

# МОДЕЛИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ, ДВОЙНИКОВАНИЯ И МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭВОЛЮЦИИ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОВ ПОДВЕРГНУТЫХ ИНТЕНСИВНЫМ ДИНАМИЧЕСКИМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ

И. Н. БОРОДИН<sup>1-3</sup>, А. Е. МАЙЕР<sup>2</sup>, С. А. АТРОШЕНКО<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

<sup>3</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

### Экспериментальные исследования

- Ограниченный диапазон скоростей деформации
- Измерение макроскопических параметров

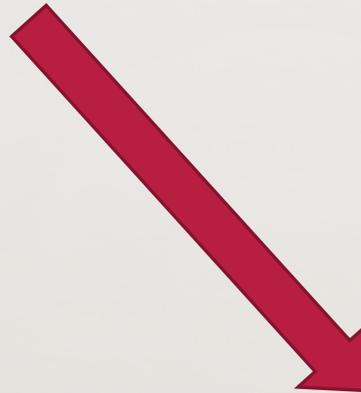
### Молекулярно-динамические исследования

- Большие скорости деформации
- Измерение энергий активации и микроскопических характеристик



### Эмпирические модели

- Обычно 5 и более подгоночных параметров
- Малая гибкость
- ***Не несут информации о развитии микроструктуры***



### Аналитические модели

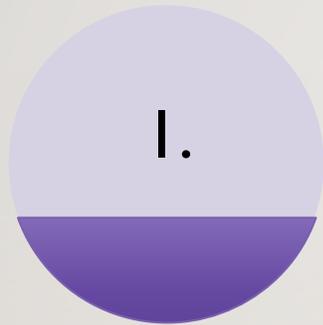
- Процессы в малых ансамблях дефектов
- ***Нельзя провести прямого сравнения с механическими испытаниями материала***



### Структурные модели

- Усреднение «элементарных» процессов по представительному объему
- Параметры и физика процессов из МД моделирования и теоретических моделей
- Не более пары подгоночных постоянных из экспериментов

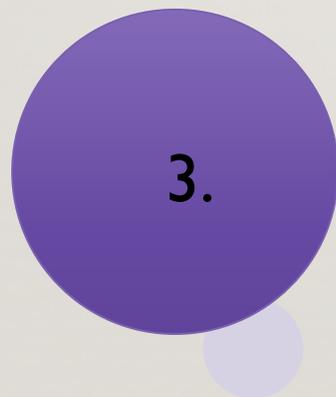
### 3 СТРУКТУРА ДОКЛАДА



1. Модели  
пластичности



2. Механические  
эффекты



3. Микроструктурные  
эффекты

# Уравнения механики сплошной среды

1. Уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i}$$

2. Уравнение движения

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad \sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + s_{ij}$$

3. Закон сохранения энергии

$$\rho \frac{dU}{dt} = \frac{P}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + s_{ik} \frac{dw_{ik}}{dt} - \frac{d}{dt} \left[ \rho_D \epsilon_D + N_{TW} S_{TW}^{(1)} \gamma_{SF} \right]$$

4. Девиаторы напряжения

$$\frac{ds_{ik}}{dt} = 2G \left( v_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik} v_{ll} - \frac{dw_{ik}^D}{dt} - \frac{dw_{ik}^{gb}}{dt} \right)$$

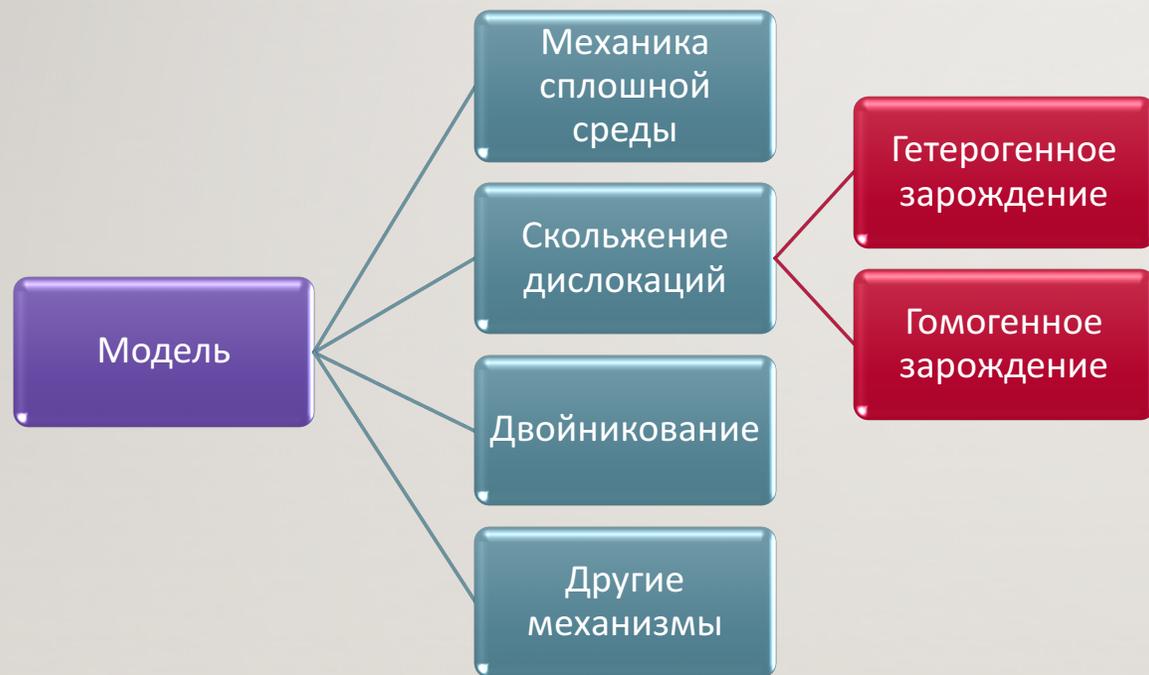
5. Уравнение состояния

$$p = p(\rho, U)$$

\*С.Н. Колгатин; А.В. Хачатурьянц

// ТВТ, 20 (3) 447 (1982)

# 5 МОДЕЛЬ ПЛАСТИЧНОСТИ



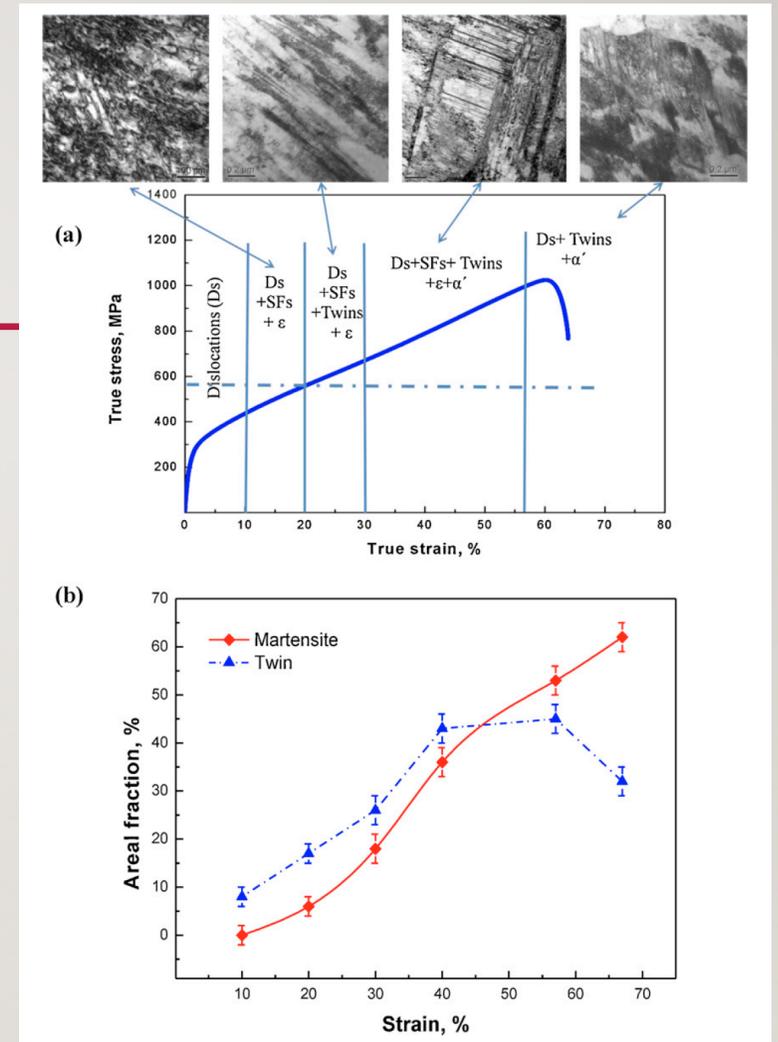
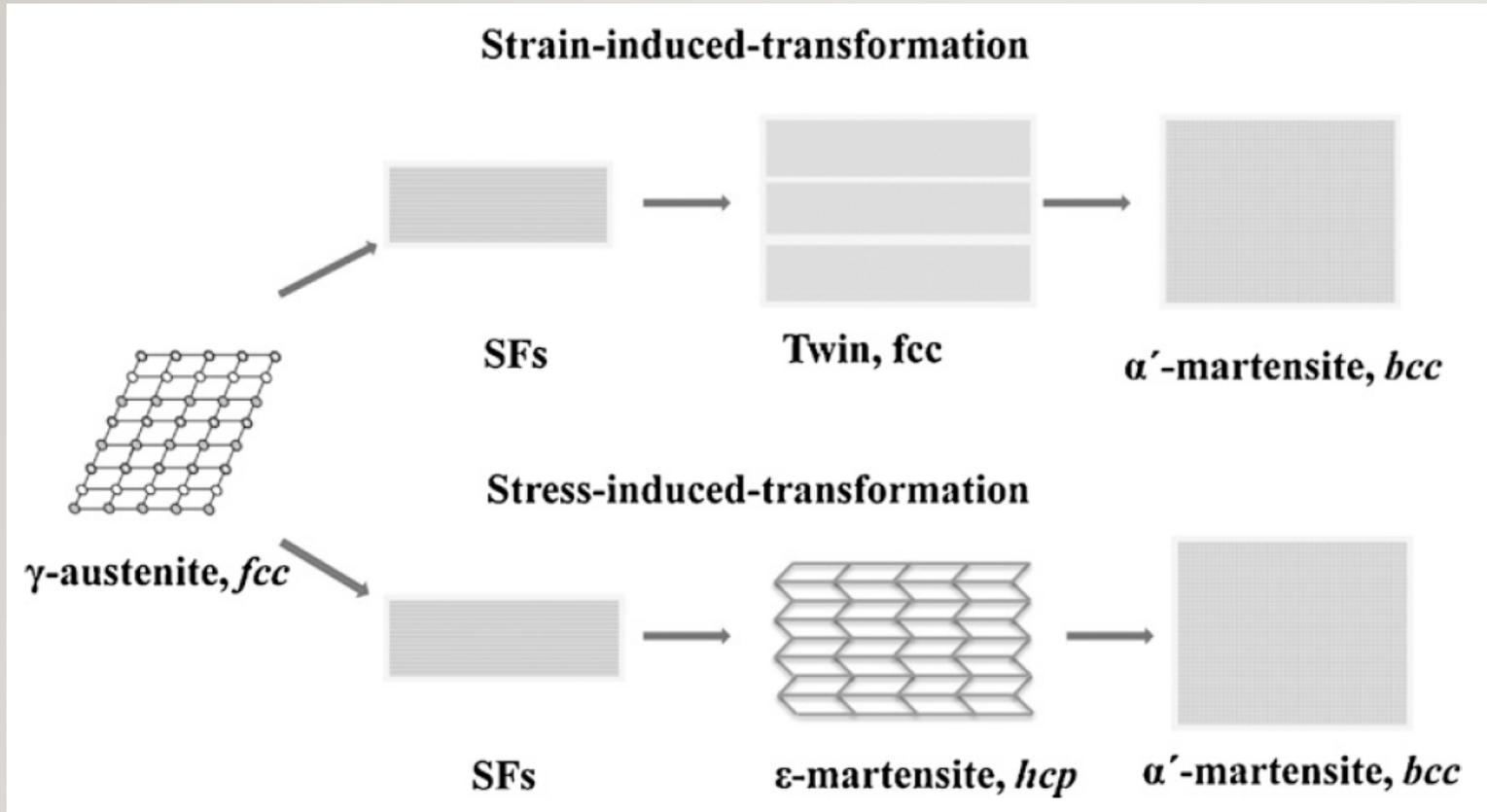
V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, A.P. Yalovets // Int. J. Plasticity, 27, 1294 (2011)  
 V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // Serf. Tech. 212, 79 (2012)  
 A.E. Mayer, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov, P.N. Mayer // J. Appl. Phys., 113, 193508 (2013)  
 E.N. Borodin, A.E. Mayer, P.N. Mayer // Int. J. Plasticity, 51, 188 (2013)  
 E.N. Borodin, A.E. Mayer // Tech. Phys., 58, 1159 (2013)  
 A.E. Mayer, E.N. Borodin, V.S. Krasnikov, P.N. Mayer // JPCS, 552, 012002 (2014)  
 V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // MSaEA, 619, 354 (2014)  
 E.N. Borodin, S.A. Atroshenko, A.E. Mayer // Tech. Phys., 59, 1163 (2014)  
 E.N. Borodin, A.E. Mayer // Int. J. Plasticity, 74, 141 (2015)  
 A.E. Mayer, E.N. Borodin // EPJC, 94, 04041 (2015)  
 E.N. Borodin, A.E. Mayer // JPCS, 653, 012042 (2015)  
 E.N. Borodin, A.E. Mayer // MSMSE, 24, 025013 (2016)

▶ Дислокации

▶ Двойники, мартенсит

$$\frac{dw_{ik}^D}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\beta} \rho_D^{\beta} (b_i^{\beta} n_j^{\beta} + b_j^{\beta} n_i^{\beta}) V_D^{\beta}$$

$$\frac{dw^{gb}}{dt} = \sum_{\gamma} \frac{d\alpha_{tw}^{\gamma}}{dt} (\tau_i^{\gamma} n_k^{\gamma} + \tau_k^{\gamma} n_i^{\gamma}) \epsilon_{TW}$$



Y.F. Shen, X.X. Li, X. Sun, Y.D. Wang, L. Zuo Twinning and martensite in a 304 austenitic stainless steel. //Mat.Sci.Engi. A 552 (2012) 514– 522.

# 7 КИНЕТИКА ДИСЛОКАЦИЙ И ДВОЙНИКОВ

## ▶ Дислокации

$$\frac{d\rho_D^\beta}{dt} = Q^+ - Q^-, \quad Q^- = k_\alpha b |V_D^\beta| (\rho_D^\beta)^2 - |V_D^\beta| \rho_D^\beta / d$$

$$Q^+ = \frac{\eta_E}{\varepsilon_D} \left\{ 2B \cdot c_t^2 \cdot \left[ \frac{1}{\sqrt{1 - (V_D^\beta / c_t)^2}} - 1 \right] + bY^\beta |V_D^\beta| \right\} \cdot \rho_D^\beta$$

$\eta_E$  - доля работы пластической деформации, запасаемая в структуре дефектов

## ▶ Двойники

$$\alpha^\gamma = \pi (R_{TW}^\gamma)^2 h_{TW}^\gamma N_{TW}^\gamma$$

$$\dot{N}_{TW} = \frac{Q^-}{4\pi\gamma_{SF}R_0}$$

# МОДЕЛЬ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ

## Динамика дислокаций

$$\frac{dw_{ik}^D}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\beta} \rho_D^{\beta} (b_i^{\beta} n_j^{\beta} + b_j^{\beta} n_i^{\beta}) V_D^{\beta}$$

$$\frac{m_0}{\left[1 - (V_D^{\beta} / c_t)^2\right]^{3/2}} \frac{d_D V_D^{\beta}}{dt} = \left( F_D^{\beta} - \frac{b \sigma_y^{\beta}}{2} \cdot \text{sign}(F_D^{\beta}) \right) - \frac{B_f \cdot V_D^{\beta}}{\left[1 - (V_D^{\beta} / c_t)^2\right]^{3/2}}$$

## Кинетическое уравнение

$$\frac{d\rho_D^{\beta}}{dt} = Q^+ - (\vec{\chi}^{\beta}, \nabla) [\rho_D^{\beta} \cdot V_D^{\beta}] - k_a b \cdot |V_D^{\beta}| \cdot (\rho_D^{\beta})^2 - \frac{\rho_D^{\beta} |V_D^{\beta}|}{d} + \frac{\rho_D^{\beta}}{\rho} \frac{d\rho}{dt}$$

$$Q^+ = \frac{\eta_E}{\varepsilon_D} \left\{ 2B \cdot c_t^2 \cdot \left[ \frac{1}{\sqrt{1 - (V_D^{\beta} / c_t)^2}} - 1 \right] + bY^{\beta} |V_D^{\beta}| \right\} \cdot \rho_D^{\beta}$$

# МОДЕЛЬ МЕХАНИЧЕСКОГО ДВОЙНИКОВАНИЯ

$$\alpha^\gamma = \pi (R_{TW}^\gamma)^2 h_{TW}^\gamma N_{TW}^\gamma$$

$$\dot{N}_{TW} = \frac{\dot{E}_{TW}^{(-)}}{4\pi\gamma_{SF} R_0} - N_{TW} \dot{R} \left( \frac{1}{\Delta} + \frac{1}{d} \right)$$

$$\dot{E}_{TW}^{(-)} = k_\alpha b |V_D| \rho_D^2 + \rho_D |V_D| / d$$

$$R_0^\gamma = \frac{\gamma_{SF}}{K} + \frac{\Phi}{\pi K} h_0^\gamma, \quad L = \frac{4\pi\gamma_{SF}^2}{3\Phi} \left( 1 - \frac{2\Phi}{\pi K} \right)$$

$$h_0^\gamma = 0.5 \left( \sqrt{L^2 + 4L/K} - L \right) \quad K = \sum_i \sum_k S_{ik} n_i^\gamma \tau_k^\gamma / \sqrt{2}$$

## Динамика роста двойников

$$F_R = \frac{4\pi}{\sqrt{2}} R_{tw}^\gamma h_{tw}^\gamma \sum_i \sum_k S_{ik} n_i^\gamma \tau_k^\gamma - 2\pi\gamma_{SF} (2R_{tw}^\gamma + h_{tw}^\gamma) - \Phi (h_{tw}^\gamma)^2$$

$$F_h = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} (R_{tw}^\gamma)^2 \sum_i \sum_k S_{ik} n_i^\gamma \tau_k^\gamma - 2\pi\gamma_{SF} R_{tw}^\gamma - 2\Phi R_{tw}^\gamma h_{tw}^\gamma$$

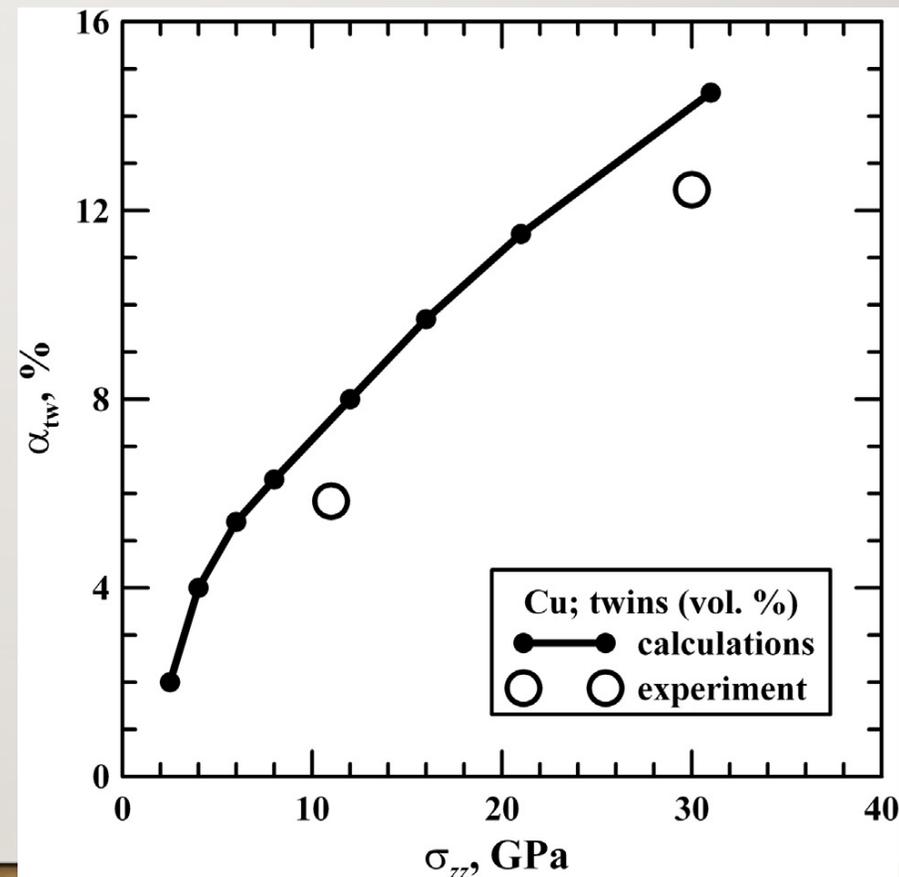
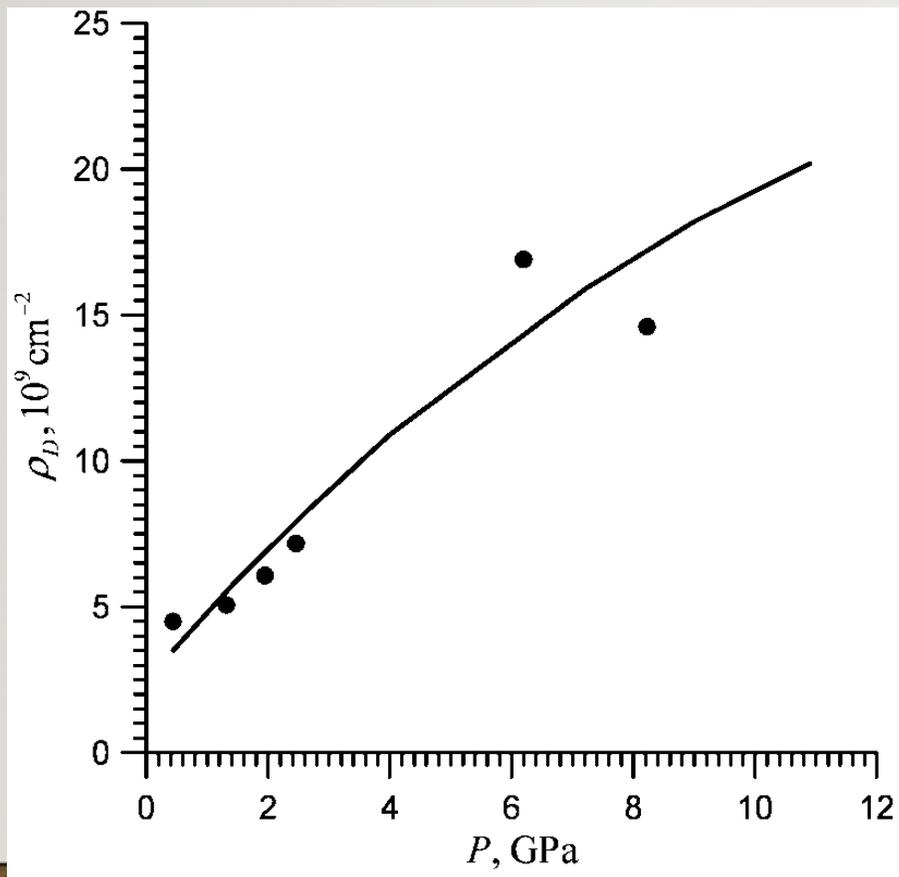
$$\Phi = \frac{2\pi^2 (2-\nu)}{3\sqrt{2} (1-\nu)} G$$

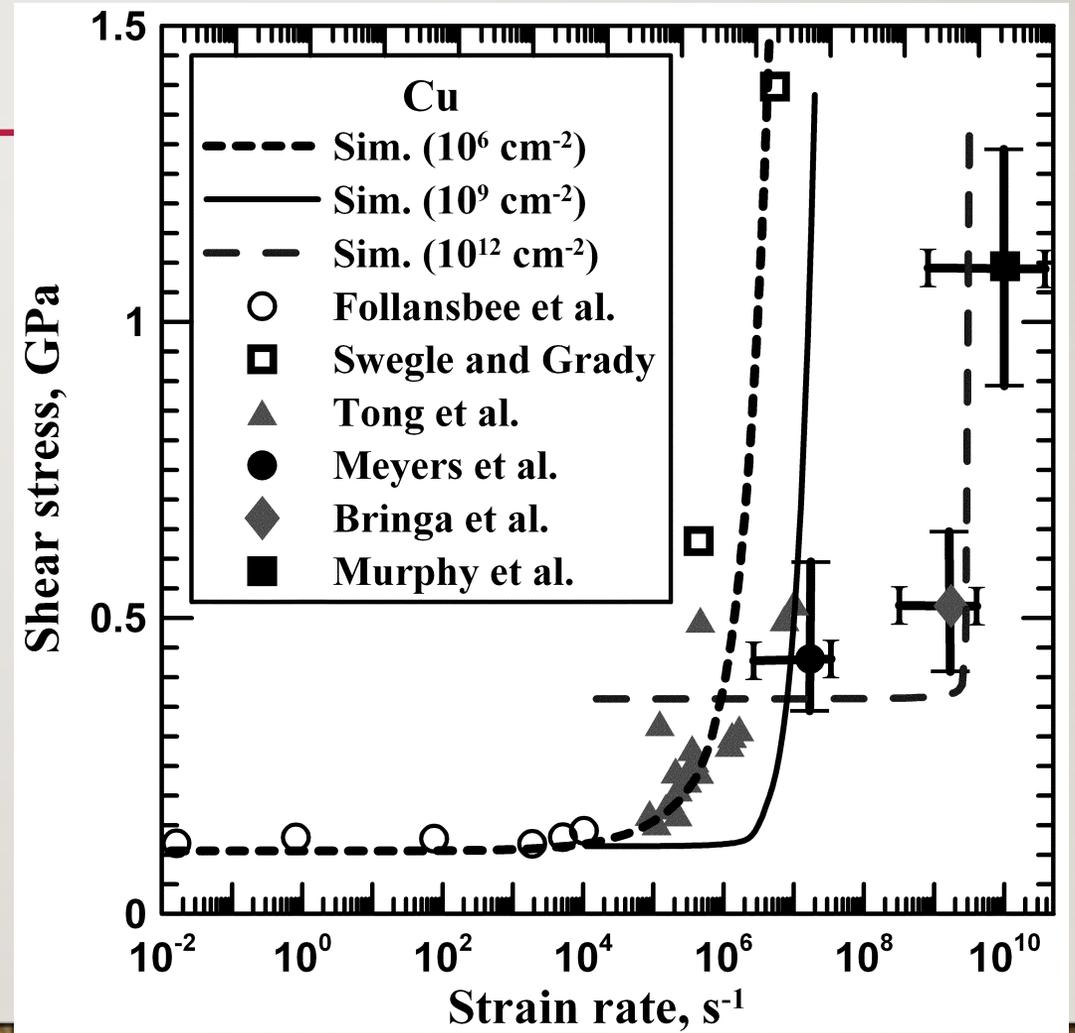
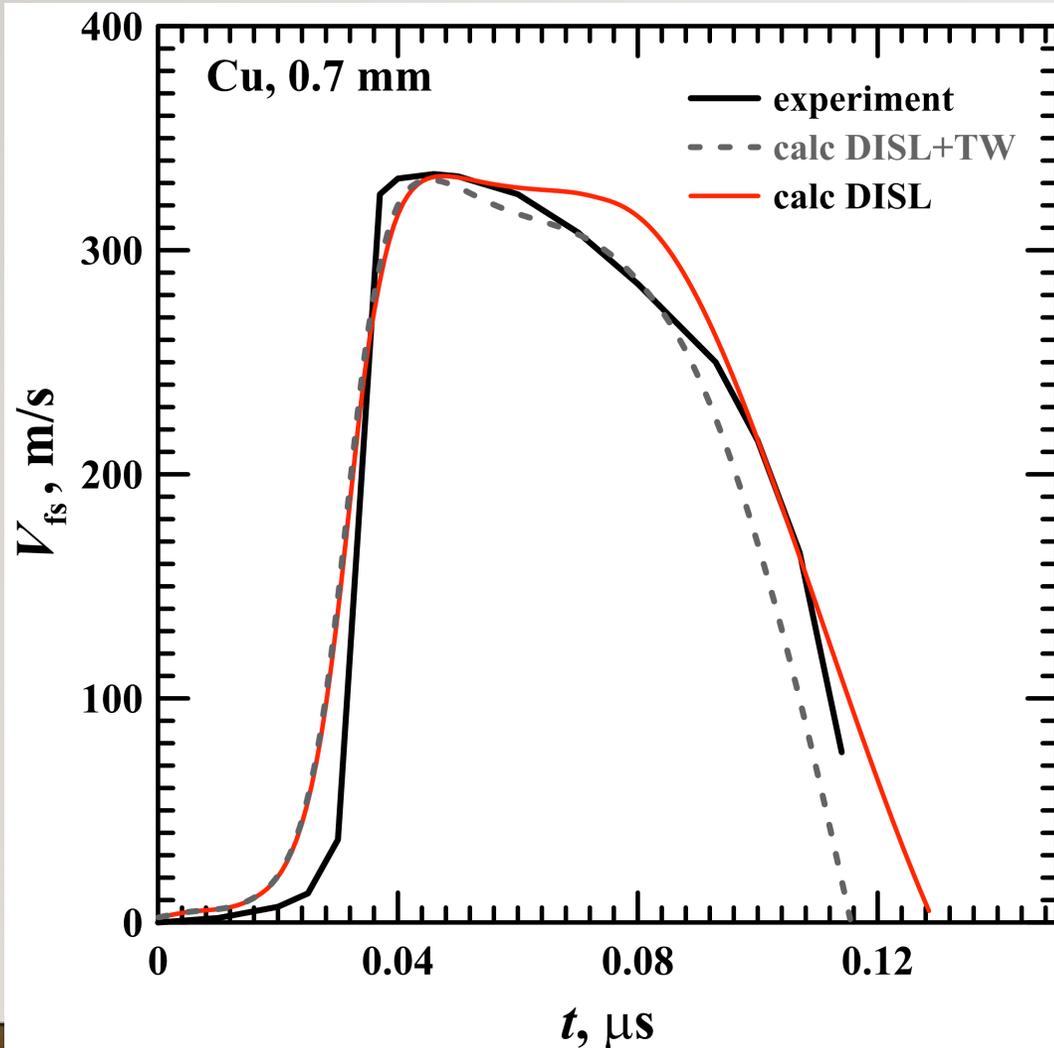


$$\dot{R}_{tw}^\gamma 2 \left( 1 - (\dot{R}_{tw}^\gamma / c_t)^2 \right)^{-3/2} = b F_R^\gamma \left( 2\pi R_{tw}^\gamma h_{tw}^\gamma B^{part} \right)^{-1}$$

$$\dot{h}_{tw}^\gamma \left( 1 - (R_{tw}^\gamma \dot{h}_{tw}^\gamma)^2 / (bc_t)^2 \right)^{-3/2} = b F_h^\gamma \left( \pi (R_{tw}^\gamma)^2 B^{part} \right)^{-1}$$

# 10 СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

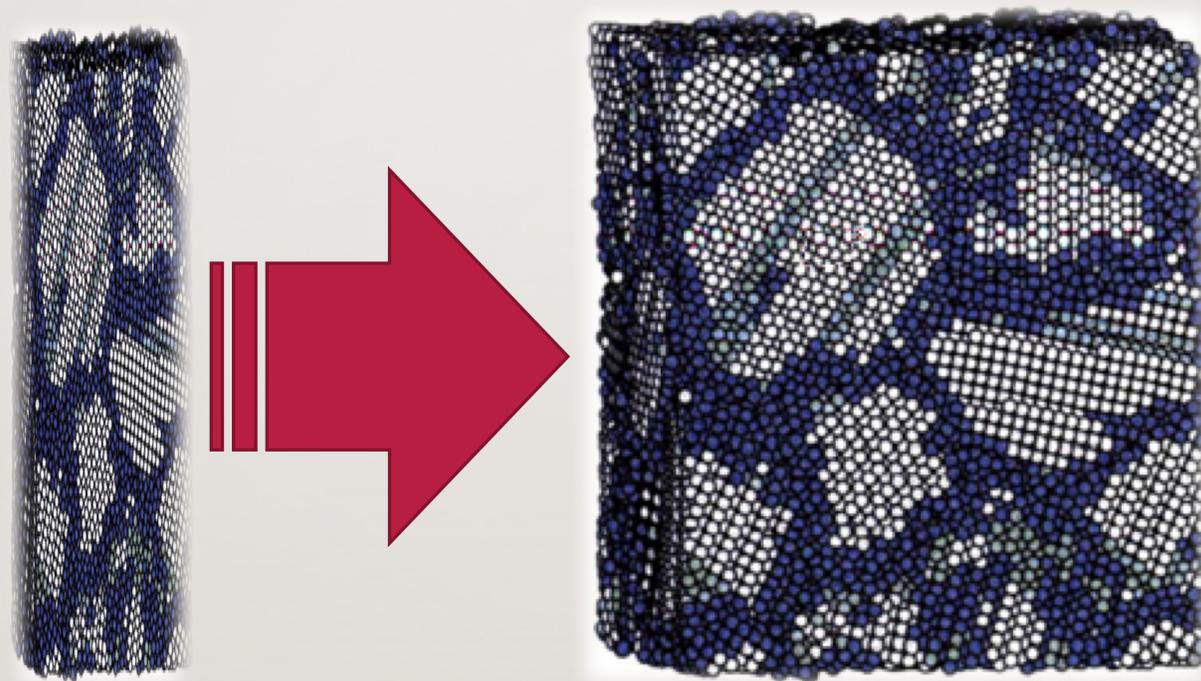




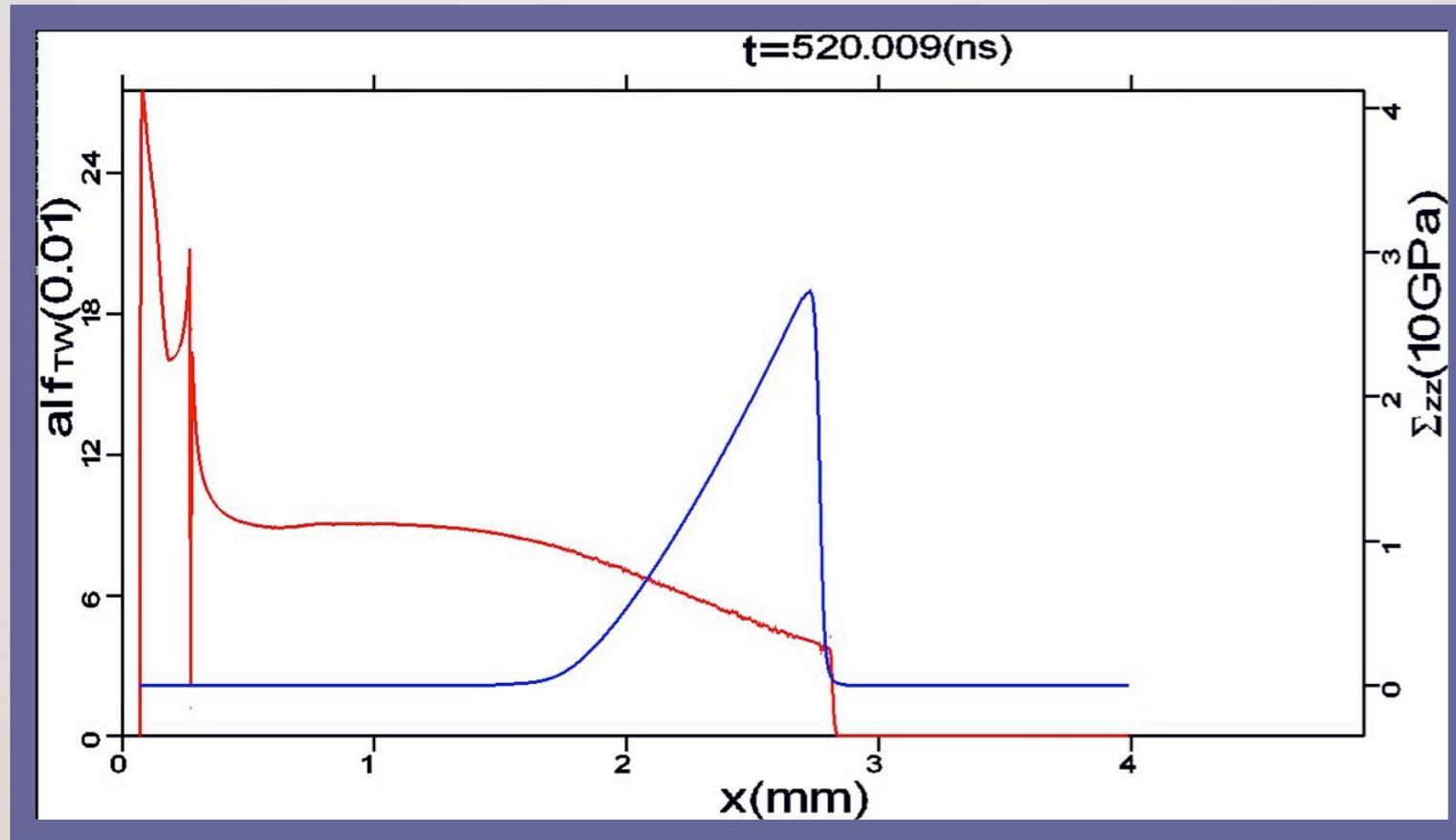
12

## Нагружение соударением с тонкими металлическими пластинами

---

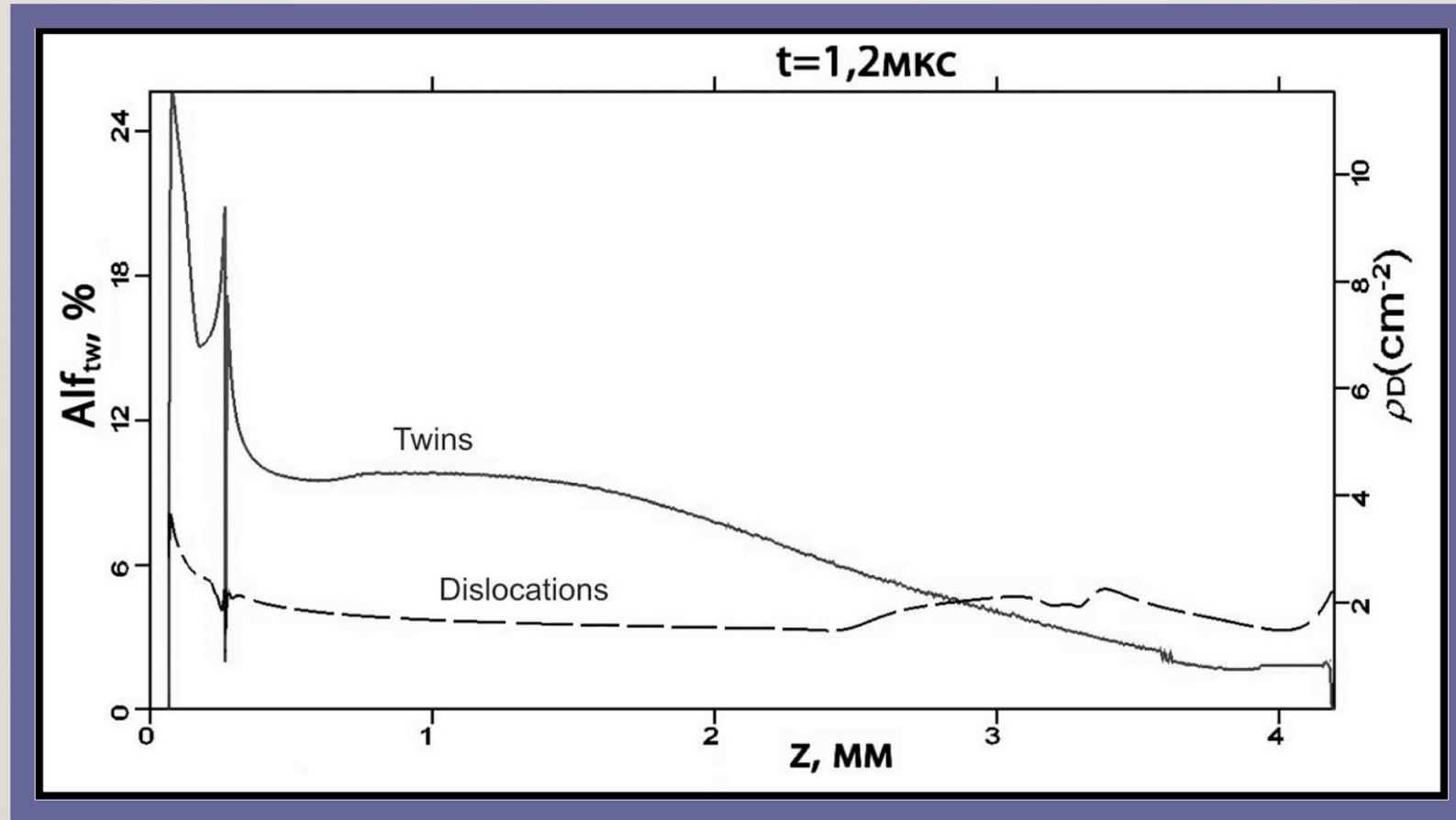


# УДАРНАЯ ВОЛНА И ОБЪЕМНАЯ ДОЛЯ ДВОЙНИКОВ В МЕДИ

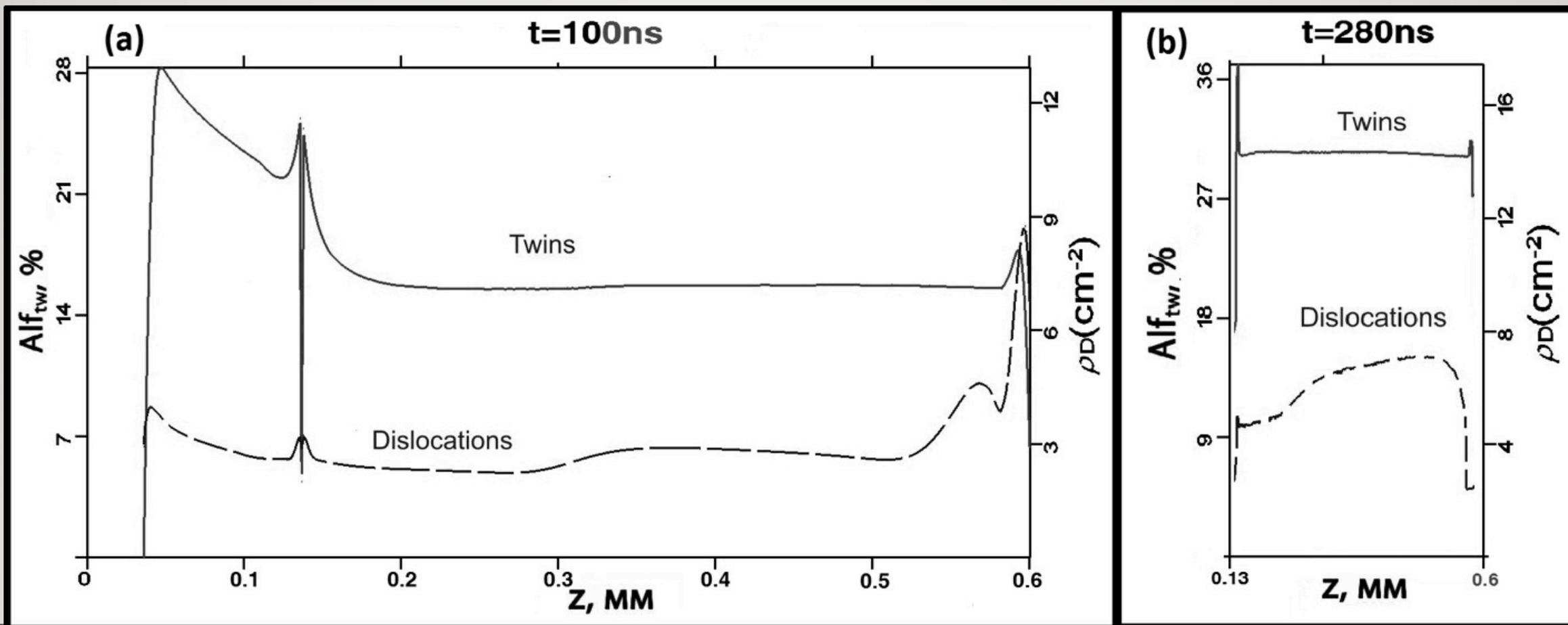


Медь, скорость ударника 1500 м/с, толщина ударника – 0.2мм, мишени – 4мм

# ПЛОТНОСТЬ ДИСЛОКАЦИЙ И ОБЪЕМНАЯ ДОЛЯ ДВОЙНИКОВ В МЕДИ

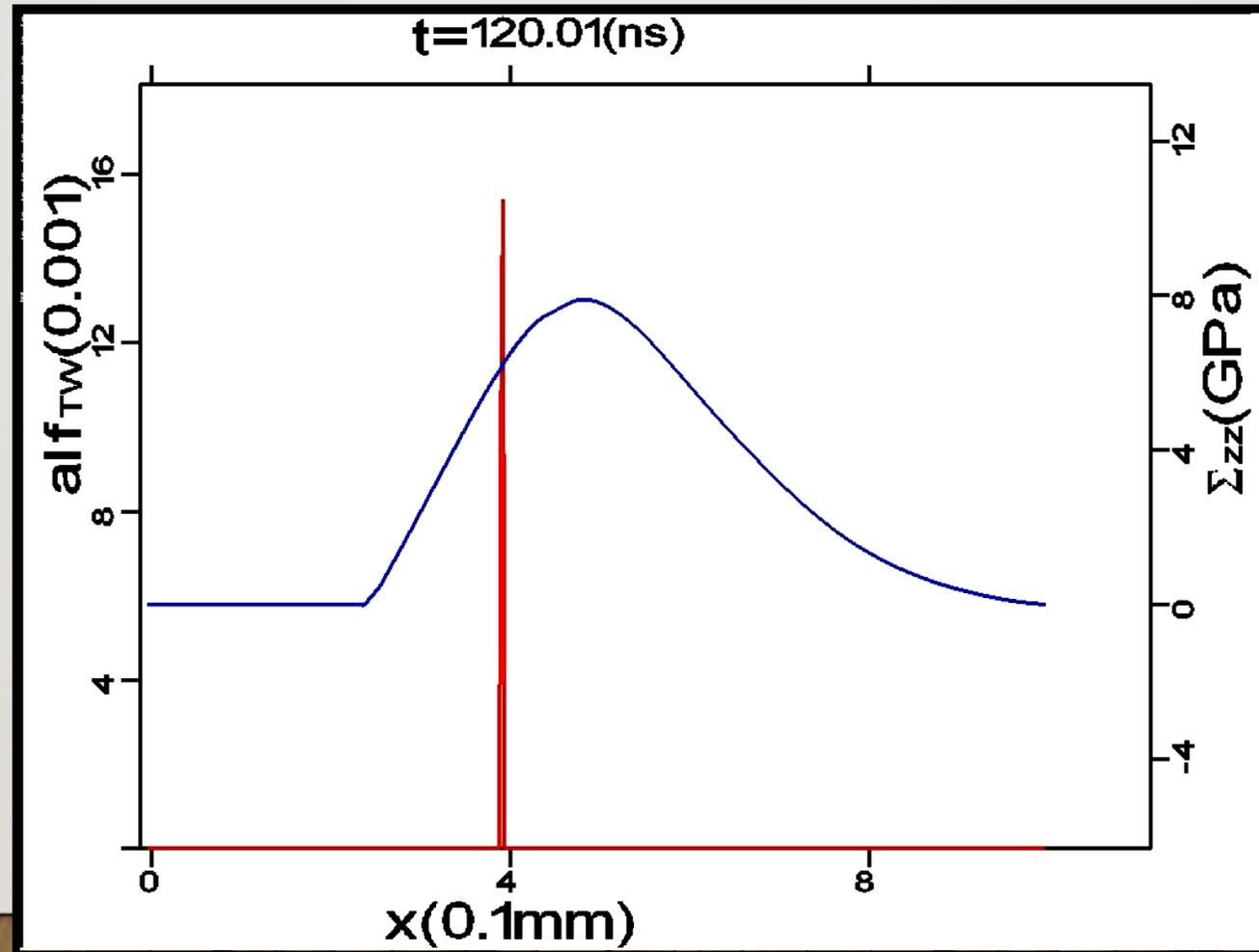


# 15 ЭФФЕКТ ОТРАЖЕНИЯ ВОЛНЫ НАПРЯЖЕНИЯ



# СЛУЧАЙ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

( аналогично облучению на *SINUS 7*, г.Томск )

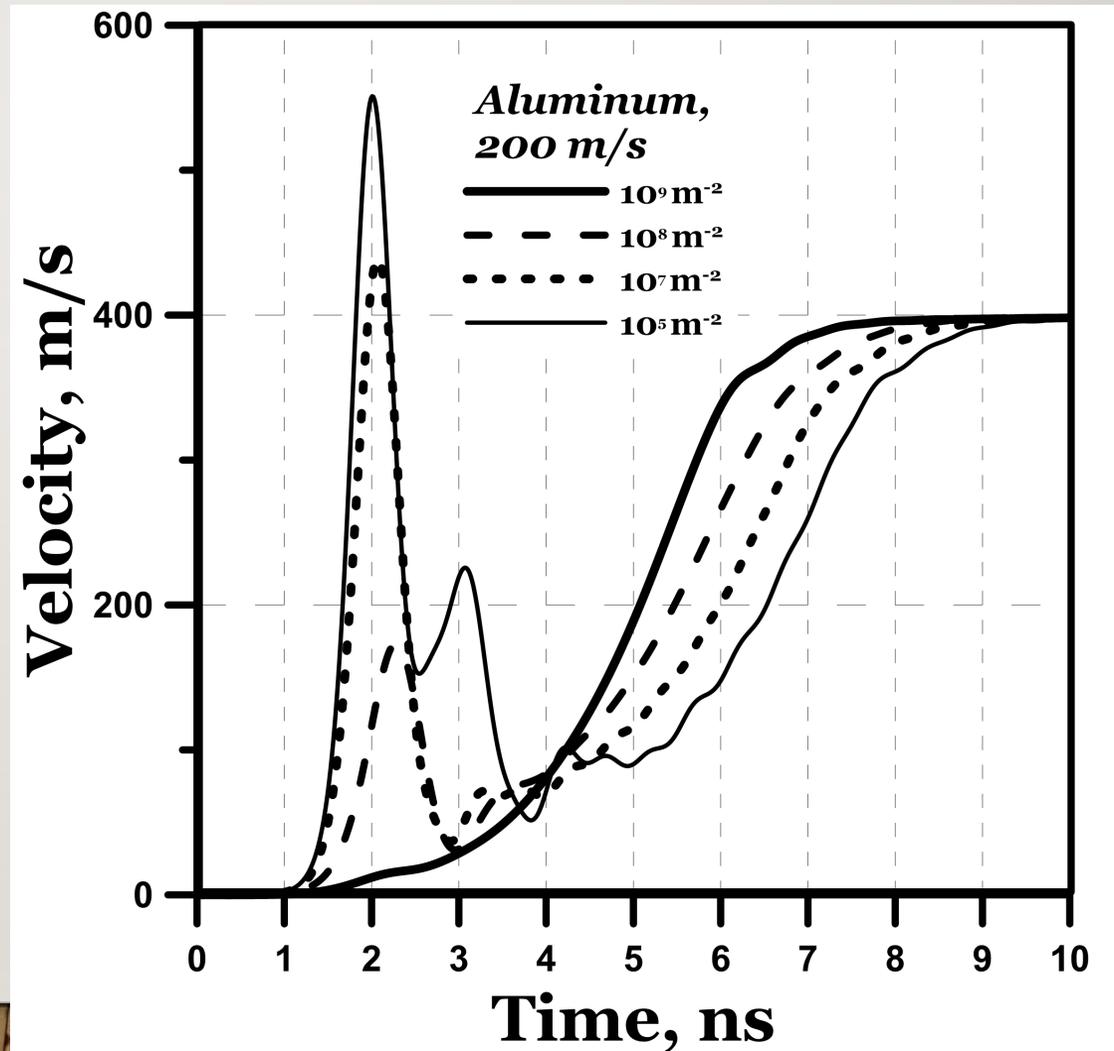
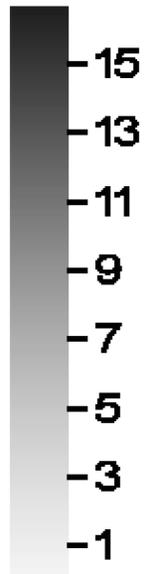


# ЗАТУХАНИЕ УПРУГОГО ПРЕДВЕСТНИКА

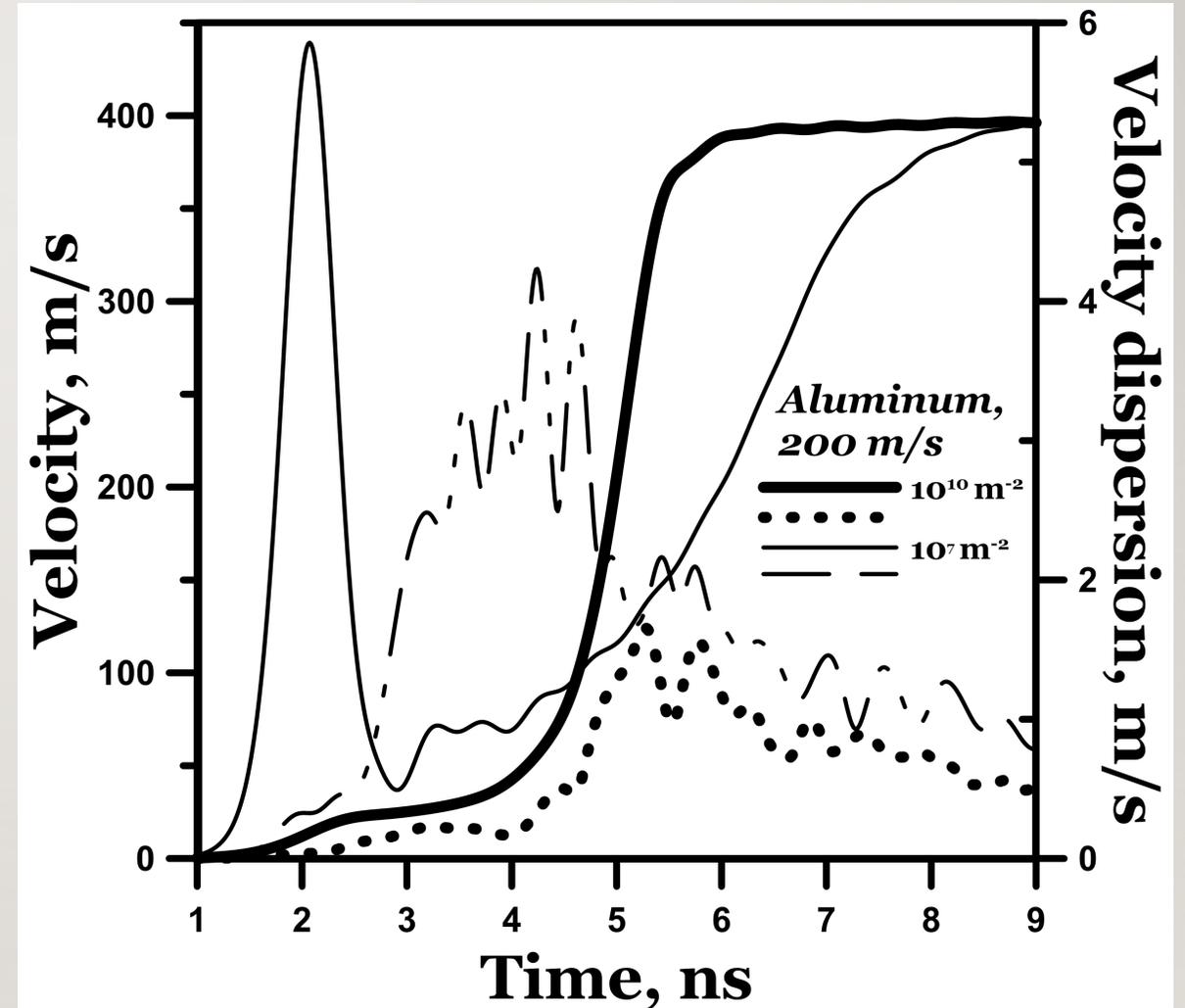
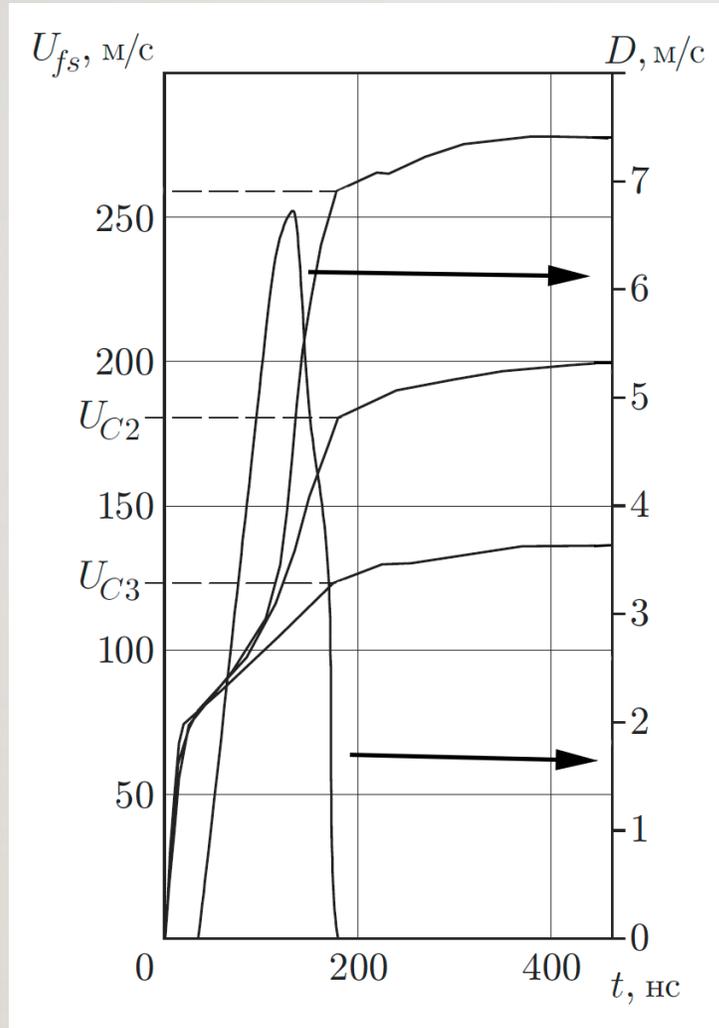
$t = 10 \text{ ns}$



$\rho_D, 10^{10} \text{ m}^{-2}$

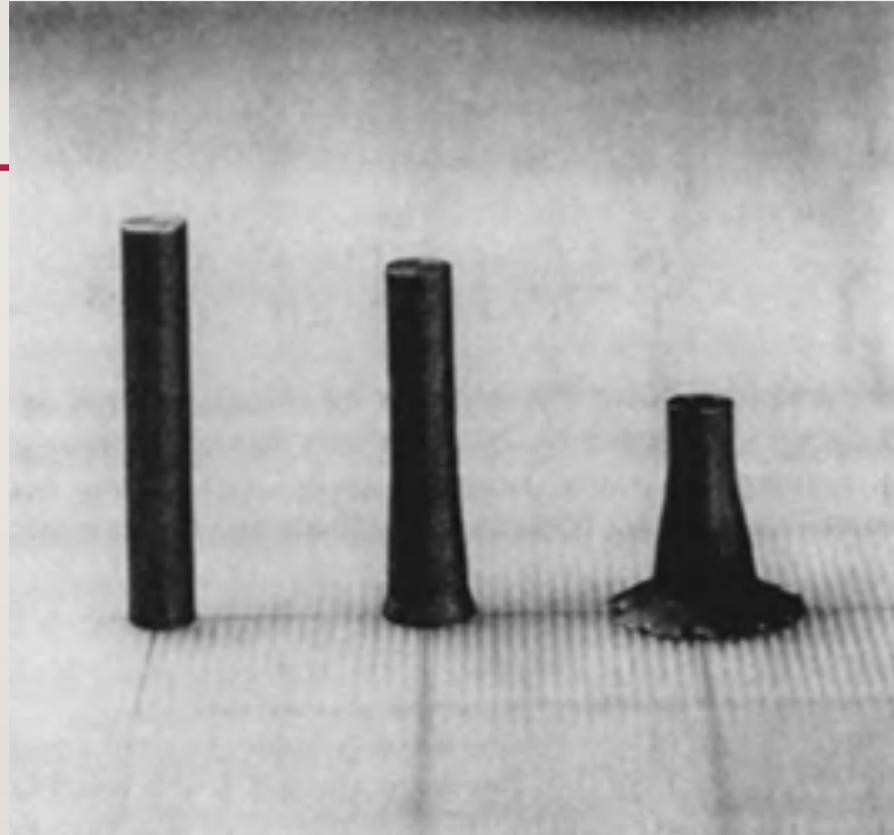


# ДИСПЕРСИЯ СКОРОСТЕЙ НА ФРОНТЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ



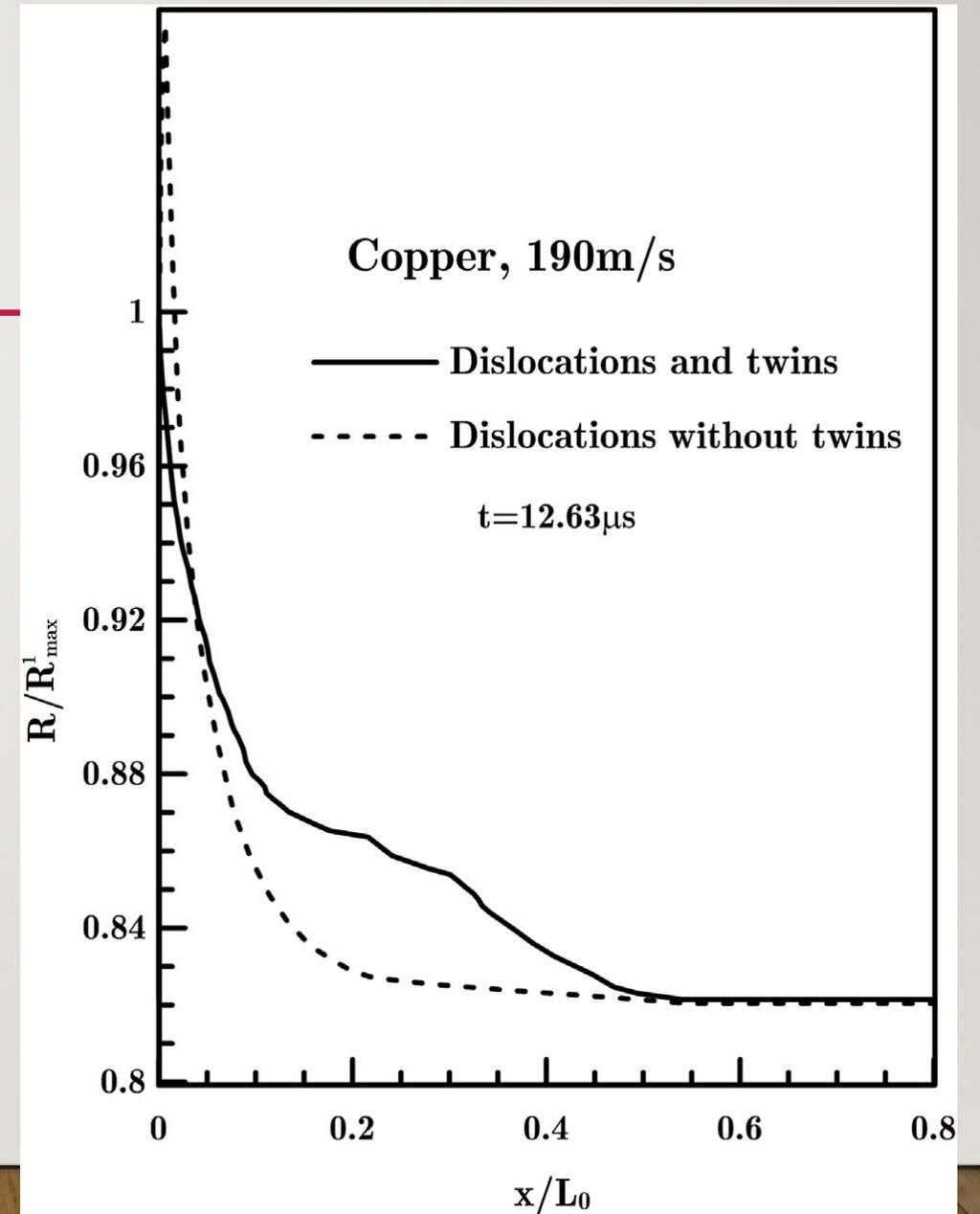
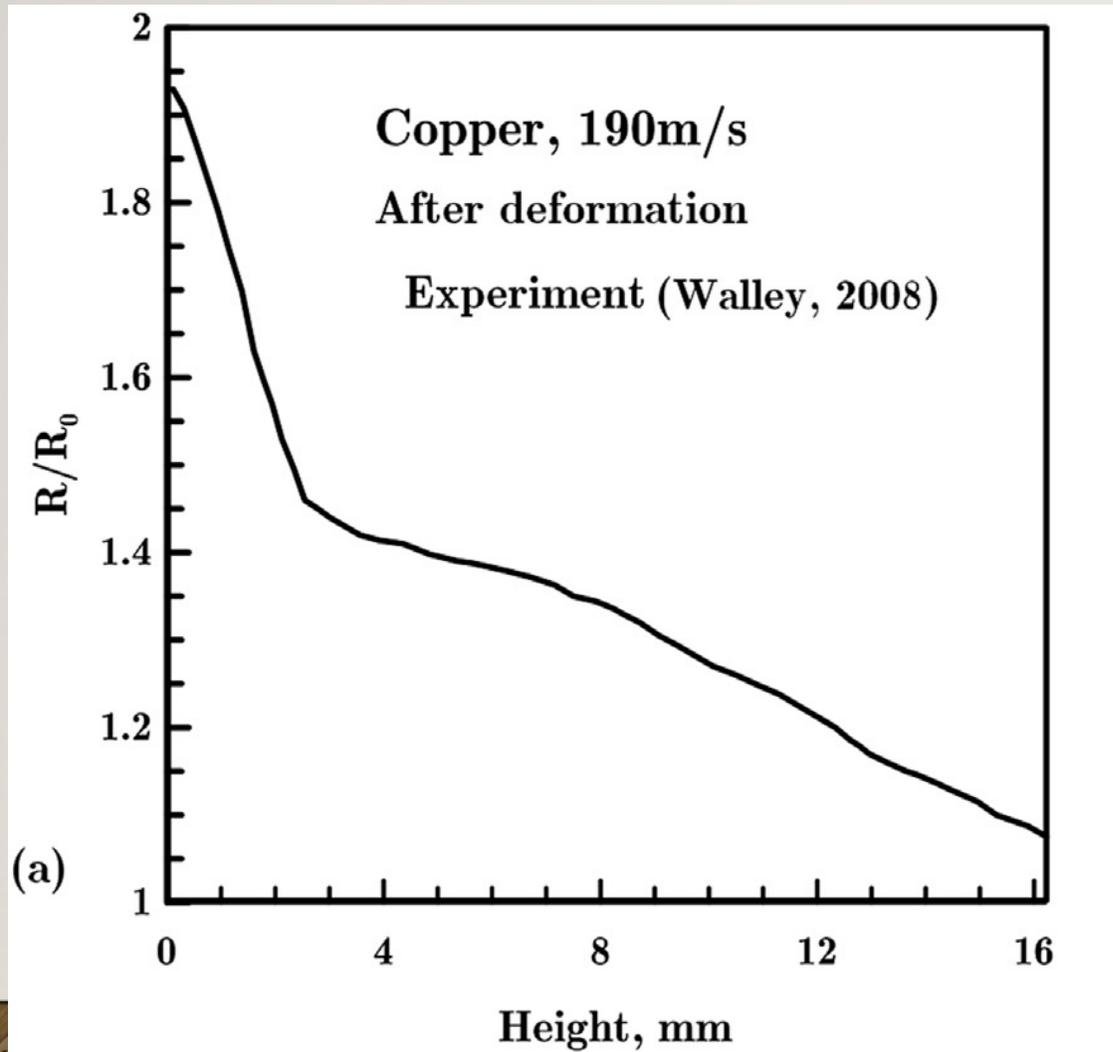
Ю.И. Мещеряков, А.К. Диваков, Н.И. Жигачева, М.М. Мышляев Влияние размера зерна на макроскопический отклик алюминия на ударное нагружение. ПМТФ, 48(6) (2007) 135-146.

# ТЕСТ ТЕЙЛОРА

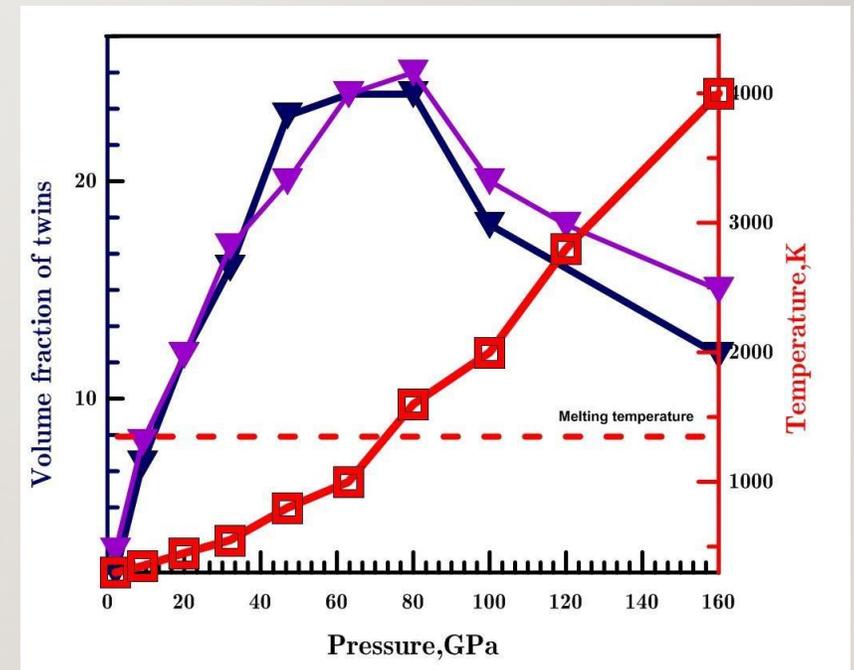
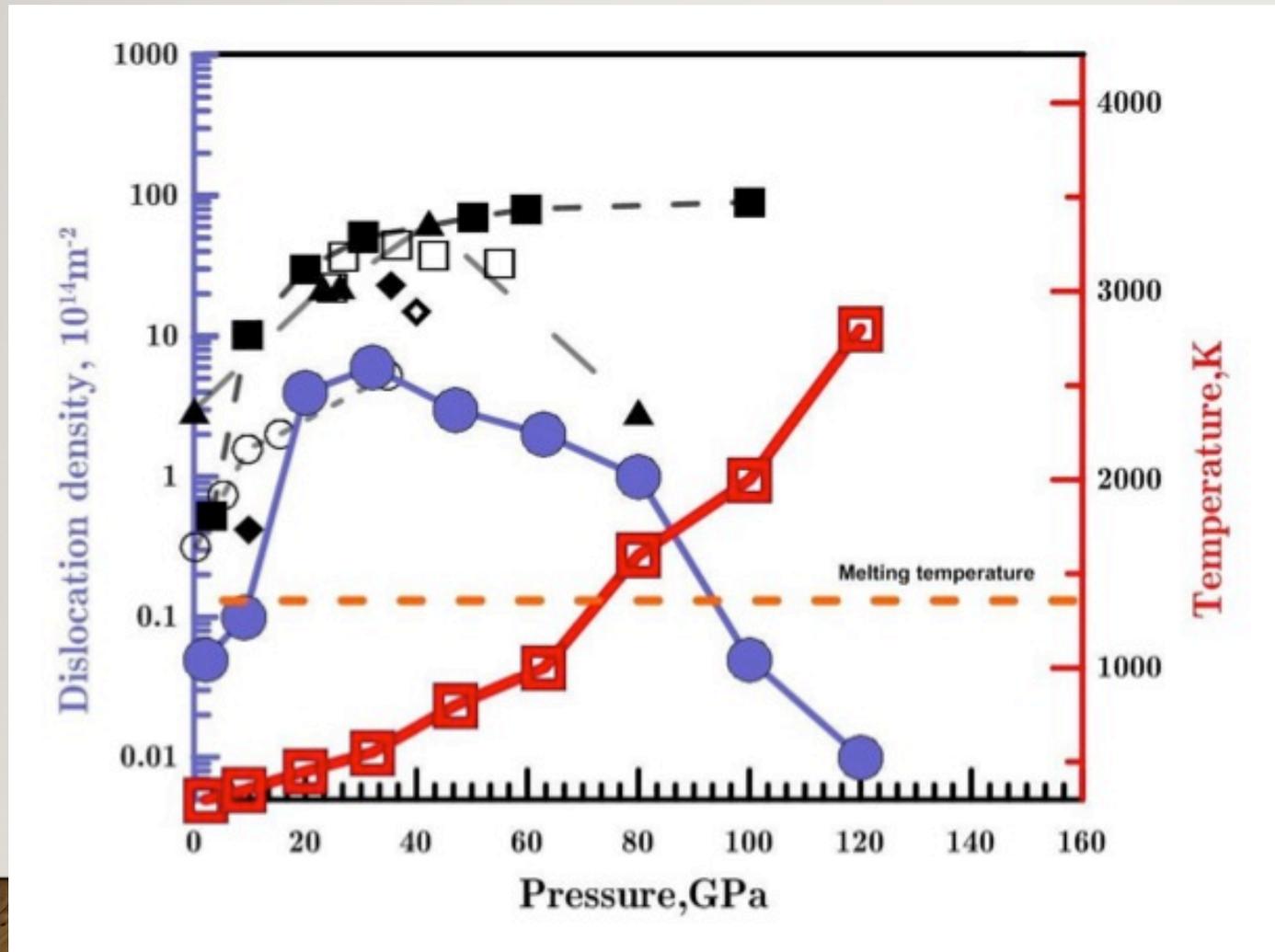


Металлический стержень со скоростью около 100 м/с налетает на твердую преграду и деформируется.

# ВКЛАД РАЗЛИЧНЫХ МЕХАНИЗМОВ



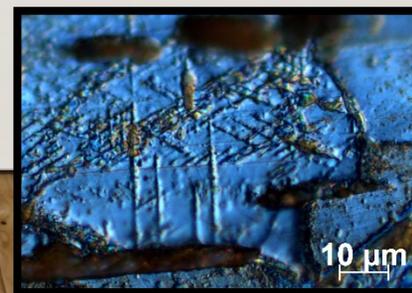
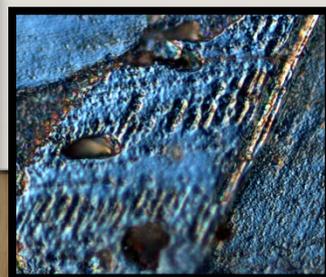
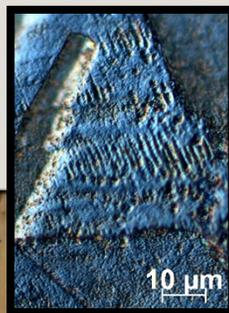
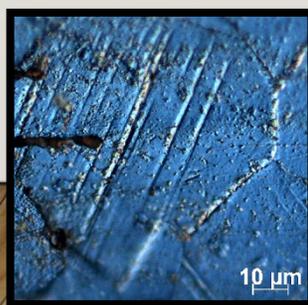
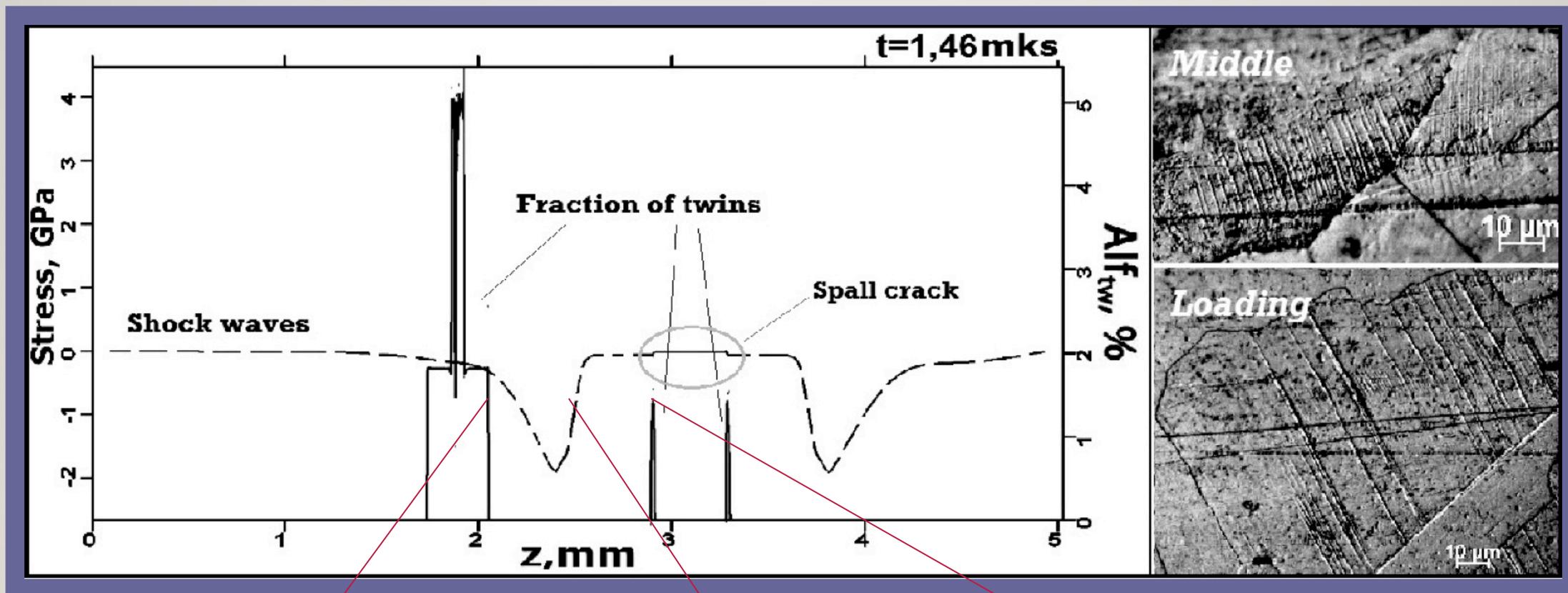
## 21 СИЛЬНЫЕ УДАРНЫЕ ВОЛНЫ



## ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

- Материал: сталь 12Х18Н10Т
- Стальной ударник толщиной 1.8мм;
- Толщина мишени 5мм;
- Скорость ударника - от 146м/с до 450м/с;
- При скоростях более 200м/с наблюдалось откольное разрушение;
- Исследования нагруженных образцов проводились на оптическом микроскопе Axio-Observer-Z1-M после соответствующего химического травления;
- Средний размер зерна не превышает 65мкм.

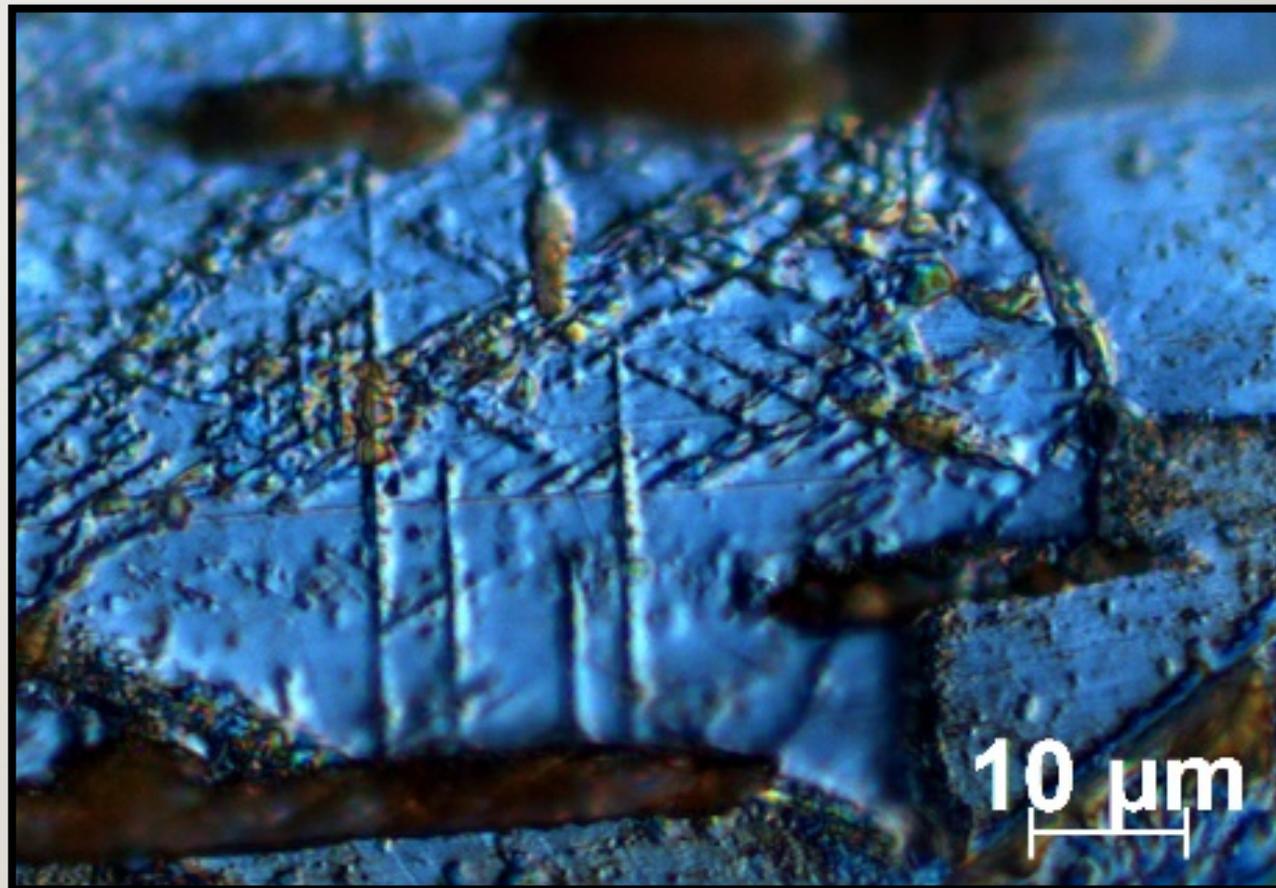
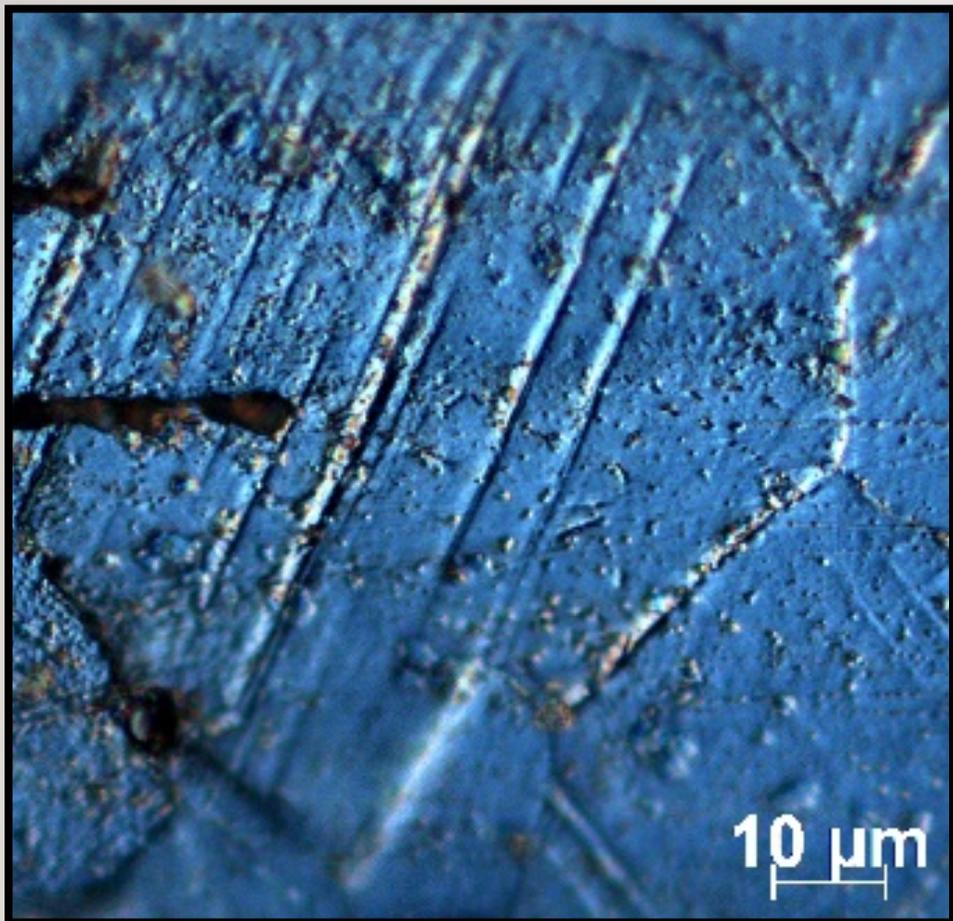
# СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ



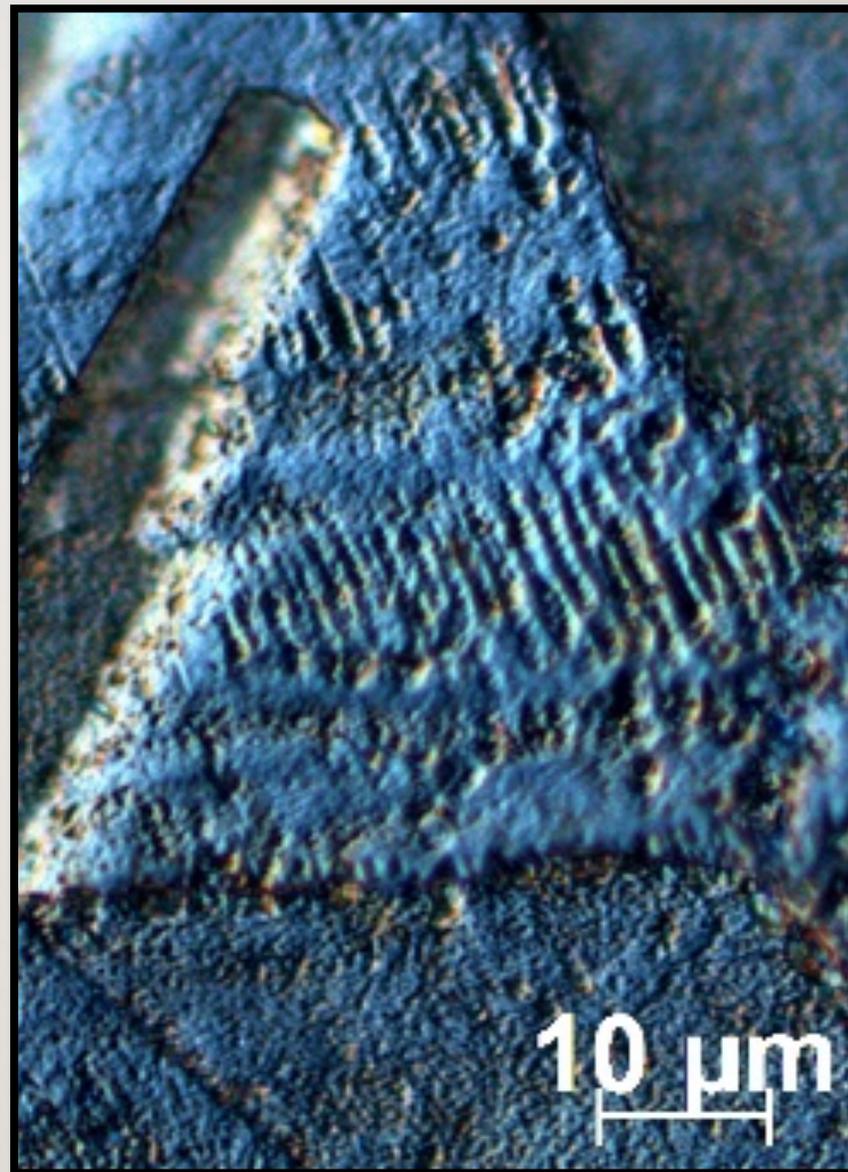
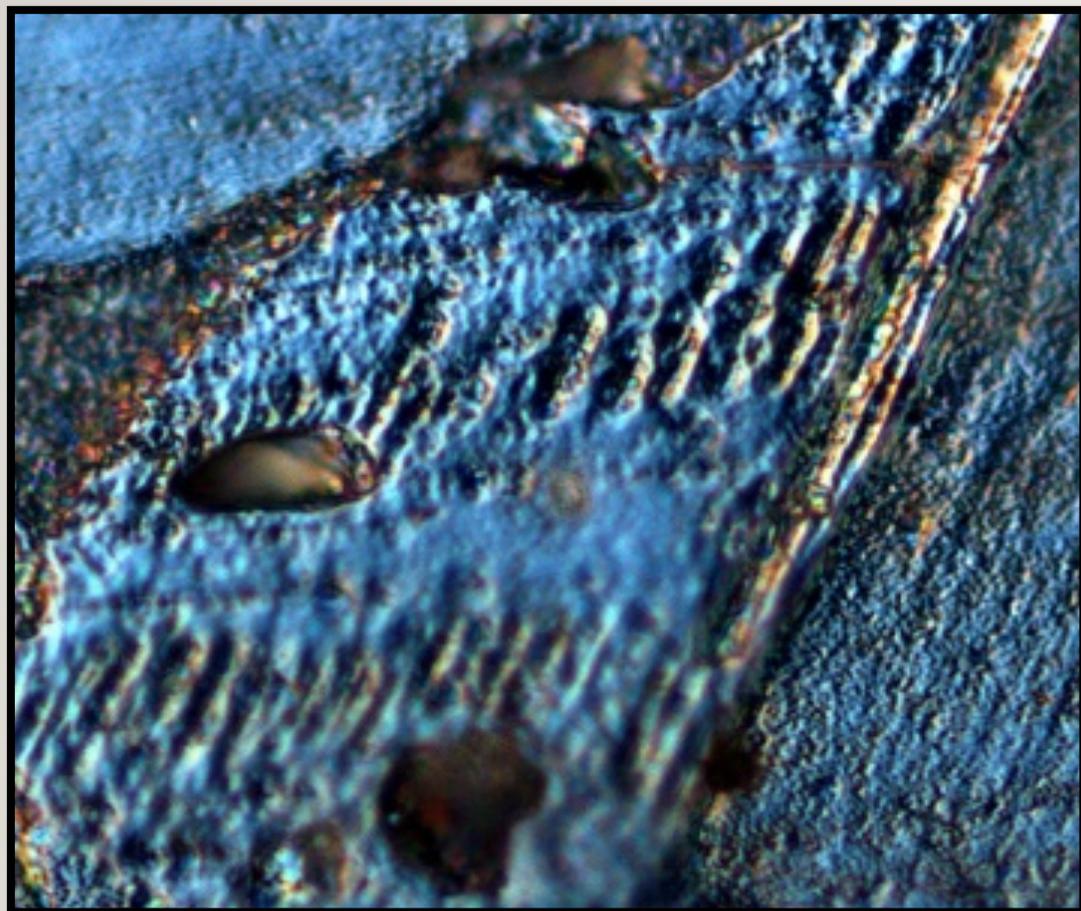
# СКОРОСТНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ

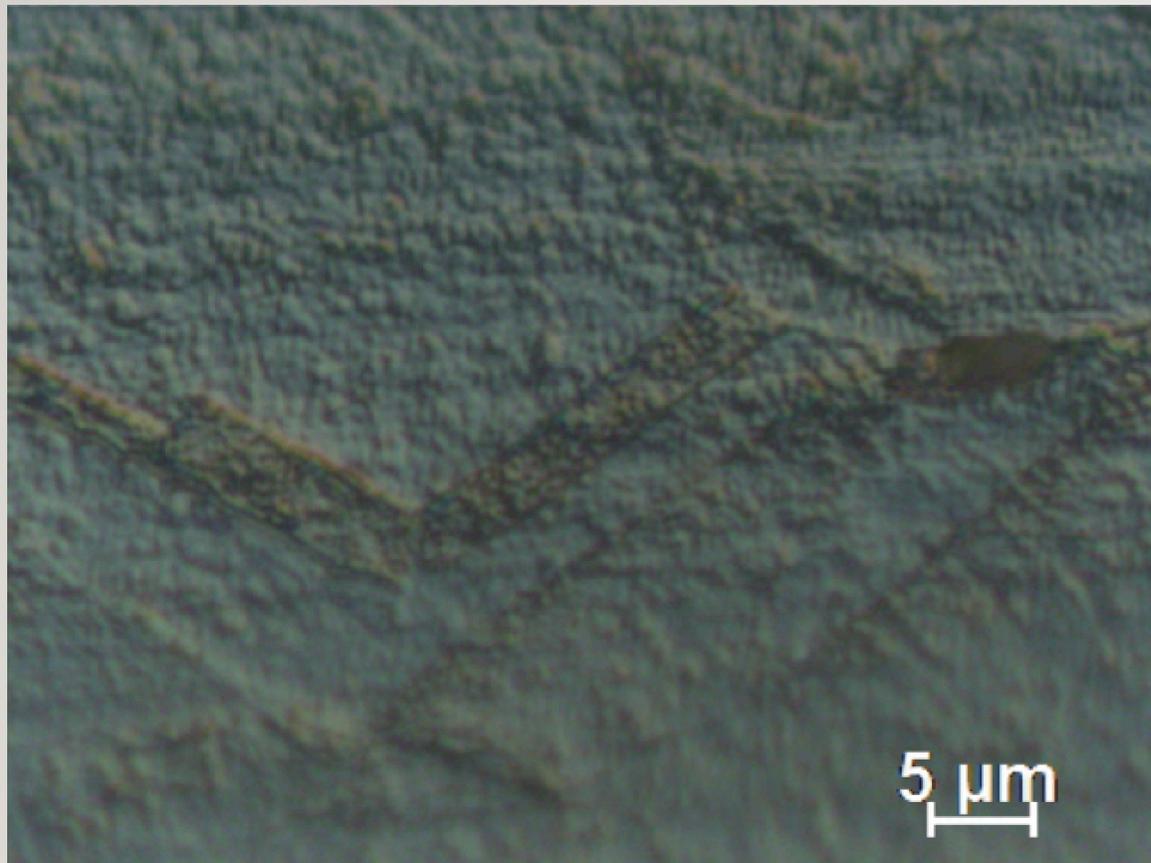
$V_{imp}$ , м/с	$\langle h \rangle$ , мкм	$\langle N_d \rangle$	$D$ , мкм	$\sigma_{ampl}$ , ГПа
146	3.6	3	55.7	3
229	0.9	6	62.1	4.6
246	0.78	7	63.5	4.9
298	0.66	10	63.5	5.9
450	1.1	9	43.6	8.9

# ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТЕЙ



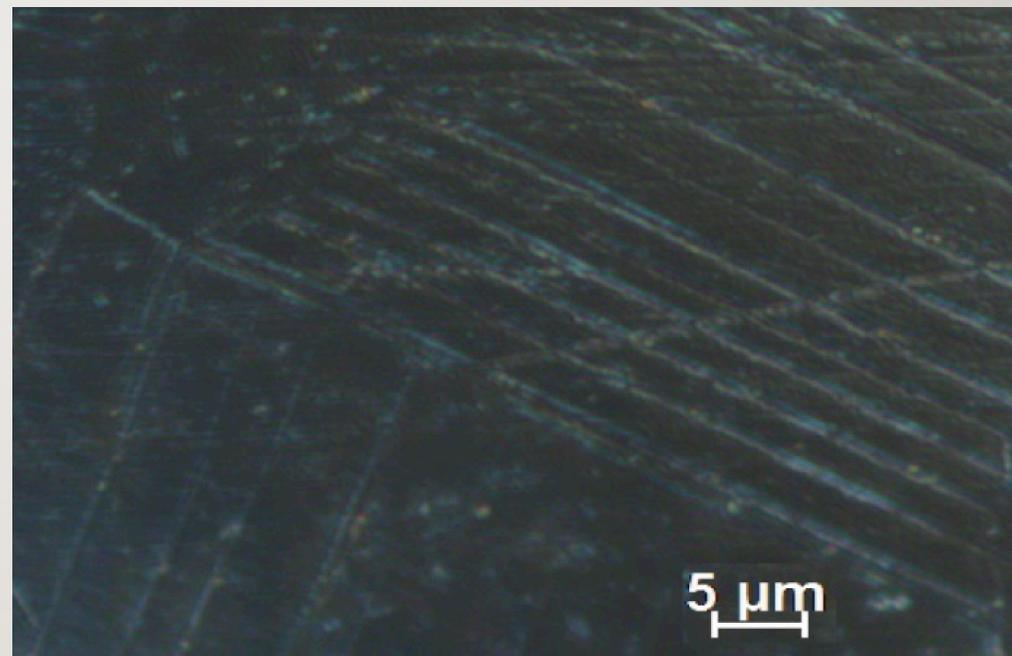
# В ЦЕНТРЕ МИШЕНИ





149m/c

$$U_{TW} \sim \Phi V_{TW}$$



229m/c

## 28 ЭФФЕКТ ФОРМЫ

$$U_{Incl} = 2\pi\gamma_{SF}S_{TW} + \Phi V_{TW} - \varepsilon_{Incl} V_{TW} \Sigma$$

$$\Phi = 2G\eta\varepsilon_{Incl}^2$$

$$\eta_{Sp} = \frac{(7-5\nu)}{15(1-\nu)} \quad \eta_L = \frac{\pi^2(2-\nu)}{3(1-\nu)} \quad \longrightarrow \quad \eta_L/\eta_{Sp} = 5\pi^2 \frac{(2-\nu)}{(7-5\nu)} \sim 15$$

$$\eta = \eta_L + (\eta_{Sp} - \eta_L) \text{Exp}(1 - Ar) \quad r = R_{TW}/h_{TW}$$

$$F_R = \frac{4\pi}{\sqrt{2}} R_{tw}^\gamma h_{tw}^\gamma \sum_i \sum_k S_{ik} n_i^\gamma \tau_k^\gamma - 2\pi\gamma_{SF} (2R_{tw}^\gamma + h_{tw}^\gamma) - \Phi (h_{tw}^\gamma)^2$$

$$\dot{R}_{tw}^\gamma 2 \left( 1 - (\dot{R}_{tw}^\gamma / c_t) \right)^{-3/2} = b F_R^\gamma \left( 2\pi R_{tw}^\gamma h_{tw}^\gamma B^{part} \right)^{-1}$$

# ВЫВОДЫ

---

1. Структурные модели могут описывать и предсказывать механический отклик материалов на внешние нагрузки и имеют большой потенциал к описанию особенностей эволюции его микроструктуры;
2. Все коэффициенты этих моделей имеют четкую физическую интерпретацию, что позволяет определять их из экспериментов, теоретических оценок или молекулярно-динамического моделирования;
3. Микроструктурные исследования демонстрируют сложную зависимость вида двойников, формируемых в стали 12Х18Н10Т от скорости деформации и напряжения;
4. Интересно изменение аспектного отношения двойников от поверхностей к центру мишеней и наличие широких двойников при малых скоростях нагружения;
5. Предложенная модель двойникования, описывающая эти наблюдаемые особенности.

---

Благодарю за внимание!