

Научная статья

УДК 539.3

DOI: 10.17072/1993-0550-2023-3-31-43

Учет разупрочнения вблизи свободной поверхности в прямой модели физической теории пластичности

Яков Витальевич Вяткин¹, Татьяна Викторовна Останина²,
Петр Валентинович Трусов³

^{1,2,3}Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

¹viatkiniv@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-8077-8571>

²tv-ostanina@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7541-2980>

³tpv@matmod.pstu.ac.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8997-5493>

Аннотация. Актуальные запросы промышленности требуют совершенствования существующих и создания новых технологий, позволяющих получать детали и конструкции с улучшенными эксплуатационными свойствами. Особенно важными являются вопросы проектирования и анализа процессов термомеханической обработки металлов и сплавов методами интенсивной неупругой деформации. Отдельного внимания заслуживает исследование процессов изготовления миниатюрных деталей, все более востребованных в различных технических устройствах. Возникающие при этом краевые задачи относятся к классу физически и геометрически нелинейных проблем механики деформируемого твердого тела, для решения которых необходимы разработки соответствующих математических моделей. Большинство классических моделей базируются на макрофеноменологической теории упруго-пластичности. Однако в ходе рассматриваемых процессов в исследуемых материалах происходят существенные структурные изменения на мезо- и микромасштабах, что определяющим образом влияет на физико-механические свойства обрабатываемых материалов и рабочие характеристики изделий, изменение которых не описываются указанными теориями. Эффективным подходом к описанию данных процессов представляется использование многоуровневых конститутивных моделей, в которых явным образом описываются физические механизмы неупругого деформирования и их носители на различных структурно-масштабных уровнях. Несмотря на наблюдаемую тенденцию к миниатюризации изделий, параметры для таких моделей, как правило, определяются из результатов натурных экспериментов, полученных в опытах на макрообразцах. Возникает вопрос о применимости таких параметров при анализе и моделировании реальных конструкций с характерными размерами до 500 мкм, где особую роль играют внутренние и внешние границы кристаллитов. В предлагаемой статье рассматривается влияние свободной поверхности на физико-механические характеристики образцов из моно- и поликристаллических материалов. Предложена модификация базовой прямой модели упруговязкопластичности мезоуровня, которая учитывает разупрочнение систем скольжения вблизи свободных границ за счет облегченного выхода дислокаций на поверхность.

Ключевые слова: *физические теории пластичности; прямая модель; монокристаллы; поликристаллы; дислокации; системы скольжения; свободная поверхность; разупрочнение*

Для цитирования: Вяткин Я.В., Останина Т.В., Трусов П.В. Учет разупрочнения вблизи свободной поверхности в прямой модели физической теории пластичности // Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика. 2023. Вып. 3(62). С. 31–43. DOI: 10.17072/1993-0550-2023-3-31-43.

Благодарности: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации национального проекта "Наука и университеты" (в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2021-0012).

Статья поступила в редакцию 07.08.2023; одобрена после рецензирования 16.08.2023; принята к публикации 15.09.2023.



Эта работа © 2023 Вяткин Я.В., Останина Т.В., Трусов П.В. под лицензией CC BY 4.0. Чтобы просмотреть копию этой лицензии, посетите <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Research article

Consideration of Softening Near Free Surface in the Direct Model of Crystal Plasticity

Iakov V. Viatkin¹, Tatyana V. Ostanina², Petr V. Trusov³^{1,2,3}Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russia¹viatkiniv@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-8077-8571>²tv-ostanina@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7541-2980>³tpv@matmod.pstu.ac.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8997-5493>

Abstract. Current industrial demands require the improvement of existing technologies and the creation of new ones that allow the production of parts and structures with advanced performance properties. Especially important are the issues of design and analysis of thermomechanical treatment of metals and alloys by intensive inelastic deformation methods. The study of manufacturing processes for miniaturized parts deserves special attention. The boundary value problems arising in this case belong to the class of physically and geometrically nonlinear problems of the mechanics of deformable solids, for the solution of which it is necessary to develop appropriate mathematical models. Most classical models are based on the macrophenomenological theory of elastoplasticity. However, in the processes under consideration, significant structural changes occur at the meso- and microscale that have a significant influence on the physical and mechanical characteristics of the processed materials and the performance characteristics of the products. These changes are not described by the mentioned theories. An effective approach to describe these processes is to use multilevel models of crystal plasticity. Despite the tendency to miniaturize products, the parameters of such models are usually determined from the results of experiments on macrosamples. The question arises whether such parameters are valid for the analysis and modeling of real structures with typical length scales below 500 μm , where the internal and external boundaries of crystallites play a special role. In this study, the influence of the free surface on the mechanical properties of single crystalline and polycrystalline materials is considered. Modification of the basic direct crystal plasticity model of elastoviscoplasticity to account for the softening of slip systems near free boundaries due to easier exit of dislocations to the surface is proposed.

Keywords: *crystal plasticity; direct model; single crystalline; polycrystalline; dislocations; slip systems; free surface; softening*

For citation: Viatkin I.V., Ostanina T.V., Trusov P.V. Consideration of Softening Near Free Surface in the Direct Model of Crystal Plasticity. Bulletin of Perm University. Mathematics. Mechanics. Computer Science. 2023;3(62):31-43. (In Russ.). DOI: 10.17072/1993-0550-2023-3-31-43.

Acknowledgments: the study was carried out with a financial support from the Ministry of Education and Science of the Russian Federation as part of the implementation of the national project "Science and Universities" (the state task fulfillment in the laboratory of multilevel structural and functional materials modeling, project no. FSNM-2021-0012).

The article was submitted 07.08.2023; approved after reviewing 16.08.2023; accepted for publication 15.09.2023.

Введение

Стремительное развитие техники различных отраслей промышленности (аэрокосмическая, автомобильная, машиностроительная и др.) постоянно требует совершенствования существующих и создания новых технологических процессов, которые давали бы возможность производить детали и конструкции, обладающие более высокими прочностными, термо- и износостойкими рабочими характеристиками. Несмотря на все более широкое распространение композиционных материалов, изделия из металлов и сплавов остаются весьма востребованными и

незаменимыми в чрезвычайно широком классе технических изделий. Последние в значительной степени производятся путем термомеханической обработки методами интенсивной пластической деформации (прокатки, экструзии,ковки, равноканального углового прессования и др.).

Проектирование, анализ и контроль подобных процессов, где деформации могут достигать тысяч процентов, невозможны без создания соответствующих математических моделей. Ключевым компонентом таких моделей являются конститутивные модели (КМ) для описания поведения рассматриваемых

физических тел под действием термомеханических факторов [1].

В литературе по механике деформируемого твердого тела отмечаются следующие подходы к построению КМ: макрофеноменологический [2, 3], структурно-механический, термодинамический [4] и многоуровневый физический [5]. Процессы неупругого деформирования и свойства поликристаллических материалов на макроуровне, как показывают многочисленные экспериментальные и теоретические исследования, существенным образом зависят от состояния эволюционирующей мезо- и микроструктуры.

С другой стороны, макронагрузки являются источником, движущей силой изменения мезо- и микроструктуры. Таким образом, управляя технологическими режимами, можно достигать рациональной структуры материалов, а следовательно – получения требуемых свойств изделий. Ответы на многие вопросы, связанные с эффектами, определяемыми мезо- и микроструктурой, по мнению авторов, невозможно получить с помощью классических определяющих соотношений (ОС), сформулированных на основе макрофеноменологического, структурно-механического или термодинамического подходов. Для анализа процессов изготовления и эксплуатации готовых изделий в этом случае требуется разработка и использование многоуровневых моделей, которые явным образом учитывают физические процессы и их носители на различных структурно-масштабных уровнях, для чего в структуру конститутивных моделей вводятся внутренние переменные и соответствующие эволюционные соотношения для описания их изменения. Данный тип КМ относится к широкому классу физических теорий пластичности (ФТП) (жесткопластических, упругопластических [6], вязкопластических, упруговязкопластических [7]).

В связи с расширяющимся использованием в технике миниатюрных изделий [8], возникает вопрос о возможности оценки их рабочих свойств за счет использования данных о физико-механических характеристиках материалов, 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)? Каковы должны быть характерные размеры представительного объема, для которого можно принять истинными полученные в данных опытах характеристики материала? Описывается ли поведение материала в объеме исследуемого изделия и вблизи его границы одними и теми же ОС и/или параметрами ОС [9]? Известно, что характерные размеры как самого образца, так и элементов его микроструктуры, могут оказывать существенное влияние на механический отклик, т.е. могут проявляться "эффекты масштаба" (scale effects) [10]. Данные явления в большинстве случаев не учитываются при проектировании микроизделий в связи с их слабой изученностью. Это может привести к некоторым проблемам, например, ухудшению эксплуатационных свойств и повышению стоимости изготовления [11].

Одна из современных проблем ФТП заключается в том, что в большинстве общепринятых моделей моно- и поликристаллов не учитывается явным образом влияние межкристаллитных границ и границ кристаллитов (зерна, субзерна и т.д.), примыкающих к границам образцов и/или изделий, на характер реализации одного из основных механизмов пластического деформирования – скольжения решеточных дислокаций (в большей мере – краевых) по системам скольжения (СС) [12]. Часто механические характеристики дислокаций (поля напряжений, скоростей, плотностей и проч.) принято рассматривать такими, как если бы они находились в бесконечной во всех направлениях упругой среде. Решения для такого случая известны и широко применяются в моделях микроуровня [13, 14]. Однако в кристаллах конечных размеров наличие внутренних и внешних границ оказывает существенное влияние на поведение дислокаций и прочих дефектов решетки и является ключевым фактором при описании эффектов масштаба.

Существует ряд исследований, в которых изучался вопрос влияния поверхностных и масштабных эффектов на механические свойства миниатюрных поликристаллических изделий. Результаты натуральных экспериментов для широкой выборки образцов из никеля представлены в работах [15–18], из меди – [19], из кобальта – [20]. Образцы, как правило, имели форму тонкой

двусторонней лопатки (dog bone shape), где размеры рабочей части достигали сотен мм^2 , а толщина варьировалась от 0.125 до 3.2 мм. Механические испытания проводились на одноосное растяжение. 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 (transmission electron microscopy). Результаты показали, что при значениях параметра t/d меньших определенной величины (никель – 3.6, медь – 6.2, кобальт – 2.5) предел текучести образцов существенно ниже, чем тот, который предсказывает закон Холла–Петча для того же размера зерна [21,22]. Анализ микроструктуры показал, что плотность дислокаций вблизи свободной поверхности ниже, чем в объемной части, и средний размер дислокационных ячеек выше. Исследования, ориентированные на изучение образцов типа микростержней и наностержней, свидетельствуют об аналогичных результатах [23–25]. В упомянутых работах выдвигаются общие гипотезы об основных физических механизмах данных явлений: уменьшение доли межкристаллитных границ, что приводит к понижению влияния зернограничного упрочнения; почти беспрепятственный выход дислокаций вблизи свободной поверхности, что приводит к их повышенной мобильности на определенных СС. Подобные механизмы приводят к неоднородности распределения сдвигов по СС в пределах даже отдельно взятого зерна уже на начальных этапах деформации (1–5%). При описании деформируемого поликристаллического агрегата отклик отдельного зерна часто подобен поведению монокристалла. В натуральных испытаниях над монокристаллическими образцами, имеющих форму прямоугольных параллелепипедов размерами $3 \times 3 \times 6$ мм, на одноосное сжатие было обнаружено наличие фрагментации сдвига по объему [26]. 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. Об этом говорит повышенное число полос сдвига на

поверхности этих областей. Таким образом, делается вывод о влиянии т.н. кристаллогеометрических факторов [27], например, ориентация СС относительно свободных граней образца. Места локализации сдвига при этом не меняются в процессе пластической деформации, но расширяются в сторону свободной поверхности [28].

При построении КМ для миниатюрных образцов исследователи [24, 25] выделяют некоторый приповерхностный слой, который отличается своими пластическими свойствами от "внутренней" части материала. Такой метод, по сути, использует подходы построения КМ для композитных материалов. В работе [29] предлагается использовать обобщение соотношения Холла–Петча за счет учета характерных размеров образцов. Выводятся относительно простые скалярно-значные соотношения, которые описывают процесс одноосного нагружения образца в целом. Как правило, в моделях ФТП описание многих физических явлений, в том числе эффектов масштаба, находит свое отражение в соотношениях для закона упрочнения СС. В работе [30] в качестве внутренних переменных вводятся плотности дислокаций, 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 уменьшает действующие напряжения, и повышение критических напряжений с ростом плотностей дислокаций в целом. Разупрочнение приповерхностных областей реализуется с использованием предположения об отсутствии скоплений дислокаций одного знака вблизи свободной поверхности в силу их выхода на границу. В работе [31] 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 микроуровня.

Из континуальной теории дислокаций [13, 14] 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 целый ряд работ, где в рамках линейной теории упругости описывались решения и методы их нахождения для полей перемещений/напряжений от дислокации вблизи свободной поверхности. Основу в исследованиях подобного направления заложили работы, где рассматривались прямолинейные дислокации, различным образом ориентированные по отношению к свободной поверхности [32–35]. Решения для общих случаев ориентации рассматривались в работах [36–38]. Модификация решения на случай анизотропной упругости описана в работе [39], на основе результатов которой, но с более детальным учетом особенностей вблизи ядра дислокации, получено решение для ГПУ кристалла в [40]. К сожалению, большинство данных аналитических решений выражены громоздкими системами интегро-дифференциальных уравнений, из-за чего носят скорее "академический" характер. Данное обстоятельство существенно осложняет их практическое применение в качестве эволюционных соотношений. В лучшем случае они могут быть использованы для моделей дискретной дислокационной динамики [41, 42], где дислокации рассматриваются явным образом. Это вынуждает прибегнуть к оценке более простых случаев.

Таким образом, целью настоящей работы является построение и анализ закона разупрочнения СС за счет влияния свободной поверхности. Предлагаемое соотношение должно быть приемлемо для использования в описанной ниже базовой прямой упруго-вязкопластической КМ кристаллита мезо-уровня на основе ФТП и иметь ясный физический и геометрический смысл.

1. Описание базовой модели

В дальнейшем отдается предпочтение независимой от выбора базисных векторов символьной форме записи тензоров произвольного ранга. Обозначение "." используется для операции скалярного произ-

ведения, ":" – двойного скалярного произведения. Знак тензорного произведения опускается (он подразумевается для любых рядом стоящих тензорзначных величин).

Движение деформируемой среды представим последовательностью пластических сдвигов по системам скольжения, жесткого поворота кристаллической решетки и упругого искажения решетки. Тогда градиент места (транспонированный) \mathbf{f} можно мультипликативно разложить на пластическую \mathbf{f}^p , ротационную \mathbf{r} и упругую \mathbf{f}^e составляющие [5]:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p. \quad (1)$$

При условии малости упругих искажений $\mathbf{f}^e \approx \mathbf{I}$ (где \mathbf{I} – единичный тензор второго ранга, при этом на собственно ортогональный тензор \mathbf{r} ограничений малости не накладыва-ется), которое вполне приемлемо для металлов и сплавов в большинстве реальных процессов деформирования, справедлива оценка

$$\hat{\nabla} \mathbf{v}^T \approx \dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{e-1} + \boldsymbol{\omega} + \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T, \quad (2)$$

где $\hat{\nabla}$ – набла оператор для актуальной конфигурации, \mathbf{v} – вектор скорости перемещения, $\boldsymbol{\omega}$ – спин жесткой подвижной системы координат, связанной с решеткой ($\boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T$). Вводя обозначения $\mathbf{z}^e = \dot{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{f}^{e-1}$ и $\mathbf{z}^{\text{in}} = \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{r}^T$, получим следующее соотношение:

$$\mathbf{z}^e \approx \hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}^{\text{in}}. \quad (3)$$

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:

$$\mathbf{z}^{\text{in}} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad (4)$$

где $\mathbf{b}^{(k)}$ – нормированный вектор Бюргерса и $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичная нормаль плоскости залегания для k -й СС в отсчетной конфигурации. Скорости сдвигов определяются в соответствии с вязкопластическим законом [43] для удвоенного числа СС (с положительными и отрицательными сдвигами):

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^{\frac{1}{m}} \text{H}(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad (5)$$

где $\tau^{(k)}$ и $\tau_c^{(k)}$ – действующие и критические касательные напряжения на k -й СС, $\dot{\gamma}_0$ – начальная скорость сдвигов, m – параметр чувствительности, H – функция Хевисайда. Скорости изменения критических касательных напряжений полагаются определяемыми аддитивным соотношением:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_{\text{внут}}^{(k)} + \dot{\tau}_{\text{внеш}}^{(k)}, \quad (6)$$

где $\dot{\tau}_{\text{внут}}^{(k)}$ и $\dot{\tau}_{\text{внеш}}^{(k)}$ – вклады за счет механизмов упрочнения/разупрочнения, реализуемых во внутренних (взаимодействие мобильных дислокаций с дислокациями леса, барьерами Ломера–Коттрелла, барьерами Хирта, границами зерен, аннигиляции при встрече с дислокациями противоположного знака) и в приграничных (выход дислокаций на поверхность) областях.

Упругое определяющее соотношение записывается в скоростной форме с использованием коротационной производной, ассоциированной со спином жесткой подвижной системы координат ω :

$$\sigma^f \equiv \dot{\sigma} + \sigma \cdot \omega - \omega \cdot \sigma = \Pi : z^e, \quad (7)$$

где индекс "г" означает коротационную производную, σ – тензор напряжений Коши, Π – тензор 4-го ранга упругих свойств кристаллита. Учитывая соотношение (3), получаем следующий гипопругий закон:

$$\dot{\sigma} + \sigma \cdot \omega - \omega \cdot \sigma = \Pi : (\dot{\nabla} v^T - \omega - z^{\text{in}}). \quad (8)$$

Выбор соотношений для спина ω и вклада в изменение критических касательных напряжений $\dot{\tau}_{\text{внут}}^{(k)}$ остается вне рамок представленной работы. Вопросы описания упрочнения детально рассмотрены в работах [5, 44–46]. Различные модели ротации представлены в работах [5, 47–48].

2. Описание закона разупрочнения

Опираясь на результаты, приведенные в работе [31], опишем закон разупрочнения СС вблизи свободных поверхностей, процесс разупрочнения в дальнейшем будем называть "релаксацией". Рассмотрим отдельно взятую прямолинейную краевую дислокацию вблизи плоской поверхности с позиции континуальной теории дислокаций. Плоскость границы разделяет все пространство на линейно упругое тело и условную пустоту. Если линия дислокации ортогональна нормали к поверхности

\mathbf{N} , а вектор Бюргерса \mathbf{b} – параллелен, то случай можно считать двумерным (рис. 1). Исходя из определения сил изображения [13, 14] для данного простого случая, можно оценить влияние свободной границы на дислокацию. На основе физического анализа можно предположить, что описанная ориентация по отношению к поверхности при прочих равных условиях является наиболее благоприятной для выхода дислокации, так как свободный пробег до границы образца в этом случае будет минимальным.

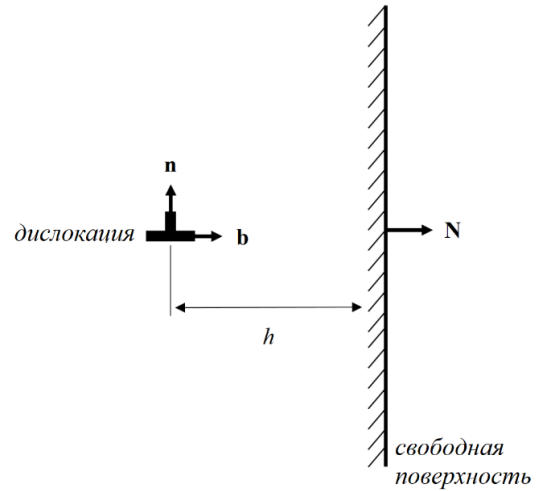


Рис. 1. Схематичное представление единичной дислокации вблизи свободной поверхности

Тогда при других ориентациях разупрочнение должно проявляться менее интенсивно вплоть до его отсутствия, когда линия дислокации ортогональна поверхности или вектор Бюргерса – параллелен. Таким образом, для краевых дислокаций на СС, находящихся на расстоянии h от свободной поверхности, максимально возможное уменьшение критических касательных напряжений ("параметр релаксации") можно выразить следующим образом [13, 14]:

$$\tau_{\text{рел}}^{\text{макс}} = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)h}, \quad (9)$$

где μ и ν – модуль сдвига и коэффициент Пуассона, b – модуль вектора Бюргерса. Для различных ориентаций СС относительно свободной поверхности уменьшение критических напряжений за счет влияния свободной поверхности предлагается аппроксимировать следующим образом:

$$\tau_{\text{рел}}^{(k)} = \tau_{\text{рел}}^{\text{макс}} \left[(\mathbf{b}^{(k)} \cdot \mathbf{N})(1 - |\mathbf{n}^{(k)} \cdot \mathbf{N}|) \right], \quad (10)$$

или в тензорной форме

$$\begin{aligned}\tau_{\text{рел}}^{(k)} &= \mathbf{T}^{(k)} : (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}), \\ \mathbf{T}^{(k)} &= \tau_{\text{рел}}^{\text{макс}} \left[\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{N} - \mathbf{N} \mathbf{N} \text{sign}(\mathbf{n}^{(k)} \cdot \mathbf{N}) \right],\end{aligned}\quad (11)$$

где $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичная нормаль плоскости k -й СС; sign – функция сигнатуры; $\mathbf{b}^{(k)}$ – единичный вектор, определяющий направление скольжения дислокаций на k -й СС:

$$\mathbf{b}^{(k)} \equiv \mathbf{v}_d^{(k)} / \|\mathbf{v}_d^{(k)}\|, \quad (12)$$

где $\mathbf{v}_d^{(k)}$ – скорость скольжения дислокаций на k -й СС. Стоит учесть, что в соотношениях (10) и (11) должны рассматриваться только случаи скольжения в направлении к поверхности. Поверхность зерна состоит из плоских участков (фасеток). Сразу на несколько из них могут быть наложены условия свободной поверхности (например, на ребрах или вершинах образца). СС в общем случае может взаимодействовать с несколькими свободными фасетками, тогда суммарный вклад в уменьшение критических напряжений для k -й СС определяется как:

$$\begin{aligned}\tau_{\text{рел}}^{(k)} &= \sum_{i=1}^N \frac{S^{(i)}}{S} \mathbf{T}^{(k,i)} : (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}), \\ \mathbf{T}^{(k,i)} &= \tau_{\text{рел}}^{\text{макс}} (\mathbf{m}_1^{(k,i)} - \mathbf{m}_2^{(k,i)}), \\ \mathbf{m}_1^{(k,i)} &\equiv \mathbf{n}^{(k)} \mathbf{N}^{(i)}, \\ \mathbf{m}_2^{(k,i)} &\equiv \mathbf{N}^{(i)} \mathbf{N}^{(i)} \text{sign}(\mathbf{n}^{(k)} \cdot \mathbf{N}^{(i)}),\end{aligned}\quad (13)$$

где $S^{(i)}$ – площадь i -й свободной фасетки, S – суммарная площадь поверхности зерна, N – количество свободных фасеток. Множитель $S^{(i)}/S$ отражает тот факт, что чем меньше площадь фасетки, принадлежащей свободной поверхности, тем меньше ее вклад в релаксацию критического напряжения на СС. Исходя из этого, общее уменьшение критических касательных напряжений для СС выражается взвешенной суммой вкладов по фасеткам. Для оценки принимается, что напряжения релаксации определяются для центральной точки отрезка дислокационной линии, заканчивающейся на границах рассматриваемого кристаллита.

3. Результаты

Рассмотрим результаты расчетов с использованием соотношения (10). Для нормировки

отнесем параметр релаксации $\tau_{\text{рел}}^{(k)}$ к напряжению Пайерлса–Набарро [14]:

$$\tau_{\text{ПН}}^{(k)} = \frac{2\mu}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi d^{(k)}}{(1-\nu)b}\right), \quad \eta^{(k)} = \frac{\tau_{\text{рел}}^{(k)}}{\tau_{\text{ПН}}^{(k)}}, \quad (14)$$

где d – расстояние между плоскостями скольжения. Для определенности используем параметры модели, характерные для алюминия. Учитывая, что для ГЦК решетки все СС равноправны, параметры принимают следующие значения:

$$\begin{aligned}\nu &= 0.34, \quad d = \frac{a}{\sqrt{3}}, \\ b &= \frac{a}{2}, \quad a = 0.495 \text{ нм.}\end{aligned}\quad (15)$$

Для случая, представленного на рис. 1, результаты расчета зависимости параметра η от расстояния дислокации до поверхности h приведены на рис. 2.

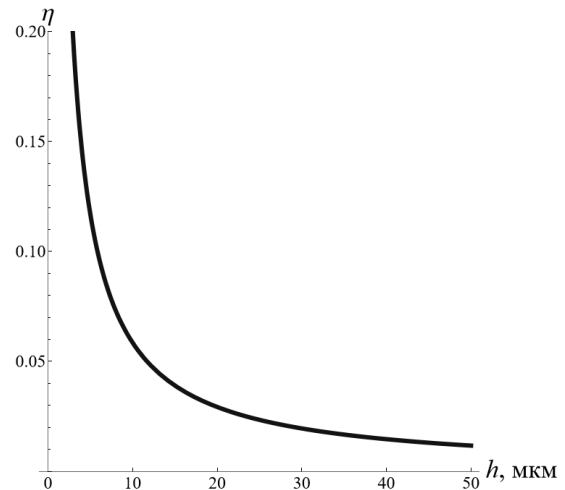


Рис. 2. Зависимость параметра η от расстояния до свободной поверхности h

Чтобы выразить зависимость от взаимной ориентации СС и единичной нормали свободной поверхности \mathbf{N} , запишем соотношение (10) следующим образом (опуская индекс СС):

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

где α – угол между векторами \mathbf{b} и \mathbf{N} , β – угол между векторами \mathbf{n} и \mathbf{N} . При заданном h (бралось равным 10 мкм) соотношение (16) является функцией двух углов. Графики зависимости параметра η от углов α и β приведены на рис. 3 и рис. 4.

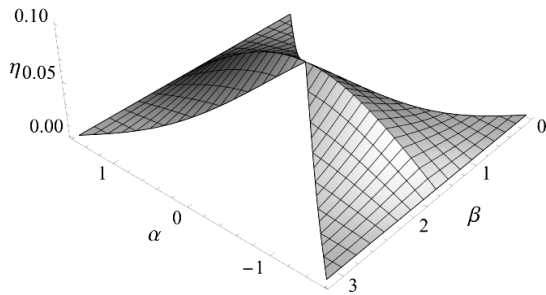


Рис. 3. Зависимость параметра η от параметров взаимной ориентации СС и свободной поверхности α и β

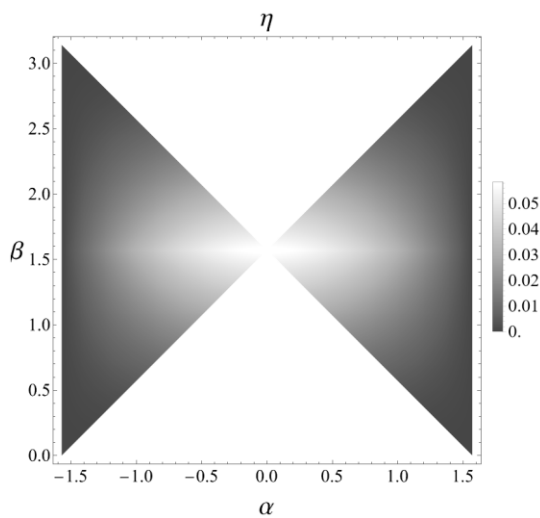


Рис. 4. Зависимость параметра η от параметров взаимной ориентации СС и свободной поверхности α и β

Заключение

Рассмотрены вопросы учета влияния свободной поверхности на механические свойства моно- и поликристаллических образцов. Приведена базовая модель упруговязкопластичности. Отмечены основные физические и геометрические гипотезы о природе процесса разупрочнения приповерхностных областей. За основу при выводе соотношения для модификации закона изменения критических напряжений сдвига на СС была взята оценка действующих напряжений на единичную дислокацию вблизи свободной поверхности. Стоит отметить, что внутренние (межкристаллитные) границы могут выступать в качестве эффективных препятствий для прохождения дислокаций.

Таким образом, можно предположить, что данный механизм разупрочнения будет действовать только на приповерхностные кристаллиты. Предложенная модификация может быть использована для описания наблюдаемой в экспериментах инициации пластических деформаций в приграничных областях образцов и их постепенном распространении во внутренние области.

Список источников

1. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. М.: Наука, 1986. 232 с.
2. Ильюшин А.А. Пластичность. Основы общей математической теории. М.: АН СССР, 1963. 272 с.
3. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М: Мир, 1975. 592 с.
4. Метлов Л.С., Мышляев М.М. Общие термодинамические механизмы ИПД и сверхпластичности // Физика и техника высоких давлений. 2009. № 4. С. 57–69.
5. Трусов П. В., Швейкин А. И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения // Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV.
6. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 1. Жесткопластические и упругопластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. 2011. № 1. С. 5–45.
7. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 2. Вязкопластические и упруговязкопластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. 2011. № 2. С. 101–131.
8. Engel U., Eckstein R. Microforming—from basic research to its realization // Journal of Materials Processing Technology. 2002. Vol. 125–126. P. 35–44. DOI: 10.1016/S0924-0136(02)00415-6.
9. Трусов П.В. Классические и многоуровневые конститутивные модели для описания поведения металлов и сплавов: проблемы и перспективы (в порядке обсуждения) // Известия российской академии наук. Меха-

- ника твердого тела. 2021. № 1. С. 69–82. DOI: 10.31857/S0572329921010128.
10. Arzt E. Size effects in materials due to microstructural and dimensional constraints: a comparative // *Acta Materialia*. 1998. Vol. 46, Is. 16. P. 5611–5626. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00231-6.
 11. Geiger M., Kleiner M., Eckstein R., Tiesler R., Engel U. Microforming // *Annals of the CIRP*. 2001. Vol. 5, Is. 50. P. 445–462. DOI: 10.1016/S0007-8506(07)62991-6.
 12. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. М.: Металлургия, 1975. 208 с.
 13. Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967. 644 с.
 14. Хурт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
 15. Keller C., Hug E. Hall–Petch behavior of Ni polycrystals with a few grains per thickness // *Materials Letters*. 2008. Vol. 62, Is. 10–11. P. 1718–1720. DOI: 10.1016/j.matlet.2007.09.069.
 16. 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, Is. 1–2. P. 207–215. DOI: 10.1016/j.msea.2008.09.054.
 17. 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, Is. 1. P. 44–54. DOI: 10.1016/j.mechmat.2009.09.002.
 18. Keller C., Hug E., Feaugas X. Microstructural size effects on mechanical properties of high purity nickel // *International Journal of Plasticity*. 2011. Vol. 27, Is. 4. P. 637–654. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.08.002.
 19. 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.
 20. 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.
 21. Hall E.O. The deformation and aging of mild steel. III. Discussion and results // *Proc. Phys. Soc. of London*. 1951. Vol. B64. P. 747–753. DOI: 10.1088/0370-1301/64/9/303.N.
 22. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystals // *J. Iron and Steel Inst.* 1953. Vol. 174. P. 25–28.
 23. Jang D., Greer J. R. Size-induced weakening and grain boundary-assisted deformation in 60 nm grained Ni nanopillars // *Scripta Materialia*. 2011. Vol. 64, Is. 1. P. 77–80. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.09.010.
 24. 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, Is. 25–27. P. 3243–3256. DOI: 10.1080/14786435.2012.693215.
 25. 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.
 26. 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.
 27. 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.
 28. Лычагин Д.В., Теплякова Л.А., Шаехов Р.В., Конева Н.А., Козлов Э.В. Эволюция деформационного рельефа монокристаллов алюминия с ориентацией оси сжатия [001] // *Физическая мезомеханика*. 2003. Т. 6, №3. С. 75–83.
 29. Liu W., Liu Y., Cheng Y., Chen L., Yu L., Yi X. Unified model for size-dependent to size-independent transition in yield strength of crystalline metallic materials // *Physical Review Letters*. 2020. Vol. 124, Is. 23. P. 235501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.235501.
 30. 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.

31. *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, Is. 2. P. 1–21. DOI: 10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2021036837.
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, Is. 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, Is. 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*. 1973. Vol. 29, Is. 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*. 1974. Vol. 30, Is. 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. P. 192–205. DOI: 10.1139/p58-024.
37. *Yoffe E.H.* A dislocation at a free surface // *Philosophical Magazine*. 1961. Vol. 6, Is. 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, Is. 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 half-space // *Physica Status Solidi (b)*. 1982. Vol. 111, Is. 2. P. 671–677. DOI: 10.1002/pssb.2221110231.
40. *Neily S., Dhoubi 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. *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, Is. 3. P. 1–14. DOI: 10.1088/1361-651x/aa5a9d.
42. *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.
43. *Asaro R. J., Needleman A.* Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals // *Acta Metall.* 1985. Vol. 33, N 6. P. 923–953. DOI: 10.1016/0001-6160(85)90188-9.
44. *Estrin Y., Tóth L. S., Molinari A., Bréchet Y.* A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation // *Acta mater.* 1998. Vol. 46, N 15. P. 5509–5522. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00196-7.
45. *Kalidindi S. R., Bronkhorst C. A., Anand L.* Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals // *J. Mech. Phys. Solids*. 1992. Vol. 40, N 3. P. 537–569. DOI: 10.1016/0022-5096(92)80003-9.
46. *Kocks U.F., Mecking H.* Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case // *Progress in Materials Science*. 2003. Vol. 48. P. 171–273. DOI: 10.1016/S0079-6425(02)00003-8.
47. *Van Houtte P., Li S., Seefeldt M., Delannay L.* Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel // *Int. J. Plasticity*. 2005. Vol. 21. P. 589–624. DOI: 10.1016/j.ijplas.2004.04.011.
48. *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.

References

1. *Pozdeev A.A., Trusov P.V., Nyashin Yu.I.* Large elastoplastic deformations: theory, algorithms, applications. M.: Nauka; 1986. 232 p. (In Russ.).
2. *Ilyushin A.A.* Plasticity. Fundamentals of general mathematical theory. M.: AN SSSR; 1963. 272 p. (In Russ.).

3. *Truesdell K.* A first course in rational continuum mechanics. M: Mir; 1975. 592 p. (In Russ.).
4. *Metlov L.S., Myshlyayev M.M.* General thermodynamic mechanisms of SPD and superplasticity. Physics and Technology of High Pressures. 2009;(4):57–69. (In Russ.).
5. *Trusov P.V., Shveikin A.I.* Multilevel models of single- and polycrystalline materials: theory, algorithms, application examples. Novosibirsk: Publishing house SO RAN; 2019. 605 p. (In Russ.). DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV.
6. *Trusov P.V., Volegov P.S.* Physical Theory of Plasticity: Theory and Applications to the Description of Inelastic Deformation of Materials. Part 1. Rigid-plastic and elastic-plastic models. Bulletin of PSTU. Mechanics. 2011;(1):5–45. (In Russ.).
7. *Trusov P.V., Volegov P.S.* Physical Theories of Plasticity: Theory and Applications to the Description of Inelastic Deformation of Materials. Part 2. Viscoplastic and elastoviscoplastic models. Bulletin of PSTU. Mechanics. 2011;(2):101–131. (In Russ.).
8. *Engel U., Eckstein R.* Microforming—from basic re-search to its realization. Journal of Materials Processing Technology. 2002;(125–126):35–44. DOI: 10.1016/S0924-0136(02)00415-6.
9. *Trusov P.V.* Classical and multilevel constitutive models for describing the behavior of metals and alloys: problems and prospects (in order of discussion). Izvestiya rossiyskoi akademii nauk. Mechanics of a rigid body. 2021;(1):69–82. (In Russ.). DOI: 10.31857/S0572329921010128.
10. *Arzt E.* Size effects in materials due to microstructural and dimensional constraints: a comparative. Acta Materialia. 1998;(46(16)):5611–5626. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00231-6.
11. *Geiger M., Kleiner M., Eckstein R., Tiesler R., Engel U.* Microforming. Annals of the CIRP. 2001;(5(50)):445–462. DOI: 10.1016/S0007-8506(07)62991-6.
12. *Novikov I.I.* Defects of the crystal structure in metals. M.: Metallurgiya; 1975. 208 p. (In Russ.).
13. *Friedel J.* Dislocations. M.: Mir; 1967. 644 p. (In Russ.).
14. *Hirt J., Lote J.* Theory of dislocations. M.: Atomizdat; 1972. 600 p. (In Russ.).
15. *Keller C., Hug E.* Hall–Petch behavior of Ni poly-crystals with a few grains per thickness. Materials Letters. 2008;(62(10–11)):1718–1720. DOI: 10.1016/j.matlet.2007.09.069.
16. *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;(500(1–2)):207–215. DOI: 10.1016/j.msea.2008.09.054.
17. *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;(42(1)):44–54. DOI: 10.1016/j.mechmat.2009.09.002.
18. *Keller C., Hug E., Feaugas X.* Microstructural size effects on mechanical properties of high purity nickel. International Journal of Plasticity. 2011;(27(4)):637–654. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.08.002.
19. *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;(574):253–261. DOI: 10.1016/j.msea.2013.03.025.
20. *Hug E., Keller C., Dubos P.A., Celis M.M.* Size effects in cobalt plastically strained tension: impact on gliding and twinning work hardening mechanisms. Journal of Materials Research and Technology. 2021;(11):1362–1377. DOI: 10.1016/j.jmrt.2021.01.105.
21. *Hall E.O.* The deformation and aging of mild steel. III. Discussion and results. Proc. Phys. soc. of London. 1951;(B64):747–753. DOI: 10.1088/0370-1301/64/9/303.N.
22. *Petch N.J.* The cleavage strength of polycrystals. J. Iron and Steel Inst. 1953;(174):25–28.
23. *Jang D., Greer J.R.* Size-induced weakening and grain boundary-assisted deformation in 60 nm grained Ni nanopillars. Scripta Materialia. 2011;(64(1)):77–80. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2010.09.010.
24. *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;(92(25–27)):3243–3256. DOI: 10.1080/14786435.2012.693215.

25. 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;(622):67–75. DOI: 10.1016/j.msea.2014.11.004.
26. Teplyakova L.A., Lychagin D.V., Kozlov E.V. Shear localization during deformation of aluminum single crystals with [001] compression axis orientation. *Physical mesomechanics*. 2002;(5(6)):49–55. (In Russ.).
27. Teplyakova L., Lychagin D.V., Beshalova I.V. Patterns of macrolocalization of deformation in single crystals of aluminum with the orientation of the compression axis [110]. *Physical mesomechanics*. 2004;(7(6)):63–78. (In Russ.).
28. Lychagin D.V., Teplyakova L.A., Shaekhov R.V., Koneva N.A., Kozlov E.V. Evolution of the deformation relief of aluminum single crystals with the orientation of the compression axis [001]. *Physical mesomechanics*. 2003;(6(3)):75–83. (In Russ.).
29. Liu W., Liu Y., Cheng Y., Chen L., Yu L., Yi X. Unified model for size-dependent to size-independent transition in yield strength of crystal-line metallic materials. *Physical Review Letters*. 2020;(124(23)):235501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.235501.
30. 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;(29):155–172. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.08.007.
31. 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;(12(2)): 1–21. DOI: 10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2021036837.
32. Eshelby J.D., Stroh A.N. CXL. Dislocations in thin plates. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. 1951;(42(335)):1401–1405. DOI: 10.1080/14786445108560958.
33. Head A.K. Edge dislocations in inhomogeneous media. *Proceedings of the Physical Society. Section B*. 1953;(66(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*. 1973;(29(5)):1227–1229. DOI: 10.1080/14786437408 226608.
35. Maurissen Y., Capella L. Stress field of a dislocation segment perpendicular to a free surface. *Philosophical Magazine*. 1974;(30(3)):679–683. DOI: 10.1080/14786439 808206591.
36. Steketee J.A. On Volterra's dislocations in a semi-infinite elastic medium. *Canadian Journal of Physics*. 1958;(36):192–205. DOI: 10.1139/p58–024.
37. Yoffe E.H. A dislocation at a free surface. *Philosophical Magazine*. 1961;(6(69)):1147–1155. DOI: 10.1080/147864361082 39675.
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;(44(3)):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 half-space. *Physica Status Solidi (b)*. 1982;(111(2)):671–677. DOI: 10.1002/pssb.222110231.
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;(2018):1–8. DOI: 10.1155/2018/3038795.
41. 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. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2017;(25(3)):1–14. DOI: 10.1088/1361-651x/aa5a9d.
42. Crone J.C., Munday L.B., Knap J. Capturing the effects of free surfaces on void strengthening with dislocation dynamics. *Acta Materialia*. 2015;(101):40–47. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.08.067.
43. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall.* 1985;(33(6)):923–953. DOI: 10.1016/0001-6160(85)90188-9.
44. Estrin Y., Tóth L. S., Molinari A., Bréchet Y. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation. *Acta mater.* 1998;(46(15)):5509–5522. DOI: 10.1016/S1359-6454(98)00196-7.

45. *Kalidindi S.R., Bronkhorst C.A., Anand L.* Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals. *J. Mech. Phys. solids.* 1992;(40(3)):537–569. DOI: 10.1016/0022-5096(92)80003-9.
46. *Kocks U.F., Mecking H.* Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case. *Progress in Materials Science.* 2003;(48):171–273. DOI: 10.1016/S0079-6425(02)00003-8.
47. *Van Houtte P., Li S., Seefeldt M., Delannay L.* Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel. *Int. J. Plasticity.* 2005;(21):589–624. DOI: 10.1016/j.ijplas.2004.04.011.
48. *Trusov P.V., Shveikin A.I.* On the decomposition of motion and constitutive relations in the geometrically nonlinear elastoviscoplasticity of crystallites. *Physical mesomechanics.* 2016;(19(3)):25–38. (In Russ.).

Информация об авторах:

Я. В. Вяткин – младший научный сотрудник лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, Россия, г. Пермь, ул. Комсомольский проспект, 29), AuthorID: 1208715;

Т. В. Останина – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов, Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, Россия, г. Пермь, ул. Комсомольский проспект, 29), AuthorID: 11693;

П. В. Трусов – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедры математического моделирования систем и процессов, Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, Россия, г. Пермь, ул. Комсомольский проспект, 29), заслуженный деятель науки РФ, AuthorID: 4234.

Information about the authors:

I. V. Viatkin – Junior Researcher of the Laboratory of Multilevel Modeling of Structural and Functional Materials, Perm National Research Polytechnic University (29 Komsomolsky Ave., Perm, Russia, 614990), AuthorID: 1208715;

T. V. Ostanina – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29 Komsomolsky Ave., Perm, Russia, 614990), AuthorID: 11693;

P. V. Trusov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29 Komsomolsky Ave., Perm, Russia, 614990), Honored Worker of Science of the Russian Federation, AuthorID: 4234.