

УДК 539.2

DOI: 10.32326/1814-9146-2023-85-4-481-490

## ЗАРОЖДЕНИЕ ТРЕЩИНЫ НА ГРАНИЦЕ ЗЕРНА С ПЕРЕМЕННЫМ ВЕКТОРОМ РАЗОРИЕНТИРОВКИ\*

© 2023 г. **Перевезенцев В.Н., Кириков С.В.**

*Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального  
исследовательского центра «Институт прикладной физики  
им. А.В. Гапонова-Грехова РАН», Нижний Новгород, Российская Федерация*

ksv.kirikov@yandex.ru

*Поступила в редакцию 30.06.2023*

Предложена модель зарождения трещин на «ножевых» границах зерен – прямолинейных, ориентированных вдоль оси растяжения оборванных границ деформационного происхождения, возникающих в результате ротационной неустойчивости в виде дисклинационного сброса на стадии предразрушения материала. Разориентировка «ножевой» границы спадает вплоть до точки обрыва в теле зерна, причем ее уменьшение происходит не непрерывно, а дискретно посредством ответвления вторичных мало- и большеугловых границ. При этом вдоль «ножевой» границы, в точках ее ветвления, возникают линейные мезодефекты ротационного типа – клиновые дисклинации одного знака. Предложена модель зарождения трещины в упругом поле цепочки отрицательных дисклинаций, создающих растягивающие упругие напряжения. При исследовании условий, необходимых для появления трещины, использовался критерий, согласно которому для зарождения трещины требовалось одновременное выполнение силового и энергетического условий. В рамках этой модели рассчитаны критические значения суммарной величины модуля вектора Франка расположенных на «ножевой» границе дисклинаций и среднего градиента ее разориентировки, при достижении которых выполняется критерий зарождения трещины. Рассчитаны зависимости этих величин от длины «ножевой» границы и эффективного радиуса экранирования упругого поля дисклинаций. Показано, что появление трещин наиболее вероятно на границах с наибольшей величиной градиента разориентировки, превышающей 8–20 град/мкм в зависимости от длины границы.

*Ключевые слова:* границы зерен деформационного происхождения, дисклинация, микротрещины.

### Введение

Известно, что вязкое разрушение многих металлов и сплавов наступает после достаточно продолжительной стадии пластической деформации, сопровождающейся разбиением исходных зерен поликристалла на фрагменты – взаимно разориентированные области размером 0,2–0,3 мкм [1]. Установлено что, явление фрагмента-

\* Выполнено в рамках государственного задания ИПФ РАН на выполнение фундаментальных научных исследований по теме №0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).

ции связано с формированием на границах и в стыках зерен специфических мезодефектов – клиновых дисклинаций, создающих мощные неоднородные поля упругих напряжений [2, 3]. Аккомодационная подстройка материала в окрестности этих мезодефектов приводит к формированию вторичных мезодефектов – оборванных дислокационных границ [1, 4]. Их возникновение и распространение в тело зерен, сопровождающееся ветвлением границ и образованием замкнутых фрагментов, и определяют характер эволюции структуры поликристаллических металлов при больших степенях деформации [1, 4]. Создаваемая таким образом фрагментированная структура хотя и является в целом устойчивой в условиях продолжающейся деформации, на ее отдельных участках возможности подстройки материала за счет аккомодационной пластической деформации исчерпываются и единственным альтернативным способом релаксации упругой энергии мезодефектов является зарождение трещин. Впервые электронно-микроскопическое исследование таких «критических» участков фрагментированной структуры, формирующихся на стадии предразрушения в ряде тугоплавких металлов, приведено в статьях [5, 6]. Было показано, что микротрещины располагаются как в стыках зерен, так и вдоль «ножевых» границ – прямолинейных, ориентированных вдоль оси растяжения границ деформационного происхождения, возникающих в результате ротационной неустойчивости в виде дисклинационного сброса. Такие границы зерен имеют переменную разориентировку. При этом изменение разориентировки границ происходит не непрерывно, а дискретно посредством ответвления вторичных мало- и большеугловых границ. В результате вдоль «ножевой» границы возникает цепочка дисклинаций одного знака, расположенных в точках ее ветвления. Теоретически условия появления трещин вблизи дисклинаций рассматривались в публикациях [7–16]. Дисклинационные модели разрушения применительно к деформации мелкозернистых материалов рассматривались в [17–19]. В настоящей статье рассмотрена модель зарождения трещины на границе деформационного происхождения, содержащей дискретное или непрерывное распределение дисклинаций одного знака.

### Описание модели

Образованную в результате дисклинационного сброса «ножевую» границу зерна можно схематически представить в виде исходящей из тройного стыка зерен ориентированной вдоль оси растяжения оборванной границы наклона с затухающей по мере удаления от стыка разориентировкой  $\theta$ , содержащей дискретное распределение клиновых дисклинаций (рис. 1).

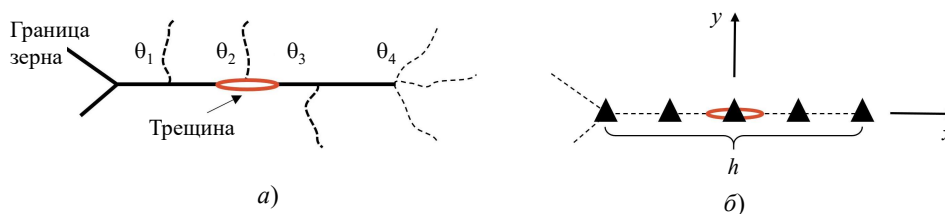


Рис. 1. Схематическое изображение «ножевой» границы (а), ее дисклинационное представление (б)

Ось  $Oz$  направлена перпендикулярно плоскости рисунка. Векторы Франка дисклинаций представляют собой сумму векторов разориентировки границ, образующих

точки ветвления. Мощность дисклинаций (абсолютная величина их вектора Франка) варьируется в достаточно узких пределах и, как правило, не превышает нескольких градусов [1]. В случае если граница содержит цепочку отрицательных дисклинаций, в границе и ее окрестности возникает поле растягивающих напряжений.

Учитывая симметрию суммарного поля напряжений от цепочки дисклинаций относительно плоскости границы, нетрудно показать, что наиболее энергетически выгодным является раскрытие трещины вдоль «ножевой» границы. В этом случае работа по разведению берегов трещины совершается лишь одной компонентой этого поля напряжений – компонентой  $\sigma_{yy}$ . Вследствие того, что граница ориентирована вдоль оси растяжения, компонента  $\sigma_{yy}$  поля внешних напряжений в исследуемом случае отсутствует. Для простоты рассматривается однородное распределение дисклинаций одинаковой мощности (см. рис. 1б). Тогда в случае упругоизотропного тела выражение для  $\sigma_{yy}$  можно записать в виде:

$$\sigma_{yy} = \frac{Gw_z}{2\pi(1-\nu)} \sum_{i=0}^{n-1} \left( 1 + \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{(x-x_i)^2}{R_a^2} \right] \right), \quad (1)$$

где  $n$  – число дисклинаций,  $w_z$  – проекция вектора Франка дисклинации на ось  $Oz$ ,  $G$  – модуль сдвига,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $R_a$  – радиус экранирования упругого поля дисклинаций,  $x_i = ih/(n-1) - h/2$  – координата  $i$ -й дисклинации,  $h$  – длина границы.

Наряду со случаем дискретного распределения дисклинаций рассматривается также случай, когда уменьшение разориентировки границы в процессе дисклинационного сброса происходит непрерывно (экспериментальные доказательства существования таких границ приведены в [20]). Поле напряжений в этом предельном случае можно рассчитать как поле, создаваемое континуальным распределением дисклинаций с однородной плотностью  $\rho_z$ :

$$\sigma_{yy} = \frac{G\rho_z}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{1}{2} \left( x + \frac{h}{2} \right) \ln \left[ \frac{(x+h/2)^2}{R_a^2} \right] - \frac{1}{2} \left( x - \frac{h}{2} \right) \ln \left[ \frac{(x-h/2)^2}{R_a^2} \right] \right). \quad (2)$$

В качестве параметров, характеризующих цепочку дисклинаций, будем использовать ее длину  $h$ , число дисклинаций  $n$  (в случае непрерывного распределения  $n = \infty$ ) и модуль проекции их суммарного вектора Франка  $|\Omega_z|$  на ось  $Oz$ :

$$|\Omega_z| = \begin{cases} |w_z| n, & n < \infty, \\ |\rho_z| h, & n = \infty. \end{cases} \quad (3)$$

Зарождение трещины наиболее вероятно на том участке границы, где усредненные по его длине значения напряжений  $\sigma_{yy}$  максимальны. На рис. 2 приведены распределения нормированных на величину модуля Юнга  $E$  напряжений  $\sigma_{yy}$  вдоль оси  $Ox$ , рассчитанные при  $|\Omega_z| = 25^\circ$ ,  $h = 2$  мкм,  $R_a = 5$  мкм.

В рассматриваемом случае наиболее благоприятным местом для зарождения трещины является центральная область границы. При рассмотрении условий, необходимых для появления трещины, использовался критерий, согласно которому зарождение трещины длиной  $l$  происходит при одновременном выполнении условий [21]:

$$\begin{cases} \sigma_{yy}(x) \geq \sigma_0, & \forall x \in (0, l], y = 0, \\ \Delta E = \Delta E_{cl}(l) + 2\bar{\gamma}l \leq 0. \end{cases} \quad (4)$$

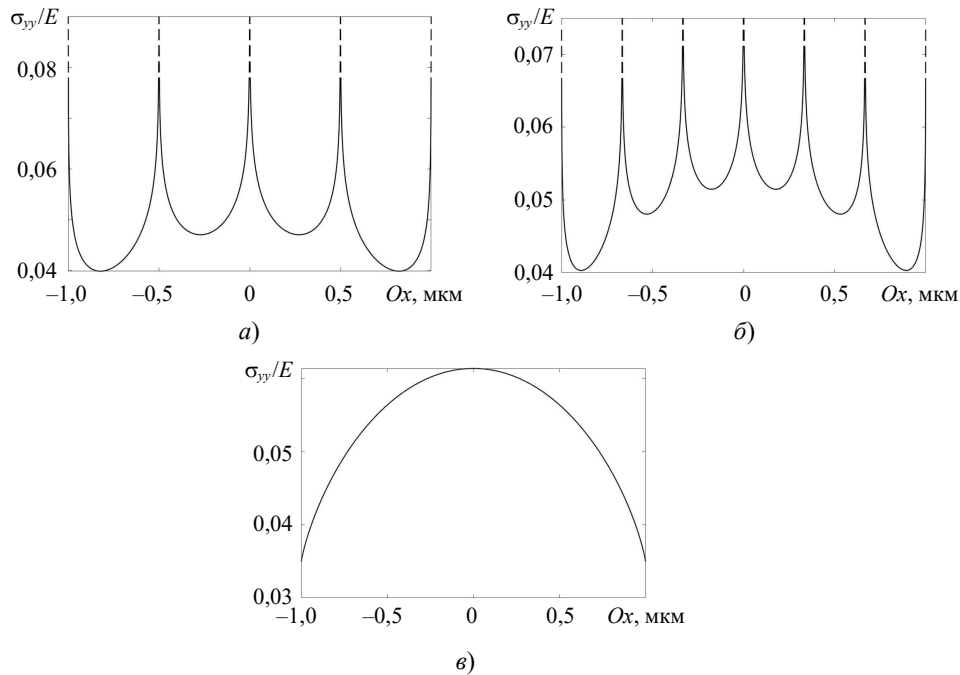


Рис. 2. Распределения напряжений  $\sigma_{yy}/E$  от цепочки дисклинаций:  $n = 5$  (а),  $n = 7$  (б),  $n = \infty$  (в)

Первое условие выполняется в том случае, если растягивающее напряжение в каждой точке  $x \in (0, l]$ ,  $y = 0$  превышает некоторую предельную величину  $\sigma_0$ , характеризующую когезионную прочность границы. Выполнение второго условия имеет место тогда, когда затраты энергии  $2\bar{\gamma}l$  ( $\bar{\gamma}$  – усредненное по длине трещины значение удельной поверхностной энергии) на формирование свободных поверхностей при зарождении трещины меньше, чем величина релаксации удельной упругой энергии системы  $\Delta E_{el}$ :

$$\Delta E_{el}(l) = - \int_{-l/2}^{l/2} F(x) dx, \quad (5)$$

где  $F(x)$  – конфигурационная сила, которая по определению равна величине упругой энергии, высвобождающейся при увеличении длины трещины. В рассматриваемом случае для трещины, расположенной между точками с координатами  $(-x, y = 0)$  и  $(x, y = 0)$ , конфигурационная сила равна:

$$F(x) = \frac{x}{4D} \bar{\sigma}_{yy}(x)^2, \quad (6)$$

где  $D = G/(2\pi(1 - \nu))$ ,  $\bar{\sigma}_{yy}$  – средневзвешенные напряжения:

$$\bar{\sigma}_{yy}(x) = \frac{1}{\pi x} \int_{-x}^x \sigma_{yy}(x') \sqrt{\frac{x'+x}{x'-x}} dx'. \quad (7)$$

### Результаты численного анализа и их обсуждение

В расчетах использовались следующие значения величин:  $G = 45000$  МПа,  $\nu = 0,3$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-4}$  мкм,  $\sigma_0 = E/15$ ,  $\bar{\gamma} = Gb/15$ . Для дальнейшего анализа были введены

две вспомогательные величины:  $l_E$  – минимальная ненулевая длина трещины, при которой при фиксированных параметрах ( $n, h, R_a$ ) выполняется равенство  $\Delta E(l_E) = 0$ ;  $l_\sigma$  – наибольшая длина участка границы, для всех точек  $x$  которого выполняется соотношение  $\sigma_{yy}(x) \geq \sigma_0$ . Величина  $l_\sigma$  определяется из уравнения:

$$\sigma_{yy}(x = -l_\sigma/2 \parallel x = l_\sigma/2) = \sigma_0. \quad (8)$$

При  $l_\sigma \geq l_E$  критерий (4) реализуется, по меньшей мере, на участке  $l_E$ ; при  $l_\sigma < l_E$  выполнение этого критерия невозможно.

На рис. 3а, б приведены зависимости изменения удельной энергии  $\Delta E$  от длины трещины и распределение напряжения  $\sigma_{yy}(x)$  при  $n = 5, h = 2$  мкм,  $R_a = 5$  мкм,  $|\Omega_z| = 20,4^\circ$ , на которых отмечены величины  $l_E$  и  $l_\sigma$ . На рис. 3в приведены зависимости величин  $l_E$  и  $l_\sigma$  от модуля суммарного вектора Франка  $|\Omega_z|$ . Величина  $|\Omega_z| = |\tilde{\Omega}_z|$ , при которой  $l_E|\tilde{\Omega}_z| = l_\sigma|\tilde{\Omega}_z| = \tilde{l}$ , задает промежуток значений  $|\Omega_z| \in [|\tilde{\Omega}_z|, +\infty)$ , где критерий (4) выполнен. Таким образом, величина  $|\tilde{\Omega}_z|$  представляет собой критическую величину суммарной мощности дисклинаций, при достижении или при превышении которой становится возможным зарождение трещины.

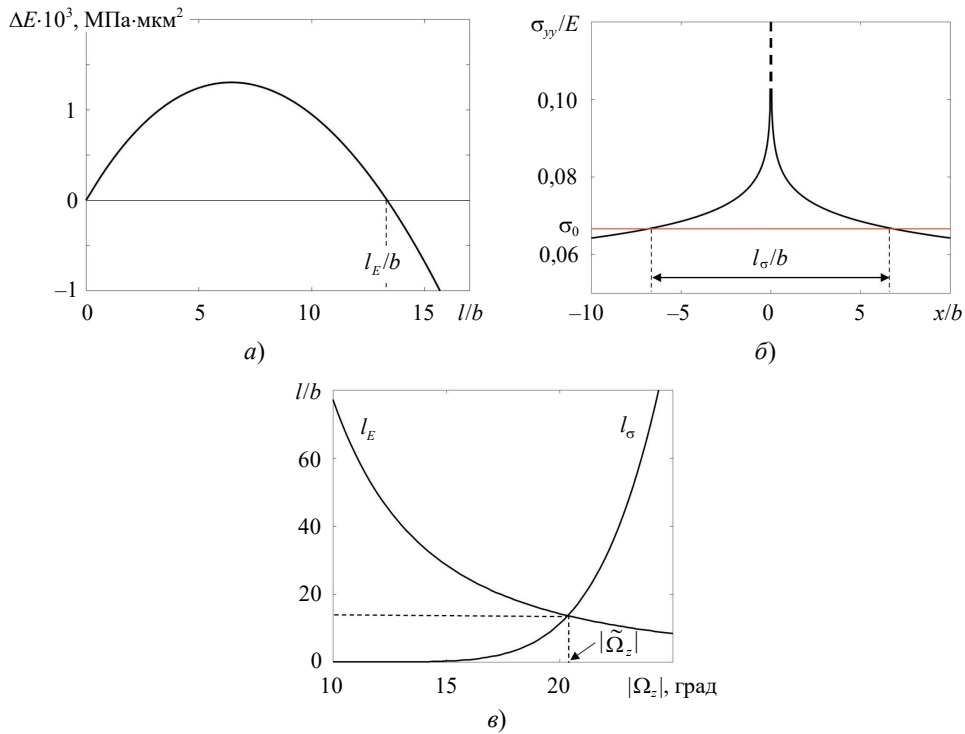


Рис. 3. Зависимость изменения удельной энергии  $\Delta E$  от длины трещины (а); распределение напряжений  $\sigma_{yy}/E$  (б); зависимости  $l_E$  и  $l_\sigma$  от суммарного модуля вектора Франка  $|\Omega_z|$  (в)

На рис. 4а, б приведены критические значения суммарного модуля вектора Франка дисклинаций  $|\tilde{\Omega}_z|$  и среднего градиента разориентировки «ножевой» границы  $|\tilde{\rho}_z|$ , при достижении которых выполняется критерий (4), в зависимости от длины границы  $h$  и при разном количестве дисклинаций  $n$ , рассчитанные при  $R_a = 5$  мкм.

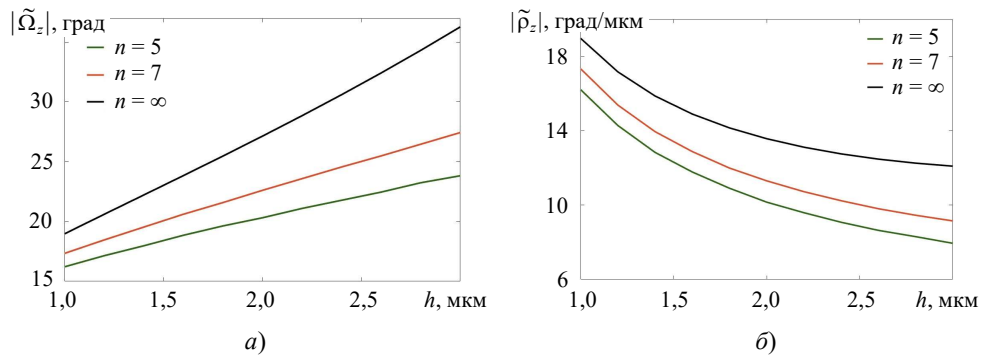


Рис. 4. Зависимости от длины «ножевой» границы  $h$  критического суммарного вектора Франка дисклинаций  $|\tilde{\Omega}_z|$  (а) и среднего градиента разориентировки  $|\tilde{\rho}_z|$  (б)

Как следует из представленных результатов, появление трещин наиболее вероятно на «ножевых» границах с наибольшей величиной градиента разориентировки (превышающей 8–20 град/мкм в зависимости от длины границы). Соответствующие модули векторов Франка дисклинаций составляют 2,0–4,5 градусов, что хорошо согласуется с результатами электронно-микроскопических исследований «ножевых» границ [1]. Следует отметить, что на результаты расчетов  $|\tilde{\Omega}_z|$  и  $|\tilde{\rho}_z|$  влияет выбор эффективного радиуса экранирования упругого поля дисклинаций  $R_a$ . Из общих соображений можно предположить, что величина  $R_a$  зависит от пространственного распределения дисклинационного заряда в окрестности «ножевой» границы и по порядку величины она сопоставима с протяженностью области дисклинационного сброса (с длиной «ножевой» границы). Зависимости критического вектора Франка  $|\tilde{\Omega}_z|$  от  $R_a$ , рассчитанные в случае непрерывного распределения дисклинаций для разных значений длины «ножевой» границы  $h$ , представлены на рис. 5.

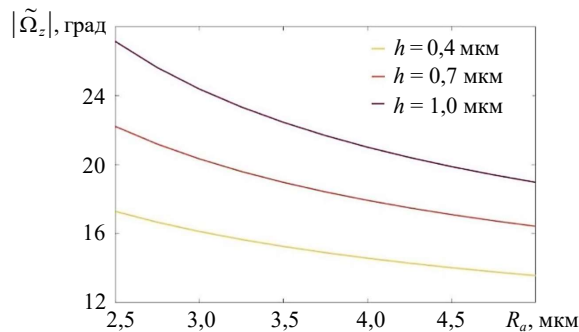


Рис. 5. Зависимости критической величины суммарного вектора Франка дисклинаций  $|\tilde{\Omega}_z|$  от радиуса экранирования  $R_a$

### Заключение

Как следует из проведенного анализа, зарождение трещин на «ножевых» границах, образованных в результате дисклинационного сброса, возможно при сочетании ряда факторов, важнейшим из которых является формирование вдоль границы системы клиновых дисклинаций, создающих высокие суммарные растягивающие напряжения. Эти дисклинации возникают на «ножевой» границе в процессе ответвления от нее вторичных границ зерен и представляют собой разновидность стыковых дис-

клиниций. Поскольку, как показывают экспериментальные данные [1], мощности дисклиниций, расположенных в различных точках ветвления, могут существенно отличаться, то удобным параметром, характеризующим возможность зарождения трещины, является суммарная величина модуля вектора Франка дисклиниций. Другим важным фактором, способным существенно влиять на зарождение трещины, является возможность экранирования упругого поля дисклиниций другими элементами мезодефектной структуры деформированного материала, например, дисклинициями противоположного знака, расположенными на соседних границах фрагментов. Предложенная модель позволяет рассчитать область значений параметров, характеризующих исследуемую систему, в которой выполняются условия для зарождения трещины. Отметим, что рассмотрен лишь один аспект формирования трещины, а именно возможность ее зарождения. Очевидно, что анализ дальнейшего распространения трещины в рамках рассмотренной модели не имеет большого смысла, поскольку эта модель не учитывает возможности блокировки трещины другими элементами фрагментированной структуры материала или ее превращения в пору в процессе аккомодационного пластического течения.

#### Список литературы

1. Рыбин В.В. *Большие пластические деформации и разрушение металлов*. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
2. 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.
3. 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.
4. Rybin V.V., Perevezentsev V.N., Svirina Y.V. A physical model for the initial stages of the fragmentation of polycrystals in the process of developed plastic deformation. *Physics of Metals and Metallography*. 2017. Vol. 118. Iss. 12. P. 1171–1175. DOI 10.1134/S0031918X17120110.
5. Вергазов А.Н., Рыбин В.В. Структурные особенности образования трещин в молибдене. *Физика металлов и металловедение*. 1978. Т. 46. №2. С. 371–383.
6. Рыбин В.В., Вергазов А.Н., Соломко Ю.В. Закономерности внутризеренного разрушения металлов с ОЦК решеткой. *Физика металлов и металловедение*. 1978. Т. 46. №3. С. 582–596.
7. Жуковский И.М., Рыбин В.В. Равновесные трещины во фрагментированных кристаллах. *Физика твердого тела*. 1991. Т. 33. Вып. 4. С. 1286–1292.
8. Wu M.S., Zhou K., Nazarov A.A. Stability and relaxation mechanisms of a wedge disclination in an HCP bicrystalline nanowire. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2006. Vol. 14. No 4. P. 647–661. DOI: 10.1088/0965-0393/14/4/008.
9. Luo J., Zhou K., Xiao Z.M. Stress investigation on a Griffith crack initiated from an eccentric disclination in a cylinder. *Acta Mechanica*. 2009. Vol. 202. P. 65–77. DOI: 10.1007/s00707-008-0010-1.
10. Wang T., Luo J., Xiao Z.M., Chen J. On the nucleation of a Zener crack from a wedge disclination dipole in the presence of a circular inhomogeneity. *European Journal of Mechanics – A/Solids*. 2009. Vol. 28. No 4. P. 688–696. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2009.03.006.
11. Luo J., Li Z., Xiao Z. On the stress field and crack initiation behavior of a disclinated nanowire with surface stress effects. *Acta Mechanica*. 2014. Vol. 225. Iss. 11. P. 3187–3197. DOI: 10.1007/s00707-014-1104-6.
12. Wu M.S. Energy analysis of Zener–Griffith crack initiation from a disclination dipole. *International Journal of Plasticity*. 2018. Vol. 100. P. 142–155. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.10.001.
13. Wu M.S. Crack nucleation from a wedge disclination dipole with shift of rotation axes. *International Journal of Fracture*. 2018. Vol. 212. Iss. 1. P. 53–66. DOI: 10.1007/s10704-018-0292-9.

14. Кириков С.В., Перевезенцев В.Н. Анализ условий существования стабильных микротрещин в упругом поле напряжений от ротационно-сдвигового мезодефекта. *Письма о материалах*. 2021. Т. 11. №1. С. 50–54. DOI: 10.22226/2410-3535-2021-1-50-54.
15. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N., Pupynin A.S. On the effect of external stress on the stability of a crack located near a wedge disclination dipole. *Physics of Metals and Metallography*. 2021. Vol. 122. Iss. 8. P. 820–824. DOI 10.1134/S0031918X21070036.
16. Perevesentsev V.N., Kirikov S.V., Zolotarevsky N.Yu. Analysis of the conditions of crack initiation during lattice dislocations transition through grain boundary. *Materials Physics and Mechanics*. 2022. Vol. 49. Iss. 1. P. 173–181. DOI 10.18149/MPM.4912022\_13.
17. Gutkin M.Y., Ovid'ko I.A. Disclinations, amorphization and microcrack generation at grain boundary junctions in polycrystalline solids. *Philosophical Magazine A*. 1994. Vol. 70. No 4. P. 561–575. DOI: 10.1080/01418619408242248.
18. Gutkin M.Y., Ovid'ko I.A. Nanocracks at grain boundaries in nanocrystalline materials. *Philosophical Magazine Letters*. 2004. Vol. 84. Iss. 10. P. 655–663. DOI: 10.1080/09500830512331329123.
19. Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Triple junction nanocracks in deformed nanocrystalline materials. *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52. Iss. 5. P. 1201–1209. DOI: 10.1016/j.actamat.2003.11.004.
20. Тюменцев А.Н., Коротаев А.Д., Дитенберг Ю.П. и др. *Закономерности пластической деформации высокопрочных и нанокристаллических металлических материалов*. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2018. 256 с.
21. Martin E., Leguillon D., Carrere N. Finite fracture mechanics: a useful tool to analyze cracking mechanisms in composite materials. In: *The Structural Integrity of Carbon Fiber Composites*. Cham, Switzerland: Springer, 2017. P. 529–548. DOI: 10.1007/978-3-319-46120-5\_19.

#### 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. 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.
3. 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.
4. Rybin V.V., Perevezentsev V.N., Svirina Y.V. A physical model for the initial stages of the fragmentation of polycrystals in the process of developed plastic deformation. *Physics of Metals and Metallography*. 2017. Vol. 118. Iss. 12. P. 1171–1175. DOI 10.1134/S0031918X17120110.
5. Vergazov A.N., Rybin V.V. Strukturnye osobennosti obrazovaniya treshchin v molibdene [Structural features of the formation of cracks in molybdenum]. *Fizika metallov i metallovedenie* [Physics of Metals and Metallography]. 1978. Vol. 46. No 2. P. 371–383 (In Russian).
6. Rybin V.V., Vergazov A.N., Solomko Yu.V. Zakonomernosti vnutrizerennogo razrusheniya metallov s OTsK reshetkoy [Patterns of intragrain destruction of metals with a BCC lattice]. *Fizika metallov i metallovedenie* [Physics of Metals and Metallography]. 1978. Vol. 46. Iss. 3. P. 582–596 (In Russian).
7. Zhukovsky I.M., Rybin V.V. Ravnovesnye treshchiny vo fragmentirovannykh kristallakh [Equilibrium cracks in fragmented crystals]. *Fizika tverdogo tela* [Physics of the Solid State]. 1991. Vol. 33. No 4. P. 1286–1292 (In Russian).
8. Wu M.S., Zhou K., Nazarov A. A. Stability and relaxation mechanisms of a wedge disclination in an HCP bicrystalline nanowire. *Model. Simul. Mat. Sci. Eng*. 2006. Vol. 14. No 4. P. 647–661. DOI: 10.1088/0965-0393/14/4/008.
9. Luo J., Zhou K., Xiao Z.M. Stress investigation on a Griffith crack initiated from an eccentric disclination in a cylinder. *Acta Mech*. 2009. Vol. 202. P. 65–77. DOI: 10.1007/s00707-008-0010-1.
10. Wang T., Luo J., Xiao Z.M., Chen J. On the nucleation of a Zener crack from a wedge disclination dipole in the presence of a circular inhomogeneity. *Eur. J. Mech. A Solids*. 2009. Vol. 28. No 4. P. 688–696. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2009.03.006.



11. Luo J., Li Z., Xiao Z. On the stress field and crack initiation behavior of a disclinated nanowire with surface stress effects. *Acta Mech.* 2014. Vol. 225. Iss. 11. P. 3187–3197. DOI: 10.1007/s00707-014-1104-6.
12. Wu M.S. Energy analysis of Zener – Griffith crack initiation from a disclination dipole. *Int. J. Plast.* 2018. Vol. 100. P. 142–155. DOI: 10.1016/j.ijplas.2017.10.001.
13. Wu M.S. Crack nucleation from a wedge disclination dipole with shift of rotation axes. *Int. J. Fract.* 2018. Vol. 212. Iss. 1. P. 53–66. DOI: 10.1007/s10704-018-0292-9.
14. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N. Analiz usloviy sushchestvovaniya stabilnykh mikro-treshchin v uprugom pole napryazheniy ot rotatsionno-sdvigovogo mezodefekta [Analysis of the conditions for the existence of stable microcracks in an elastic stress field from a rotational shear mesodefekt]. *Pisma o materialakh [Letters on Materials]*. 2021. Vol. 11. No 1. P. 50–54 (In Russian).
15. Kirikov S.V., Perevezentsev V.N., Pupylin A.S. On the effect of external stress on the stability of a crack located near a wedge disclination dipole. *Phys. Met. Metallogr.* 2021. Vol. 122. Iss. 8. P. 820–824. DOI: 10.1134/S0031918X21070036.
16. Perevezentsev V.N., Kirikov S.V., Zolotarevsky N.Yu. Analysis of the conditions of crack initiation during lattice dislocations transition through grain boundary. *Mat. Phys. and Mech.* 2022. Vol. 49. Iss. 1. P. 173–181. DOI: 10.18149/MPM.4912022\_13.
17. Gutkin M.Y., Ovid'ko I.A. Disclinations, amorphization and microcrack generation at grain boundary junctions in polycrystalline solids. *Philos. Mag.* 1994. Vol. 70. No 4. P. 561–575. DOI: 10.1080/01418619408242248.
18. Gutkin M.Y., Ovid'ko I.A. Nanocracks at grain boundaries in nanocrystalline materials. *Philos. Mag. Lett.* 2004. Vol. 84. Iss. 10. P. 655–663. DOI: 10.1080/09500830512331329123.
19. Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Triple junction nanocracks in deformed nanocrystalline materials. *Acta Mater.* 2004. Vol. 52. Iss. 5. P. 1201–1209. DOI: 10.1016/j.actamat.2003.11.004.
20. Tyumentsev A.N., Korotaev A.D., Ditenberg Yu.P. et al. *Zakonomernosti plasticheskoy deformatsii vysokoprochnykh i nanokristallicheskiy metallicheskiy materialov [Patterns of Plastic Deformation of High-Strength and Nanocrystalline Metallic Materials]*. Novosibirsk. SO RAN Publ. 2018. 256 p. (In Russian).
21. Martin E., Leguillon D., Carrere N. Finite fracture mechanics: a useful tool to analyze cracking mechanisms in composite materials. In: *The Structural Integrity of Carbon Fiber Composites*. Cham, Switzerland. Springer. 2017. P. 529–548. DOI: 10.1007/978-3-319-46120-5\_19.

## CRACK INITIATION AT GRAIN BOUNDARY WITH A VARIABLE MISORIENTATION VECTOR\*

**Perevezentsev V.N., Kirikov S.V.**

*Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences – Branch of Federal Research Center “Institute of Applied Physics n. a. A.V. Gaponov-Grekhov of the RAS”, Nizhny Novgorod, Russian Federation*

ksv.kirikov@yandex.ru

*Received by the Editor 2023/06/30*

A model is proposed for the initiation of cracks at “knife” grain boundaries, i.e., rectilinear, broken boundaries of deformation origin, oriented along the tension axis, arising as a result of rotational incompatibility in the form of a disclination dump at the stage of pre-fracture of the material. The disorientation of the “knife” boundary decreases down to the breaking point in the body of the grain, and its decrease (rotational instability damping) occurs not continuously, but discretely through the branching of secondary low- and high-angle boundaries. In this case, along the “knife” boundary, at the points of its branching, linear mesodeflects of the rotational type arise-wedge disclinations of

---

\* The work was carried out within the Russian state task for fundamental scientific research (FFUF-2021-0025).

the same sign. A model of crack initiation in an elastic field of a chain of negative disclinations that create tensile elastic stresses is proposed. When analyzing the conditions for crack initiation, a combined criterion was used, according to which the simultaneous fulfillment of force and energy conditions was required for crack initiation. Within the framework of this model, the critical values of the total value of the Frank vector of disclinations located on the “knife” boundary and the average gradient of its misorientation are calculated, upon reaching which the criterion of crack initiation is satisfied. The dependences of these quantities on the length of the “knife” boundary and the effective screening radius of the elastic field of disclinations are calculated. It is shown that the appearance of cracks is most likely at the boundaries with the largest misorientation gradient (exceeding 8–20 deg/ $\mu\text{m}$ , depending on the length of the boundary).

*Keywords:* deformation induced grain boundaries, disclination, microcracks.