сетки масштабированы с коэффициентом 3)

По мере развития пластической деформации в формирование деформационного рельефа включаются не отдельные зерна, а зеренные кластеры, образуя более крупные неровности поверхности. Коллективное смещение групп зерен позволяет им приспосабливаться к большей деформации, что увеличивает интенсивность рельефа. Хотя отдельные зерна в этих неровностях все еще деформируются дислокационными механизмами, коллективные смещения групп зерен являются недислокационным явлением и классифицируются как явление мезоуровня. На начальных степенях пластической деформации такие мезоскопические неровности появляются практически одновременно с микронеровностями и формируются группами из 2-3 зерен. При дальнейшем растяжении в формирование складок поверхности вовлекается все большее число зерен, в результате чего деформационный рельеф становится еще более выраженным, что показано на рисунке 8г.

Представленные на рисунке 8д распределения интенсивности пластических деформаций показывают образовавшиеся полосы локализации, как на поверхности, так и внутри материала. Эти полосы проходят через зерна вне зависимости от их ориентации, в связи с чем рассматриваются как явления мезоуровня. Стоит отметить, что деформационный рельеф связан со смещениями поверхности, а деформации вычисляются как градиент смещений. Поэтому величина пластической деформации будет выше в областях пиков и впадин поверхности. Послойный анализ полей пластических деформаций показал, что мезомасштабные полосы, наблюдаемые на поверхности, являются видимой частью областей локализации деформации, формирующихся в объеме материала.

Несмотря на то, что макроскопически только компоненты тензора напряжений вдоль оси нагружения не равны нулю, на микро- и мезоуровне все

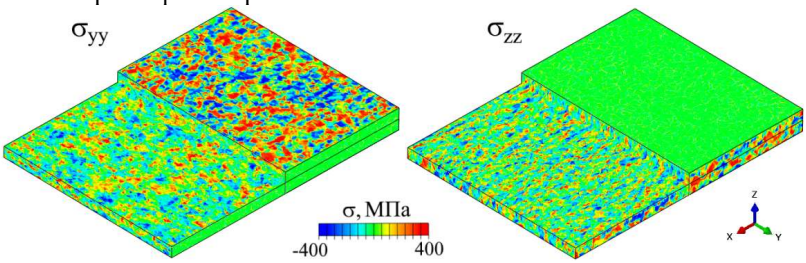
компоненты могут вносить ненулевой вклад в деформацию. В качестве примера распределения частот встреч диагональных компонент тензоров напряжений и интенсивностей напряжений приведены на рисунке 9 для 0,22% и 5% деформации. Согласно этим распределениям значительная часть зерен испытывает напряжения, отклоняющиеся от среднего значения.



(а) (б)

Рисунок 9 – Распределения частот встреч компонент тензоров напряжений в модели при растяжении до 0,22% (а) и 5% (б)

Для сохранения равновесия в условиях одноосного нагружения средние значения напряжений, действующих перпендикулярно оси растяжения (σ_{yy} и σ_{zz}), должны быть равны нулю, что подтверждается приведенными данными. При этом существенное количество зерен испытывает положительные и отрицательные напряжения, соответствующие растяжению и сжатию. Ненулевые локальные напряжения, действующие со стороны объема в направлении перпендикулярно плоскости поверхности (рисунок 10б), связаны с соответствующими деформациями и смещениями, что приводит к образованию выраженного рельефа поверхности.



(а) (б)

Рисунок 10 – Компоненты тензора напряжений, действующие перпендикулярно оси растяжения

В разделе 4.2 исследуется влияние остроты базисной текстуры титана на локализацию пластической деформации, эволюцию напряженно-деформированного состояния и деформационного рельефа на свободной поверхности. Было рассмотрено 4 модельных поликристалла, характеризующихся одной и той же геометрией зерен, но с различными кристаллографическими ориентациями. Ориентации зерен в четырех структурах

задавались четырьмя наборами углов Эйлера для задания отклонения призматических осей зерен относительно ND в диапазонах ± 10˚, ± 20˚, ± 40˚ и ± 60˚, соответственно. В дальнейшем эти модели обозначены двумя заглавными буквами, обозначающими базисную текстуру (BT), и цифрами, обозначающими угол рассеяния текстуры.

На рисунке 11 представлены картины деформационного рельефа и пластических деформаций при растяжении до 15% и эволюция профилей поверхности. Чем меньше угол рассеяния, тем более выражена базисная текстура. Из рисунков для образца BT10 видно, что выраженная базисная текстура приводит к подавлению деформационного рельефа как на микроуровне, где он развивается за счет смещений отдельных зерен, так и на мезоуровне, где рельеф формируется за счет смещения групп зерен.

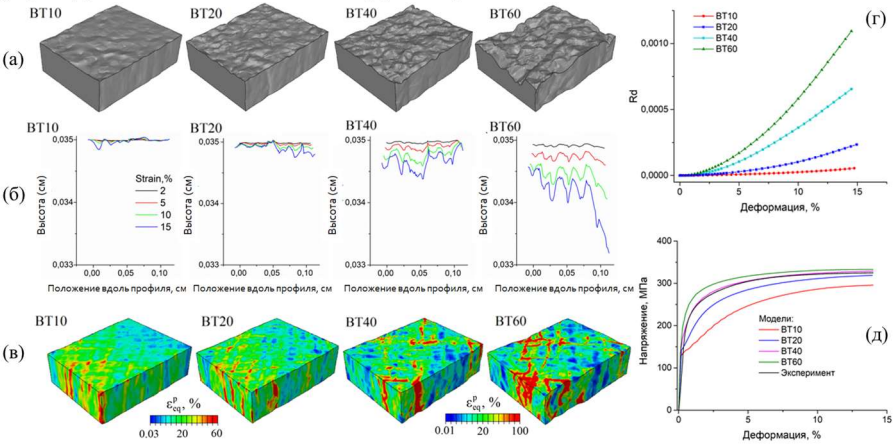


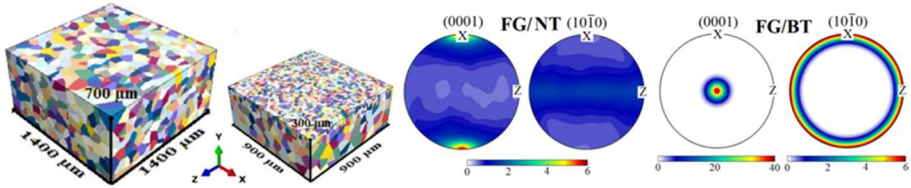
Рисунок 11 – Деформационный рельеф (а), профили шероховатости (б), локализация пластической деформации (в), зависимость параметра интенсивности деформационного рельефа от степени деформации (г) и кривые нагружения (д)

Базисная ориентация зерен влияет на способность материала деформироваться перпендикулярно оси нагружения. При этом призматический сдвиг приводит к образованию мезополос локализации пластической деформации. С увеличением угла отклонения деформационный рельеф на микро- и мезоуровнях становится более выраженным, а расстояние между пиками и впадинами постепенно увеличивается. Наряду с микрорельефом мезоскопические складки четко выделяются на профилях поверхности.

Эти выводы подтверждаются зависимостями параметра интенсивности деформационного рельефа от степени деформации (рисунок 11г). В случае более выраженной базисной текстуры зерна обладают близкими ориентациями и ведут себя как монокристалл. Границы зерен вносят незначительный вклад в развитие неоднородных напряжений на уровне зерен, но области концентрации напряжений формируются на большем масштабном уровне. Поэтому для

моделей с выраженной базисной текстурой кривые нагружения лежат ниже (рисунок 11д).

В разделе 4.3 численно исследуется индивидуальное и комбинированное влияние размера зерна и текстуры поверхностного слоя на эволюцию напряженно-деформированного состояния и деформационного рельефа. На основе экспериментальных данных были сгенерированы две модельные микроструктуры с равноосными зернами, характерными для основного материала (рисунок 12а), и с измельченными зернами в поверхностном слое, характерными для титана, модифицированного ультразвуковой обработкой (рисунок 12б). Поверхностным зернам модельных микроструктур в различных комбинациях были заданы два набора кристаллографических ориентаций, задающие либо отсутствие текстуры (Nontextured – NT) (рисунок 12в), либо базисную текстуру (Basal texture – BT) (рисунок 12г). Таким образом, были проведены четыре серии расчетов для модельных микроструктур с крупными зернами (Coarse grains – CG) и мелкими зернами (Fine grains – FG) в поверхностных слоях. Во всех случаях объемным зернам присваивались случайные ориентации, задающие отсутствие текстуры, а поверхностный слой был либо нетекстурированный, либо характеризовался базисной текстурой (Таблица 1).



(а) (б) (в) (г)

Рисунок 12 – Модельные микроструктуры с крупными (а) и мелкими (б) зернами в поверхностном слое и полюсные фигуры для нетекстурированного (в) и текстурированного (г) поверхностного слоя

Таблица 1 – Параметры микроструктур поверхностно-модифицированного титана

Модель	Текстура поверхностного слоя	Средний размер зерна в поверхностном слое	Количество зерен в поверхностном слое	Количество зерен в объеме
CG/NT	нет текстуры	70 мкм	400	3600
CG/BT	базисная текстура			
FG/NT	нет текстуры	20 мкм	5000	1000
FG/BT	базисная текстура			

Было получено, что измельчение размера зерна, сопровождающееся увеличением площади межзеренных границ и уменьшению их радиуса кривизны, приводит, соответственно, к увеличению областей концентрации напряжений вблизи границ и локализации пластической деформации.

На текстурированной поверхности пластическая деформация локализуется в виде мезополос некристаллографического сдвига, проходящих через всю

поверхность независимо от ориентации зерен и лежащих под углом 45° относительно оси растяжения. На боковых гранях образца мезополосы остаются перпендикулярными оси растяжения в течение всего процесса растяжения. В образцах без текстуры наблюдается обратная картина: на свободной поверхности мезополосы перпендикулярны оси растяжения, а на боковых гранях мезополосы лежат под углом 45-50°. В нетекстурированных поликристаллах выделяется два характерных масштаба рельефных формирований. На более мелком масштабе наблюдается рельеф «апельсиновой корки», связанный со смещением отдельных зерен друг относительно друга перпендикулярно свободной поверхности (рисунок 13, FG/NT). При этом размер образующихся впадин напрямую связан с размером зерна в поверхностном слое: чем меньше зерно, тем мельче впадины и тем больше их количество. Наряду с рельефом «апельсиновой корки» на поверхности формируются мезомасштабные складки, образованные в результате коллективных смещений групп зерен. В моделях с крупным зерном (рисунок 13, CG/NT) наблюдается хорошо выраженный деформационный рельеф на мезоуровне в виде складок, лежащих перпендикулярно оси нагружения. В модели с мелкозернистой структурой поверхности (рисунок 13, FG/NT) мезорельеф гораздо менее выражен на ранней стадии деформации и становится все менее заметным при дальнейшем нагружении, при этом вся поверхность испытывает волнистость на более крупном масштабе. Так как зерна с базисной текстурой не способны пластически деформироваться перпендикулярно поверхности, то основным механизмом пластической деформации является сдвиг параллельно плоскости поверхности. По результатам расчетов сделан вывод о том, что одновременное измельчение зерна и базисная текстура в поверхностном слое подавляют деформационный рельеф как на микро-, так и на мезоуровне. Размер зерна оказывает меньшее влияние на формирование деформационного рельефа по сравнению с текстурой.

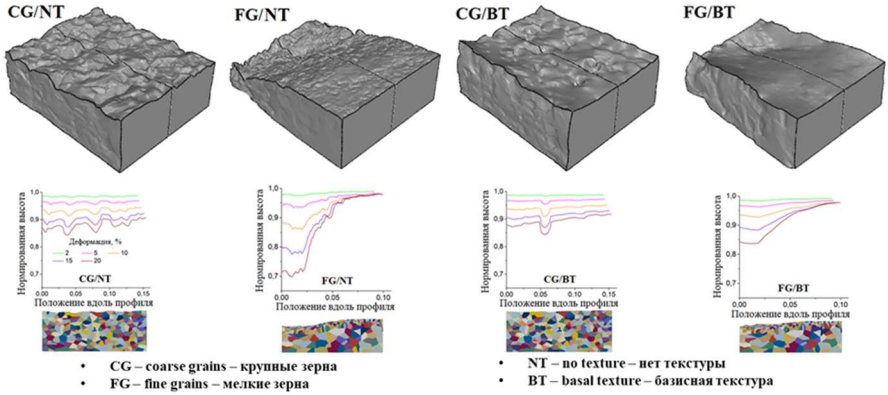


Рисунок 13 – Деформационный рельеф в исследуемых образцах при 20% деформации и эволюция профилей поверхности вдоль центральных линий образцов. Соответствующие микроструктуры центральных поперечных сечений показаны под профилями

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе анализа литературных данных, построения численной модели, выполнения экспериментов и численного моделирования и последующего анализа полученных результатов были решены все поставленные задачи и достигнута цель, поставленная в диссертационной работе.

На основе численного и экспериментального анализа получены следующие результаты и выводы:

1. Разработана модель деформационного поведения α-титана с явным учетом зеренной структуры и геометрии скольжения в ГПУ кристаллах. Модель корректно воспроизводит деформационные явления на мезоуровне, включая формирование деформационного рельефа. Показано, что моделирование без учета пирамидальных систем скольжения приводит к завышенным значениям локальных напряжений в единичных зернах, а также завышенным макроскопическим напряжениям.

2. Показано, что для численного воспроизведения деформационного рельефа на мезоуровне размер представительного объема будет определяться степенью деформации, приложенной к модели. Модель способна адекватно воспроизводить деформационное поведение материала на мезоуровне до тех пор, пока масштаб локализации пластической деформации не становится соизмеримым с размером модели. Показано, что модель, содержащая порядка 1000 зерен, может быть успешно использована для анализа формирования и развития деформационного рельефа на ранних стадиях деформирования (до 10%), где рельеф образуется за счет коллективных смещений групп из 2-5 зерен. Это позволяет сократить вычислительные затраты без потери информативности и точности результатов. Для моделирования мезоскопического деформационного рельефа на более поздних стадиях деформации, где в формирование рельефных складок вовлекаются группы из 5-10 и более зерен необходимо, соответственно, использовать модели большего размера.

3. Разработана методика аттестации поверхности пластически деформируемых поликристаллов в терминах безразмерного параметра интенсивности деформационного рельефа R_D, представляющего собой отношение длины профиля поверхности к длине его проекции. Выявлена сильная корреляция параметра R_D со степенью пластической деформации на мезоуровне в условиях одноосного растяжения с коэффициентом детерминации 0,84-0,99.

4. Показано, что кристаллографическая текстура существенно влияет на картины мезоскопического деформационного рельефа. Пластическая деформация в образцах с базисной текстурой затруднена в направлении, перпендикулярном свободной поверхности, что приводит к подавлению деформационного рельефа на микро- и мезоуровнях. Ориентация мезополос некристаллографического сдвига контролируется кристаллографической текстурой. На текстурированной поверхности пластическая деформация локализуется в виде мезополос, лежащих под углом 45° относительно оси растяжения. На боковых гранях образца

мезополосы остаются перпендикулярными оси растяжения в течение всего процесса растяжения. В образцах без текстуры наблюдается обратная картина: на свободной поверхности мезополосы перпендикулярны оси растяжения, а на боковых гранях мезополосы лежат под углом 45-50°.

5. Показано, что измельчение размера зерна, сопровождающееся увеличением площади межзеренных границ и уменьшением их радиуса кривизны, приводит, соответственно, к увеличению областей концентрации напряжений вблизи границ и локализации пластической деформации. Размер образующихся впадин микрорельефа напрямую связан с размером зерна в поверхностном слое: чем мельче зерно, тем меньше впадины и тем больше их количество. Одновременное измельчение зерна и базисная текстура в поверхностном слое подавляют деформационный рельеф как на микро-, так и на мезоуровне. Размер зерна оказывает меньшее влияние на формирование деформационного рельефа по сравнению с текстурой.

Было выявлено, что характеристики деформационного рельефа коррелируют со степенью накопленной пластической деформации в плоскости растяжения и, таким образом, могут служить для раннего прогноза локализации деформации и разрушения на макроуровне. Перспективными представляются дальнейшие исследования, посвященные анализу возможности использования поверхностных слоев из титана и других гексагональных металлов в качестве материалов-свидетелей для оценки состояния нагруженных конструкций.

СПИСОК РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

1. **Емельянова Е. С.** Численное исследование вкладов различных систем скольжения в деформационный отклик поликристаллического титана / Е. С. Емельянова, В. А. Романова, Р. Р. Балохонов, М. Писарев, О. С. Зиновьева // Физическая мезомеханика. – 2020. – Т. 23, № 4. – С. 68–81. – 0,7 / 0,14 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Emelianova E. S. A Numerical Study of the Contribution of Different Slip Systems to the Deformation Response of Polycrystalline Titanium / **E. S. Emelianova**, V. A. Romanova, R. R. Balokhonov, M. Pisarev, O. S. Zinovieva // Physical Mesomechanics. – 2021. – Vol. 24, is. 2. – P. 166–177. – DOI: 10.1134/S1029959921020065.

2. **Емельянова Е. С.** Локализация пластической деформации в поликристаллическом титане. Численное моделирование / Е. С. Емельянова, В. А. Романова, Р. Р. Балохонов, М. В. Сергеев // Известия вузов. Физика. – 2019. – Т. 62, № 9 (741). – С. 3–14. – 0,78 / 0,19 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Emelianova E. S. Plastic Strain Localization in Polycrystalline Titanium. Numerical Simulation / E. S. Emelianova, V. A. Romanova, R. R. Balokhonov, M. V. Sergeev // Russian Physics Journal. – 2020. – Vol. 62, № 9. – P. 1539–1551. – DOI: 10.1007/s11182-020-01874-2.

3. Романова В. А. О решении квазистатических задач микро- и мезомеханики в динамической постановке / В. А. Романова, Р. Р. Балохонов, Е. Е. Батухтина, **Е. С. Емельянова**, М. В. Сергеев // Физическая мезомеханика. – 2018. – Т. 21, № 2. – С. 68–79. – 0,67 / 0,13 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Romanova V. A. On the Solution of Quasi-Static Micro- and Mesomechanical Problems in a Dynamic Formulation / V. A. Romanova, R. R. Balokhonov, E. E. Batukhtina, **E. S. Emelianova**, M. V. Sergeev // Physical Mesomechanics. – 2019. – Vol. 22, № 4. – P. 296–306. – DOI: 10.1134/S1029959919040052.

4. Romanova V. Quantification of Mesoscale Deformation-Induced Surface Roughness in α-Titanium / V. Romanova, **E. Emelianova**, M. Pisarev, O. Zinovieva, R. Balokhonov // Metals. – 2023. – Vol. 13, is. 2. – Article number 440. – 18 p. – URL: https://www.mdpi.com/2075-4701/13/2/440 (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.3390/met13020440. – 1,31 / 0,26 а.л. (*Web of Science*).

5. **Emelianova E.** A microstructure-based mechanical model of deformation-induced surface roughening in polycrystalline α-titanium at the mesoscale / E. Emelianova, V. Romanova, O. Zinovieva, M. Pisarev, R. Balokhonov // Mechanics of Advanced Materials and Structures. – 2022. – Vol. 29, is. 28. – P. 7364–7374. – DOI: 10.1080/15376494.2021.1995916. – 1,14 / 0,23 а.л. (*Web of Science*).

6. **Emelianova E.** The effects of surface-layer grain size and texture on deformation-induced surface roughening in polycrystalline titanium hardened by ultrasonic impact treatment / E. Emelianova, V. Romanova, O. Zinovieva, R. Balokhonov // Materials Science and Engineering A. – 2020. – Vol. 793. – Article number 139896. – 12 p. – URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509320309680 (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1016/j.msea.2020.139896. – 0,73 / 0,18 а.л. (*Web of Science*).

7. Romanova V. Numerical study of the texture effect on deformation-induced surface roughening in titanium polycrystals / V. Romanova, R. Balokhonov, **E. Emelianova**, M. Pisarev, E. Dymnich // Engineering Failure Analysis. – 2020. – Vol. 110. – Article number 104437. – 10 p. – URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1350630719316553?via%3Dihub (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1016/j.engfailanal.2020.104437. – 0,59 / 0,12 а.л. (*Web of Science*).

8. Romanova V. Early prediction of macroscale plastic strain localization in titanium from observation of mesoscale surface roughening / V. Romanova, R. Balokhonov, **E. Emelianova**, E. Sinyakova, M. Kazachenok // International Journal of Mechanical Sciences. – 2019. – Vol. 161–162. – Article number 105047. – 12 p. – URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020740319309348 (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2019.105047. – 0,75 / 0,15 а.л. (*Web of Science*).

9. Romanova V. Microstructure-based simulations of quasistatic deformation using an explicit dynamic approach / V. Romanova, R. Balokhonov, **E. Emelianova**, O. Zinovieva, A. Zinoviev // Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering. – 2019. – Vol. 17, is. 2. – P. 243–254. – DOI: 10.22190/FUME190403028R. – 0,73 / 0,15 а.л. (*Web of Science*).

Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ:

10. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020664165. Модуль для расчета определяющих соотношений гексагональных кристаллов в конечно-элементном пакете ABAQUS/Explicit / Романова В. А. (RU), Балохонов Р. Р. (RU), **Емельянова Е. С.** (RU), Писарев М. (KZ). Заявка № 2020663310; дата поступления – 30.10.2020; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 09.11.2020.

11. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021668487. Программа расчета безразмерного параметра интенсивности деформационного рельефа по профилограммам поверхности / Романова В. А. (RU), Балохонов Р. Р. (RU), **Емельянова Е. С.** (RU), Шахиджанов В.С. (RU), Писарев М. (KZ). Заявка № 2021667931; дата поступления – 12.11.2021; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 17.11. 2021.

12. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022682243. Аттестация мезоскопического деформационного рельефа / Романова В. А. (RU), Писарев М. (KZ), **Емельянова Е. С.** (RU), Балохонов Р. Р. (RU). Заявка № 2022680909; дата поступления – 08.11.2022; дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ – 22.11.2022.

Статьи в сборниках материалов конференций, представленных в изданиях, входящих в Web of Science и / или Scopus:

13. **Emelianova E.** A review of deformation-induced roughness effects in metals / E. Emelianova, M. Pisarev, O. Zinovieva, V. Shakhidjanov // AIP Conference Proceedings. – 2022. – Vol. 2509, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Physical Mesomechanics. Materials with Multilevel Hierarchical Structure and Intelligent Manufacturing Technology 2022. Tomsk, Russian Federation, September 06–10, 2022. – Article number 020063. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2509/1/020063/2828108/A-review-of-deformation-induced-roughness-effects (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/5.0084720. – 0,25 / 0,06 а.л. (*Scopus*).

14. **Emelianova E.** The effect of texture sharpness on deformation-induced surface roughening in α-titanium / E. Emelianova, M. Pisarev, O. Zinovieva, V. Romanova // Procedia Structural Integrity. – 2021. – Vol. 35 : 2nd International Workshop on Plasticity, Damage and Fracture of Engineering Materials (IWPDF 2021). Ankara, Turkey, August 18–20, 2021. – P. 203–209. – DOI: 10.1134/S1029959919040052. – 0,44 / 0,11 а.л. (*Scopus*).

15. **Emelianova E.** Simulation of quasistatic deformation of polycrystals in terms of dynamics / E. Emelianova, M. Pisarev, V. Romanova, R. Balokhonov // AIP Conference Proceedings. – 2020. – Vol. 2310, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Physical Mesomechanics. Materials with Multilevel Hierarchical Structure and Intelligent Manufacturing Technology 2020. Tomsk, Russian Federation, October 05–09, 2020. – Article number 020082. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2310/1/020082/781374/Simulation-of-quasistatic-deformation-of (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/5.0034598. – 0,25 / 0,06 а.л. (*Web of Science*).

16. **Emelianova E.** Contribution of Different Slip Systems to the Deformation Behavior of Polycrystalline Titanium. Numerical Study / E. Emelianova, V. Romanova, R. Balokhonov, M. Pisarev // AIP Conference Proceedings. – 2020. – Vol. 2310, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Physical

Mesomechanics. Materials with Multilevel Hierarchical Structure and Intelligent Manufacturing Technology 2020. Tomsk, Russian Federation, October 05–09, 2020. – Article number 020083. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2310/1/020083/781371/Contribution-of-different-slip-systems-to-the (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/5.0034601. – 0,25 / 0,06 а.л. (*Web of Science*).

17. **Emelianova E.** The effect of a textured surface layer on deformation-induced surface roughening in titanium polycrystals / E. Emelianova, O. Zinovieva, M. Pisarev, E. Dymnich // AIP Conference Proceedings. – 2020. – Vol. 2310, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Physical Mesomechanics. Materials with Multilevel Hierarchical Structure and Intelligent Manufacturing Technology 2020. Tomsk, Russian Federation, October 05–09, 2020. – Article number 020084. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2310/1/020084/781613/The-effect-of-a-textured-surface-layer-on (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/5.0034612. – 0,25 / 0,06 а.л. (*Web of Science*).

18. Romanova V. On the definition of RVE size in simulations of mesoscale deformation-induced surface roughening in polycrystals / V. Romanova, R. Balokhonov, **E. Emelianova**, M. Pisarev, O. Zinovieva, V. Shakhidjanov // Procedia Structural Integrity. – 2021. – Vol. 31 : 4th International Conference on Structural Integrity and Durability, ICSID 2020. Dubrovnik, Croatia, September 14–18, 2020. – P. 64–69. – DOI: 10.1016/j.prostr.2021.03.010. – 0,37 / 0,06 а.л. (*Web of Science*).

19. **Emelianova E. S.** Plastic strain localization in surface-hardened titanium polycrystals / E. S. Emelianova, V. A. Romanova // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – Vol. 1459 : IX All-Russian Scientific conference with international participation «Current issues of Continuum mechanics and Celestial mechanics». Tomsk, Russian Federation, November 18–20, 2019. – Article number 012011. – 7 p. – URL: https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1459/1/012011 (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1088/1742-6596/1459/1/012011. – 0,44 / 0,22 а.л. (*Web of Science*).

20. Zinovieva O. Effects of grain size on surface roughening in deformed polycrystals / O. Zinovieva, **E. Emelianova**, T. Emelianova // AIP Conference Proceedings. – 2019. – Vol. 2167, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures 2019. Tomsk, Russian Federation, October 01–05, 2019. – Article number 020406. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2167/1/020406/788250/Effects-of-grain-size-on-surface-roughening-in (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/1.5132273. – 0,25 / 0,08 а.л. (*Web of Science*).

21. **Emelianova E.** Numerical study of the texture effect on plastic strain localization in polycrystalline titanium / E. Emelianova, V. Romanova, R. Balokhonov, M. Sergeev // AIP Conference Proceedings. – 2019. – Vol. 2167, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures 2019. Tomsk, Russian Federation, October 01–05, 2019. – Article number 020079. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2167/1/020079/888956/Numerical-study-of-the-

texture-effect-on-plastic (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/1.5131946. – 0,25 / 0,06 а.л. (*Web of Science*).

22. **Emelianova E.** Modeling the deformation behavior of titanium single crystals / E. Emelianova, V. Romanova, E. Dymnich, M. Pisarev // AIP Conference Proceedings. – 2019. – Vol. 2167, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures 2019. Tomsk, Russian Federation, October 01–05, 2019. – Article number 020080. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2167/1/020080/889056/Modeling-the-deformation-behavior-of-titanium (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/1.5131947. – 0,25 / 0,06 а.л. (*Web of Science*).

23. **Emelianova E.** The effect of a textured surface layer on the deformation behavior of polycrystalline titanium / E. Emelianova, V. Romanova, E. Dymnich, M. Pisarev // AIP Conference Proceedings. – 2019. – Vol. 2167, is. 1 : Proceedings of the International Conference on Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures 2019. Tomsk, Russian Federation, October 01–05, 2019. – Article number 020081. – 4 p. – URL: https://pubs.aip.org/aip/acp/article/2167/1/020081/889051/The-effect-of-a-textured-surface-layer-on-the (access date: 27.06.2023). – DOI: 10.1063/1.5131948. – 0,25 / 0,06 а.л. (*Web of Science*).

Издание подготовлено в авторской редакции.
Отпечатано на участке цифровой печати
Издательства Томского государственного университета
Заказ № 7590 от «03» ноября 2023 г. Тираж 100 экз.
г. Томск, Московский тр. 8, тел. (3822) 53-15-28
publish.tsu.ru