

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗМЕРА ЗЕРНА И УСЛОВИЙ НАГРУЖЕНИЯ НА ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА

Зиновьева О.С.^{1,2}, Романова В.А.²

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36), e-mail: zin.ispms@mail.ru

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия (634021, г. Томск, пр. Академический, 2/4)

Работа посвящена численному исследованию влияния условий нагружения и размера зерна на качественные характеристики деформационного рельефа и деформационных процессов, происходящих на мезоуровне при квазистатическом растяжении поликристаллов AL6061-T3. При описании поведения материала используется математический аппарат механики сплошных сред в предположении о сохранении сплошности среды на мезоуровне в условиях упругопластической деформации. Показано, что увеличение размера зерна приводит к образованию более крупных рельефных складок на поверхности нагруженных поликристаллов. Условия стесненной деформации также приводят к образованию более высоких складок меньшего периода по сравнению со свободными боковыми поверхностями. Для оптимизации численных расчетов определена минимальная толщина образца для исследования явлений деформационного рельефа. Она составляет 3–4 средних диаметров зерна.

Ключевые слова: поликристаллические материалы, алюминиевые сплавы, деформационный рельеф, численное моделирование, трехмерные модели, напряженно-деформированное состояние.

NUMERICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF GRAIN SIZE AND LOADING CONDITIONS ON THE DEFORMATION IN POLYCRYSTALLINE ALUMINUM ALLOY

Zinovieva O.S.^{1,2}, Romanova V.A.²

¹The National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia (634050, Tomsk, pr. Lenina, 36), e-mail: zin.ispms@mail.ru

²Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russia (634021, Tomsk, pr. Akademicheskii, 2/4)

The article is concerned with numerical study of the influence of loading conditions and grain size on the surface roughening and mesoscale deformation processes in polycrystalline aluminum alloy AL6061-T3 under quasistatic uniaxial tension. In describing the behavior of the material it was used mathematical apparatus of continuum mechanics on the assumption of maintaining continuity of the medium at the meso level under elastoplastic deformation. It is shown that the increase in grain size leads to the formation of larger relief folds on the surface of loaded polycrystallines. Constrained deformations conditions also cause the formation of higher folds with shorter period compared with the free lateral surfaces. To optimize the numerical calculations it was determined the minimum thickness of the sample for the study of the phenomena of strain relief. It has 3–4 average grain diameter.

Keywords: polycrystalline materials, aluminum alloys, surface roughening, numerical modeling, 3D models, stress-strain state.

Введение

Одной из особенностей поведения алюминиевых сплавов является возникновение и развитие специфического деформационного рельефа (шероховатости) на свободной от нагрузки поверхности в процессе формовки. Несмотря на значительное количество работ в данной области, причины и механизмы возникновения деформационного рельефа продолжают обсуждаться среди ученых [2–4, 6–9]. Было показано, что процессы формирования и развития шероховатости зависят от множества факторов, таких как размер

зерна [4], кристаллографическая текстура металла [8,9] и т.п. Значительное влияние на изменение морфологии поверхности оказывает анизотропия зерен, которая приводит к локализации пластической деформации и, как следствие, к формированию рельефных складок [8].

Поведение реальных алюминиевых сплавов определяется сложной многоуровневой структурой, и процессы, происходящие в них, зависят от целого комплекса факторов. Отделить и исследовать влияние индивидуальных факторов на процессы деформации и разрушения в эксперименте зачастую не представляется возможным. В этой связи модельный эксперимент является важным дополнением к экспериментальным исследованиям. В работе [3] была подробно проанализирована эволюция напряженно-деформированного состояния (НДС) в поликристалле Al6061-T6, содержащего 280 зерен. Картины рельефа пластических деформаций позволяют говорить об иерархии локализованных сдвигов и концентраторов напряжений, действующих на разных масштабах. В настоящей работе в рамках методологии физической мезомеханики обсуждается влияние граничных условий и размера зерна на качественные характеристики деформационного рельефа на поверхности поликристаллического сплава алюминия AL6061-T3. Структурно-механическая модель, предложенная в [3], модифицирована с целью задания периодических граничных условий. Обсуждается роль свободной поверхности и межзеренных границ в развитии деформационных процессов на мезоуровне. Определена оптимальная толщина трехмерной модели для исследования деформационного рельефа.

Описание трехмерной модели поликристаллического алюминия и условия численного эксперимента

При описании поведения материала используется математический аппарат механики сплошных сред в предположении о сохранении сплошности среды на мезоуровне в условиях упругопластической деформации. Общая система динамических уравнений континуальной механики для описания упругопластического поведения материалов включает законы сохранения массы, количества движения, соотношения для скоростей деформации и определяющие уравнения, характеризующие среду. Подробную математическую постановку читатель может найти во многих работах, к примеру [6].

В настоящей работе трехмерные поликристаллические структуры сгенерированы методом пошагового заполнения, предложенным в [6]. Прямоугольный объем дискретизирован регулярной сеткой $200 \times 75 \times 200$ с кубическими ячейками и шагом 10 мкм. В качестве начальных условий центры зарождения зерен распределялись в объеме случайным образом. Предполагалось, что зерна растут с одинаковой скоростью по сферическому закону.

Поликристаллические структуры, периодические в направлении оси X_1 , продемонстрированы на рис. 1. Размер расчетной области во всех трех случаях составляет $2000 \times 750 \times 2000$ мкм, а количество зерен варьируется от 200 до 1000. Средний диаметр зерна составляет 300, 200 и 170 мкм, соответственно. Чтобы получить периодическую структуру в определенном направлении, проверялось дополнительное условие: в случае выхода зерна в процессе роста за пределы поверхности его рост продолжался на противоположной стороне объема путем параллельного переноса. В рамках численной реализации диаметр зерна рассчитывался как диаметр сферы такого же объема:

$$D = \sqrt[3]{\frac{6V}{\pi}} = h \sqrt[3]{\frac{6N_c}{\pi}}, \quad (1)$$

V – объем сферы, N_c – число расчетных ячеек, приходящихся на зерно, h – шаг расчетной сетки.

Для строгого описания упругопластического отклика материала в рамках многоуровневого подхода необходимо использовать модели физической теории пластичности, которые в явном виде учитывают кристаллографическую ориентацию зерен и плоскостей скольжения [5]. Такие модели принципиально важны для использования при описании поведения материалов с ограниченным числом систем скольжения, пластически анизотропных материалов и условий нагружения, при которых зерна испытывают значительные повороты, поскольку модели феноменологической теории пластичности, основывающиеся на опытных данных и их аппроксимации, не учитывают процессы микроуровня в явном виде.

Для исследования в качестве модельного материала выбран макроскопически изотропный алюминиевый сплав AL6061-T3. Он характеризуется ГЦК решеткой, соответственно, имеет 12 систем скольжения. Исходя из этого, полагается, что кристаллографическая ориентация не оказывает значительного влияния на напряжение пластического течения в зерне по отношению к приложенной нагрузке и, следовательно, может быть задана в неявном виде, через разброс упругих и пластических характеристик в пределах $\pm 2 \div 5$ % относительно среднего значения.

При описании поведения поликристаллических алюминиевых сплавов важное значение имеет эффект зернограничного упрочнения, который определялся в работе [3] в соответствии с зависимостью Холла – Петча. Стоит отметить, что в данной работе эффект Холла – Петча намеренно не учитывался, для того чтобы отделить эффекты, связанные с размером зерна и механическими свойствами. По этой же причине не учитывались явления прерывистой текучести, характерные для исследуемого алюминиевого сплава [1].

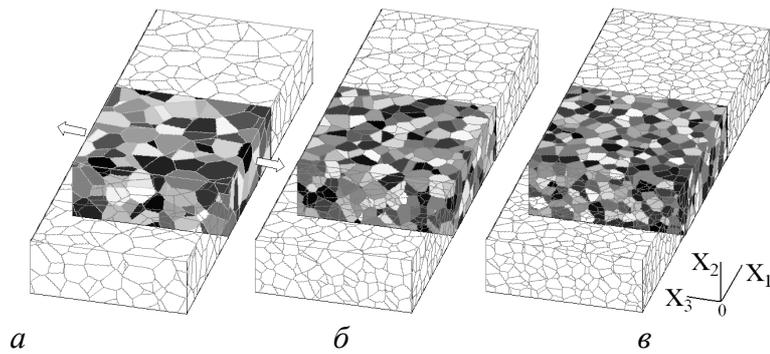


Рис. 1. Модели поликристаллов с периодической структурой, сгенерированные на сетках $200 \times 75 \times 200$, и схема трансляции микроструктуры в направлении оси X_1 . Средний диаметр зерна составлял 300 (а), 200 (б) и 170(в) мкм

Переход локальных объемов материала из упругого состояния в пластическое определялся критерием текучести Мизеса с учетом изотропного упрочнения:

$$\sigma_{eq} = \frac{1}{2} \sqrt{S_{ij} S_{ij}} = \sigma_y^i(\epsilon_{eq}^p) \quad (2)$$

где $\sigma_y^i(\epsilon_{eq}^p)$ – предел текучести i -го зерна с учетом деформационного упрочнения. Функция упрочнения для Al6061-T3 была задана в виде:

$$\sigma_y^i = \sigma_0^i + 65 \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\epsilon_{eq}^p}{0.048}\right) \right) \text{ [МПа]}, \quad (3)$$

где σ_0^i – начальный предел текучести i -го зерна, ϵ_{eq}^p – интенсивность накопленной пластической деформации. Средние значения модуля сдвига и модуля объемного сжатия, заданные в расчетах, составляли 28.4 и 82.0 ГПа. Среднее значение начального предела текучести – 107 МПа. На границах структурных элементов выполняется условие идеального механического контакта, внутри зерна упругие характеристики остаются постоянными, но меняются при переходе через границу. В соответствии с цветовой шкалой, использованной для изображения поликристаллических конгломератов на рис. 1, чем темнее зерно, тем выше его упругопластические характеристики. Задача решается численно методом конечных разностей. Граничные условия моделировали одноосное растяжение поликристаллического материала в направлении оси X_3 на боковых поверхностях (рис. 1). На верхнюю поверхность не действуют внешние силы, а на нижней заданы условия симметрии относительно оси X_2 . На боковых поверхностях $x_1 = 0$ и $x_1 = L_1$, где L_1 – линейный размер образца в направлении оси X_1 , формулировались либо условия отсутствия внешних сил (свободные поверхности), либо периодические граничные условия.

Обсуждение результатов

Авторы [2] показали, что определяющий вклад в процессы формирования и развития деформационного рельефа поверхности вносит структура приповерхностных слоев. На основании этого были оптимизированы геометрические размеры расчетной области и определена минимальная толщина модели, необходимой для воспроизведения деформационного рельефа с приемлемой степенью точности. Рассматривалось одноосное растяжение поликристаллических структур размерами $500 \times 350 \times 1000$, $500 \times 200 \times 1000$ и $500 \times 100 \times 1000$ мкм. Средний диаметр зерна составлял около 50 мкм, соответственно, в направлении, нормальном к свободной поверхности, содержалось порядка 7-ми, 4-х и 2-х слоев зерен. Анализ расчетов показал, что основное влияние на деформационные процессы, происходящие на поверхности, оказывает микроструктура, лежащая в пределах 1–2 диаметров зерна, но модель, содержащая только 2 слоя зерен в направлении, перпендикулярном поверхности, не позволяет адекватно описать шероховатость поверхности из-за влияния нижней закрепленной поверхности. При использовании модели толщиной более 4-х средних диаметров зерна для рассмотренных условий нагружения, поверхностный рельеф меняется слабо. Таким образом, для исследования явления деформационного рельефа рекомендуется использовать модели с толщиной, равной 3–4-м средним диаметрам зерна.

Для анализа напряженно-деформированного состояния, приводящего к возникновению рельефных складок, было проведено сравнение поверхностей однородного изотропного материала и материала с внутренними границами раздела. Было показано, что поликристаллическая структура приводит к тому, что на мезоуровне в локальных областях материала все компоненты тензоров напряжений и деформаций принимают ненулевые значения, включая напряжения, действующие в направлении свободной поверхности (далее – нормальные напряжения). В условиях одноосного растяжения нормальные напряжения демонстрируют квазипериодическое распределение положительных и отрицательных значений, удовлетворяя тем самым условиям макроскопического равновесия. Таким образом, периодические поля нормальных напряжений и деформаций, возникающие в объеме материала на мезоуровне, действуют со стороны объема на свободную поверхность и вызывают нормальные смещения в виде периодических деформационных складок.

Для анализа влияния размера зерна и условий нагружения на характеристики деформационного рельефа была проведена серия расчетов для структур, приведенных на рис. 1, с различными граничными условиями на боковых поверхностях. Условия нагружения являются важным фактором, оказывающим значительное влияние на характеристики деформационного рельефа. Авторами [8] с использованием методов статистического анализа

на основе матриц было экспериментально исследовано влияние условий нагружения (одноосное, двуосное растяжение, плоское деформированное состояние) на шероховатость поверхности алюминиевого сплава АА5754-О. В настоящей работе проведена оценка влияния условий нагружения мезообъема на качественные характеристики деформационного рельефа. Рассматривались два идеализированных случая граничных условий, отличавшиеся описанием поведения боковых поверхностей: в одном случае боковые поверхности считались свободными от действия внешних сил, во втором случае на них были заданы периодические граничные условия, имитирующие условия стесненной деформации в объеме материала. Расчеты были проведены для модели, содержащей 1000 зерен (рис.1*в*).

На рис. 2 сравниваются результаты расчетов для поликристаллов со свободными границами и с заданными на них периодическими граничными условиями. В обоих случаях наблюдается наличие мезоскопических складок, состоящих из нескольких более мелких. Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными [3, 9]. Качественное отличие заключается в ориентации складок и областей локализации пластической деформации. В случае образца со свободными боковыми гранями рельефные образования и полосы локализации ориентированы под углом 45° к оси растяжения (рис. 2 *а, в*), что объясняется направлением максимальных касательных напряжений. В случае образца, находящегося в условиях стесненной деформации, переплетающиеся складки ориентированы перпендикулярно оси нагружения (рис.2 *б, г*). В образце со свободными боковыми гранями высота рельефных складок меньше, а ширина больше по сравнению с образцом с периодическими граничными условиями (рис. 3). Во втором случае увеличение разброса значений высот поверхности обусловлено ограничением деформации в латеральном направлении. В обоих образцах профили поверхностей демонстрируют наличие нескольких крупных складок, состоящих из двух-трех более мелких (рис. 3). Такая структура придает крупным складкам вид переплетающихся спиралей (рис. 2 *в, г*).

Для исследования размера зерна была проведена серия расчетов для образцов со средним размером зерна 300, 200 и 170 мкм. Сделан вывод о том, что уменьшение размера зерна приводит к уменьшению высоты и глубины рельефных складок относительно среднего уровня, соответствующего поверхности однородного образца, и возрастанию их количества (рис. 4). Во всех случаях поперечные размеры складок, образовавшихся на ранней стадии пластического течения, составляют 3–4 диаметра зерна.

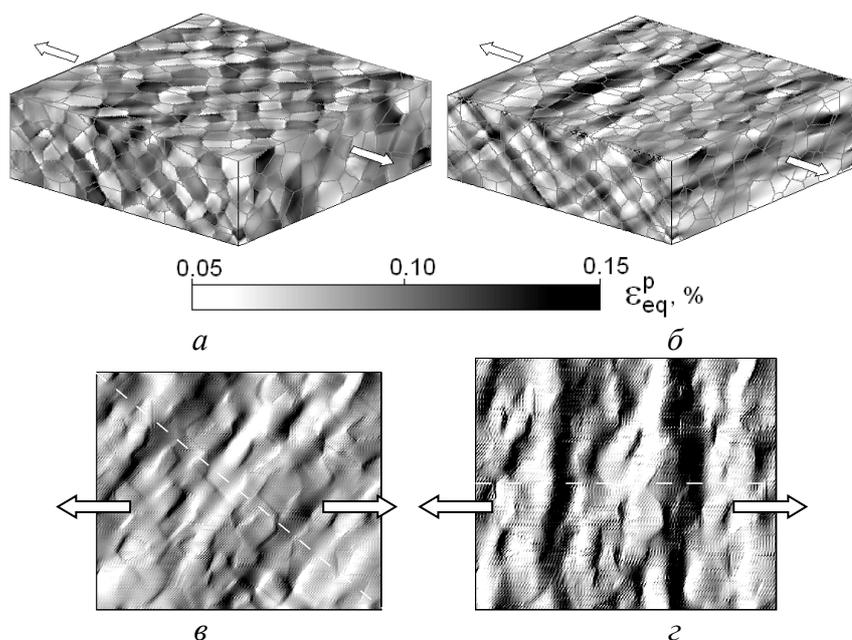


Рис. 2. Распределения интенсивности пластических деформаций (*а*, *б*) и картины деформационного рельефа поверхности (*в*, *г*) в поликристаллах со свободными боковыми поверхностями (*а*, *в*) и с периодическими граничными условиями (*б*, *г*), $\epsilon = 0.18 \%$, стрелками указано направление растяжения

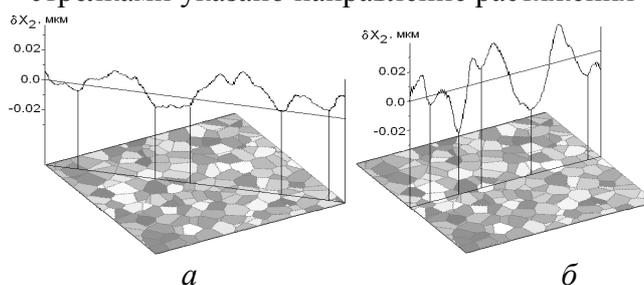


Рис. 3. Профили поверхности, снятые вдоль диагональной линии в поликристалле со свободными боковыми поверхностями (*а*) и вдоль средней линии в образце с периодическими граничными условиями (*б*), $\epsilon = 0.18 \%$

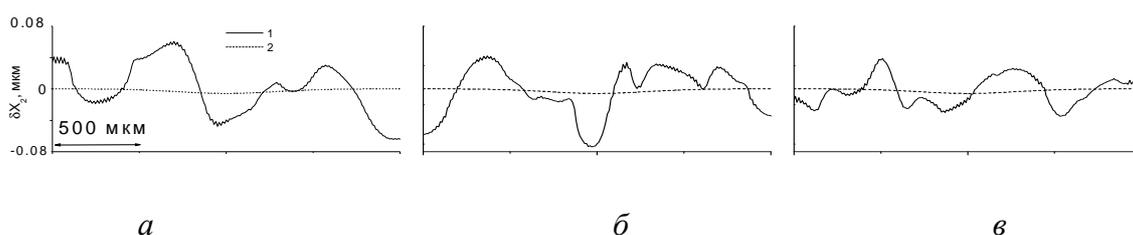


Рис. 4. Профили поверхности в поликристаллах с размером зерна 300 (*а*), 200(*б*) и 170 мкм (*в*) (кривые 1); пунктирная линия (кривые 2) – профиль поверхности в однородном образце, $\epsilon = 0.22 \%$

Выводы

Рассмотрено влияние условий нагружения и размера зерна на качественные характеристики деформационного рельефа и деформационные процессы, происходящие на мезоуровне при квазистатическом растяжении поликристаллов AL6061-T3. Показано, что увеличение размера зерна приводит к образованию более крупных рельефных складок на поверхности нагруженных поликристаллов. Условия стесненной деформации также

приводят к образованию более высоких складок меньшего периода по сравнению со свободными боковыми поверхностями. Для оптимизации численных расчетов определена минимальная толщина образца для исследования явлений деформационного рельефа. Она составляет 3–4 средних диаметров зерна.

Работа выполнена в рамках государственной программы исследований РАН, при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (договор № 02.G25.31.0063) в рамках реализации Постановления Правительства РФ № 218.

Список литературы

1. Исследование локальных характеристик прерывистой текучести дисперсно-упрочненного алюминия как многоуровневой системы / Е.Е. Дерюгин, В.Е. Панин, З. Шмаудер, Б.И. Суворов // Физ. мезомех. – 2006. – Т.9, № 5. – С. 27-32.
2. Формирование мезоскопических складчатых структур на поверхности поликристаллов стали ЭК-181 в условиях одноосного растяжения / А.В. Панин, В.А. Романова, Р.Р. Балохонов и др. // Физ. мезомех. – 2011. – Т. 14, № 4. – С. 57-67.
3. Романова В.А. Численное исследование деформационных процессов на поверхности и в объеме трехмерных поликристаллов / В.А. Романова, Р.Р. Балохонов // Физ. мезомех. – 2009. – Т.12, № 2. – С. 5-16.
4. Численное исследование формирования деформационного рельефа на поверхности модельных поликристаллов в условиях одноосного растяжения / В.А. Романова, Р.Р. Балохонов, Н.Н. Карпенко и др. // Физ. мезомех. – 2011. – Т.14, № 5. – С.55-64.
5. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model / F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin, G. Cailletaud // Int. J. Plast. – 2001. – Vol.17. – P.513-536.
6. Simulation of elasto-plastic behavior of an artificial 3D-structure under dynamic loading / V. Romanova, R. Balokhonov, P. Makarov et al. // Comp. Mat. Sci. – 2003. – Vol. 28. – P.518-528.
7. Study of the fundamental relationships between deformation-induced surface roughness and strain localization in AA5754 / M.R. Stoudt, J.B. Hubbard, M.A. Iadicola, S.W. Banovic // Metall. Mater. Trans. A. – 2009. – Vol. 40. – P.1611–1622.
8. Wittridge N.J. A microtexture based analysis of the surface roughening behavior of an aluminium alloy during tensile deformation / N.J. Wittridge, R.D. Knutsen // Mater. Sci. Eng. A. – 1999. – Vol. 269. – P.205-216.
9. Zhao Z. A study of surface roughening in fcc metals using direct numerical simulation / Z. Zhao, R. Radovitzky., A. Cuitiño // Acta Materialia. – 2004. – Vol. 52. – P.5791-5804.

Рецензенты:

Поляков В.В., д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой прикладной физики, электроники и информационной безопасности, декан физико-технического факультета, г. Барнаул.

Колубаев А.В., д.ф.-м.н., профессор, заведующий лабораторией физики упрочнения поверхности ИФПМ СО РАН, г. Томск.