

УДК 539.3

DOI: 10.32326/1814-9146-2024-86-4-505-524

**ПРЯМАЯ ФИЗИЧЕСКИ-ОРИЕНТИРОВАННАЯ
УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ:
ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ
СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ НА НЕУПРУГОЕ
ДЕФОРМИРОВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ***

© 2024 г.

Вяткин Я.В., Трусов П.В.

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Пермь, Российская Федерация*

viatkiniv@gmail.com

Поступила в редакцию 07.10.2024

Приведено обоснование актуальности детального, основанного на анализе физических механизмов неупругого деформирования исследования влияния свободных поверхностей образцов на результаты механических испытаний (масштабных факторов), обусловленное все более широким использованием миниатюрных изделий.

Предлагаемая статья посвящена построению прямой модели упруго-вязкопластичности для описания поведения кристаллитов мезоуровня и ее применению для анализа влияния свободной поверхности на физико-механические свойства моно- и поликристаллических материалов/конструкций из металлов и сплавов. Описана базовая модель кристаллита на основе физических теорий пластичности, в которой явно учитываются механизмы неупругого деформирования и их носители. Рассматриваются гранецентрированные кристаллы, где пластические сдвиги могут реализовываться по 12 доступным системам дислокационного скольжения. В модели использованы закон нелинейного упрочнения с насыщением и подмодель решеточного спина. Предложен вариант соотношений для описания понижения критических касательных напряжений на системах скольжения вблизи свободной границы. Проведен ряд численных экспериментов по решению начально-краевых задач исследования деформирования монокристаллических образцов. Рассмотрены несколько сценариев нагружения и несколько характерных размеров образца с целью выявления наличия эффекта масштаба. Решения поставленных задач получены с помощью метода конечных элементов, реализованного в инженерном программном пакете. Конститутивная модель кристаллита и алгоритмы для ее работы реализованы в специальном программном модуле для описания пользовательских материалов. Результаты показали значительное влияние размера образца на механический отклик в

* Выполнено при финансовой поддержке Министерством науки и высшего образования РФ в рамках реализации национального проекта «Наука и университеты» (в рамках выполнения госзадания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002).

процессе неупругого деформирования. Продемонстрировано снижение характерных значений предела текучести и напряжений течения образца с уменьшением его размеров.

Ключевые слова: миниатюрные изделия, физико-механические характеристики, масштабный фактор, многоуровневая упруговязкопластическая модель, критические напряжения сдвига, влияние свободной поверхности.

Введение

Для удовлетворения существующих потребностей современной промышленности и ее дальнейшего развития необходимо создавать новые технологии производства деталей и конструкций с требуемыми рабочими характеристиками. Широкий класс изделий из металлов и сплавов производится с использованием методов термомеханической обработки. Проектирование, анализ и совершенствование подобных процессов, в которых реализуются интенсивные пластические деформации, невозможны без создания соответствующих математических моделей. Ключевым компонентом таких моделей являются определяющие соотношения (ОС) (или конститутивные модели (КМ)) для описания поведения рассматриваемых физических тел при различных термомеханических воздействиях [1–3]. Управляя технологическими режимами, можно достигать рациональной мезо- и микроструктуры материалов, что сказывается на физико-механических свойствах материалов на макроуровне и эксплуатационных характеристиках изделий. Для анализа процессов изготовления и эксплуатации готовых изделий в этом случае требуется разработка и использование многоуровневых моделей, которые учитывают физические процессы и их носители на различных структурно-масштабных уровнях. Под носителями понимаются физические объекты, движение, изменение конфигурации которых определяет течение рассматриваемых физических процессов; для неупругого деформирования к таковым в первую очередь относятся дислокации. Для их учета в структуру КМ вводятся внутренние переменные и соответствующие эволюционные соотношения для них. Такой тип КМ базируется на широком классе физических теорий пластичности (ФТП) [4, 5].

В связи с расширяющимся использованием в технике миниатюрных изделий [6, 7] возникает вопрос о возможности оценки их рабочих характеристик при использовании данных о физико-механических свойствах материала, полученных в испытаниях макрообразцов. Даже при анализе, казалось бы, простейших натуральных испытаний возникают различные вопросы. Прежде всего: поведение чего именно исследуется в этих опытах – материала или образца (конструкции)? Описывается ли поведение материала в объеме исследуемого изделия и вблизи его границы одними и теми же ОС или параметрами ОС [8]? Известно, что характерные размеры как самого образца, так и элементов его микроструктуры могут оказывать существенное влияние на механический отклик, то есть могут проявляться так называемые эффекты масштаба [9, 10]. Некорректный учет этих эффектов может привести к ряду проблем, например ухудшению эксплуатационных свойств и повышению стоимости изготовления [11]. В моно- и поликристаллах наличие внутренних и свободных внешних границ оказывает существенное влияние на реализацию одного из основных механизмов пластического деформирования – скольжения решеточных дислокаций по системам скольжения (СС) [12]. Таким образом, взаимодействие дефектов материалов с различными типами поверхностей кристаллитов является ключевым

фактором при описании эффектов масштаба. К сожалению, многие известные и общепринятые модели ФТП не учитывают явно влияние границ различного типа в структуре КМ.

Для малоразмерных исследований одной из самых доступных морфологических форм являются тонкие пленки (или фольги). Их форма достигается, как правило, путем прокатки, в процессе которой сильно изменяется внутренняя структура материала, поэтому обычно после деформирования проводят отжиг изделий для осуществления возврата, рекристаллизации и гомогенизации структуры. Результаты натуральных механических испытаний над образцами различных размеров представлены в статьях [13–21]. Обычно эксперименты проводятся на образцах в форме тонкой двусторонней лопатки («dog bone»). При механических испытаниях большая часть внешней поверхности свободна от напряжений. Основным предметом исследований являлось изучение влияния отношения толщины образца t к среднему размеру зерен d на процесс пластического деформирования. Исследовалась эволюция дислокационной структуры в приповерхностных и внутренних частях образца методами просвечивающей электронной микроскопии. Результаты показали, что при значениях параметра t/d , меньших определенной величины (никель – 3,6, медь – 6,2, кобальт – 2,5), предел текучести образцов оказался существенно ниже, чем тот, который предсказывает закон Холла – Петча [22, 23] для того же размера зерна. Анализ микроструктуры показал, что после механических испытаний плотность дислокаций в кристаллитах вблизи свободной поверхности существенно ниже, чем в объемной части. Были также замечены повышенные значения шероховатости поверхности, что может свидетельствовать об интенсивном выходе дислокаций на свободную границу. Отмечено, что зоны активного скольжения были в относительном отдалении от внутренних границ зерен. В большинстве упомянутых исследований выдвигаются следующие общие гипотезы об основных физических механизмах этих явлений:

1) уменьшение доли межкристаллитных границ, что приводит к понижению влияния зернограничного упрочнения;

2) облегченный выход дислокаций из приграничной области образцов на свободную поверхность, что приводит к их повышенной мобильности на благоприятно ориентированных СС.

Реализация указанных механизмов обуславливает неоднородность распределения сдвигов по СС в пределах даже отдельно взятого кристаллита уже на начальных этапах деформации.

Подмодель для описания поведения монокристаллов является основным элементом многоуровневых моделей для описания поведения поликристаллов. Кроме того, в последние десятилетия предпринимаются значительные усилия по разработке технологий изготовления монокристаллических деталей (например, лопаток газотурбинных двигателей), обладающих уникальными физико-механическими свойствами (в частности – жаростойкостью). В натуральных испытаниях на одноосное сжатие монокристаллических образцов, имеющих форму прямоугольных параллелепипедов, было обнаружено наличие фрагментации сдвига по объему [24]. Результаты показывают, что те области, которые не контактировали с пуансонами испытательной машины и чьи СС имели выход на свободную поверхность, испытывали большие сдвиговые пластические деформации. На основе результатов таких экспериментов делается вывод о влиянии так называемых кристаллогеометрических факторов [25], например ориентации СС относительно свободных граней образца.

При построении КМ для изучения миниатюрных образцов исследователи [20, 26] выделяют некоторый приповерхностный слой, который отличается своими пластическими свойствами от «внутренней» части материала. В статье [27] предлагается использовать обобщение соотношения Холла – Петча с целью учета характерных размеров образца и объемной доли приповерхностного слоя. Предлагаемые соотношения ориентированы на предсказание предела текучести при одноосных нагрузках и канонической форме образца. Как правило, в моделях ФТП описание многих физических явлений, в том числе эффектов масштаба, находит свое отражение в соотношениях для закона упрочнения СС. В статье [28] в качестве внутренних переменных вводятся плотности дислокаций на СС, через которые записываются эволюционные соотношения для эффективных (комбинация из действующих внешних напряжений и остаточных микронапряжений) и критических касательных напряжений на СС. В этих соотношениях учитывается образование остаточных микронапряжений за счет скопления дислокаций одного знака, что может уменьшить эффективные напряжения, и повышение критических напряжений с ростом плотностей дислокаций в целом. Разупрочнение приповерхностных областей реализуется с использованием предположения об отсутствии скопления дислокаций одного знака вблизи свободной поверхности в силу их выхода на границу. В статье [29] учитывается понижение критических касательных напряжений в начальный момент времени для тех областей поликристалла, которые близки к свободной поверхности и чьи СС имеют наиболее благоприятную ориентацию для выхода дислокаций.

Для корректного описания механизма выхода дислокаций на свободные поверхности в моделях мезоуровня целесообразно прибегнуть к оценке результатов, полученных на моделях микро- и наноуровня. Из классической теории дислокаций [30, 31] известно, что дислокации образуют неоднородные поля напряжений вокруг себя, которые убывают обратно пропорционально расстоянию от ядра дислокации. При наличии в относительной близости свободной поверхности поля напряжений от дислокаций должны удовлетворять тривиальным статическим граничным условиям. Существует ряд публикаций [32–40], где в рамках линейной теории упругости описывались решения и методы нахождения граничных условий для полей напряжений от дислокации вблизи свободной поверхности. В большинстве упомянутых исследований установление аналитических решений приводит к громоздким системам интегро-дифференциальных уравнений, из-за чего они носят скорее «академический» характер. Это обстоятельство существенно осложняет их практическое применение в структуре моделей ФТП. Больше применение они находят в моделях дискретной дислокационной динамики (ДДД) [41, 42], где рассматривается движение дислокаций. Указанные сложности вынуждают прибегнуть к анализу и оценке некоторых частных случаев. Следует отметить, что результаты, полученные с помощью ДДД, позволяют заполнить «бреешь» между моделями нано-, микро- и мезоуровня. Например, авторы статьи [43] при оценке роста и развития трещины за счет ее взаимодействия с дислокациями применяли классическое решение для дислокации вблизи свободной поверхности. Результаты трехмерных расчетов дислокационной динамики [44] показывают, что глубина значимого влияния свободной поверхности составляет порядка 10 мкм.

Исходя из вышесказанного, представляется актуальной задача учета влияния свободной поверхности на физико-механические свойства моно- и поликристаллических миниатюрных изделий, в частности, с использованием базовой модели, из-

ложенной ниже и ориентированной на исследование напряженно-деформированного состояния кристаллита мезоуровня. Таким образом, цель настоящей статьи – построение и анализ физически-ориентированной модели для исследования механизма понижения критических касательных напряжений на СС за счет влияния свободной поверхности. Предлагаемое соотношение должно быть приемлемо для использования в описанной ниже базовой прямой упруговязкопластической КМ кристаллита мезоуровня на основе ФТП и иметь ясный физический и геометрический смысл.

1. Описание конститутивной модели материала

Рассматривается независимая от выбора системы координат символьная форма записи тензоров произвольного ранга. Точкой обозначается операция скалярного произведения, двоеточием – двойное скалярное произведение (свертка) тензоров. Для обозначения тензоров ранга выше первого использованы прописные жирные буквы, для векторов – строчные жирные, для скаляров – строчные курсивные.

1.1. Базовая прямая модель упруговязкопластичности кристаллита мезоуровня. Движение деформируемой среды представляется совокупностью пластических сдвигов по системам скольжения, жесткого поворота кристаллической решетки и упругого искажения решетки. Вводится полная мера скорости деформации \mathbf{z} :

$$\mathbf{z} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \boldsymbol{\omega}, \quad (1)$$

где $\hat{\nabla} \mathbf{v}$ – градиент (определенный в актуальной конфигурации) скорости перемещений; $\boldsymbol{\omega}$ – спин жесткой подвижной системы координат (ПСК), связанной с кристаллографической решеткой [45]. Полная мера \mathbf{z} , в свою очередь, аддитивно раскладывается на упругую \mathbf{z}^e и неупругую \mathbf{z}^{in} составляющие меры скорости деформации:

$$\mathbf{z} = \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{in}. \quad (2)$$

Приведенные меры деформации являются несимметричными и индифферентными [46]. Используя жесткий ортонормированный базис ПСК \mathbf{k}_i ($i = 1, 2, 3$), связанный с базисом кристаллографической системы координат (КСК), для описания квазитвердого движения введен спин ПСК [45]:

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{I} \times (\mathbf{k}_3 \otimes \mathbf{k}_1 \otimes \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2 \otimes \mathbf{k}_1 \otimes \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_1 \otimes \mathbf{k}_2 \otimes \mathbf{k}_3) : (\hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \mathbf{z}^{in}). \quad (3)$$

Следует отметить, что в отсчетной естественной конфигурации базисы КСК и ПСК совпадают. Упругое определяющее соотношение записывается в скоростной форме с использованием коротационной производной, ассоциированной со спином $\boldsymbol{\omega}$:

$$\boldsymbol{\sigma}^{cr} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{p} : \mathbf{z}^e, \quad (4)$$

где индекс «cr» означает коротационную производную, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, \mathbf{p} – тензор 4-го ранга упругих свойств кристаллита. Учитывая соотношения (1) и (2), получаем гипопругий закон:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{p} : (\hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{in}). \quad (5)$$

Тензор \mathbf{p} для кубической симметрии можно представить так [47, 48]:

$$\mathbf{p} = \lambda \mathbf{C}_I + \mu (\mathbf{C}_{II} + \mathbf{C}_{III}) + \eta \sum_{k=1}^3 \mathbf{p}_k \otimes \mathbf{p}_k \otimes \mathbf{p}_k \otimes \mathbf{p}_k, \quad (6)$$

где \mathbf{p}_k – базис КСК в естественной конфигурации ($k = 1, 2, 3$); \mathbf{C}_I , \mathbf{C}_{II} и \mathbf{C}_{III} – первый,

второй и третий изотропные тензоры четвертого ранга [49]; λ, μ, η – три независимых упругих модуля, которые являются аналогами коэффициентов Ламе для кубической симметрии: $\lambda = \Pi_{1122}, \mu = \Pi_{1212}, \eta = \Pi_{1111} - \Pi_{1122} - 2\Pi_{1212}$ (компоненты Π определены в базисе ПСК). Тогда, подставляя (6) в (4), получаем:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \lambda(\mathbf{z}^e : \mathbf{I})\mathbf{I} + \mu(\mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{eT}) + \eta \sum_{k=1}^3 (\mathbf{z}^e : \mathbf{p}_k \otimes \mathbf{p}_k) \mathbf{p}_k \otimes \mathbf{p}_k. \quad (7)$$

Неупругая составляющая \mathbf{z}^{in} меры скорости деформации определяется по скоростям сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}$ за счет скольжения краевых дислокаций по СС $k = 1, \dots, K$ (K – количество СС), которые известны для каждого типа кристаллической решетки:

$$\mathbf{z}^{\text{in}} = \sum_{k=1}^3 \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \otimes \mathbf{n}^{(k)}, \quad (8)$$

где $\mathbf{b}^{(k)}$ – нормированный вектор Бюргера и $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичная нормаль плоскости k -й СС в разгруженной конфигурации. Скорости сдвигов определяются в соответствии с вязкопластическим законом Хатчинсона [50] для удвоенного числа СС (с положительными и отрицательными сдвигами):

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^m \text{H}(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad (9)$$

где $\tau^{(k)}$ и $\tau_c^{(k)}$ – действующие и критические касательные напряжения на k -й СС; $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвигов при касательном напряжении, равном критическому; m – параметр скоростной чувствительности; H – функция Хэвисайда. В качестве условия активности СС (начала скольжения дислокаций) используется закон Шмида:

$$\tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} = \tau_c^{(k)}. \quad (10)$$

Скорости изменения критических касательных напряжений полагаются определяемыми аддитивным соотношением:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_{\text{int}}^{(k)} + \dot{\tau}_{\text{ext}}^{(k)}, \quad (11)$$

где $\dot{\tau}_{\text{int}}^{(k)}$ и $\dot{\tau}_{\text{ext}}^{(k)}$ – вклады за счет механизмов упрочнения/разупрочнения, реализуемых соответственно во внутренних и в приграничных областях. Для определения первой составляющей примем анизотропный нелинейный закон упрочнения, отражающий зависимость критических напряжений от накопленных сдвигов и текущих скоростей сдвигов по СС [51, 52]:

$$\dot{\tau}_{\text{int}}^{(k)} = \sum_{l=1}^K h^{(k,l)} \dot{\gamma}^{(l)}, \quad (12)$$

$$h^{(k,l)} = [q_{\text{lat}} + (1 - q_{\text{lat}}) \delta^{(k,l)}] h^{(l)}, \quad h^{(l)} = h_0 \left| 1 - \frac{\tau_c^{(l)}}{\tau_{\text{sat}}} \right|^\chi,$$

где q_{lat} – параметр латентного упрочнения, $\delta^{(k,l)}$ – дельта Кронекера, τ_{sat} – напряжения насыщения, h_0 и χ – параметры модели.

1.2. Определение изменения критических касательных напряжений на системах дислокационного скольжения вблизи свободной поверхности. Строгое решение задачи о распределении поля тензора напряжений от единичной дислокации вблизи свободной поверхности даже в рамках изотропной линейной теории упругости

приводит в общем случае к довольно громоздким аналитическим выражениям, которые крайне затруднительно использовать в прикладных расчетах для моделей типа ФТП. Однако реализация пластических деформаций скольжением краевых дислокаций по СС носит массовый и стохастический характер. Это открывает возможность для определения приближенных оценок влияния свободных поверхностей на изменение критических касательных напряжений на СС за счет анализа ряда относительно простых, но наиболее показательных ситуаций с помощью моделей, описывающих физику нижележащего уровня. На основе ряда исследований по схожей тематике [26, 28, 29] и анализа имеющихся решений [39] предлагается возможный вариант описания процесса разупрочнения СС вблизи свободной поверхности, который в дальнейшем будет называться релаксацией.

С позиции классической теории дислокаций [30, 31] рассмотрим отдельно взятую краевую дислокацию (с вектором Бюргера \mathbf{b} и единичным вектором нормали плоскости залегания \mathbf{n}) вблизи плоской бесконечной поверхности (с единичным вектором нормали \mathbf{n}_s), которая разделяет пространство на упругую материальную среду и вакуум [37]. Неоднородные распределения полей напряжений от дислокации в этом случае должны удовлетворять тривиальным условиям на свободной поверхности. Для выполнения граничного условия на свободной поверхности требуется приложить поле, вообще говоря, фиктивных напряжений, которое воздействует на ядро дислокации и способствует выходу соответствующим образом ориентированной дислокации на границу. Реализуется это за счет так называемого метода изображений и введения, соответственно, дислокации изображения [31]. Предполагается, что дислокация, у которой вектор Бюргера \mathbf{b} сонаправлен с нормалью свободной поверхности \mathbf{n}_s , находится в самой «благоприятной» конфигурации для выхода на поверхность, так как в этом случае влияние дислокации изображения наибольшее, а пробег реальной дислокации до поверхности наименьший (рис. 1а). Иная ситуация имеет место, когда \mathbf{b} ортогонален \mathbf{n}_s , так как дислокация изображения не оказывает влияния и у дислокации при такой взаимориентации в принципе нет возможности выйти на поверхность путем скольжения по СС (рис. 1б).

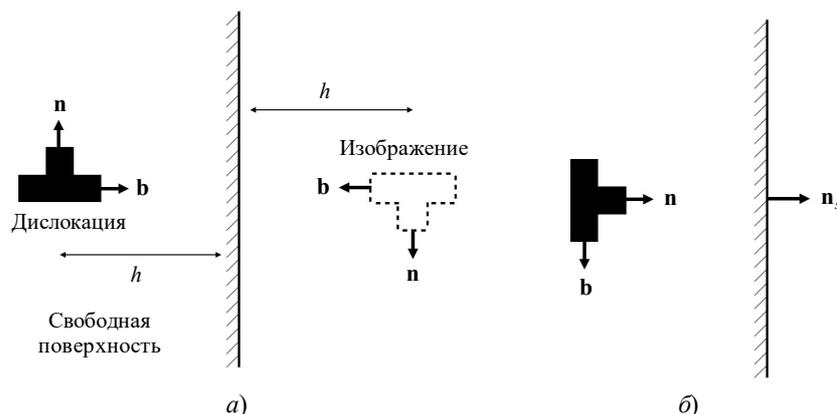


Рис. 1. Схематичное представление единичной краевой дислокации вблизи свободной поверхности: а – благоприятная ориентация для выхода на поверхность и дислокация изображения, б – нереализуемая для выхода ориентация

Таким образом, описанные два случая с точки зрения влияния свободной поверх-

ности являются самыми «экстремальными», поэтому им в дальнейшем уделяется особое внимание.

Оценим релаксацию для ситуации, характерной для первого случая (см. рис. 1а). Для единичной дислокации, строго говоря, такая постановка требует решения краевой задачи, для которой нередко применяют метод изображений. В этом известном приеме вводятся фиктивные источники искомых полей вне области определения поставленной задачи в целях удовлетворения конкретным граничным условиям. Для учета влияния свободной границы в подобных случаях вводится дислокация изображения, которая, согласно методу изображений, располагается зеркально относительно поверхности кристаллита на расстоянии h и с противоположным вектором Бюргерса для возможности компенсации полей напряжений исходной дислокации на поверхности. Тогда стремление рассматриваемой дислокации к границе определяется только напряжением от дислокации изображения [31], поэтому учитываются только генерируемые ей касательные напряжения в плоскости залегания реальной дислокации (напряжения изображения). Определим напряжение релаксации (уменьшение критического касательного напряжений) на СС, которое будет оцениваться как максимально реализуемое при указанном расстоянии от поверхности h (определенное для случая наиболее благоприятной взаимориентации дислокации и свободной поверхности):

$$\tau_{\text{rel}}^{\text{max}}(h) = \frac{\xi G b}{4\pi(1-\nu)} \frac{1}{h}, \quad (13)$$

где G и ν – модуль сдвига и коэффициент Пуассона; b – модуль вектора Бюргерса; ξ – безразмерный коэффициент, который в общем случае зависит от значений внутренних переменных, например, плотности дислокаций.

Из физических и геометрических предпосылок следует, что максимальная релаксация реализуется при $\mathbf{b} \parallel \mathbf{n}_s$ и равна нулю при $\mathbf{b} \perp \mathbf{n}_s$. Тогда для всех промежуточных взаимных ориентаций СС и свободной поверхности напряжение релаксации предлагается аппроксимировать по формуле:

$$\tau_{\text{rel}}^{(k)} = \tau_{\text{rel}}^{\text{max}} [(\mathbf{b}^{(k)} \cdot \mathbf{n}_s)(1 - |\mathbf{n}^{(k)} \cdot \mathbf{n}_s|)], \quad (14)$$

где $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичная нормаль плоскости k -й СС; $\mathbf{b}^{(k)}$ – единичный вектор Бюргерса k -й СС; \mathbf{n}_s – единичная нормаль свободной поверхности. Отметим, что в соотношении (14) должны рассматриваться только те СС, на которых движение дислокаций направлено в сторону поверхности.

Рассмотрим графики для иллюстрации полученных соотношений. Для определенности используем параметры материала, характерные для меди. Поскольку для гранцентрированной решетки (ГЦК) все СС равноправны, эффективные параметры материала принимают следующие значения:

$$\tau_{c_0} = 16 \text{ МПа}, \quad G = 44 \text{ ГПа}, \quad \nu = 0,34, \quad b = 0,208 \text{ нм}. \quad (15)$$

График зависимости напряжения релаксации, отнесенного к начальному критическому касательному напряжению, от расстояния до свободной поверхности, построенный по соотношению (13), представлен на рис. 2.

Стоит отметить, что для практического применения при рассмотрении реальных кристаллитов, содержащих огромное множество дислокаций, производится отсекание значений, которые соответствуют $h < l/2$, где l – характерный линейный размер рассматриваемого кристаллита мезоуровня (на практике определяется требуемой точностью расчетов).

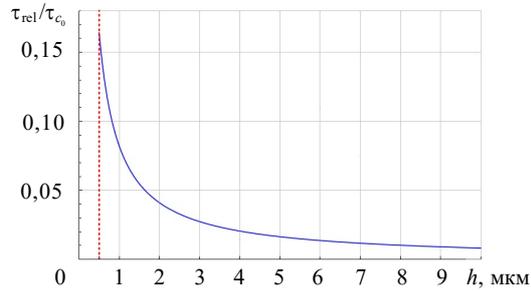


Рис. 2. Зависимость напряжения релаксации от расстояния до свободной поверхности h

В реальных металлах и сплавах, даже подвергнутых отжигу, плотность дислокаций превышает 10^8 м^{-2} , в силу чего введение дислокаций изображения для каждой из реальных дислокаций практически невозможно. В этом случае вводится некоторый представительный объем с характерным размером l , по которому осуществляется осреднение дислокаций, принадлежащих каждой СС кристаллита. Для массива дислокаций на каждой СС вводится «супердислокация» с вектором Бюргерса, равным сумме векторов Бюргерса дислокаций, принадлежащих рассматриваемой СС. После этого для указанных супердислокаций, размещаемых в геометрическом центре представительного объема, вводится «супердислокация изображения». В приведенном примере $l = 1 \text{ мкм}$, значение h определяется для геометрического центра введенного представительного объема. Чтобы выразить зависимость от взаимной ориентации СС и единичной нормали свободной поверхности \mathbf{n}_s , запишем соотношение (14), опуская индекс СС:

$$\tau_{\text{rel}} = \tau_{\text{rel}}^{\text{max}} \cos \alpha (1 - |\cos \beta|), \quad (16)$$

где α – угол между векторами \mathbf{b} и \mathbf{n}_s , β – угол между векторами \mathbf{n} и \mathbf{n}_s . При заданном h , изменяющемся от $l/2$ до бесконечности (для определенности в расчетах, результаты которых приведены далее, h принималось равным 1 мкм), соотношение (16) является функцией двух углов. Графики зависимости относительных напряжений релаксации от углов α и β приведены на рис. 3 (величина углов выражена в радианах).

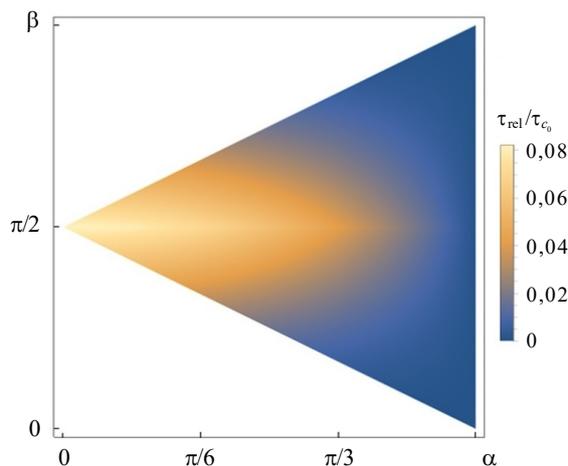


Рис. 3. Зависимость напряжения релаксации от параметров взаимной ориентации СС и свободной поверхности α и β

Заметим, что закон для релаксации (14) сформулирован в конечной форме, поэтому напрямую в соотношении (11) не применяется. При определении текущего критического напряжения на СС в момент времени T учет разупрочнения осуществляется согласно соотношению:

$$\tau_c^{(k)} = \tau_{c_0}^{(k)} + \int_0^T \dot{\tau}_c^{(k)} dt = \tau_{c_0}^{(k)} + \int_0^T (\dot{\tau}_{\text{int}}^{(k)} + \dot{\tau}_{\text{ext}}^{(k)}) dt = \tau_{c_0}^{(k)} - \tau_{\text{rel}}^{(k)} + \int_0^T \dot{\tau}_{\text{int}}^{(k)} dt, \quad (17)$$

где $\tau_{c_0}^{(k)}$ – начальное значение критических касательных напряжений на k -й СС.

2. Результаты численных экспериментов

Для проверки адекватности модели необходимо провести численные расчеты для краевых задач (КЗ) исследования напряженно-деформированного состояния монокристаллического образца. Примем, что образец в начальной конфигурации имеет кубическую форму. Рассмотрим два случая, соответствующие сжатию (осадке) и простому сдвигу. В дальнейшем они будут обозначаться как КЗ-1 и КЗ-2. Общий вид граничных условий:

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ для } \mathbf{r} \in S_0, \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}_b \text{ для } \mathbf{r} \in S_v, \quad \mathbf{n}_S \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \text{ для } \mathbf{r} \in S_\sigma, \quad (18)$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор материальной точки; S_0 – часть границы образца, на которой заданы условия закрепления; S_v – часть границы с предписанными ненулевыми скоростями движения; S_σ – свободные границы. Схематично задание краевых условий для КЗ-1 и КЗ-2 представлено на рис. 4. На схеме приведена также используемая условно неподвижная лабораторная система координат $X_1 X_2 X_3$.

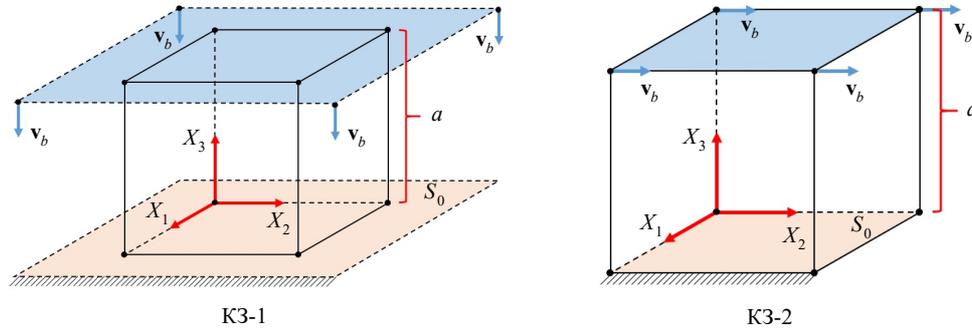


Рис. 4. Схема, иллюстрирующая граничные условия для КЗ-1 и КЗ-2

Задачи решались с помощью метода конечных элементов (МКЭ) в программном пакете Simula Abaqus. Рассматриваемый монокристалл был разбит на множество субкристаллитов (конечных элементов (КЭ)), поведение которых описывается с использованием изложенной в разделе 1 КМ. Реализация КМ кристаллита осуществлена с помощью разработанного авторами собственного программного модуля для пользовательских материалов (VUMAT). Для тестирования модели и программного модуля реализована и верифицирована процедура расчета линейного упругого отклика с применением гипопругих определяющих соотношений для материалов кубической симметрии. Реализованы и апробированы процедуры и алгоритмы расчета неупругого отклика для ГЦК монокристалла с учетом анизотропного нелинейного упрочнения, решеточного спина и влияния свободной поверхности. Вместе они образуют рабочую физически-ориентированную упруговязкопластическую численную модель.

В качестве параметров материала использовались значения, характерные для монокристалла меди [3]:

$$\begin{aligned} \pi_{1111} &= 164,4 \text{ ГПа}, \quad \pi_{1122} = 121,4 \text{ ГПа}, \quad \pi_{1212} = 74,4 \text{ ГПа}, \\ \dot{\gamma}_0 &= 10^{-3} \text{ с}^{-1}, \quad m = 83, \\ \tau_{c_0} &= 16 \text{ МПа}, \quad \tau_{\text{sat}} = 148 \text{ МПа}, \quad h_0 = 180 \text{ МПа}, \quad q_{\text{lat}} = 1,4, \quad \chi = 2,25, \\ G &= 44 \text{ ГПа}, \quad \nu = 0,34, \quad b = 0,2475 \text{ нм}. \end{aligned} \quad (19)$$

Рассматривались четыре типа образцов: с размером ребра a , равным 20, 50, 100 и 150 мкм. Дискретизация расчетной области производилась путем равномерного подразделения на 1000 восьмиузловых (кубических) КЭ с билинейной аппроксимацией. Скорость перемещения верхнего торца выбиралась таким образом, чтобы средняя скорость деформации принимала значения, близкие к 10^{-3} с^{-1} . Начальная ориентация решетки: кристаллографическое направление (100) совпадает с осью X_1 , кристаллографическое направление (010) совпадает с осью X_2 .

Результаты расчетов полей параметров, характеризующих напряженно-деформированное состояние, приведены для среза плоскостью $X_1 = a/2$. Распределения полей напряжений Мизеса (интенсивности девиатора тензора напряжений Коши) показаны на рис. 5.

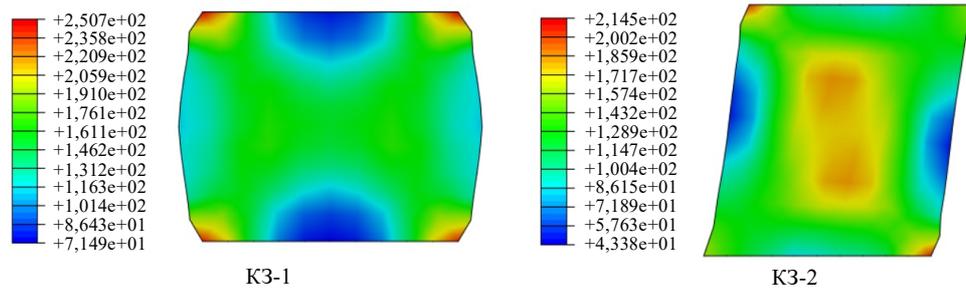


Рис. 5. Распределение полей напряжений Мизеса (МПа) при значении накопленной деформации 15% (образец 20 мкм, сечение $X_1 = a/2$)

Можно заметить, что имеет место неоднородность распределения полей напряжений. Это обусловлено в большей мере условиями нагружения. Внутренние переменные в этом случае тоже обладают существенной неоднородностью распределения по объему образца в процессе деформирования. Представляет интерес рассмотрение некоторых из них для внутренних областей образца. Распределения осредненных по всем СС накопленных пластических сдвигов представлены на рис. 6.

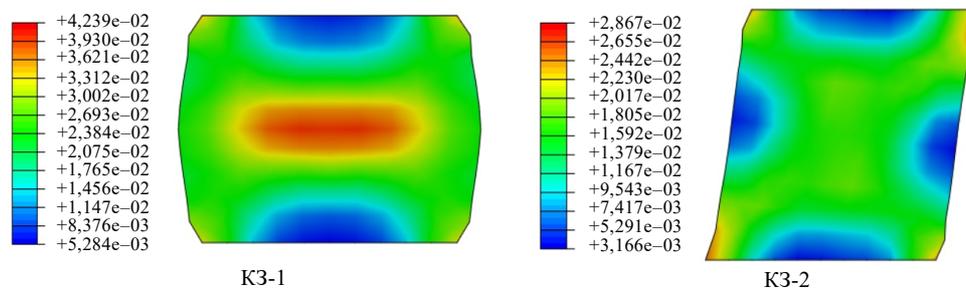


Рис. 6. Распределения среднего накопленного пластического сдвига при значении накопленной деформации 15% (образец 20 мкм, сечение $X_1 = a/2$)

Распределения аналогично осредненных критических касательных напряжений на СС представлены на рис. 7.

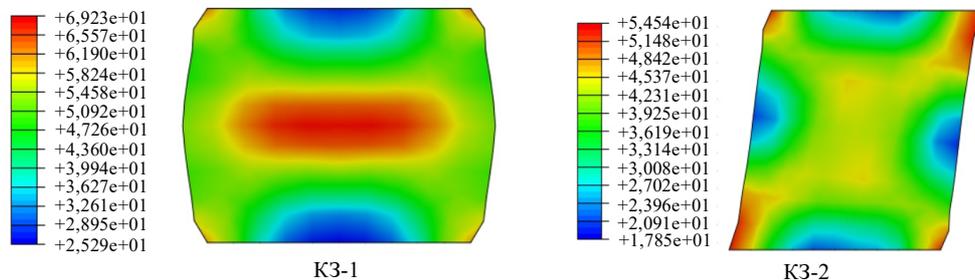


Рис. 7. Распределения среднего критического касательного напряжения (МПа) на СС при значении накопленной деформации 15% (образец 20 мкм, сечение $X_1 = a/2$)

Здесь наблюдается ситуация, похожая на предыдущий пример, что предсказуемо, так как закон упрочнения устанавливает зависимость критических напряжений от накопленного пластического сдвига. Влияние свободной поверхности на критические касательные напряжения наиболее существенно на начальной стадии деформирования до наступления интенсивного упрочнения. Распределения угла поворота решетки относительно отсчетной конфигурации представлены на рис. 8 (угол измеряется в градусах). Косинус угла поворота ПСК φ определяется соотношению:

$$\cos \varphi = \frac{1}{2} (\mathbf{R} : \mathbf{I} - 1), \quad (20)$$

где \mathbf{R} – тензор поворота ПСК относительно отсчетной конфигурации.

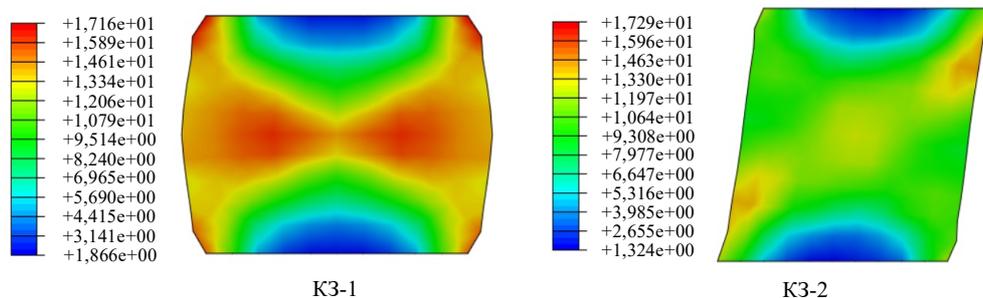


Рис. 8. Распределения угла поворота ПСК решетки при значении накопленной деформации 15% (образец 20 мкм, сечение $X_1 = a/2$)

Чтобы продемонстрировать наличие эффекта масштаба, который обуславливается влиянием свободной границы, приводятся сравнения диаграмм $\sigma_{ii} - \varepsilon_{ii}$ (зависимость интенсивности напряжений σ_{ii} от значения накопленной деформации ε_{ii}), осредненных по всем КЭ, для различных типов нагружения и размеров образца. Диаграммы представлены на рис. 9.

Исходя из вида графиков, можно заметить, что при уменьшении характерного размера образца пластическое деформирование начинается и реализуется при меньших действующих напряжениях (для образцов с характерным размером $a = 20$ мкм по сравнению с образцом с $a = 150$ мкм наблюдается разница до 30%). Это связано с тем, что доля приповерхностного материала, системы скольжения которого испытали релаксацию, для меньшего образца составляет значительную часть объема тела. Для

образца с большим характерным размером этот эффект тоже имеет место, но с заметно меньшим влиянием, так как приграничная область, для которой эффект разупрочнения является значимым, составляет малую часть образца.

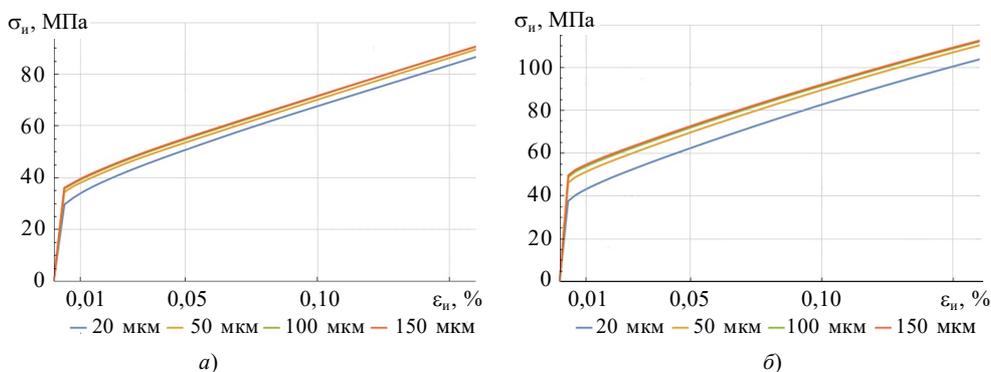


Рис. 9. Диаграммы $\sigma_n - \varepsilon_n$ для образцов разных размеров для $K3 = 1$ (а) и $K3-2$ (б)

Таким образом, на основе приведенных результатов можно сделать вывод о том, что при уменьшении характерных размеров образца наблюдается падение предела текучести и напряжения течения. Это обуславливается тем, что приповерхностный слой, кристаллиты которого испытали значительные падения критических касательных напряжений на СС из-за влияния свободной поверхности, имеет при прочих равных условиях практически одинаковую «толщину». При достаточно малых размерах образца это приводит к тому, что приповерхностная доля материала составляет существенную часть от общего объема, предел текучести и напряжения течения снижаются. При увеличении характерных размеров образца до макромасштабного уровня (оценочно от 500 мкм и выше) влиянием поверхности на предел текучести и напряжение течения можно пренебречь. Эти выводы согласуются с указанными выше результатами исследований эффекта масштаба. Следует также отметить получаемую в расчетах фрагментацию пластических сдвигов по объему образца, что согласуется с экспериментальными данными, полученными в опытах по деформированию монокристаллических образцов [35, 36].

Закключение

Рассмотрены вопросы учета влияния свободной поверхности на механические свойства моно- и поликристаллических образцов. Приведена базовая модель упруго-вязкопластичности кристаллита мезоуровня. Отмечены основные физические и геометрические гипотезы о природе процесса разупрочнения приповерхностных областей. За основу при выводе соотношения для модификации закона изменения критических касательных напряжений на СС были использованы известные решения для определения действующих на единичную дислокацию вблизи свободной поверхности напряжений от дислокации изображения. Стоит отметить, что в поликристаллах межзеренные границы могут выступать в качестве эффективных препятствий для движения дислокаций. Таким образом, можно предположить, что указанный механизм разупрочнения будет действовать только в приповерхностных зернах поликристаллического образца. Предложенная модификация может быть использована для описания наблюдаемой в экспериментах инициации пластических деформаций в приграничных областях образцов и их постепенном распространении во внутренние

области. Выход дислокаций также может приводить к возникновению шероховатости на поверхности.

Поставлены и решены тестовые краевые задачи, результаты решения которых подтверждают адекватность предложенной модели. Осуществлена численная реализация разработанной модели в рамках МКЭ с помощью программного пакета Simula Abaqus с использованием собственного программного модуля для пользовательских материалов (VUMAT). Приведены результаты численных экспериментов для ГЦК монокристалла для двух типов нагружения и четырех характерных размеров образцов. Сравнение результатов для разных случаев показывает явное наличие эффекта масштаба, который проявляется в уменьшении предела текучести и напряжения течения для образца в целом с уменьшением его характерных размеров.

Список литературы

1. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. *Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения*. М.: Наука, 1986. 232 с.
2. Трусов П.В., Швейкин А.И. *Теория пластичности*. Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2011. 419 с.
3. Трусов П.В., Швейкин А.И. *Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения*. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV.
4. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 1. Жесткопластические и упруго-пластические модели. *Вестник ПГТУ. Механика*. 2011. №1. С. 5–45.
5. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 2. Вязкопластические и упруго-вязкопластические модели. *Вестник ПГТУ. Механика*. 2011. №2. С. 101–131.
6. Engel U., Eckstein R. Microforming – from basic research to its realization. *Journal of Materials Processing Technology*. 2002. Vol. 125-126. P. 35–44. [https://doi.org/10.1016/S0924-0136\(02\)00415-6](https://doi.org/10.1016/S0924-0136(02)00415-6).
7. Tang X.F., Peng L.F., Shi S.Q., Fu M.W. Influence of crystal structure on size dependent deformation behavior and strain heterogeneity in micro-scale deformation. *International Journal of Plasticity*. 2019. Vol. 118. P. 147–172. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.02.004>.
8. Трусов П.В. Классические и многоуровневые конститутивные модели для описания поведения металлов и сплавов: проблемы и перспективы (в порядке обсуждения). *Изв. РАН. МТТ*. 2021. №1. С. 69–82. DOI: 10.31857/S0572329921010128.
9. Arzt E. Size effects in materials due to microstructural and dimensional constrains: a comparative. *Acta Materialia*. 1998. Vol. 46. Iss. 16. P. 5611–5626. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(98\)00231-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(98)00231-6).
10. Fu M.W., Wang J.L., Korsunsky A.M. A review of geometrical and microstructural size effects in micro-scale deformation processing of metallic alloy components. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*. 2016. Vol. 109. P. 94–125. <https://doi.org/10.1016/j.ijmactools.2016.07.006>.
11. Geiger M., Kleiner M., Eckstein R., Tiesler R., Engel U. Microforming. *CIRP Annals*. 2001. Vol. 5. Iss. 2. P. 445–462. [https://doi.org/10.1016/S0007-8506\(07\)62991-6](https://doi.org/10.1016/S0007-8506(07)62991-6).
12. Новиков И.И. *Дефекты кристаллического строения металлов*. М.: Металлургия, 1975. 208 с.
13. Keller C., Hug E. Hall – Petch behavior of Ni polycrystals with a few grains per thickness. *Materials Letters*. 2008. Vol. 62. Iss. 10-11. P. 1718–1720. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2007.09.069>.
14. Keller C., Hug E., Chateigner D. On the origin of the stress decrease for nickel polycrystals with few grains across the thickness. *Materials Science and Engineering: A*. 2009. Vol. 500. Iss. 1-2. P. 207–215. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2008.09.054>.

15. Keller C., Hug E., Retoux R., Feaugas X. TEM study of dislocation patterns in near-surface and core regions of deformed nickel polycrystals with few grains across the cross section. *Mechanics of Materials*. 2010. Vol. 42. Iss. 1. P. 44–54. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2009.09.002>.
16. Keller C., Hug E., Feaugas X. Microstructural size effects on mechanical properties of high purity nickel. *Journal of Plasticity*. 2011. Vol. 27. Iss. 4. P. 637–654. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.08.002.
17. Hug E., Dubos P.A., Keller C. Temperature dependence and size effects on strain hardening mechanism in copper polycrystals. *Materials Science and Engineering: A*. 2013. Vol. 574. P. 253–261. DOI: 10.1016/j.msea.2013.03.025.
18. Hug E., Keller C., Dubos P.A., Celis M.M. Size effects in cobalt plastically strained in tension: impact on gliding and twinning work hardening mechanisms. *Journal of Materials Research and Technology*. 2021. Vol. 11. P. 1362–1377. DOI: 10.1016/j.jmrt.2021.01.105.
19. Stölken J.S., Evans A.G. A microbend test method for measuring the plasticity length scale. *Acta Materialia*. 1998. Vol. 46. Iss. 14. P. 5109–5115. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00153-0.
20. Yang B., Motz C., Rester M., Dehm G. Yield stress influenced by the ratio of wire diameter to grain size – a competition between the effects of specimen microstructure and dimension in micro-sized polycrystalline copper wires. *Philosophical Magazine*. 2012. Vol. 92. Iss. 25–27. P. 3243–3256. DOI: 10.1080/14786435.2012.693215.
21. Jang D., Greer J.R. Size-induced weakening and grain boundary-assisted deformation in 60 nm grained Ni nanopillars. *Scripta Materialia*. 2011. Vol. 64. Iss. 1. P. 77–80. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.09.010.
22. Hall E.O. The deformation and aging of mild steel. III. Discussion and results. *Proceedings of the Physical Society. Section B*. 1951. Vol. 64. No 9. P. 747–753. DOI: 10.1088/0370-1301/64/9/303.N.
23. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of the Iron and Steel Institute*. 1953. Vol. 174. P. 25–28.
24. Теплякова Л.А., Лычагин Д.В., Козлов Э.В. Локализация сдвига при деформации монокристаллов алюминия с ориентацией оси сжатия [001]. *Физическая мезомеханика*. 2002. Т. 5. №6. С. 49–55.
25. Теплякова Л.А., Лычагин Д.В., Беспалова И.В. Закономерности макролокализации деформации в монокристаллах алюминия с ориентацией оси сжатия [110]. *Физическая мезомеханика*. 2004. Т. 7. №6. С. 63–78.
26. Shin C., Lim S., Jin H., Hosemann P., Kwon J. Specimen size effects on the weakening of a bulk metastable austenitic alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2015. Vol. 622. P. 67–75. DOI: 10.1016/j.msea.2014.11.004.
27. Liu W., Liu Y., Cheng Y., Chen L., Yu L., Yi X., H.Duan H. Unified model for size-dependent to size independent transition in yield strength of crystalline metallic materials. *Physical Review Letters*. 2020. Vol. 124. Iss. 23. Article No 235501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.235501.
28. Keller C., Hug E., Habraken A.M., Duchene L. Finite element analysis of the free surface effects on the mechanical behavior of thin nickel polycrystals. *International Journal of Plasticity*. 2012. Vol. 29. P. 155–172. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.08.007.
29. Yants A., Trusov P., Tokarev A. Direct crystal plasticity model for describing the deformation of samples of polycrystalline materials: influence of external and internal grain boundaries. *Nanoscience and Technology: An International Journal*. 2021. Vol. 12. Iss. 2. P. 1–21. DOI: 10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2021036837.
30. Фридель Ж. *Дислокации*. М.: Мир, 1967. 644 с.
31. Хирт Дж., Лоте И. *Теория дислокаций*. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
32. Eshelby J.D., Stroh A.N. CXL. Dislocations in thin plates. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. 1951. Vol. 42. Iss. 335. P. 1401–1405. DOI: 10.1080/14786445108560958.
33. Head A.K. Edge dislocations in inhomogeneous media. *Proceedings of the Physical Society. Section B*. 1953. Vol. 66. Iss. 9. P. 793–801. DOI: 10.1088/0370-1301/66/9/309.
34. Maurissen Y., Capella L. Stress field of a dislocation segment parallel to a free surface.

- Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. Ser. 8.* 1973. Vol. 29. Iss. 5. P. 1227–1229. DOI: 10.1080/14786437408226608.
35. Maurissen Y., Capella L. Stress field of a dislocation segment perpendicular to a free surface. *Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. Series 8.* 1974. Vol. 30. Iss. 3. P. 679–683. DOI: 10.1080/14786439808206591.
36. Steketee J.A. On Volterra's dislocations in a semi-infinite elastic medium. *Canadian Journal of Physics.* 1958. Vol. 36. No 2. P. 192–205. DOI: 10.1139/p58-024.
37. Yoffe E.H. A dislocation at a free surface. *Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. Series 8.* 1961. Vol. 6. Iss. 69. P. 1147–1155. DOI: 10.1080/14786436108239675.
38. Shaibani S.J., Hazzledine P.M. The displacement and stress fields of a general dislocation close to a free surface of an isotropic solid. *Philosophical Magazine A.* 1981. Vol. 44. Iss. 3. P. 657–665. DOI: 10.1080/01418618108236168.
39. Lothe J., Indenbom V.L., Chamrov V.A. Elastic field and self-force of dislocations emerging at the free surfaces of an anisotropic halfspace. *Physica Status Solidi (B): Basic Research.* 1982. Vol. 111. Iss. 2. P. 671–677. DOI: 10.1002/pssb.2221110231.
40. Neily S., Dhouibi S., Bonnet R. Threading dislocations piercing the free surface of an anisotropic hexagonal crystal: review of theoretical approaches. *Advances in Condensed Matter Physics.* 2018. Vol. 2018. P. 1–8. DOI: 10.1155/2018/3038795.
41. Crone J.C., Munday L.B., Knap J. Capturing the effects of free surfaces on void strengthening with dislocation dynamics. *Acta Materialia.* 2015. Vol. 101. P. 40–47. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.08.067.
42. Balusu K., Huang H. A combined dislocation fan-finite element (DF-FE) method for stress field simulation of dislocations emerging at the free surfaces of 3D elastically anisotropic crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering.* 2017. Vol. 25. No 3. P. 1–14. DOI: 10.1088/1361-651x/aa5a9d.
43. Zacharopoulos N., Srolovitz D.J., Lesar R. Dynamic simulation of dislocation microstructures in Mode III cracking. *Acta Materialia.* 1997. Vol. 45. Iss. 9. P. 3745–3763. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00029-3.
44. Fivel M.C., Gosling T.G., Canova G.R. Implementing image stresses in a 3D dislocation simulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering.* 1996. Vol. 4. Iss. 6. P. 581–596. DOI: 10.1088/0965-0393/4/6/003.
45. Трусов П.В., Швейкин А.И. О разложении движения и определяющих соотношениях в геометрически нелинейной упруговязкопластичности кристаллитов. *Физическая мезомеханика.* 2016. Т. 19. № 3. С. 25–38. DOI: 10.24411/1683-805X-2016-00061.
46. Трусов П.В., Нечаева Е.С., Швейкин А.И. Применение несимметричных мер напряженного и деформированного состояния при построении многоуровневых конститутивных моделей материалов. *Физическая мезомеханика.* 2013. Т. 16. №2. С. 15–31.
47. Lazar M., Agiasofitou E., Böhlke T. Mathematical modeling of the elastic properties of cubic crystals at small scales based on the Toupin – Mindlin anisotropic first strain gradient elasticity. *Continuum Mechanics and Thermodynamics.* 2022. Vol. 34. Iss. 1. P. 107–136. DOI: 10.1007/s00161-021-01050-y.
48. Srinivasan T.P., Nigam S.D. Invariant elastic constants for crystals. *Journal of Mathematics and Mechanics.* 1969. Vol. 19. Iss. 5. P. 411–420. <http://www.jstor.org/stable/24901866>.
49. Лурье А.И. *Нелинейная теория упругости.* М.: Наука, 1980. 512 с.
50. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metallurgica.* 1985. Vol. 33. No 6. P. 923–953. DOI: 10.1016/0001-6160(85)90188-9.
51. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals. *Philosophical Transactions of the Royal Society A.* 1992. Vol. 341. Iss. 1662. P. 443–477. DOI: 10.1098/rsta.1992.0111.
52. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.* 2004. Vol. 193. Iss. 48–51. P. 5359–5383. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.068.

References

1. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Nyashin Yu.I. *Bolshie uprugoplasticheskie deformatsii: teoriya, algoritmy, prilozheniya* [Large Elastic-Plastic Deformations: Theory, Algorithms, Applications]. Moscow. Nauka Publ. 1986. 232 p. (In Russian).
2. Trusov P.V., Shveykin A.I. *Teoriya plastichnosti* [Theory of Plasticity]. Perm. PNIPU Publ. 2011. 419 p. (In Russian).
3. Trusov P.V., Shveykin A.I. *Mnogourovnevnye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniya* [Multilevel Models of Mono- and Polycrystalline Materials: Theory, Algorithms, Application Examples]. Novosibirsk. Branch of the Russian Academy of Sciences Publ. 2019. 605 p. (In Russian).
4. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskie teorii plastichnosti: teoriya i prilozheniya k opisaniyu neuprugogo deformirovaniya materialov. Ch. 1. Zhestkoplasticheskie i uprugoplasticheskie modeli [Physical theories of plasticity: Theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 1. Rigid-plastic and elastic-plastic models]. *Vestnik Permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Mekhanika* [Perm State Technical University Mechanics Bulletin]. 2011. No 1. P. 5–45.
5. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskie teorii plastichnosti: teoriya i prilozheniya k opisaniyu neuprugogo deformirovaniya materialov. Ch. 2. Vyazkoplasticheskie i uprugovyazkoplasticheskie modeli [Physical theories of plasticity: Theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 2. Viscoplastic and elastic-viscoplastic models]. *Vestnik Permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Mekhanika* [Perm State Technical University Mechanics Bulletin]. 2011. No 2. P. 101–131.
6. Engel U., Eckstein R. Microforming – from basic research to its realization. *J. Mater. Process. Technol.* 2002. Vol. 125–126. P. 35–44. [https://doi.org/10.1016/S0924-0136\(02\)00415-6](https://doi.org/10.1016/S0924-0136(02)00415-6)
7. Tang X.F., Peng L.F., Shi S.Q., Fu M.W. Influence of crystal structure on size dependent deformation behavior and strain heterogeneity in micro-scale deformation. *Int. J. Plast.* 2019. Vol. 118. P. 147–172. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.02.004>.
8. Trusov P.V. Classical and multi-level constitutive models for describing the behavior of metals and alloys: problems and prospects (as a matter for discussion). *Mechanics of Solids*. 2021. Vol. 56. No 1. P. 55–64.
9. Arzt E. Size effects in materials due to microstructural and dimensional constrains: a comparative. *Acta Mater.* 1998. Vol. 46. Iss. 16. P. 5611–5626. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(98\)00231-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(98)00231-6).
10. Fu M.W., Wang J.L., Korsunsky A.M. A review of geometrical and microstructural size effects in micro-scale deformation processing of metallic alloy components. *Int. J. Mach. Tools and Manuf.* 2016. Vol. 109. P. 94–125. <https://doi.org/10.1016/j.ijmactools.2016.07.006>.
11. Geiger M., Kleiner M., Eckstein R., Tiesler R., Engel U. Microforming. *CIRP Annals*. 2001. Vol. 5. Iss. 2. P. 445–462. [https://doi.org/10.1016/S0007-8506\(07\)62991-6](https://doi.org/10.1016/S0007-8506(07)62991-6).
12. Novikov I.I. *Defekty kristallicheskogo stroeniya metallov* [Defects of the Crystalline Structure of Metals]. Moscow. Metallurgiya Publ. 1975. 208 p. (In Russian).
13. Keller C., Hug E. Hall–Petch behavior of Ni polycrystals with a few grains per thickness. *Mater. Lett.* 2008. Vol. 62. Iss. 10–11. P. 1718–1720. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2007.09.069>.
14. Keller C., Hug E., Chateigner D. On the origin of the stress decrease for nickel polycrystals with few grains across the thickness. *Mater. Sci. Eng. A*. 2009. Vol. 500. Iss. 1–2. P. 207–215. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2008.09.054>.
15. Keller C., Hug E., Retoux R., Feaugas X. TEM study of dislocation patterns in near-surface and core regions of deformed nickel polycrystals with few grains across the cross section. *Mech. Mater.* 2010. Vol. 42. Iss. 1. P. 44–54. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2009.09.002>.
16. Keller C., Hug E., Feaugas X. Microstructural size effects on mechanical properties of high purity nickel. *Int. J. Plast.* 2011. Vol. 27. Iss. 4. P. 637–654. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.08.002.
17. Hug E., Dubos P.A., Keller C. Temperature dependence and size effects on strain hardening mechanism in copper polycrystals. *Mater. Sci. Eng. A*. 2013. Vol. 574. P. 253–261. DOI: 10.1016/j.msea.2013.03.025.
18. Hug E., Keller C., Dubos P.A., Celis M.M. Size effects in cobalt plastically strained in

- tension: impact on gliding and twinning work hardening mechanisms. *J. Mater. Res. Technol.* 2021. Vol. 11. P. 1362–1377. DOI: 10.1016/j.jmrt.2021.01.105.
19. Stölken J.S., Evans A.G. A microbend test method for measuring the plasticity length scale. *Acta Mater.* 1998. Vol. 46. Iss. 14. P. 5109–5115. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00153-0.
 20. Yang B., Motz C., Rester M., Dehm G. Yield stress influenced by the ratio of wire diameter to grain size – a competition between the effects of specimen microstructure and dimension in micro-sized polycrystalline copper wires. *Phil. Mag.* 2012. Vol. 92. Iss. 25–27. P. 3243–3256. DOI: 10.1080/14786435.2012.693215.
 21. Jang D., Greer J.R. Size-induced weakening and grain boundary-assisted deformation in 60 nm grained Ni nanopillars. *Scr. Mater.* 2011. Vol. 64. Iss. 1. P. 77–80. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.09.010.
 22. Hall E.O. The deformation and aging of mild steel. III. Discussion and results. *Proc. Phys. Soc. B.* 1951. Vol. 64. P. 747–753. DOI: 10.1088/0370-1301/64/9/303.N.
 23. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of the Iron and Steel Institute.* 1953. Vol. 174. P. 25–28.
 24. Teplyakova L.A., Lychagin D.V., Kozlov E.V. Lokalizatsiya sdviga pri deformatsii monokristallov alyuminiya s orientatsiyey osi szhatiya [001] [Localization of shear during deformation of aluminum single crystals with compression axis orientation [001]]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2002. Vol. 5. No 6. P. 49–50 (In Russian).
 25. Teplyakova L.A., Lychagin D.V., Bespalova I.V. Zakonomernosti makrolokalizatsii deformatsii v monokristallakh alyuminiya s orientatsiyey osi szhatiya [110] [Mechanisms of deformation macrolocalization in aluminum single crystals with loading axis orientation [110]]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2004. Vol. 7. No 6. P. 63–78 (In Russian).
 26. Shin C., Lim S., Jin H., Hosemann P., Kwon J. Specimen size effects on the weakening of a bulk metastable austenitic alloy. *Mater. Sci. Eng. A.* 2015. Vol. 622. P. 67–75. DOI: 10.1016/j.msea.2014.11.004.
 27. Liu W., Liu Y., Cheng Y., Chen L., Yu L., Yi X., H.Duan H. Unified model for size-dependent to size independent transition in yield strength of crystalline metallic materials. *Phys. Rev. Lett.* 2020. Vol. 124. Iss. 23. Article No 235501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.235501.
 28. Keller C., Hug E., Habraken A.M., Duchene L. Finite element analysis of the free surface effects on the mechanical behavior of thin nickel polycrystals. *Int. J. Plast.* 2012. Vol. 29. P. 155–172. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.08.007.
 29. Yants A., Trusov P., Tokarev A. Direct crystal plasticity model for describing the deformation of samples of polycrystalline materials: influence of external and internal grain boundaries. *Nanoscience and Technology: An International Journal.* 2021. Vol. 12. Iss. 2. P. 1–21. DOI: 10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2021036837.
 30. Fridel J. *Dislocations*. Oxford. Pergamon Press. 1964. 491 p.
 31. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations*. New York. McGraw-Hill. 1968. 780 p.
 32. Eshelby J.D., Stroh A.N. CXL. Dislocations in thin plates. *The London, Edinburg, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science.* 1951. Vol. 42. Iss. 335. P. 1401–1405. DOI: 10.1080/14786445108560958.
 33. Head A.K. Edge dislocations in inhomogeneous media. *Proceedings of the Physical Society. Section B.* 1953. Vol. 66. Iss. 9. P. 793–801. DOI: 10.1088/0370-1301/66/9/309.
 34. Maurissen Y., Capella L. Stress field of a dislocation segment parallel to a free surface. *Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. Ser. 8.* 1973. Vol. 29. Iss. 5. P. 1227–1229. DOI: 10.1080/14786437408226608.
 35. Maurissen Y., Capella L. Stress field of a dislocation segment perpendicular to a free surface. *Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. Series 8.* 1974. Vol. 30. Iss. 3. P. 679–683. DOI: 10.1080/14786439808206591.
 36. Steketee J.A. On Volterra's dislocations in a semi-infinite elastic medium. *Canadian Journal of Physics.* 1958. Vol. 36. No 2. P. 192–205. DOI: 10.1139/p58-024.
 37. Yoffe E.H. A dislocation at a free surface. *Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. Series 8.* 1961. Vol. 6. Iss. 69. P. 1147–1155. DOI: 10.1080/14786436108239675.

38. Shaibani S.J., Hazzledine P.M. The displacement and stress fields of a general dislocation close to a free surface of an isotropic solid. *Philosophical Magazine A*. 1981. Vol. 44. Iss. 3. P. 657–665. DOI: 10.1080/01418618108236168.
39. Lothe J., Indenbom V.L., Chamrov V.A. Elastic field and self-force of dislocations emerging at the free surfaces of an anisotropic halfspace. *Phys. Status Solidi B Basic Res.* 1982. Vol. 111. Iss. 2. P. 671–677. DOI: 10.1002/pssb.2221110231.
40. Neily S., Dhouibi S., Bonnet R. Threading dislocations piercing the free surface of an anisotropic hexagonal crystal: review of theoretical approaches. *Adv. Condens. Matter Phys.* 2018. Vol. 2018. P. 1–8. DOI: 10.1155/2018/3038795.
41. Crone J.C., Munday L.B., Knap J. Capturing the effects of free surfaces on void strengthening with dislocation dynamics. *Acta Mater.* 2015. Vol. 101. P. 40–47. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.08.067.
42. Balusu K., Huang H. A combined dislocation fan-finite element (DF-FE) method for stress field simulation of dislocations emerging at the free surfaces of 3D elastically anisotropic crystals. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2017. Vol. 25. No 3. P. 1–14. DOI: 10.1088/1361-651x/aa5a9d.
43. Zacharopoulos N., Srolovitz D.J., Lesar R. Dynamic simulation of dislocation microstructures in Mode III cracking. *Acta Mater.* 1997. Vol. 45. Iss. 9. P. 3745–3763. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00029-3.
44. Fivel M.C., Gosling T.G., Canova G.R. Implementing image stresses in a 3D dislocation simulation. *Model. Simul. Mat. Sci. Eng.* 1996. Vol. 4. Iss. 6. P. 581–596. DOI: 10.1088/0965-0393/4/6/003.
45. Trusov P.V., Shveykin A.I. O razlozhenii dvizheniya i opredelyayushchikh sootnosheniyakh v geometricheski nelineynoy uprugoviyazkoplastichnosti kristallitov [On motion decomposition and constitutive relations in geometrically nonlinear elastoviscoplasticity of crystallites]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2016. Vol. 19. No 3. P. 25–38 (In Russian).
46. Trusov P.V., Nechaeva E.S., Shveykin A.I. Primenenie nesimmetrichnykh mer napryazhennogo i deformirovannogo sostoyaniya pri postroenii mnogourovnevnykh konstitutivnykh modeley materialov [Asymmetric stress-strain measures in construction of multilevel constitutive models of materials]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2013. Vol. 16. No 2. P. 15–31 (In Russian).
47. Lazar M., Agiasofitou E., Böhlke T. Mathematical modeling of the elastic properties of cubic crystals at small scales based on the Toupin – Mindlin anisotropic first strain gradient elasticity. *Contin. Mech. Thermodyn.* 2022. Vol. 34, Iss. 1. P. 107–136. DOI: 10.1007/s00161-021-01050-y.
48. Srinivasan T.P., Nigam S.D. Invariant elastic constants for crystals. *Journal of Mathematics and Mechanics*. 1969. Vol. 19. Iss. 5. P. 411–420. <http://www.jstor.org/stable/24901866>.
49. Lurye A.I. *Nelineynaya teoriya uprugosti [Nonlinear Theory of Elasticity]*. Moscow. Nauka Publ. 1980. 512 p. (In Russian).
50. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall.* 1985. Vol. 33. No 6. P. 923–953. DOI: 10.1016/0001-6160(85)90188-9.
51. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*. 1992. Vol. 341. Iss. 1662. P. 443–477. DOI: 10.1098/rsta.1992.0111.
52. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2004. Vol. 193. Iss. 48–51. P. 5359–5383. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.068.

**DIRECT PHYSICS-BASED MODEL OF ELASTOVISCOPLASTICITY:
APPLICATION TO THE STUDY OF FREE SURFACE EFFECTS
ON INELASTIC DEFORMATION OF SINGLE CRYSTAL SAMPLES***

Viatkin I.V., Trusov P.V.

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

viatkiniv@gmail.com

Received by the Editor 2024/10/07

The article provides a rationale for the relevance of a detailed study of the influence of free surfaces of samples on the results of mechanical tests (scale factors), based on the analysis of physical mechanisms of inelastic deformation, due to the increasingly widespread use of miniature products. The proposed paper is devoted to the construction of a direct model of elastoviscoplasticity for describing the behavior of mesoscale crystallites and its application to the analysis of the effect of a free surface on the physicomaterial properties of mono- and polycrystalline materials/structures made of metals and alloys. A basic model of a crystallite is described on the basis of physical theories of plasticity, where inelastic deformation mechanisms and their carriers are explicitly considered. A face-centered crystal is considered, where plastic shear can be realized by 12 available dislocation slip systems. The model uses the law of nonlinear hardening with saturation and the lattice spin submodel. A variant of the relations describing the decrease of critical tangential stresses in sliding systems near the free boundary is proposed. A series of numerical experiments have been carried out to solve initial boundary value problems in the study of the deformation of single crystal specimens. The results showed a significant effect of the sample size on the mechanical response during inelastic deformation. A decrease in the characteristic values of the yield strength and flow stress of the sample with a decrease in its size is demonstrated.

Keywords: miniature products, physical and mechanical characteristics, scale factor, multilevel elastoviscoplastic model, critical shear stresses, influence of free surface.

* This study was carried out with a financial support from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the implementation of the national project "Science and Universities" (the state assignment fulfillment in the laboratory of multilevel structural and functional materials modeling, project No FSNM-2024-0002).