

УДК 539.374.1

DOI: 10.32326/1814-9146-2021-83-2-235-244

АНАЛИЗ ЛОКАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ, ГЕНЕРИРУЕМЫХ РОТАЦИОННО-СДВИГОВЫМИ МЕЗОДЕФЕКТАМИ ВБЛИЗИ СТЫКОВ ЗЕРЕН*

© 2021 г. Кириков С.В., Пупынин А.С., Свирина Ю.В.

*Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального
исследовательского центра «Институт прикладной физики РАН»,
Нижний Новгород, Российская Федерация*

ksv.kirikov@yandex.ru

Поступила в редакцию 25.02.2021

Исследована структура поля упругих напряжений в окрестности стыков и изломов границ зерен, содержащих ротационно-сдвиговые мезодефекты деформационного происхождения, формирующиеся при пластической деформации по ансамблю зерен поликристалла. Скачки пластической дилатации зерен при переходе через межзеренные границы создают на них дополнительные разориентировки, рассогласование которых в стыках зерен приводит к появлению линейных мезодефектов ротационного типа – стыковых дисклинаций деформационного происхождения. На плоских участках границ появляются планарные мезодефекты сдвигового типа, представляющие собой однородно распределенные вдоль границ пластические сдвиги. Эти мезодефекты создают вблизи стыков и изломов зерен пространственно неоднородные поля упругих напряжений, которые возрастают с увеличением пластической деформации и при достаточно больших деформациях инициируют процессы формирования фрагментированной структуры материала. Ротационно-сдвиговые мезодефекты являются также причиной зарождения и накопления микротрещин на стадии вязкого разрушения поликристаллических твердых тел.

Получены асимптотические выражения, позволяющие проанализировать пространственное распределение и анизотропию поля внутренних напряжений в окрестности стыка зерен от ротационно-сдвиговых мезодефектов деформационного происхождения. Установлено, что компоненты поля напряжений слабо зависят (логарифмически) от длины границ входящих в стык зерен и размера рассматриваемой окрестности. Показано, что экранирующая дисклинация диполя приводит к появлению угловой зависимости диагональных компонент тензора упругих напряжений в окрестности стыка и ее вклад в упругое поле диполя дисклинаций зерен составляет порядка 10–15%. Полученные асимптотические выражения могут быть использованы при исследовании кинетики дислокационного ансамбля и анализе условий зарождения микротрещин в окрестности стыков и изломов зерен.

Ключевые слова: границы зерна, мезодефект, стыковая дисклинация, внутренние напряжения.

* Выполнено в рамках государственного задания ИПФ РАН на проведение фундаментальных научных исследований на 2021–2023 гг. по теме № 0030-2021-0025.2.

Введение

Электронно-микроскопические исследования дефектной структуры деформированных поликристаллов позволили выявить важные закономерности ее формирования. Установлено, что при достаточно больших деформациях вблизи стыков и изломов зерен [1–3] формируются оборванные дислокационные границы, дальнейшая эволюция которых (распространение в тело зерен, увеличение разориентировок и ветвление) приводит к фрагментации – разбиению зерен поликристалла на взаимно разориентированные области (фрагменты), разделенные границами зерен деформационного происхождения. При продолжающейся деформации процесс формирования новых оборванных дислокационных границ постепенно прекращается. На стадии предразрушения стыки зерен (фрагментов) вновь играют важную роль, поскольку именно в них наблюдается зарождение микротрещин [1] и создаются предпосылки для вязкого разрушения материала.

В современной физике больших пластических деформаций принято считать, что причиной такого поведения дефектной структуры поликристаллических твердых тел является появление в стыках и изломах зерен (и/или фрагментов) линейных мезодефектов ротационного типа – стыковых дисклинаций деформационного происхождения [4–7] и накопление на плоских участках границ зерен планарных мезодефектов сдвигового типа [8, 9]. Указанные мезодефекты создают вблизи стыков и изломов зерен пространственно неоднородные поля упругих напряжений [10, 11], инициирующие сложные процессы формирования фрагментированной структуры материала. Исследование этих процессов проводится обычно путем компьютерного моделирования с использованием методов динамики дискретных дислокаций [12]. При этом исследуется эволюция ансамбля взаимодействующих между собой, а также с полями внешних и внутренних напряжений от мезодефектов решеточных дислокаций, осуществляющих пластическую деформацию в приграничной зоне зерна. Как правило, при рассмотрении таких процессов, как формирование оборванных дислокационных границ [13–15] или зарождение микротрещин [16–18], ограничиваются простейшим случаем одиночной стыковой дисклинации или одиночного диполя дисклинаций, которые лишь приближенно моделируют поля внутренних напряжений вблизи стыка.

Для более адекватного описания полей упругих напряжений вблизи стыка необходимо учитывать всю систему ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границах, входящих в стык. Целью настоящей статьи является получение выражений для компонент тензора упругих внутренних напряжений, локализованных вблизи стыка зерен, содержащего клиновую дисклинацию, с учетом вкладов от планарных сдвиговых мезодефектов и отдаленных некомпенсированных экранирующих дисклинаций.

Схема ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на типовых участках границы, содержащих стык зерен

В используемой в настоящей статье 2D-модели на образующих стык границах зерен в результате однородных, но различных в каждом из сопрягающихся зерен деформаций, формируются мезодефекты в виде равномерно распределенных скользящих и сидячих компонент дислокаций ориентационного несоответствия. В континуальном приближении эти мезодефекты характеризуются величиной плотности

вектора Бюргерса (w_τ для скользящих дислокаций, w_n для сидячих дислокаций). При этом совокупность сидячих дислокаций с точки зрения полей упругих напряжений (смещений) эквивалентна дипольно клиновым дисклинациям [19], вектор Франка каждой из которых определяется по формулам:

$$\mathbf{w}_d(\mathbf{r}_1) = \frac{\mathbf{w}_n \times (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad \mathbf{w}_d(\mathbf{r}_2) = \frac{\mathbf{w}_n \times (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}, \quad (1)$$

где $\mathbf{w}_d(\mathbf{r}_1)$ – вектор Франка дисклинации, находящейся в точке с радиус-вектором \mathbf{r}_1 , $\mathbf{w}_d(\mathbf{r}_2)$ – вектор Франка дисклинации, находящейся в точке с радиус-вектором \mathbf{r}_2 . Нетрудно получить и обратную связь $\mathbf{w}_n(\mathbf{w}_d)$. На рис. 1 представлена схема ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границе зерна в результате однородных, но различных в каждом из сопрягающихся зерен пластических дисторсий β_1 и β_2 (τ_1, N_1 и τ_2, N_2 – тангенциальный и нормальный единичные векторы для первого и второго зерен соответственно).

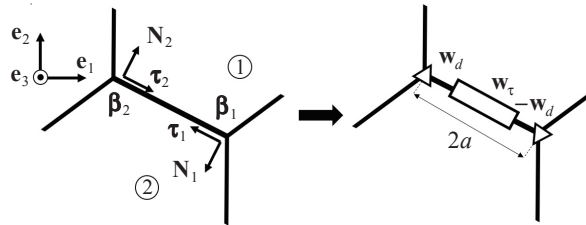


Рис. 1. Схема ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границе зерна

В случае 2D-геометрии вектор Франка направлен либо вдоль, либо против орта \mathbf{e}_3 (направлен перпендикулярно плоскости рисунка), вследствие этого будем характеризовать его величиной проекции w_d на этот орт. Совокупность скользящих дислокаций, согласно принятой в литературе терминологии, будем далее называть планарным сдвиговым мезодефектом. Планарный сдвиговый мезодефект и дисклинационный диполь, сформированные на отдельной границе зерна в результате прохождения однородных, но различных в каждом из сопрягающихся зерен пластических дисторсий β_1 и β_2 , характеризуются своими мощностями \mathbf{w}_τ и \mathbf{w}_n (или \mathbf{w}_d) соответственно и длиной этой границы $2a$. Взаимосвязь пластических дисторсий β_1 и β_2 с величинами мощностей мезодефектов \mathbf{w}_τ и \mathbf{w}_n приведены в статье [8].

Схемы ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на наиболее типовых участках границы, содержащих стык зерен в результате прохождения однородной внутризеренной деформации, приведены на рис. 2 (a – на одиночной фасетке, b – в случае стыка двух фасеток, \bar{b} – в тройном стыке).

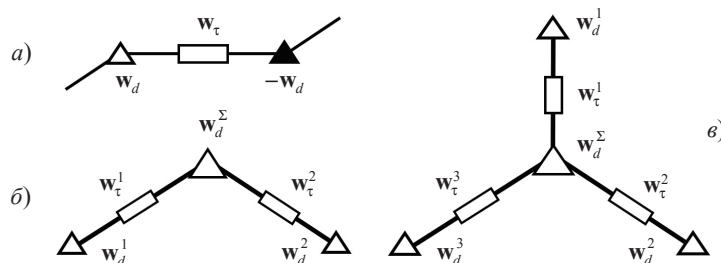


Рис. 2. Схема ротационно-сдвиговых мезодефектов, формирующихся на типовых участках границ зерен, содержащих стык

Каждая из рассмотренных конфигураций границ зерен характеризуется некоторой системой ротационно-сдвиговых мезодефектов. Например, в общем случае дефектная структура тройного стыка описывается набором параметров: длинами границ зерен $2a^1, 2a^2, 2a^3$, образующих этот стык, мощностями планарных мезодефектов $w_\tau^1, w_\tau^2, w_\tau^3$ и дисклинационных диполей w_n^1, w_n^2, w_n^3 (см. рис. 2в).

Расчет полей упругих напряжений, формирующихся вблизи стыка зерен, от одиночного планарного мезодефекта и диполя дисклинаций

Определим асимптотические выражения для полей напряжений от одиночного планарного сдвигового мезодефекта и одиночного дисклинационного диполя. Для расчета полей упругих напряжений выберем систему координат, начало которой расположено в стыке зерен. На рис. 3 показана система координат для расчета локальных полей упругих напряжений вблизи стыка зерен, расположенного в начале координат: a – от планарного сдвигового мезодефекта, b – от дисклинационного диполя.

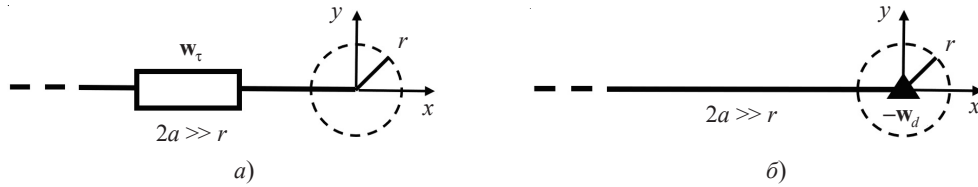


Рис. 3. Система координат для расчета локальных полей упругих напряжений вблизи стыка зерен, расположенного в начале координат

Процедуру вывода выражений продемонстрируем на примере планарного мезодефекта. Получение выражений для дисклинационного диполя проводится аналогично.

Рассмотрим планарный мезодефект мощностью w_τ и плечом $2a$ и найдем выражения, описывающие поля упругих напряжений от него, локализованные вблизи одного из стыков, в области с характерным размером $r \ll 2a$ (см. рис. 2а). Выражения для компонент тензора упругих полей напряжений для рассматриваемого мезодефекта в правосторонней декартовой системе координат, начало которой совпадает с центром мезодефекта, а ось x направлена вдоль плеча мезодефекта, приведены в [20]. Далее сдвинем систему координат в точку с координатами $(a, 0)$ и учтем, что $r \ll 2a$, следовательно, $x \ll 2a$ и $y \ll 2a$. В результате асимптотические выражения для полей напряжений от планарного мезодефекта принимают вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(x, y) &= Dw_\tau \left(\pi \operatorname{sgn} y (\operatorname{sgn} x - 1) - 2 \operatorname{arctg} \frac{y}{x} - \frac{xy}{x^2 + y^2} \right), \\ \sigma_{yy}(x, y) &= Dw_\tau \left(\frac{xy}{x^2 + y^2} \right), \\ \sigma_{xy}(x, y) &= Dw_\tau \left(-\frac{y^2}{x^2 + y^2} + \frac{1}{2} \ln \frac{4a^2}{x^2 + y^2} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где $D = G/(2\pi(1 - \nu))$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, $w_\tau = \mathbf{w}_\tau \cdot \mathbf{e}_x$ –

величина проекции вектора \mathbf{w}_τ на ось Ox . Далее переведем выражения (2) в полярную систему координат. Для этого сначала преобразуем декартовы координаты x, y в полярные координаты $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\varphi \in [0, 2\pi)$ в (2). Затем преобразуем компоненты тензора напряжений из декартовой системы координат в полярную систему $\sigma_{r,\varphi} = \mathbf{J}^{-1} \sigma_{x,y} \mathbf{J}$, где $\sigma_{r,\varphi}$, $\sigma_{x,y}$ – матрицы тензора напряжений в полярной и декартовой системах координат соответственно, \mathbf{J} – матрица перехода из декартовой системы координат в полярную систему координат. В результате асимптотические выражения для компонент тензора упругих напряжений, создаваемых одиночным планарным мезодефектом в окрестности стыка, в полярной системе координат запишутся в виде:

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}(r, \varphi) &= \frac{Dw_\tau}{2} \left(2(C(\varphi) - 2\varphi) \cos^2 \varphi + \left(\ln \frac{4a^2}{r^2} - 1 \right) \sin 2\varphi \right), \\ \sigma_{\varphi\varphi}(r, \varphi) &= \frac{Dw_\tau}{2} \left(2(C(\varphi) - 2\varphi) \sin^2 \varphi - \left(\ln \frac{4a^2}{r^2} - 1 \right) \sin 2\varphi \right), \\ \sigma_{r\varphi}(r, \varphi) &= \frac{Dw_\tau}{2} \left(1 - (C(\varphi) - 2\varphi) \sin 2\varphi + \left(\ln \frac{4a^2}{r^2} - 1 \right) \cos 2\varphi \right),\end{aligned}\quad (3)$$

где $C(\varphi) = 0$ при $0 \leq \varphi \leq \pi$ и $C(\varphi) = 4\pi$ при $\pi < \varphi < 2\pi$.

Асимптотические выражения для компонент тензора упругих напряжений, создаваемых одиночным дисклинационным диполем в окрестности стыка, в полярной системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned}\sigma_{rr} &= -\frac{Dw_d}{2} \left(1 - \cos 2\varphi - 2 \ln \frac{r}{2a} \right), & \sigma_{\varphi\varphi} &= -\frac{Dw_d}{2} \left(1 - \cos 2\varphi + 2 \ln \frac{r}{2a} \right), \\ \sigma_{r\varphi} &= -\frac{Dw_d}{2} \sin 2\varphi.\end{aligned}\quad (4)$$

Эпюры компонент тензора напряжений от планарного мезодефекта мощностью $w_\tau = 0,02$ и длиной $2a = 0,5$ мкм и дисклинационного диполя мощностью $w_n = 0,02$ и длиной $2a = 0,5$ мкм, локализованные вблизи стыка зерен, представлены на рис. 4: $a - \sigma_{rr}/G$, $b - \sigma_{r\varphi}/G$, $c - \sigma_{\varphi\varphi}/G$, $d - \sigma_{rr}/G$, $e - \sigma_{\varphi\varphi}/G$, $f - \sigma_{r\varphi}/G$ (расчет проводился для значений $\nu = 0,3$ и $b = 2,7 \cdot 10^{-4}$ мкм, где b – вектор Бюргерса решеточной дислокации для ГЦК металлов).

Из представленных эпюр видно, что компоненты тензора упругих напряжений от планарного мезодефекта вблизи стыка существенно неоднородны, однако, проводя анализ полученных выражений (3), можно убедиться, что тензор-функция $\sigma_{r,\varphi}(r, \varphi)$ обладает определенной степенью симметрии – нечетностью по аргументу φ . Для определенного круга задач физики пластичности можно ограничиться усредненным полем вблизи стыка, в случае планарного мезодефекта усреднение по круговой области дает нулевое значение среднего поля напряжений.

Из приведенных выражений и эпюр для полей упругих напряжений от дисклинационного диполя в окрестности стыка видно, что они отличаются от изотропного поля одиночной дисклинации [19]. Величина вклада экранирующей дисклинации при вариации значений $2a/r = 10^3 - 10^6$ составляет порядка 10–15%.

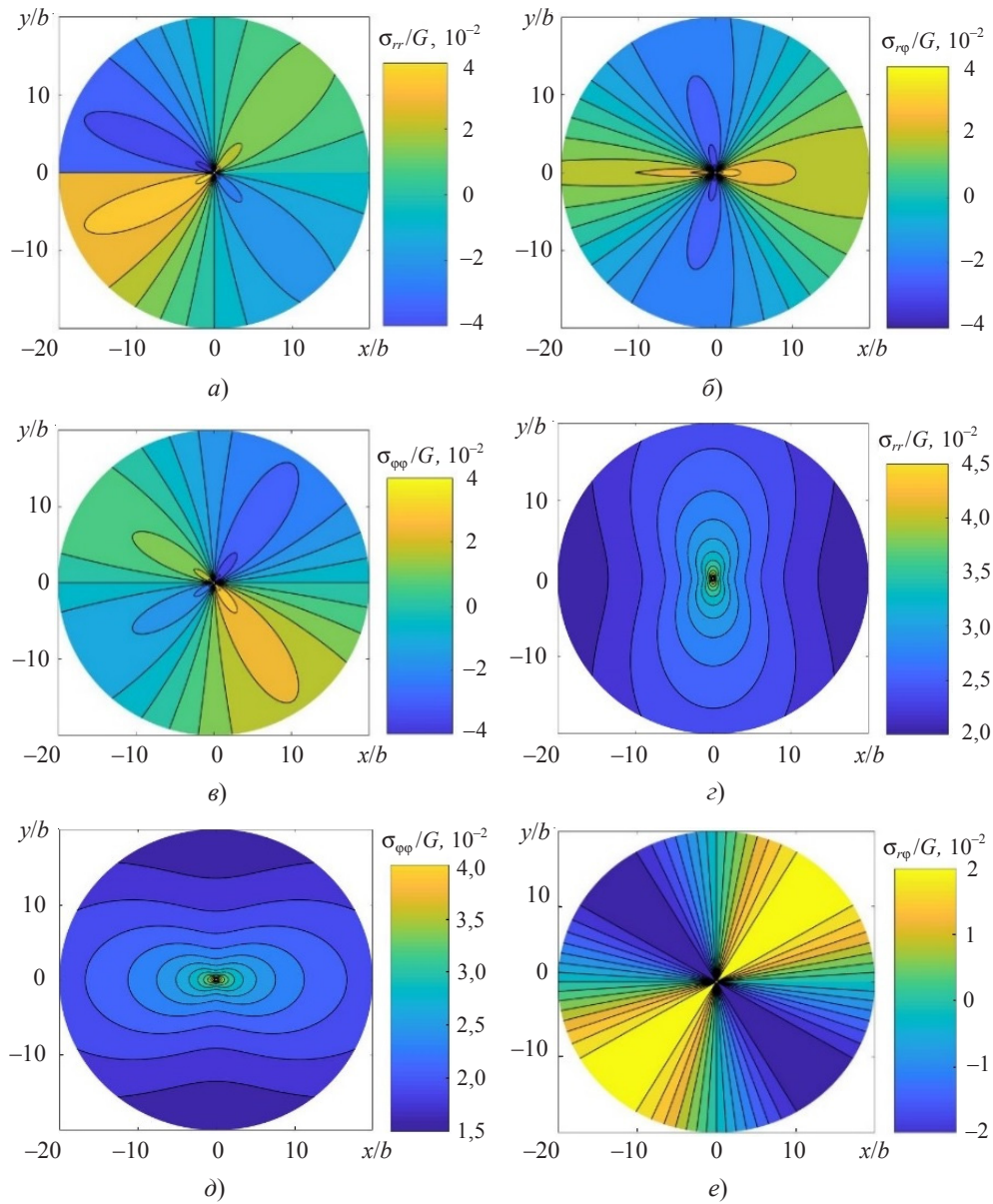


Рис. 4. Изолинии полей компонент тензора упругих напряжений от планарного мезодефекта в окрестности стыка зерен (а, б, в) и дисклинационного диполя в окрестности стыка с отрицательной дисклинацией (г, д, е)

Преобразование полей напряжений для повернутого на угол α мезодефекта, стык которого расположен в полюсе полярной системы, осуществляется простой заменой угла в выражениях, при этом преобразования самого тензора не требуется. К примеру, компонента σ_{rr} тензора напряжений от повернутого в положительном направлении на угол α планарного мезодефекта будет иметь вид:

$$\sigma_{rr}(r, \varphi) = \frac{Dw_{\tau}}{2} \left(2(C(\varphi - \alpha) - 2(\varphi - \alpha)) \cos^2(\varphi - \alpha) + \left(\ln \frac{4a^2}{r^2} - 1 \right) \sin 2(\varphi - \alpha) \right). \quad (5)$$

Так как полярный угол определен на полуинтервале $[0, 2\pi)$, то $\varphi - \alpha \in [0, 2\pi)$. Аналогичные результаты получаются и для случая повернутого дисклинационного диполя. Суммарное поле напряжений от стыка получается как суперпозиция полей от повернутых одиночных диполей и повернутых планарных сдвиговых мезодефектов, формирующихся на границах, входящих в стык.

В качестве примера приведем эпюры компонент тензора упругих напряжений вблизи стыка (рис. 5) для случая одиночной фасетки, содержащей комбинированный мезодефект мощностью $w_n = w_\tau = 0,02$ и длиной $2a = 0,5$ мкм (см. рис. 2а).

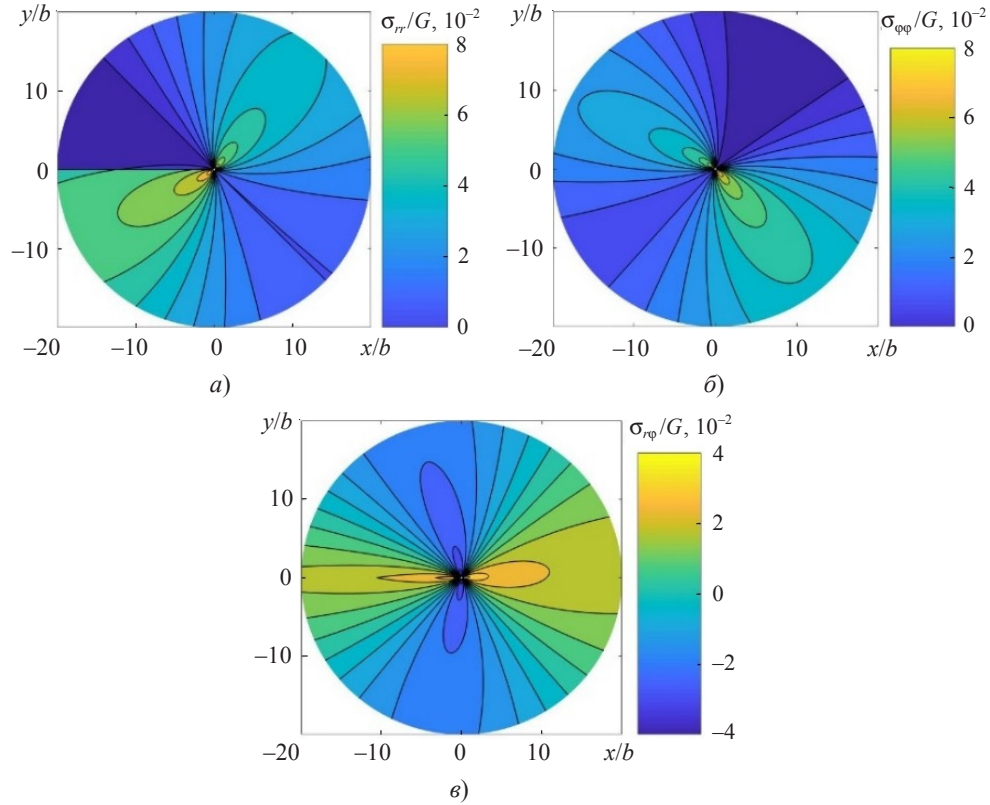


Рис. 5. Изолинии полей компонент тензора упругих напряжений от комбинированного мезодефекта в окрестности стыка с отрицательной дисклинацией: а) σ_{rr}/G , б) $\sigma_{\varphi\varphi}/G$, в) $\sigma_{r\varphi}/G$

Заключение

Получены асимптотические выражения, позволяющие проанализировать пространственное распределение и анизотропию поля внутренних напряжений в окрестности стыка зерен от ротационно-сдвиговых мезодефектов деформационного происхождения. Показано, что компоненты поля напряжений слабо зависят (логарифмически) от длины границ входящих в стык зерен и размера рассматриваемой окрестности.

Показано, что экранирующая дисклинация диполя приводит к появлению зависимости от угла компонент тензора упругих напряжений σ_{rr} , $\sigma_{\varphi\varphi}$ в окрестности стыка. Вклад экранирующей дисклинации в упругое поле диполя дисклинаций в окрестности стыка зерен составляет порядка 10–15%.

Полученные асимптотические выражения могут быть использованы при исследовании кинетики дислокационного ансамбля и анализе условий зарождения микротрещин в окрестности стыков и изломов зерен.

Список литературы

1. Рыбин В.В. *Большие пластические деформации и разрушение металлов*. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
2. Liu Q., Hansen N. Microstructural study of deformation in grain boundary region during plastic deformation in polycrystalline aluminium. *Materials Science and Engineering: A*. 1997. Vol. A234-A236. P. 672–675. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(97\)00300-6](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(97)00300-6).
3. Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science. *Acta Materialia*. 2013. Vol. 61. Iss. 3. P. 782–817. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.10.038.
4. Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. Junction disclinations in plastically deformed crystals. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993. Vol. 41. Iss. 7. P. 2211–2217. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90390-E.
5. Romanov A.E., Kolesnikova A. L. Application of disclination concept to solid structures. *Progress in Materials Science*. 2009. Vol. 54. Iss. 6. P. 740–769. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2009.03.002.
6. Fressengeas C., Beausir B. Tangential continuity of the curvature tensor at grain boundaries underpins disclination density determination from spatially mapped orientation data. *International Journal of Solids and Structures*. 2019. Vol. 156-157. P. 210–215. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2018.08.015.
7. Beausir B., Fressengeas C. Disclination densities from EBSD orientation mapping. *International Journal of Solids and Structures*. 2013. Vol. 50. Iss. 1. P. 137–146. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2012.09.016.
8. Zisman A.A., Rybin V.V. Basic configurations of interfacial and junction defects induced in a polycrystal by deformation of grains. *Acta Materialia*. 1996. Vol. 44. Iss. 1. P. 403–407. DOI: 10.1016/1359-6454(95)00155-8.
9. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. The screening of mesodefects stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation. *Reviews on Advanced Materials Science*. 2012. Vol. 30. No 1. P. 73–89.
10. Zisman A.A., Rybin V.V. Mesoscopic stress field arising from the grain interaction in plastically deformed polycrystals. *Acta Materialia*. 1998. Vol. 46. No 2. P. 457–464. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00275-9.
11. Кириков С.В., Перевезенцев В.Н. К расчету внутренних напряжений от мезодефектов, накапливающихся на границах раздела при пластической деформации твердых тел. *Проблемы прочности и пластичности*. 2019. Т. 81. № 2. С. 212–221. DOI: 10.32326/1814-9146-2019-81-2-212-221.
12. Van der Giessen E., Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 1995. Vol. 3. No 5. P. 689–735. DOI: 10.1088/0965-0393/3/5/008.
13. Rybin V.V., Perevezentsev V.N., Svirina Yu.V. Model of formation of broken dislocation boundaries at joint disclinations. *Technical Physics*. 2016. Vol. 61. No 6. P. 898–903. DOI: 10.1134/S1063784216060190.
14. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F., Svirina J.V. Computer simulation of the dislocation ensemble kinetics in the elastic fields of mesodefects and fragmentation processes during plastic deformation. *Materials Physics and Mechanics*. 2014. Vol. 21. P. 78–98.
15. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. Computer simulation of terminated sub-boundary formation in the disclination elastic field. *Materials Science and Engineering A*. 2009. Vol. 503. No 1-2. P. 137–140. DOI: 10.1016/j.msea.2008.02.055.
16. Nazarov A.A., Wu M.S., Zhou K. Computer simulation of crack formation in a nickel bicrystal nanowire containing a wedge disclination. *The Physics of Metals and Metallography*. 2007. Vol. 104. Iss. 3. P. 274–280. DOI: 10.1134/S0031918X07090098.

17. Wu M.S. Energy analysis of Zener – Griffith crack nucleation from a disclination dipole. *International Journal of Plasticity*. 2017. Vol. 100. P. 142–155. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.10.001.
18. Gutkin M.Yu., Ovidko I.A., Skiba N.V. Generation of nanocracks at grain boundary disclinations in nanocomposite materials. *Reviews on Advanced Materials Science*. 2005. Vol. 10. No 5. P. 483–489.
19. Лихачев В.А., Хайров Р.Ю. *Введение в теорию дисклинаций*. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. 183 с.
20. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N. Analysis of the conditions for the existence of stable microcracks in an elastic stress field from a rotational-shear. *Letters on Materials*. 2021. Vol. 11. No 1. P. 50–54. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-1-50-54>.

References

1. Rybin V.V. *Bolshie plasticheskie deformatsii i razrushenie metallov [Large Plastic Deformation and Destruction of Metals]*. Moscow. Metallurgiya Publ. 1986. 224 p. (In Russian).
2. Liu Q., Hansen N. Microstructural study of deformation in grain boundary region during plastic deformation in polycrystalline aluminium. *Mater. Sci. Eng.* 1997. Vol. A234-A236. P. 672–675. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(97\)00300-6](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(97)00300-6).
3. Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science. *Acta Mater.* 2013. Vol. 61. P. 782–817. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.10.038.
4. Rybin V. V., Zisman A. A., Zolotarevsky N. Yu. Junction disclinations in plastically deformed crystals. *Acta Metal. Mater.* 1993. Vol. 41. P. 2211–2217. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90390-E.
5. Romanov A.E., Kolesnikova A. L. Application of disclination concept to solid structures. *Progress in Mater. Sci.* 2009. Vol. 54. P. 740–769. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2009. 03.002.
6. Fressengeas C., Beausir B. Tangential continuity of the curvature tensor at grain boundaries underpins disclination density determination from spatially mapped orientation data. *Int. J. Solids Struct.* 2019. Vol. 156-157. P. 210–215. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2018.08.015.
7. Beausir B., Fressengeas C. Disclination densities from EBSD orientation mapping. *Int. J. Solids Struct.* 2013. Vol. 50. Iss. 1. P. 137–146. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2012.09.016.
8. Zisman A.A., Rybin V.V. Basic configurations of interfacial and junction defects induced in a polycrystal by deformation of grains. *Acta Mater.* 1996. Vol. 44. Iss. 1. P. 403–407. DOI: 10.1016/1359-6454(95)00155-8.
9. Perevezentsev V.N., Sarafanov G. F. The screening of mesodefected stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation. *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2012. Vol. 30 № 1. P. 73–89.
10. Zisman A.A., Rybin V.V. Mesoscopic stress field arising from the grain interaction in plastically deformed polycrystals. *Acta Mater.* 1998. Vol. 46. P. 457–464. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00275-9.
11. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N. K raschetu vnutrennikh napryazheniy ot mezodefektov, nakaplivayushchikhsya na granitsakh razdela pri plasticheskoy deformatsii tverdykh tel [About the calculation of internal stresses from mesodefected accumulating at the boundaries during plastic deformation of solids]. *Problemy prochnosti i plastichnosti [Problems of Strength and Plasticity]*. 2019. Vol. 81. No 2. P. 212–221. DOI: 10.32326/1814-9146-2019-81-2-212-221 (In Russian).
12. Van der Giessen E., Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Model Simul. Mater. Sci. Eng.* 1995. Vol. 3. No 5. P. 689–735. DOI: 10.1088/0965-0393/3/5/008.
13. Rybin V.V., Perevezentsev V.N., Svirina Y.V. Model of formation of broken dislocation boundaries at joint disclinations. *Tech. Phys.* 2016. Vol. 61. No 6. P. 898–903. DOI: 10.1134/S1063784216060190.
14. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F., Svirina J.V. Computer simulation of the dislocation ensemble kinetics in the elastic fields of mesodefected and fragmentation processes during plastic deformation. *Mater. Phys. Mech.* 2014. Vol. 21. P. 78–98.
15. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. Computer simulation of terminated sub-boundary formation in the disclination elastic field. *Mat. Sci. Eng. A*. 2009. Vol. 503. No 1-2. P. 137–140. DOI: 10.1016/j.msea.2008.02.055.
16. Nazarov A.A., Wu M.S., Zhou K. Computer simulation of crack formation in a nickel

bicrystal nanowire containing a wedge disclination. *Phys. Met. Metallogr.* 2007. Vol. 104. Iss. 3. P. 274–280. DOI: 10.1134/S0031918X07090098.

17. Wu M.S. Energy analysis of Zener–Griffith crack nucleation from a disclination dipole. *Int. J. Plasticity.* 2018. Vol. 100. P. 142–155. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.10.001.

18. Gutkin M. Yu., Ovidko I. A., Skiba N.V. Generation of nanocracks at grain boundary disclinations in nanocomposite materials. *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2005. Vol.10. No 5. P. 483–489.

19. Likhachev V.A., Khayrov R.Iu. *Vvedenie v teoriyu disklinatsiy [Introduction to the Theory of Disclination]*. Leningrad. Leningrad University Publ. 1975. 183 p. (In Russian).

20. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N. Analysis of the conditions for the existence of stable microcracks in an elastic stress field from a rotational-shear. *Letters on Mat.* 2021. Vol. 11. Iss. 1. P. 50–54. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-1-50-54>.

ANALYSIS OF LOCAL FIELDS OF ELASTIC STRESS GENERATED BY ROTATIONAL-SHEAR MESODEFECTS NEAR THE JUNCTIONS OF GRAINS

Kirikov S.V., Pupynin A.S., Svirina Yu.V.

*Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences – Branch of Federal Research Center “Institute of Applied Physics of the RAS”,
Nizhny Novgorod, Russian Federation*

The work is devoted to the study of the structure of the elastic stress field in the area of junctions of grain boundaries containing strain-induced rotational-shear mesodeflects. The jumps in plastic distortion of grains when passing through grain boundaries create additional misorientations on them, the mismatch of which at the junctions of grains leads to the appearance of linear mesodeflects of the rotational type – junction disclinations. Planar mesodeflects of the shear type appear on the flat sections of the boundaries, which are plastic shears uniformly distributed along the boundaries. These mesodeflects create spatially inhomogeneous elastic stress fields near the junctions and ledges of the grains. They increase during plastic deformation and, at sufficiently large value of strain, initiate the formation of a fragmented material structure. Rotational-shear mesodeflects are also the cause of the nucleation and accumulation of microcracks at the stage of viscous fracture of polycrystalline solids.

In this work, asymptotic formulas are obtained that make it possible to analyze the distribution and anisotropy of the internal stress field in the vicinity of the grain junction from rotational-shear mesodeflects. It was found that the components of the stress field weakly depend (logarithmically) on the length of the grain boundaries formatting junction of the grains. It is shown that the screening disclination of the dipole leads to the appearance of an angular dependence of the diagonal components of the elastic stress tensor in the vicinity of the junctions and its contribution to the elastic field of the disclinations dipole is about 10–15%. The obtained asymptotic expressions can be used to study the kinetics of a dislocation ensemble and to analyze the conditions for the nucleation of microcracks in the vicinity of joints and ledges of grains.

Keywords: grain boundary, mesodeflect, junction disclination, internal stress.