

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-84-452

К. Вальтер, И. Дёрфель

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТЕКСТУР
В КУБИЧЕСКИХ
ОБЪЕМОЦЕНТРИРОВАННЫХ МЕТАЛЛАХ
(Модельные расчеты)

1984

ВВЕДЕНИЕ

При деформации поликристаллических материалов образуется текстура, т.е. преимущественная ориентация кристаллитов. В данной работе исследуется механизм возникновения текстуры случая холодной прокатки, что имеет значение для целого ряда прикладных областей, где исследуются свойства, возникающие на основе разных текстур. В связи с этим представляется полезным предсказать текстуру из условий деформации, в которых находятся материалы, и из этого определить свойства материала без измерений свойств или текстур.

Несмотря на многократные попытки, за прошедшие 50 лет не удалось создать модели, которая бы адекватно описывала экспериментальные данные. Существующие модели приводят только к качественным совпадениям.

Теория механизма образования текстур была развита Тейлором^{/1/} и дополнена Бишопом и Хиллом^{/2/}. Эта модель содержит следующие предпосылки:

- Пластическая деформация каждого зерна образца соответствует пластической деформации всего образца.
 - Деформация происходит медленно, скольжением дислокаций.
- При этом возможно одновременное действие различных систем скольжения. В каждой из них предполагается простое скольжение.
- Материал подлжит жесткопластическому закону течения.
 - Объем деформированного образца считается постоянным.

В этой работе сделаны упрощения модели Тейлора. Проведена проверка качества модели при помощи численных расчетов на ЭВМ с целью иметь исходную базу, которая позволила бы в будущем исследовать более сложные эффекты в модели.

1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОСНОВА

Как системы скольжения рассматриваются $\{110\} \langle 111 \rangle$, $\{112\} \langle 111 \rangle$ и смесь обеих. Все 12 эквивалентных систем скольжения обозначены фигурными скобками и скобками вида $\langle \rangle$. Эти системы скольжения есть плоскости плотнейшей упаковки и соответствующие им направления в кубической объемноцентрированной структуре. Система скольжения $\{123\} \langle 111 \rangle$, которая редко принимается во внимание, рассматриваться не будет, ее реализация маловероятна^{/3-6/}, в итоге возникает 24 возможных системы скольжения для кубических объемноцентрированных металлов.

Система координат была выбрана таким образом, что направление оси x соответствует направлению прокатки, направление оси y соответствует поперечному направлению и направление оси z соответствует направлению нормали плоскости прокатки.

Для прокатки было принято простое, плоское состояние напряжения. Из этого получаются для тензоров напряжения и деформации следующие выражения:

тензор напряжения:

$$T = \begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma \end{pmatrix}, \quad /1/$$

тензор деформации:

$$D = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\epsilon \end{pmatrix}. \quad /2/$$

Принимая во внимание постоянство объема образца, тензоры выбирают таким образом, что след равен 0.

Мы рассмотрим 27 выбранных ориентировок кристаллитов относительно направления прокатки, которые классифицируются индексами Миллера, приведенными в табл.1. Чтобы сделать преобразование из системы образца в систему кристалла, определяем углы Эйлера ϕ_1, Φ, ϕ_2 и матрицу преобразования $O^{17/}$.

$$\Phi = \arccos \frac{\ell}{\sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}}, \quad \phi_2 = \arccos \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}} = \arcsin \frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}}, \quad /3/$$

$$\phi_1 = \arcsin \left[\frac{w}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}} \cdot \sqrt{\frac{h^2 + k^2 + \ell^2}{h^2 + k^2}} \right],$$

$$O = \begin{bmatrix} \cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi & \sin\phi_1 \cos\phi_2 + \cos\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi & \sin\phi_2 \sin\Phi \\ -\cos\phi_1 \sin\phi_2 - \sin\phi_1 \cos\phi_2 \cos\Phi & -\sin\phi_1 \sin\phi_2 + \cos\phi_1 \cos\phi_2 \cos\Phi & \cos\phi_2 \sin\Phi \\ \sin\phi_1 \sin\Phi & -\cos\phi_1 \sin\Phi & \cos\Phi \end{bmatrix}. \quad /4/$$

Из этого получаем тензор напряжения σ в координатах кристалла T^c

$$T^c = O T O^{-1}. \quad /5/$$

Матричные элементы T^c :

$$t_{11} = \sigma [(\cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi)(\cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi) - \sin^2\phi_1 \sin^2\Phi],$$

Избранные ориентировки кристаллитов в индексах Миллера

$(\bar{1}00)/001/$	
$(100)/023/$	$(100)/0\bar{2}3/$
$(100)/013/$	$(100)/0\bar{1}3/$
$(100)/012/$	$(100)/0\bar{1}2/$
$(100)/011/$	$(100)/0\bar{1}1/$
$(110)/\bar{1}13/$	$(1\bar{1}0)/\bar{1}\bar{1}3/$
$(110)/\bar{1}12/$	$(1\bar{1}0)/\bar{1}\bar{1}2/$
$(0\bar{1}\bar{1})/\bar{2}33/$	$(0\bar{1}\bar{1})/\bar{2}\bar{3}3/$
$(110)/\bar{1}11/$	$(1\bar{1}0)/\bar{1}\bar{1}1/$
$(12\bar{1})/\bar{1}23/$	$(1\bar{2}\bar{1})/\bar{1}\bar{2}3/$
$(0\bar{1}\bar{1})/\bar{1}33/$	$(0\bar{1}\bar{1})/\bar{1}\bar{3}3/$
$(0\bar{1}\bar{1})/\bar{1}22/$	$(0\bar{1}\bar{1})/\bar{1}\bar{2}2/$
$(02\bar{1})/\bar{1}24/$	$(0\bar{2}\bar{1})/\bar{1}\bar{2}4/$
$(04\bar{3})/\bar{1}34/$	$(0\bar{4}\bar{3})/\bar{1}\bar{3}4/$

$$t_{12} = t_{21} = \sigma [(\cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi)(\cos\phi_2 \sin\phi_1 + \sin\phi_2 \cos\phi_1 \cos\Phi) + \sin\phi_1 \sin^2\Phi \cos\Phi],$$

$$t_{13} = t_{31} = \sigma [(\cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\Phi) \sin\phi_2 \sin\Phi - \sin\phi_1 \sin\Phi \cos\Phi],$$

$$t_{22} = \sigma [(\cos\phi_2 \sin\phi_1 + \sin\phi_2 \cos\phi_1 \cos\Phi)(\cos\phi_2 \sin\phi_1 + \sin\phi_2 \cos\phi_1 \cos\Phi) - \cos^2\phi_1 \sin^2\Phi],$$

$$t_{23} = t_{32} = \sigma [(\cos\phi_2 \sin\phi_1 + \sin\phi_2 \cos\phi_1 \cos\Phi) \sin\phi_2 \sin\Phi + \cos\phi_1 \sin\Phi \cos\Phi],$$

$$t_{33} = \sigma [\sin^2\phi_2 \sin^2\Phi - \cos^2\Phi].$$

С помощью закона Шмидта определяется результирующая сдвиговая составляющая напряжения в отдельных системах скольжения для любых состояний напряжения.

$$\sigma_{\ell} = \sum_{ij} t_{ij} m_{ij}^{\ell}, \quad /7/$$

где t_{ij} - компоненты тензора напряжения T^c и m_{ij}^l - тензор косинусов направления,

$$m_{ij}^l = \frac{1}{2} (r_i^l v_j^l + r_j^l v_i^l); \quad /8/$$

r - направляющий косинус направления скольжения, v - направляющий косинус нормали к плоскости скольжения.

Упрощения, которые делались по сравнению с моделью Тейлора, состоят в том, что не выбирается самая выгодная комбинация пяти систем скольжения, а берется та система, для которой действует самая большая сдвиговая составляющая напряжения.

Этот способ предполагает, что критическая сдвиговая составляющая напряжения является одинаковой для всех систем скольжения. Расчеты были выполнены на ЭВМ с помощью фортрановской программы.

Результаты этих расчетов представлены на рис. 1-6. Благодаря рассматриваемым скольжениям происходит компенсирующее вращение кристаллической решетки /рис. 13/ /8/, которое выражается через антисимметричную часть тензора деформации по формуле

$$S_a^c + \Omega = D_a^c = 0, \quad /9/$$

где

$$S_a^{c,l} = \gamma_l (r_i^l v_j^l + r_j^l v_i^l) \cdot \frac{1}{2}, \quad /10/$$

$$S_a^{c,l} = \gamma_l (r_i^l v_j^l - r_j^l v_i^l) \cdot \frac{1}{2}. \quad /11/$$

D_a^c - антисимметричная часть тензора деформации в координатах кристалла; γ_l - модуль скольжения в системе скольжения с номе-

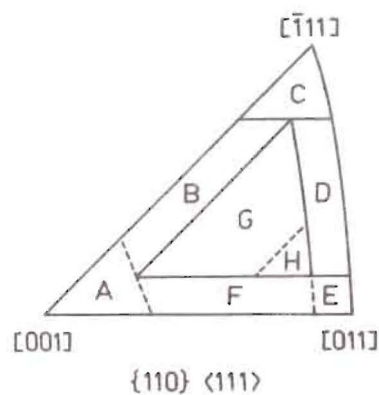


Рис. 1. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$.

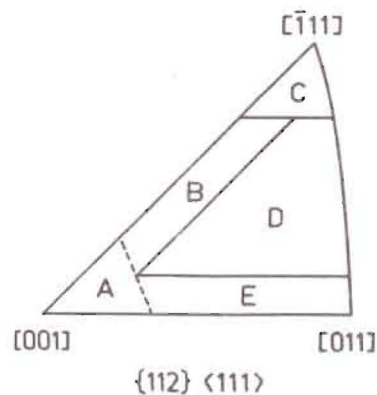


Рис. 2. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{112\} \langle 111 \rangle$.

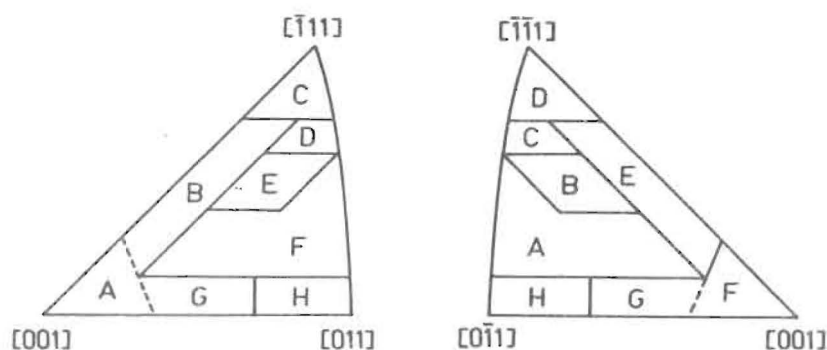


Рис. 3. Действуют системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$ и $\{112\} \langle 111 \rangle$ одновременно.

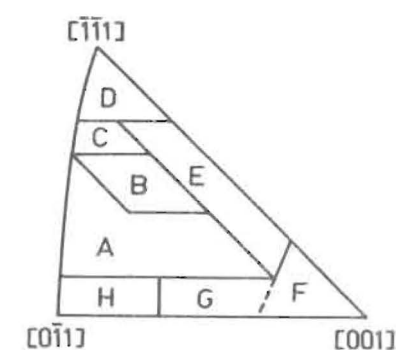


Рис. 4. Действуют системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$ и $\{112\} \langle 111 \rangle$ одновременно.

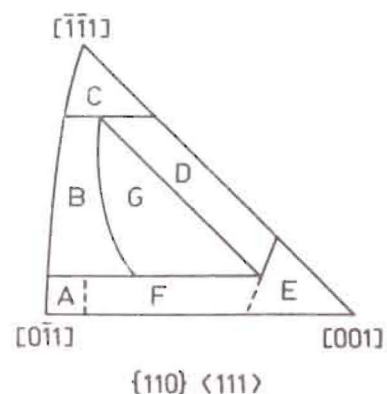


Рис. 5. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$.

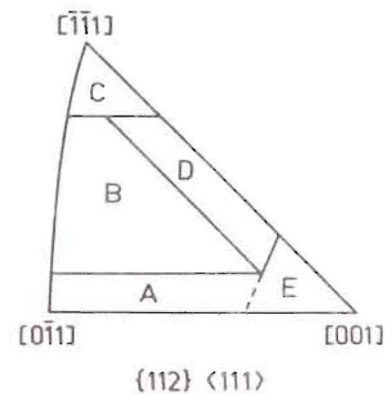


Рис. 6. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{112\} \langle 111 \rangle$.

ром l . Вращение описывается тензором Ω , который определяется через углы Эйлера $\phi_1', \phi_2', \phi_3'$.

Используя инфинитезимальность вращений при малых степенях деформации, получаем из матрицы D транспонированную матрицу D' в виде

$$O' = I + \Omega = \begin{bmatrix} \cos(\phi'_1 + \phi'_2) & -\sin(\phi'_1 + \phi'_2) & \Phi' \sin \phi'_1 \\ \sin(\phi'_1 + \phi'_2) & \cos(\phi'_1 + \phi'_2) & -\Phi' \cos \phi'_1 \\ \Phi' \sin \phi'_2 & \Phi' \cos \phi'_2 & 1 \end{bmatrix}. \quad /12/$$

Отдельные углы выражаются по следующим формулам:

$$\phi'_1 + \phi'_2 = -\epsilon_1, \quad \phi'_2 = -\phi'_1 - \epsilon_1, \quad \Phi' = \sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2};$$

$$\cos \phi'_1 = -\frac{\epsilon_3}{\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}}, \quad \sin \phi'_1 = \frac{\epsilon_2}{\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}}, \quad /13/$$

$$\cos \phi'_2 = -\frac{\epsilon_3}{\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}}, \quad \sin \phi'_2 = -\frac{\epsilon_2}{\sqrt{\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}},$$

где

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ -\epsilon_1 & 0 & \epsilon_3 \\ -\epsilon_2 & -\epsilon_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad /14/$$

Для расчета вращений отдельных кристаллитов была принята степень деформаций 5% и на основе этого выбраны γ_{ℓ} того же порядка. С помощью теоремы сложения для углов Эйлера двух последующих вращений /9/ можно определить ориентировку кристаллита после деформации.

Углы Эйлера совокупного вращения $\phi''_1, \phi''_2, \Phi''$ определяются по следующим формулам:

$$\cos \Phi'' = \cos \Phi + \sin \Phi (\epsilon_3 \cos \phi_1 - \epsilon_2 \sin \phi_1),$$

$$\sin \Phi'' = \sin \Phi - \cos \Phi (\epsilon_3 \cos \phi_1 - \epsilon_2 \sin \phi_1),$$

$$\cos \phi''_2 = \cos \phi_2 + \frac{\sin \phi_2 (\cos \phi_1 \cdot \epsilon_2 + \sin \phi_1 \cdot \epsilon_3)}{\sin \Phi},$$

$$\sin \phi''_2 = \sin \phi_2 - \frac{\cos \phi_2 (\cos \phi_1 \cdot \epsilon_2 + \sin \phi_1 \cdot \epsilon_3)}{\sin \Phi},$$

$$\cos \phi''_1 = \cos \phi_1 + \epsilon_1 \sin \phi_1 + \frac{\sin \phi_1}{\cos(\Phi/2)} \left[\epsilon_2 \cos \phi_1 \sin \frac{\Phi}{2} - \frac{\epsilon_2}{2} \frac{\cos \phi_1}{\sin \Phi} + \epsilon_3 \sin \phi_1 \sin \frac{\Phi}{2} - \frac{\epsilon_3}{2} \cdot \frac{\sin \phi_1}{\sin \Phi} \right],$$

$$\sin \phi''_1 = \sin \phi_1 - \epsilon_1 \cos \phi_1 - \frac{\cos \phi_1}{\cos \Phi/2} \left[\epsilon_2 \cos \phi_1 \sin \frac{\Phi}{2} - \frac{\epsilon_2}{2} \frac{\cos \phi_1}{\sin \Phi} + \epsilon_3 \sin \phi_1 \sin \frac{\Phi}{2} - \frac{\epsilon_3}{2} \cdot \frac{\sin \phi_1}{\sin \Phi} \right]. \quad /15/$$

Результаты перевода углов Эйлера в индексы Миллера представлены на рис.7-12.

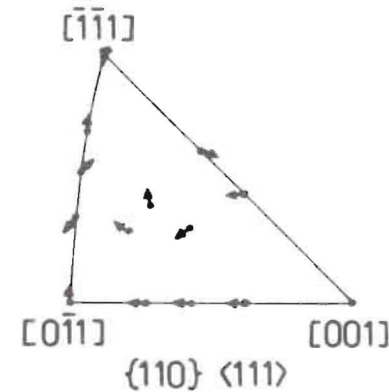


Рис.7. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$.

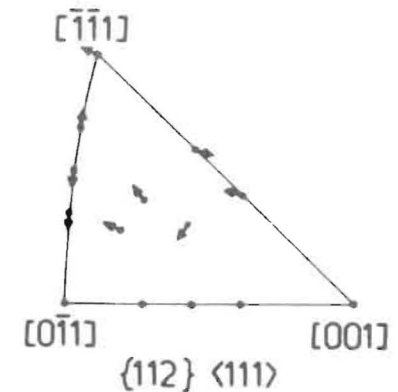


Рис.8. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{112\} \langle 111 \rangle$.

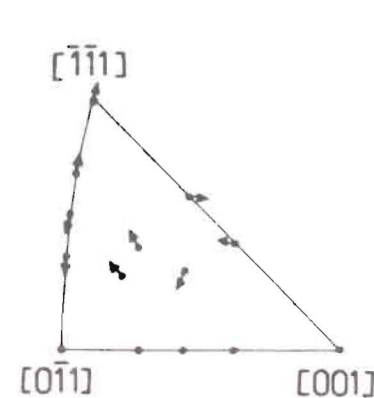


Рис.9. Действуют системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$ и $\{112\} \langle 111 \rangle$ одновременно.

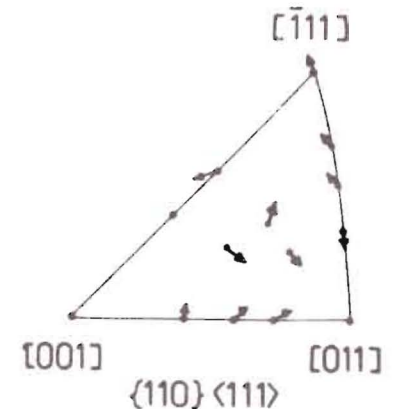


Рис.10. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$.

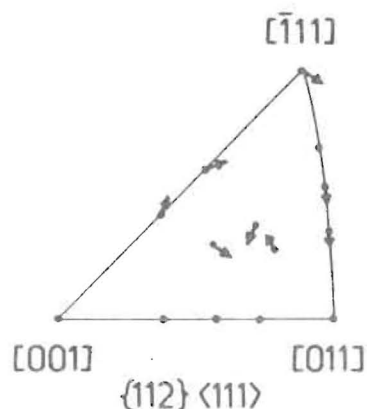


Рис.11. Действуют только эквивалентные системы скольжения $\{112\} \langle 111 \rangle$.

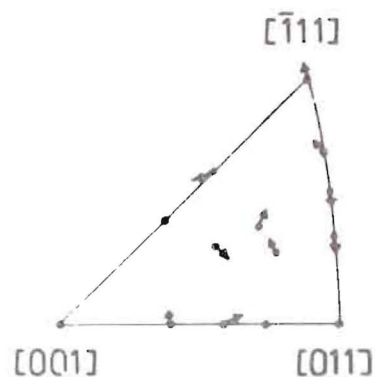
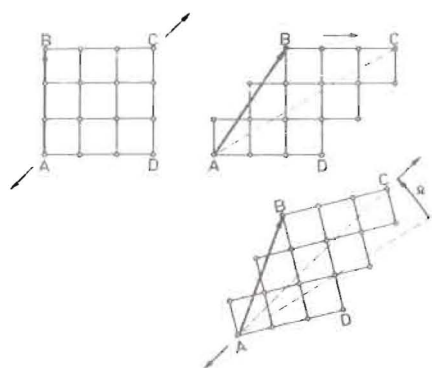


Рис.12. Действуют системы скольжения $\{110\} \langle 111 \rangle$ и $\{112\} \langle 111 \rangle$ одновременно.

Рис.13. AC- ось растяжения, вращение вектора AB после чистого скольжения, Ω - компенсирующее вращение. Сдвигом на плоскости скольжения кристаллическая решетка не изменяется, хотя вектор AB вращается. Компенсирующее вращение переводит решетку в позицию, которая соответствует деформации вдоль направления AC.



2. РЕЗУЛЬТАТЫ

Использованные ориентировки приведены в табл.1. В выбранном треугольнике /в котором рассматривается только ориентировка кристаллитов по отношению к направлению прокатки/ получают связанные области, в которых действует та же самая система скольжения /рис.1-6/.

При этом были рассмотрены только действие систем $\{110\} \langle 111 \rangle$, $\{112\} \langle 111 \rangle$ или одновременное действие обеих.

В табл.2 приведены системы скольжения, которые действуют в областях, обозначенных буквами.

Рассчитанное вращение кристаллитов после деформации указано стрелками на рис.7-12. Размер вращения не принимается во внимание в этих системах. Из рисунков видно, что они выделяют устой-

чивую ориентировку $(100) [011]$, и это хорошо согласуется с экспериментальными данными Вандермера и других^{/10/} и Хэснера и других^{/11/}. Таким образом, наша простая модель приводит к качественному совпадению с экспериментом. Названные выше авторы также выделяют устойчивую ориентировку $(110) [211]$. Наши данные пока не позволяют сделать определенного заключения относительно ее реализации, но и не исключают наличия других устойчивых ориентировок. Этот вопрос должен быть решен после более детального и громоздкого численного анализа, включая большее число ориентировок и одновременное действие нескольких систем скольжения. В данном направлении исследования продолжаются.

Таблица 2

Системы скольжения, действующие в выделенных областях, для разных рисунков

Рисунок 1.

А	Б	С	Д	Е	Ф
$(101)/\bar{1}11/$	$(\bar{1}01)/111/$	$(011)/\bar{1}\bar{1}1/$	$(0\bar{1}1)/1\bar{1}\bar{1}/$	$(\bar{1}01)/111/$	$(101)/\bar{1}\bar{1}\bar{1}/$
$(\bar{1}01)/111/$				$(101)/\bar{1}\bar{1}1/$	$(\bar{1}01)/111/$
				$(011)/\bar{1}\bar{1}1/$	
Г	И				
$(110)/\bar{1}\bar{1}1/$	$(110)/\bar{1}\bar{1}1/$				
	$(0\bar{1}1)/\bar{1}\bar{1}1/$				

Рисунок 2.

А	Б	С	Д	Е
$(112)/\bar{1}\bar{1}1/$	$(\bar{2}11)/111/$	$(\bar{1}21)/\bar{1}\bar{1}1/$	$(12\bar{1})/\bar{1}11/$	$(112)/\bar{1}\bar{1}1/$
$(211)/\bar{1}11/$				$(11\bar{2})/\bar{1}\bar{1}\bar{1}/$
$(\bar{1}12)/\bar{1}\bar{1}1/$				
$(1\bar{1}2)/\bar{1}\bar{1}1/$				
$(11\bar{2})/\bar{1}\bar{1}\bar{1}/$				
$(\bar{2}11)/111/$				
$(2\bar{1}1)/\bar{1}\bar{1}1/$				
$(2\bar{1}\bar{1})/\bar{1}\bar{1}\bar{1}/$				

Рисунок 3.

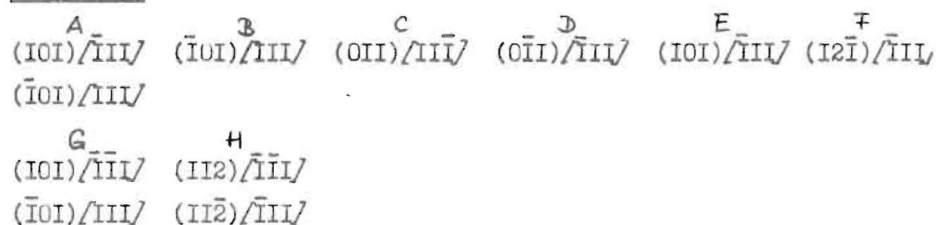


Рисунок 4.

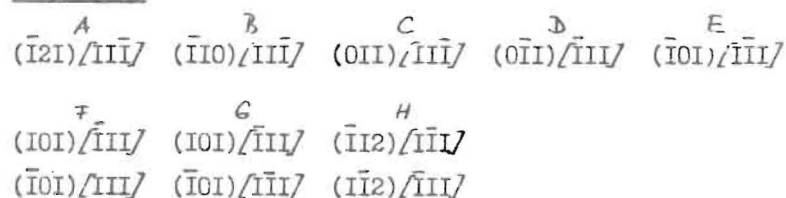


Рисунок 5.

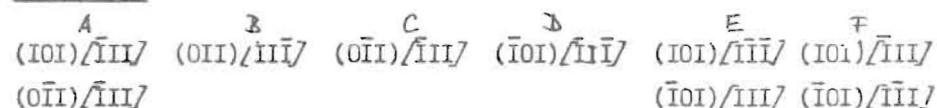
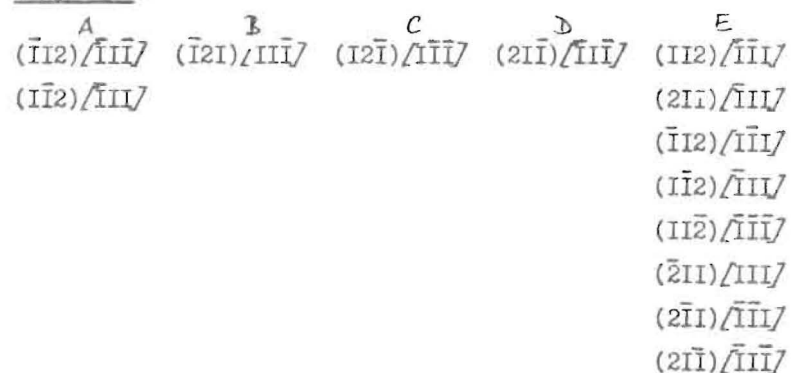


Рисунок 6.



Авторы благодарны за помощь при подготовке рукописи У.Фельдманн и Л.П.Дрекслер, Ю.М.Останевичу и К.Фельдманну за интерес к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Taylor G.J. J. Just. Metals, 1938, 62, p.307.
2. Bishop J.F.W., Hill R. Phil. Mag., 1951, 42, p.414, 1298.
3. Duesberry M.S., Foxall R.A. Phil. Mag., 1969, 20, p.719.
4. Vitek V. Physica Status Solid, 1967, 22, p.453.
5. Foxall R.A., Duesberry M.S., Hirsch P.B. Can. J. Phys., 1967, 45, p.607.
6. Van der Walt C.M. Acta Met., 1969, 17, p.393.
7. Bunge H.-J. Texture Analysis in Materials Science, Mathematical Methods, Butterworth, 1982.
8. Van Houtte P., Aernoudt E. Z. Metallkunde, 1975, 66, p.202.
9. Виленкин Н.Я. Специальные функции и теория представлений групп. "Наука", М., 1965.
10. Vandermeer R.A., Ogle J.C. Trans. AJME, 1968, 242, p.1317.
11. Haebner F., Mayer-Rosa D. Z. Metallkunde, 1967, 58, p.12.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 июня 1984 года

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Вальтер К., Дёрфель И. P17-84-452
Исследование образования текстур в кубических
объемноцентрированных металлах /модельные расчеты/

В работе обсуждается механизм возникновения текстур кубических объемноцентрированных металлов в рамках упрощенной модели Тейлора. Установлена связь между деформацией и системой скольжения кристалла. Получено качественное согласие с экспериментом.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Walter K., Dörfel J. P17-84-452
Investigation of Texture Formation for Body-Centred
Cubic Metals /Model Calculations/

The mechanism of texture formation for body-centred cubic metals is investigated in the framework of a simplified Taylor model. The connection between deformation and slip system of the crystal is determined. A qualitative coincidence with experimental results is found.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984