

ХАРЬКОВСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

На правах рукописи

ШКУРОПАТЕНКО

Владимир Антонович

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕКСТУРЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ
ТЕКСТУРООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ
БЕРИЛЛИЯ.

01.04.07 - физика твердого тела

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



ХАРЬКОВ - 1993



Работа выполнена в Харьковском физико-математическом институте

Научные руководители - доктор физико-математических наук,
профессор Паширов И.И.

- кандидат физико-математических
наук Капчерин А.С.

Официальные оппоненты - доктор физико-математических наук,
профессор Пугачев А.Т.

доктор физико-математических наук,
профессор Коган В.С.

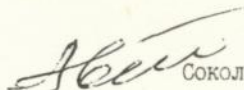
Ведущая организация - Московский инженерно-физический
институт

Защита состоится "1" июле 1993 г. в 14³⁰ часов на
заседании специализированного совета К 068.39.02 в
Харьковском политехническом институте (310002, г. Харьков,
ГСП, ул. Фрунзе, 21).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке
Харьковского политехнического института.

Автореферат разослан "28" мая 1993 г.

Ученый секретарь
специализированного совета


Сокол А.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Существует обширный класс важных теоретических и практических металлофизических задач, решение которых так или иначе связано с необходимостью исследования и последующего анализа, либо учета текстуры поликристаллических материалов. Заметный прогресс в текстурных исследованиях, наблюдаемый в последние годы, обусловлен переходом на новую, более высокую ступень развития экспериментального оборудования и возможностью получения полного количественного описания текстур при использовании новых математических методов обработки текстурных данных.

Экспериментальную информацию о текстуре обычно получают путем построения прямых или обратных полюсных фигур при помощи методов, основанных на дифракции рентгеновских лучей или нейтронов. Полностью текстура поликристаллических материалов может быть описана аналитически при помощи функции распределения зерен по ориентациям (ФРО), значения которой в отличие от полюсных фигур (ПФ) не поддаются прямому измерению. Отсюда возникает постановка основной задачи количественного текстурного анализа: восстановить функцию распределения зерен по ориентациям по конечному набору экспериментальных полюсных фигур. Распространенный метод вычисления ФРО, использующий разложение ФРО и ПФ в ряды по обобщенным шаровым и сферическим функциям, приводит, в некоторых случаях, к неправдоподобным результатам. Поэтому существует необходимость в разработке новых методов получения ФРО, основанных на привлечении дополнительной информации о самой функции распределения зерен по ориентациям и учете кристаллической симметрии образующих поликристалл зерен.

Применение аналитического описания текстуры поликристаллических материалов в физике металлов открывает принципиально новые возможности исследований. Во-первых, впервые появляется возможность наиболее строгого расчета свойств анизотропных текстурированных материалов на основе известных свойств монокристаллов матрицы зерна с учетом весовых текстурных функций. Во-вторых, изучение изменения ФРО в процессе деформации или другой обработки и получения материала позволяет анализировать механизмы этих процессов. В-третьих, ФРО должна являться одним из основных параметров любой математической модели поведения анизотропного поликристаллического материала, а также может быть использована в качестве критерия справедливости и приемлемости этой модели.

Цель работы. Целью настоящей работы являлось получение полного количественного анализа всех типов текстур бериллия деформационного происхождения путем восстановления функции распределения зерен по ориентациям, моделирование процессов текстурообразования при пластической деформации бериллия и использование функции распределения зерен по ориентациям для расчета физико-механических свойств поликристаллического бериллия.

Основные задачи.

1. Создание программно-алгоритмического комплекса для решения задачи восстановления ФРО методом Роу.

2. Создание и использование на практике нового метода расчета ФРО путем представления ФРО в виде суммы круговых гауссовских распределений (КГР).

3. Изучение текстур деформации бериллия различной чистоты в зависимости от схемы и температурно-скоростных параметров деформации.

4. Моделирование процессов текстурообразования при пластической деформации поликристаллического бериллия и определение количественного вклада действующих механизмов.

5. Разработка математического и программного аппарата расчета анизотропии свойств гексагональных поликристаллов, описываемых тензорами второго и четвертого рангов.

Основным объектом исследований был выбран литой бериллий различной чистоты.

Научная новизна. В диссертации получено полное количественное описание текстур выдавливания, осадки и прокатки поликристаллического бериллия. Предложен новый метод восстановления ФРО, лишенный основных недостатков наиболее распространенных методов (отрицательные значения ФРО, ложные максимумы и т.д.) путем априорного задания вида функции.

Изучены влияния схемы и температурно-скоростных параметров деформации на преимущественные ориентировки, возникающие в литом деформированном бериллии различной чистоты. Изучено изменение текстуры при сверхпластическом течении поликристаллического бериллия.

Разработана кинематическая модель пластической деформации поликристаллического бериллия, критерием справедливости которой выбрана кристаллографическая текстура, описанная на языке ФРО. Указанная модель позволила прогнозировать текстуры деформации бериллия на основе конкуренции базисного и призматического скольжений без привлечения гипотезы о существовании пирамидального скольжения.

Определены количественные вклады базисного, призматического скольжения и двойникования в общую деформацию материала в условиях активной деформации. Расчитаны вклады проскальзывания по границам зерен, аккомодируемые диффузионным и дислокационным крипом, в области реализации сверхпластического течения бериллия и ее окрестностях по температуре 600 - 800°C и скоростях деформации 10^{-1} - 10^{-5} сек⁻¹.

Найдена связь между параметрами ФРО, представимой в виде линейной комбинации гауссовских распределений, и физико-механическими свойствами гексагональных поликристаллов. Программы апробированы на примерах расчета тензорных свойств: среднего электросопротивления, магнитной восприимчивости, модуля Юнга и модуля сдвига прокатанного бериллия.

Практическая значимость.

Результаты работы открывают новые возможности для количественного исследования процессов пластической деформации и текстурообразования в гексагональных поликристаллах. В настоящее время трудно представить изучение сложных текстур без использования функции распределения зерен по ориентациям. Оба метода (Роу-Бунге и КТР), имеющие свои преимущества и недостатки (как показано в данной работе) могут успешно применяться в том или ином конкретном случае. Рабочие программы расчета ФРО вместе с программами моделирования процессов текстурообразования представляют целостный программный пакет, позволяющий проводить многоплановое исследование текстур.

Результаты исследования текстур деформации бериллия с использованием моделирования показали, что формирование преимущественных ориентировок в области активной деформации происходит, в основном, в результате конкурирующего действия базисного и призматического скольжения, причем конечный характер текстуры определяется относительным вкладом этих систем. Это позволяет в определенных пределах регулировать образование текстур, поскольку различие между критическими напряжениями сдвига по базисным и призматическим плоскостям существенно зависят от температуры, содержания примесей и т.д.

Проделанные расчеты ориентационно-зависимых физико-механических свойств на основе известных свойств монокристаллов и весовых текстурных функций позволяют определять ориентационно-зависимую компоненту свойств текстурированных ГПУ-металлов в любом из выбранных направлений в системе координат образца. Особенно важны подобные

расчеты для тех случаев, когда эти свойства невозможно или очень трудно измерить, например, в направлении нормали к плоскости тонкого листа, нормали к оси прутка или проволоки. Кроме предсказания свойств текстурированных материалов указанные расчеты являются инструментом для разделения вкладов текстурно-зависимых и текстурно-независимых компонентов свойств поликристаллических агрегатов.

Хотя результаты, приведенные в работе, относятся к ГПУ-бериллию, необходимо отметить, что аналогичный подход возможен с некоторыми изменениями и к материалам других кристаллографических сингоний, и тем более к металлам, имеющим гексагональные решетки.

Результаты работы, выносимые на защиту:

1. Новый метод расчета функции распределения зерен по ориентациям гексагональных поликристаллов путем ее аппроксимации гауссовскими распределениями и его программное обеспечение.

2. Изучение текстур деформации бериллия в терминах ФРО. Критический анализ на практических примерах применимости метода Роу и метода КГР получения ФРО.

3. Моделирование процессов текстурообразования при одноосной и двухосной схеме нагружения (растяжение, сжатие, выдавливание, осадка, прокатка) поликристаллического бериллия различной чистоты в широкой области температур и степеней деформации на основе кинематической модели пластической деформации поликристаллов.

4. Количественное определение вкладов базисного, призматического скольжения и двойникования в общую деформацию ГПУ-бериллия при помощи совместного применения моделирования, аналитического описания текстур и экспериментальных текстурных данных.

5. Определение вклада проскальзывания по границам зерен, аккомодируемого диффузионным и дислокационным крипом, в области температур 600–800°C и скоростей деформации 10^{-1} – 10^{-5} сек⁻¹.

6. Расчет на основе известных свойств монокристаллов и весовых текстурных функций физико-механических свойств прокатанного бериллия: среднее электросопротивление, магнитная восприимчивость, модуль Юнга, модуль сдвига.

Апробация работы. Материалы диссертации докладывались и обсуждались на Всесоюзных конференциях по металлофизике бериллия (Харьков, 1985; Усть-Каменогорск, 1988), на VII Всесоюзной конференции по текстурам и рекристаллизации (Уфа, 1987).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 9 работ /I–9/.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов и списка литературы на 107 наименований. Диссертация изложена на 191 странице машинописного текста, содержит 75 рисунков и 5 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Во введении аргументируется актуальность темы диссертации, сформулирована цель исследования, приведены краткая характеристика полученных результатов и положений, выносимых автором на защиту.

В первой главе изложены основные понятия текстурного анализа, дан обзор существующих методов аналитического описания текстур и моделирования процессов образования текстур деформации. Сформулирована задача настоящей работы.

1.1 Текстура поликристаллического материала количественно описывается функцией распределения зерен по ориентациям. Понятие ФРО для описания текстуры впервые ввел Виглин А.С. в 1960г. Введем две системы координат - систему координат K_A , связанную с рассматриваемым образцом, и систему координат кристаллита (зерна) K_B . Выбор системы координат образца на практике предопределяется предисторией исследуемого материала. Например, при изучении текстур прокатки оси ортогональной системы координат обычно располагают вдоль таких характерных направлений в листе, как направление прокатки (НП), поперечное направление (ПН) и направление нормали к листу (НН). При выборе системы координат K_B , как правило, учитывают кристаллическую симметрию, и оси координат располагают вдоль осей симметрии. Ориентация кристаллита в поликристаллическом образце задается вращением g , посредством которого система координат образца K_A совмещается с системой координат кристаллита K_B . Вращение $K_A \rightarrow K_B$ обычно задается тремя углами Эйлера $g = (\alpha, \beta, \gamma)$, $0 \leq \alpha, \gamma \leq 2\pi$, $0 \leq \beta \leq \pi$, описываемыми повороты в следующей последовательности:

- 1) поворот K_A вокруг оси Z_A на угол Эйлера α ;
- 2) поворот вокруг оси Y'_A на угол Эйлера β ;
- 3) поворот вокруг оси Z''_A на угол Эйлера γ ;

Функция ФРО $f(g)$ представляет собой плотность вероятности обнаружить в образце кристаллит с ориентацией g и определяется выражением $\Delta V/V = f(g)dg$, где ΔV - объем зерен, имеющих ориентации в области от g до Ag , V - объем всех зерен.

Значения ФРО обычно не поддаются прямому измерению. Экспериментальную информацию о текстуре, в основном, получают путем измерения полюсных фигур методами, основанными на дифракции рентгеновских лучей или тепловых нейтронов. В работах Роу Р.Ж. и Бунге Г.Х. в 1965 г. был предложен, получивший широкое распространение, метод вычисления ФРО, основанный на разложении ФРО $f(g)$ и ПФ $P_{\mathbb{R}}(\vec{g})$ в ряды по обобщенным шаровым и сферическим функциям, соответственно. Оба автора воспользовались одним и тем же математическим подходом, однако их методы незначительно отличаются по принятому формализму (символике). При построении и использовании ФРО было замечено, что метод Роу-Бунге имеет ряд существенных недостатков. Причины этого были вскрыты Маттхизом З., который показал, что ФРО принципиально не может быть однозначно определена по полюсным фигурам. Даже если известны все теоретически возможные полюсные фигуры (бесчисленное множество), то можно получить лишь половину набора коэффициентов разложения ФРО в ряд по обобщенным шаровым функциям, а именно: коэффициенты при четных шаровых функциях. Эти коэффициенты представляют интерес, но как правило, не дают никакого представления о структуре ФРО. Существуют ФРО совершенно разные, но с одинаковыми полюсными фигурами. Это означает, что задача восстановления ФРО по ПФ является некорректной (нет единственности решения). За последнее время были развиты методы, которыми достигается единственность решения задачи при дополнительных предположениях о структуре ФРО. В настоящее время они известны как методы получения "четной" части ФРО (метод Роу-Бунге, векторный метод Руэро-Баро, метод Имхофа Ж. и др.), так и методы получения "полной" ФРО (метод "нуль-области" Бунге Г.Х., итерационный метод Маттхиза З., метод "квадратичной формы" Ван Хута Р. и др.). Хотя вопросам получения ФРО посвящено много работ, эта задача в настоящее время далека от завершения.

1.2 Наличие полного количественного анализа текстур при помощи ФРО позволяет достаточно хорошо описывать, так называемые идеальные текстуры, с изотропным рассеиванием вокруг положения центров преимущественных ориентировок. При изучении реальных текстур необходимо также учитывать пути и способы формирования текстур, как с помощью экспериментальных данных, так и с помощью моделирования этих процессов.

Существует два принципиально отличных подхода к теоретической модели текстурообразования при пластической деформации поликристаллов. Один основан на допущении однородности напряжений в

деформируемом материале: модель деформации, по Заксу; другой - на допущении однородной деформации поликристалла: модель Тейлора и Бишопа-Хилла. Эти два подхода отражают две крайние возможности для осуществления пластической деформации поликристалла. Теории Тейлора и Закса успешно используются для предсказания текстур деформации поликристаллических материалов и имеют свои области применения.

Положения теорий Закса и Тейлора взяты за основу большинства современных моделей формирования текстур деформации. Особый интерес представляет кинематическая модель пластической деформации Леффера Т., в рамках которой легко перейти от деформации по Заксу к деформации, согласно "статистической" модели Тейлора. Модифицированный вариант модели Леффера был выбран в качестве основной модели пластической деформации поликристаллического бериллия при повышенных температурах, причем критерием справедливости является конечная ФРО. Во второй главе описан автоматизированный рентгеновский дифракционный эксперимент по измерению полюсных фигур, алгоритм и программы численной реализации метода Роу восстановления функции распределения зерен по ориентациям, использование метода ФРО для описания текстур осадки, выдавливания и прокатки поликристаллического бериллия.

Для получения прямых полюсных фигур был создан автоматизированный комплекс, в состав которого вошли рентгеновский дифрактометр типа ДРОН, оснащенный текстур-гонометром собственной конструкции, управляющая машина СМ-1401 и персональная ЭВМ. Связи ЭВМ с дифрактометром осуществлены через крейт в стандарте КАМАК. Конструкция текстур-гонометра позволяет полностью исследовать сферу проекций с шагом по углам 2 или 4°. Съемку ПФ осуществляли в фильтрованном излучении медного анода. Образцы имеют форму шара с держателем. Диаметр шара равен 2-4 мм, длина держателя около 6 мм. Образцы готовили электроэрозионной резкой с последующим травлением поверхностного слоя. Образцы вырезали из заготовок так, чтобы ось держателя была параллельна одному из характерных направлений, например, направлению прокатки.

Из дифракционного эксперимента, выполненного на поликристаллах, могут быть получены полюсные фигуры, обозначаемые $P_{h_1}(\hat{\gamma})$, где $\hat{\gamma}$ - единичный вектор, описывающий некоторое направление в системе координат образца, имеющий сферические координаты (χ, η) . $P_{h_1}(\hat{\gamma})$ связана с $f(g)$ следующим соотношением:

$$P\tilde{h}_1(\tilde{Y}) = \int_0^{2\pi} (f([\tilde{h}_1, \varphi]^{-1}[\tilde{Y}, 0]) + f([\tilde{h}_1, \varphi]^{-1}[\tilde{Y}, 0])) d\varphi, \quad (1)$$

где φ - произвольный угол.

Задача состоит в том, чтобы по известным функциям $P\tilde{h}_1(\tilde{Y})$ восстановить ФРО $f(g)$. Такую задачу можно решить, если представить $f(g)$ и $P\tilde{h}_1(\tilde{Y})$ в виде рядов по обобщенным шаровым и сферическим функциям, соответственно:

$$f(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_l \sum_m \sum_n C_l^{mn} \exp(im\alpha) P_l^{mn}(\cos\beta) \exp(in\gamma), \quad (2)$$

где $P_l^{mn}(\cos\beta)$ - полиномы Якоби.

$$P\tilde{h}_1(\tilde{Y}) = \sum_{l,m} F_l^m(\tilde{h}_1) Y_l^{mn}(\tilde{Y}), \quad (3)$$

где $Y_l^m(\tilde{Y}) = (2\pi)^{-0.5} \exp(im\Phi) i^m (1+0.5)^{0.5} P_l^m(\cos\theta)$,
 θ, Φ - сферические координаты вектора \tilde{Y} .

Интегральное соотношение (1) и разложение в ряд (2) дают следующую важную формулу, выражающую $P\tilde{h}_1(\tilde{Y})$ через коэффициенты разложения функции распределения зерен по ориентациям $f(g)$:

$$P\tilde{h}_1(\tilde{Y}) = 0.5 \sum_l \sum_m [4\pi/(2l+1)] [1+(-1)^l] C_l^{mn} Y_{lm}^*(\tilde{h}_1) Y_{ln}(\tilde{Y}) \quad (4)$$

Это соотношение представляет собой систему линейных уравнений относительно коэффициентов C_l^{mn} .

Для численной реализации метода Роу восстановления ФРО разработали 2 пакета программ на Фортране: первый пакет, первичной обработки экспериментальных данных, выполняет сглаживание исходных данных путем кусочно-полиномиальной аппроксимации, их нормировку, построение и вывод ПФ, вычисление коэффициентов F_l^m разложения ПФ и второй пакет, расчета ФРО, для определения коэффициентов C_l^{mn} путем решения систем линейных уравнений методом Гауссова исключения, суммирования и построения ФРО, расчета ПФ, вычисления ошибок представления. При традиционном подходе восстановления ФРО поликристаллического бериллия по трем ПФ с длиной разложения $l=16$ для измерения 3 ПФ необходимо 4,5 часа и время на счет 20 мин при заранее насчитанных массивах значений полиномов Лежандра и Якоби.

Метод Роу восстановления ФРО использован для описания различных типов текстур деформации бериллия получаемых, как при одноосной

деформации: текстуры растяжения, сжатия, выдавливания, волочения, осадки, так и при двухосной: текстуры прокатки. При одноосной деформации бериллия, как правило, возникает аксиальная текстура. Ось текстуры при волочении является направлением $[10\bar{1}0]$, а при при осадке нормали к плоскостям базиса располагаются преимущественно параллельно направлению действия приложенной нагрузки, так что ось текстуры имеет индексы $[0001]$. Это хорошо видно при сравнении изображений ФРО проволоки и осажённых заготовок. Значения ФРО для изоповерхностей даются в относительных единицах, кратных значению плотности вероятности обнаружить зерно с данной ориентировкой при изотропном распределении зерен по ориентациям, равному $1/R$. При таком изображении точки пространства ориентаций, в которых ФРО проволоки имеет одинаковые значения образуют "ориентационную трубку". Ось "трубки" параллельна оси α и проходит через точки с координатами $(\alpha, \beta, \gamma) = (\alpha, 90^\circ, 0^\circ)$. При приближении к оси "ориентационной трубки" значение функции распределения возрастает, достигая максимума в точках, лежащих непосредственно на оси "трубки".

ФРО для аксиальной текстуры другого типа - текстуры осадки - также характеризуется наличием подобных "ориентационных трубок" правильной формы. Однако, в этом случае ось "трубки" параллельна оси γ и проходит через точки $(\alpha, \beta, \gamma) = (90^\circ, 90^\circ, \gamma)$.

ФРО листа, прокатанного на валках диаметром 120 мм до суммарной деформации 90 % , напоминает ФРО осажённой заготовки, но как и ФРО проволоки вытянута вдоль оси α . В области ориентационного пространства, в которой при наложении ФРО осажённого материала и ФРО проволоки пересекутся (вблизи точки с координатами $(\alpha, \beta, \gamma) = (90^\circ, 90^\circ, 0^\circ)$) ФРО листа принимает максимальное значение. Этот текстурный максимум обусловлен действием двойного призматического скольжения. Увеличение степени деформации до 92 % (валки диаметром 56 мм) и 98 % (валки диаметром 25 мм) приводит к усилению текстуры - уменьшению объема ориентационного пространства, "занятого" ориентировками зерен. Наряду с этим при уменьшении диаметра валков наблюдается размытие максимума ФРО вдоль оси γ , связанное с повышением вклада базисного скольжения при изменении геометрии очага деформации и траекторий течения материала.

В третьей главе представлен новый метод расчета функции распределения зерен по ориентациям путем аппроксимации ФРО круговыми гауссовскими распределениями, сравнение ФРО, полученных методом Роу и ИТР.

При построении и использовании ФРО было замечено, что метод Роу имеет ряд существенных недостатков:

1. - восстановление по Роу может приводить к появлению ложных максимумов на ФРО;
2. - практически непригоден для описания острых текстур, так как в этом случае необходимо увеличивать длину ряда разложения, что влечет за собой необходимость увеличения числа ПФ и при этом катастрофически растет время счета;
3. - ФРО, полученной по этому методу, свойственно наличие больших областей ориентационного пространства с отрицательными значениями, что противоречит самому определению ФРО.

С целью устранения указанных недостатков был разработан новый метод расчета ФРО - представления ФРО в виде суммы круговых гауссовских распределений. В качестве базисной аппроксимирующей функции выбрано круговое гауссовское распределение (распределение с симметричным рассеянием ϵ вокруг своего "центра" g_0):

$$f(g, g_0, \epsilon) = f(t, \epsilon) = \sum_{l=0}^{\infty} F_l(\epsilon) \sin(l+1/2) t / \sin(t/2), \quad (5)$$

где $F_l(\epsilon) = (2l+1) \exp[-l(l+1)\epsilon^2]$, а t - угловое расстояние между вращениями $g = (\alpha, \beta, \gamma)$ и $g_0 = (\alpha_0, \beta_0, \gamma_0)$; (α, β, γ) - углы Эйлера вращения g ; $\cos(t/2) = \cos(\beta/2) \cos[(\alpha+\gamma)/2]$.

Полюсные фигуры для кругового гауссовского распределения (5) имеют вид:

$$P_{\hat{n}}(\hat{y}) = \sum_{l=0}^{\infty} F_l(\epsilon) P_l(\cos t), \quad (6)$$

где $P_l(\cos t)$ - ненормированные полиномы Лежандра,

$$\cos t = \cos \chi \cos \theta - \sin \chi \sin \theta \cos(\eta - \varphi),$$

$\hat{n} = (\chi, \eta)$, $y = (\theta, \varphi)$ - сферические координаты единичных векторов \hat{n} и \hat{y} , \hat{y} - единичный вектор в системе координат K_A , зафиксированной в образце, \hat{n} - вектор обратной решетки в системе координат K_B , зафиксированной в зерне. Если присутствует статистическая симметрия образца и кристаллическая симметрия образующих поликристалл зерен, аппроксимирующие выражения (5) для ФРО $f(g, g_0, \epsilon)$ и (6) для ПФ $P_{\hat{n}}(\hat{y}, g_0, \epsilon)$ нужно симметризовать.

Таким образом, если предположить, что ФРО $f(g)$ многокомпонентной текстуры аппроксимируется суммой круговых гауссовских распределений:

$$f(g) = \sum_{i=1}^N M_i f(g, g_{01}, \varepsilon_1), \quad (7)$$

где N - число компонент текстуры, M_i - вес i -й компоненты, g_{01} - положение ее "центра", ε_1 - параметр рассеяния, а ПФ от ФРО $f(g)$ вида (7) вычисляются по формулам:

$$P_{\tilde{f}}^{\text{теор.}}(\tilde{f}) = \sum_{i=1}^N M_i P_{\tilde{f}}(\tilde{f}, g_{01}, \varepsilon_1), \quad (8)$$

то задача получения ФРО сводится к определению числа компонент текстуры N , положений их "центров" g_{01} и параметров $M_i, \varepsilon_1, i=1, 2, \dots, N$ путем минимизации функционала от квадрата разности между экспериментально измеренными ПФ $P_{\tilde{f}_k}^{\text{эксп.}}(\tilde{f})$ $k=1, 2, \dots, I_D$ и ПФ вида

$$(8): \quad \Phi = \sum_{k=1}^{I_D} \int_{\tilde{f} \in S^2} (P_{\tilde{f}_k}^{\text{эксп.}}(\tilde{f}) - P_{\tilde{f}_k}^{\text{теор.}}(\tilde{f}))^2 d\tilde{f} \rightarrow \min \quad (9)$$

где I_D - число ПФ.

В простейшем случае однокомпонентной аксиальной текстуры выдавливания бериллия положение оси текстуры и центра гауссовского распределения определяются однозначно. Положение оси текстуры совпадает с координатами максимума призматической ПФ. Значения ФРО совпадают со значениями обратной ПФ в направлении выдавливания бериллия.

Для текстур прокатки в большинстве случаев труднее определить положение "центров" гауссовских распределений непосредственно по положениям максимальных плотностей на ПФ в отличие от случая аксиальных текстур. Необходимую помощь при этом может оказать моделирование текстурообразования при прокатке в условиях, сходных с реальными. В такой ситуации задача (9) в силу нелинейности может и не иметь единственного решения. Мы искали решение, минимизирующее функционал (9) в пределах экспериментальных погрешностей при минимально возможном числе компонент.

Перебирая N ($N \geq 1$) и комбинируя при заданном N метод подбора положений "центров" g_{01} (число возможных вариантов из-за симметрии ПФ невелико) с нахождением отвечающих их параметров ε_1 и M_i , определяли параметры ФРО, минимизирующие (9) с приемлемой точностью по данным двух ПФ (0001) и (1010). Для построения ФРО текстуры прокатки

бериллия ($T_D = 650-680^\circ\text{C}$, $\Sigma\epsilon = 92\%$) потребовалось шесть КГР: пять для описания аксиальных компонент (M_2-M_6) и один - компоненты прокатки (M_7). Вклады компонент определяются их весами и равны: $M_1 = 0.09$, $M_2 = M_3 = 0.17$, $M_4 = M_5 = 0.06$, $M_6 = 0.37$, $M_7 = 0.08$, (M_1 - вклад бестекстурной компоненты).

При дальнейшей прокатке данного материала ($\Sigma\epsilon = 96\%$) происходит рассеивание базисных полюсов вдоль поперечного направления. Поэтому появляется еще два "центра" ξ_{01} .

Функцию распределения зерен по ориентациям $f(g)$ можно представить в виде:

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \Psi(g), \quad (10)$$

где $\tilde{f}(g)$ - часть суммы (10) с четными индексами 1, а $\Psi(g)$ - часть суммы (10) с нечетными индексами 1. Метод Роу-Бунге позволяет получить неполную ФРО, а именно $\tilde{f}(g)$. Рассмотрим на практических примерах отличие ФРО, получаемых методом Роу и с помощью круговых гауссовских распределений (7). Необходимо отметить совпадение положений максимумов ФРО, полученных по этим двум методам. Однако, количественно функции $f(g)$ и $\tilde{f}(g)$ отличаются. Для слабых текстур ФРО по Роу практически не отличается от четной составляющей ФРО. В этом случае четная составляющая достаточно хорошо описывает ФРО. При острых текстурах для их описания недостаточно знание четной составляющей, что существенно ограничивает область применения метода Роу. При рассмотрении зависимости $f(g)$ по КГР и по Роу от суммарной степени деформации кривые сечения этих функций в направлении $[10\bar{1}0]$ имеют сходный характер, однако в направлении $[\bar{1}120]$ они заметно отличаются. Здесь ФРО по Роу имеет ложный максимум. Естественно, такие результаты могут привести к неверной трактовке, например, действия механизмов текстурообразования бериллия при прокатке.

При рассмотрении аксиальных текстур, выполняется равенство $f(g) = \tilde{f}(g)$, что наблюдается на практике. Такая ситуация имеет место только для аксиальных текстур, чьи компоненты обладают осями симметрии второго порядка, перпендикулярными осям текстуры. Существование таких осей в нашем случае является следствием определенного расположения "центров" компонент, их осей текстуры, вида аппроксимирующих функций и гексагональной кристаллической симметрии. А так как четная составляющая $\tilde{f}(g)$ достаточно хорошо рассчитывается методом Роу, то в случае аксиальных текстур выдавленного бериллия мы и получаем совпадение значений функций $f(g)$ и $\tilde{f}(g)$.

Достоверного критерия правильности найденной $f(g)$ в настоящее время не существует, так как это может быть ФРО, полученная по определению, т.е. должны быть измерены ориентации по крайней мере нескольких тысяч зерен. Тем не менее, учитывая то, что метод круговых гауссовских распределений не дает ложных максимумов и отрицательных значений функции $f(g)$, а также появляется возможность восстановить нечетную часть ФРО, можно предположить о близости значений ФРО, получаемых этим методом, "истинным" ее значениям. К недостаткам предложенного метода, в отличие от традиционного метода Роу-Бунге, следует отнести трудности в выборе "центров" g_{01} в случае перекрытия максимумов на ПФ.

В четвертой главе рассмотрено применение ФРО для полного количественного анализа сформированных текстур, при изучении действующих механизмов в процессе деформационной обработки материалов, для расчета свойств анизотропных текстурированных материалов на основе известных свойств монокристаллов.

1.1 Для анализа текстур деформации при помощи ФРО удобно дать интерпретацию основных максимумов ФРО в терминах идеальных ориентировок. С этой целью строятся номограммы. Нами рассчитаны номограммы объяснения ФРО прокатанного бериллия для плоскостей и направлений с индексами от -3 до $+3$. Используя номограммы, определили, что ФРО листов бериллия максимальна в точке нормали к плоскости (0001) и направления [1010], а минимальна в этом случае в направлении [1120]. Это означает, что большая часть зерен расположена благоприятно для двойного призматического скольжения и можно ожидать дальнейшей пластической деформации данного материала.

1.2 Количественное рассмотрение и однозначное объяснение процессов текстурообразования в металлах и сплавах при пластической деформации становится возможным при использовании трехмерных функций распределения зерен по ориентациям и реализации на ЭВМ теоретических моделей текстурообразования. В поликристаллах металлических материалов пластическая деформация преимущественно осуществляется путем скольжения по определенным кристаллографическим системам и двойникованием. Такие условия протекания пластической деформации и положены в основу реализуемых теорий для моделирования. Моделирование позволяет проследить за процессами текстурообразования при условии действия различных систем скольжения и двойникования и различном их вкладе в пластическую деформацию. С другой стороны, вид текстур, полученных в результате моделирования, позволяет точно сказать о

том, действие каких механизмов деформации приводит к данному распределению кристаллографических ориентировок в пространстве и их количественном вкладе.

Основная модель пластической деформации поликристаллического бериллия была разработана на основе оригинальной работы Леффера. Для кинематической модели критерием истинности является текстура деформации. В данном случае текстура рассматривается как статистический источник информации о действии тех или иных механизмов в процессе деформации. Текстура представлена в виде ФРО. Расчетные значения ФРО представлены суммой КТР с известными "центрами". Т.е. совпадение или несовпадение численных значений ФРО рассчитанных по данной модели и экспериментально полученных будет говорить о пригодности или о непригодности модели.

При использовании кинематической модели пластической деформации данного материала необходимо знать его элементарные виды деформации, значения критических напряжений сдвига по этим системам деформации, зависимости их от температуры и примесей и т.д. В монокристаллах бериллия имеются две основные системы дислокационного скольжения: базисная (0001) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и призматическая (1010) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Вплоть до 800°K базисное скольжение имеет самое низкое значение $\tau_{кр}$. Выше этой температуры величины $\tau_{кр}$ для базисного и призматического скольжения уравниваются. Скольжение по призматическим плоскостям (1010) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ является вторичным скольжением бериллия. Хотя для него обычно необходимы более высокие напряжения, оно играет важную роль в процессе деформации поликристаллического бериллия.

Роль пирамидального скольжения при пластической деформации бериллия и даже сам факт его существования относится к числу дискуссионных проблем физики пластичности. Пирамидальное скольжение в бериллии (из-за большого значения $\tau_{кр}$) экспериментально можно изучать только при условии, что касательные напряжения в плоскости (0001) не превышают 0.1 кг/мм². Так как в этом вопросе не получен однозначный ответ, мы включили в рассмотрение пирамидальное скольжение для данной модели с учетом высоких значений его $\tau_{кр}$.

Все вышесказанное позволяет нам учесть в данной модели пластической деформации все известные виды деформационного скольжения в бериллии. Путем учета отношений $\tau_{призм.} / \tau_{баз.}$ и $\tau_{пир.} / \tau_{баз.}$ модель позволяет исследовать процессы текстурообразования при деформации поликристаллического бериллия

различной чистоты в широком интервале температур. В бериллии двойникование обычно происходит по плоскостям типа $\{10\bar{1}2\}$. Направление двойникования по плоскости $\{10\bar{1}2\}$ соответствует оси $\langle 10\bar{1}1 \rangle$. Так как у бериллия отношение c/a меньше $\sqrt{3}$, то двойникование $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$ приводит к дилатации решетки вдоль оси C , и, следовательно, происходит тогда, когда имеется растягивающая компонента напряжений вдоль оси C . Двойникование учитывалось в деформационной модели следующим образом. На каждом шаге деформации выбирались системы скольжения и системы двойникования с максимальным напряжением сдвига $\tau_{дв. (макс.)} / \tau_{ск. (макс.)}$, где $\tau_{дв.}$ - напряжение сдвига при двойниковании, $\tau_{ск.}$ - напряжение сдвига при скольжении. Данные для этого соотношения рассчитывались с учетом температурной зависимости критических напряжений скольжения и двойникования. После того, как определили, что действует двойник, рассчитывались величины деформации в результате двойникования:

$$\epsilon = (1 + 2S \sin\lambda_0 \cos\chi_0 + S^2 \sin^2\lambda_0)^{0.5}, \quad (II)$$

где λ_0 - угол между направлением деформации и плоскостью двойникования, χ_0 - угол между направлением деформации и направлением двойникования, s - удельный кристаллографический сдвиг. По максимальной величине ϵ определяли действующую систему двойникования и затем рассчитывали ориентировку переддвойникованного зерна, согласно известным данным.

Проведено моделирование процессов текстурообразования при одноосной - растяжение, сжатие (на практике выдавливание, волочение, осадка) и двухосной схеме нагружения - сочетание растяжения и сжатия (прокатка) поликристаллического бериллия различной чистоты в широкой области температур и степеней деформации. Разработанная модель, использующая описание текстуры в виде суммы круговых гауссовских распределений, позволяет работать как с бестекстурными, так и с материалами, имеющими текстуру. Из сравнения экспериментально измеренных и расчетных по результатам моделирования ФРО следует, что данная модель пригодна для описания пластической деформации ГПУ-бериллия при повышенных температурах.

Анализ текстур деформации бериллия показал, что лучшее согласие с экспериментальными данными дают расчетные данные, полученные с учетом модели Закса. Отсюда следует, что для поликристаллического бериллия, деформируемого при повышенных температурах, характерна деформация

монокольжением, аккомодируемая двойникованием или проскальзыванием зерен по границам. Совпадение значений экспериментальных и расчетных ФРО позволяет по данным моделирования определить количественный вклад действующих механизмов в общую деформацию. При моделировании пластической деформации ГПУ-бериллия определили вклад базисного, призматического и пирамидального скольжения, а также двойникования, подсчетом количества действий той или иной системы. Затем проводили усреднение по числу продеформированных зерен. Установлено, что вклад пирамидального скольжения пренебрежимо мал, так как пирамидальное скольжение требует очень больших напряжений и идеальной ориентации кристалла. Вклад двойникования также мал по сравнению с вкладом скольжения. Из расчетов следует, что двойникование осуществляется только лишь в неблагоприятно ориентированных зернах по отношению к внешней нагрузке и на начальных стадиях деформации. Увеличение вклада призматического скольжения с ростом температуры связано с уменьшением различия в значениях критических напряжений сдвига в плоскостях (0001) и (1010). Одним из важных преимуществ компьютерного моделирования является возможность рассмотрения действия того или иного механизма отдельно от других. Для анализа процесса текстурообразования при прокатке ГПУ-бериллия были смоделированы текстуры для разных степеней деформации с учетом действия только базисного скольжения или только призматического. Это позволило наглядно показать, что образование текстур при прокатке бериллия основано на конкуренции двух основных видов скольжения: базисного и призматического и не нуждается в дополнительных предположениях о существовании пирамидального скольжения.

Указанный выше аппарат открывает принципиально новые исследовательские возможности. В частности, позволяет разделить вклады кристаллографических механизмов деформации и механизмов, аккомодируемых диффузией и не приводящих к направленному изменению текстуры. Для определения количественного вклада скольжения по границам зерен в общую деформацию поликристаллического металла провели специальную работу по изучению деформации бериллия в области реализации сверхпластичности и ее окрестностях по температуре (600-800°C) и скоростях деформации (10^{-1} - 10^{-5} сек $^{-1}$). Образцы деформировались растяжением на 30%. Основываясь на утверждении, что процесс зернограницного проскальзывания не сопровождается направленным изменением текстур и вычислив по апробированной модели часть

деформации, осуществляемую дислокационным скольжением, а также зная общую деформацию материала, определили количественный вклад проскальзывания по границам зерен, аккомодируемого дислокационным и диффузионным крипом в указанной области температур и скоростей деформации. Построены карты эволюции вкладов механизмов деформации в координатах: скорость деформации - температура деформации. Показали, что при увеличении температуры деформации для всех скоростей наблюдается уменьшение вклада базисного скольжения. Причем при температурах $750-800^{\circ}\text{C}$ и скоростях $10^{-4}-10^{-5}$ вклад базисного скольжения практически не меняется. Аналогично уменьшается вклад призматического скольжения в области температур $600-700^{\circ}\text{C}$ при всех скоростях. Однако, при повышении температуры испытания до 800°C наблюдается усиление вклада призматического скольжения, причем оно зависит от скорости деформации и максимально при скорости 10^{-5}сек^{-1} . Такое усиление призматического скольжения, видимо, обусловлено сравнимыми значениями критических напряжений сдвига для плоскостей (0001) и (1010) и благоприятной исходной ориентацией зерен. С увеличением температуры и уменьшением скорости деформации происходит увеличение вклада проскальзывания по границам зерен, достигая максимального значения при температуре $700-750^{\circ}\text{C}$ и скоростях деформации $10^{-4}-10^{-5}\text{сек}^{-1}$. Это означает, что в этой области температур и скоростей деформации наблюдаются оптимальные условия для сверхпластического течения, о чем свидетельствует и резкое падение значений предела текучести данного материала.

1.3 Ранее показано, что основной и часто единственной причиной анизотропии многих свойств однофазных поликристаллов является кристаллографическая текстура. Наличие ФРО позволяет строго учесть кристаллографическую текстуру при расчете свойств, описываемых тензорами второго и четвертого рангов, таких как теплопроводность, электропроводность, линейное расширение, магнитные, упругие свойства и т.д. Поэтому представляется возможность, используя известные свойства монокристаллов и весовые текстурные функции, рассчитать физические и механические свойства текстурированных ПЧ-металлов в любом из выбранных направлений. Подобные расчеты позволяют не только предсказать свойства текстурированных материалов, но и являются инструментом для исследования вклада свойств монокристаллов в свойства поликристаллических агрегатов. В настоящей работе, учитывая то, что ФРО представлена в виде суммы круговых гауссовских распределений, получены аналитические выражения для расчета

тензорных свойств гексагональных поликристаллов через параметры КГР путем усреднения соответствующих свойств, составляющих поликристалл зерен. Расчитаны среднее электросопротивление, магнитная восприимчивость, модуль Юнга и модуль сдвига прокатанного поликристаллического бериллия. Максимальное значение среднего электросопротивления, как и магнитной восприимчивости, достигается в направлении параллельном направлению нормали к листу, а минимальное - в направлении прокатки. Рассмотрено изменение расчетных и экспериментально измеренных значений электросопротивления в зависимости от угла α отклонения от направления прокатки в плоскости листа. Сравнение этих значений показывает достаточно хорошее совпадение результатов. Вследствие того, что размер зерна вдоль направления прокатки превышает размер в поперечном направлении, следует ожидать увеличение значений электросопротивления в поперечном направлении по сравнению со значениями электросопротивления в направлении прокатки, что и согласуется с полученными данными. Выполнен расчет эффективного тензора 4-го ранга коэффициентов податливости поликристаллического бериллия в приближениях Фойгта, Ройсса и Хилла. Небольшое отличие этих значений позволяет сделать вывод о правомерности в данном случае использования этих приближений для расчета эффективных упругих характеристик. Для этих же приближений расчитаны значения модуля Юнга и сдвига бериллия в различных плоскостях. Ввиду того, что узость вилки Хилла (разность между приближениями Ройсса и Фойгта) в первую очередь определяется параметрами анизотропии составляющих образец монокристаллов, следует ожидать аналогичных результатов при расчете упругих характеристик поликристаллического бериллия с различными типами текстур.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе решена задача восстановления функции распределения зерен по ориентациям ГПУ-бериллия, создана кинематическая модель пластической деформации поликристаллического бериллия, критерием справедливости которой служит процесс текстурообразования и математическая модель расчета свойств гексагональных текстурированных материалов. Изучены ФРО как функция температуры, степени и скорости деформации для основных видов деформации поликристаллического бериллия.

Основные результаты диссертационной работы:

1. Численно реализован традиционный метод Роу восстановления ФРО по известным ПФ путем разложения в ряды по обобщенным шаровым и сферическим функциям. Созданы пакеты прикладных программ.
2. Предложен и разработан новый метод восстановления ФРО, основанный на использовании круговых гауссовских распределений.
3. Оба метода применены для изучения текстур деформации поликристаллического бериллия: волочения, осадки и прокатки. Показано, что при волочении образуется аксиальная текстура с осью $[10\bar{1}0]$, характеризующаяся ФРО в виде "ориентационной трубки" параллельной оси α , текстура осадки также характеризуется наличием "ориентационной трубки" параллельной оси γ выбранной системы координат. Типичная текстура прокатки бериллия может быть представлена как суперпозиция текстур осадки и волочения. ФРО в случае текстуры прокатки напоминает ФРО осаженного материала, но вытянута вдоль оси α как и в случае проволоки.
4. Выполненная работа на текстурах деформации ГПУ-бериллия позволила выявить недостатки старого метода и преимущества нового. В частности, ФРО, полученная методом Роу, в больших областях ориентационного пространства имеет отрицательные значения, также для такой ФРО характерно наличие ложных максимумов.
5. Для интерпретации основных максимумов ФРО в терминах идеальных ориентировок при рассмотрении текстур прокатки гексагональных материалов построены номограммы.
6. Представление ФРО в виде суммы круговых гауссовских распределений позволило определить вклад отдельных компонент в случае многокомпонентных текстур деформации бериллия.
7. Разработана кинематическая модель пластической деформации поликристаллического бериллия. Показано, что деформация бериллия при повышенных температурах удовлетворяет условиям Закса.
8. Полученные после моделирования расчетные ПФ достаточно хорошо согласуются с экспериментальными ПФ основных типов текстур деформации бериллия. Определены количественные вклады базисного, призматического скольжения и двойникования в общую деформацию материала.
9. Исследовано изменение текстур при сверхпластической деформации бериллия и определена область температур и скоростей деформации максимального проявления эффекта сверхпластичности. Использование моделирования при сверхпластической деформации позволило определить

вклад проскальзывания по границам зерен, который составил в условиях сверхпластичности - 80% от общей деформации бериллия (Растяжение с $\Sigma\epsilon = 30\%$).

Ю. Проведены расчеты ориентационно-зависимых физических и механических свойств, описываемых тензорами второго и четвертого рангов: электросопротивления, магнитной восприимчивости, модулей упругости прокатанного поликристаллического бериллия с учетом того, что ФРО представлена в виде набора круговых гауссовских распределений. Показано хорошее совпадение рассчитанных и экспериментально измеренных значений электросопротивления в зависимости от угла α в плоскости листа.

И. В целях автоматизации процессов сбора и обработки данных рентгеновского текстурного анализа разработан и отлажен программно-алгоритмический комплекс для дифрактометра ДРОН-2, оснащенный автоматическим текстур-гонометром и вычислительными машинами.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Иванов В.Е., Тихинский Г.Ф., Папилов И.И., Капчерин А.С., Шкуропатенко В.А. Дальнейшее исследование сверхпластичности бериллия. // Сб. "Материалы 3-го межведомственного совещания по металлофизике бериллия", Харьков, 1981, с.57-62
2. Капчерин А.С., Шкуропатенко В.А., Папилов И.И., Николаев Д.И. Аналитическое описание текстуры поликристаллических материалов. Полюсная фигура. // Препринт ХФТИ 85-42, М.: ЦНИИатоминформ, 1985, 50с.
3. Капчерин А.С., Шкуропатенко В.А., Папилов И.И., Тихинский Г.Ф., Савелова Т.И., Николаев Д.И. Исследование ФРО для описания текстур деформации поликристаллического бериллия. // ВАНТ, сер.: общая и ядерная физика, 1985, вып. I (1), с.80-84.
4. Капчерин А.С., Шкуропатенко В.А., Папилов И.И. Кинематическая модель пластической деформации бериллия при растяжении и прокатке. // ВАНТ, сер.: общая и ядерная физика, 1985, вып. I (1), с.84-88
5. Бухарова Т.И., Капчерин А.С., Николаев Д.И., Папилов И.И., Савелова Т.И., Шкуропатенко В.А. Новый метод восстановления функции распределения зерен по ориентациям. Аксиальная текстура. // ФММ, 1988, т.65, вып.5, с.934-939.
6. Бухарова Т.И., Капчерин А.С., Шкуропатенко В.А. Описание текстур прокатки с помощью гауссовских распределений. // Материалы Всесоюз. конф. "Текстуры и рекристаллизация в металлах и сплавах". - Уфа: Институт проблем сверхпластичности при АН СССР, 1987, с.231.

7. Капчерин А.С., Папиров И.И., Шкуропатенко В.А. Аналитическое описание текстуры поликристаллических материалов в решении ряда задач металлофизики. //М: ЦНИИатоминформ, 1986, 30с.
8. Капчерин А.С., Бухарова Т.И., Шкуропатенко В.А. Применение гауссовских распределений для вычисления физических свойств поликристаллов. // Труды 6 Всесоюзной конф. Усть-Каменогорск, 1988
9. Капчерин А.С., Папиров И.И., Стоев П.И., Торяник В.В., Финкель В.А., Шкуропатенко В.А., Бухарова Т.И. Методика анализа текстур с помощью ФРО и исследование текстурообразования при прессовании порошков ВТСП. //СФХТ, NI, 1992, с.113-118

Подписано в печать 04.05.93г. Формат 60x84/16.
Офсетная печать. Усл.п.л. I,0. Уч.-изд.л. I,0.
Тираж 100. Заказ № 244.

Харьков-108, ротاپронт ХФТИ

AB 27.623

AB 27.623