

<https://doi.org/10.21869/2223-1528-2022-12-3-118-129>



Формирование дислокационной структуры зоны аккомодации в системе двух механических двойников в титане

М. В. Мишунин¹ ✉, Т. Б. Никуличева¹, В. С. Захвалинский¹, И. С. Никулин¹

¹ Белгородский государственный национальный исследовательский университет
ул. Победы 85, г. Белгород 308015, Российская Федерация

✉ e-mail: maks_mish@mail.ru

Резюме

Цель. Экспериментальное исследование и математическое моделирование процессов формирования структуры в аккомодационной зоне системы клиновидных двойников в технически чистом титане.

Методы. Применялись методы микроиндентирования, химического травления, математического моделирования, электронной зондовой микроскопии.

Результаты. При формировании клинового двойника в поликристаллическом титане образуются условия для формирования дополнительного двойника в его зоне аккомодации. Формирование дополнительного двойника – это в некотором роде способ снятия высоких напряжений на вершинах. Проведенное математическое моделирование распределения напряжений в области прохождения процесса двойникования, учитывающее наличие обнаруженного скопления образованных малоугловых границ, позволяет утверждать о закономерном взаимодействии дефектов структуры с дефектами, образованными в процессе развития двойниковой прослойки.

Предложенная модель показывает, что образование малоугловых границ в результате взаимодействия существующих дефектов материала и двойнивающих дислокаций приводит к изменению эпюры напряжений в зоне аккомодации, что, в свою очередь, порождает множественные малоугловые границы в виде стенок дислокаций.

Представленный физический механизм и математическая модель дают достаточно ясную картину формирования структуры и эпюры растягивающих напряжений в зоне формирования двух параллельных двойников. Обнаружено скопление малоугловых границ в зоне аккомодации клиновидного двойника закономерно сформированных в процессе ее роста.

Заключение. В работе представлены результаты экспериментальных исследований и математического моделирования процессов формирования структуры в аккомодационной зоне системы клиновидных двойников в технически чистом титане. Был учтен процесс взаимодействия структурных дефектов с двойнивающими дислокациями при образовании клиновидного двойника. Показано, что это взаимодействие изменяет положение максимума напряжений вблизи границ в системе двух клиновидных двойников.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки; теория функционала плотности; сорбционные свойства; борирование; квантово-химические расчеты; экологические фильтры.

Конфликт интересов: Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

© Мишунин М. В., Никуличева Т. Б., Захвалинский В. С., Никулин И. С., 2022

Для цитирования: Формирование дислокационной структуры зоны аккомодации в системе двух механических двойников в титане / М. В. Мишунин, Т. Б. Никуличева, В. С. Захвалинский, И. С. Никулин // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2022. Т. 12, № 3. С. 118–129. <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2022-12-3-118-129>

Поступила в редакцию 29.07.2022

Подписана в печать 29.08.2022

Опубликована 28.09.2022

Formation of a Dislocation Structure of the Accommodation Zone in a System of Two Mechanical twins in Titanium

Maksim V. Mishunin¹✉, Tatiana B. Nikulicheva¹, Vasilii S. Zakhvalinskii¹,
Ivan S. Nikulin¹

¹ Belgorod National Research University
85 Pobedy Str., Belgorod 308015, Russian Federation

✉ e-mail: maks_mish@mail.ru

Abstract

Purpose. Experimental study and mathematical modeling of the processes of structure formation in the accommodation zone of a system of wedge-shaped twins in commercially pure titanium.

Methods. Methods of Microindentation, chemical etching, mathematical modeling and electron probe microscopy were used.

Results. While forming of wedge twin in poly-crystal of titanium are forming conditions of formation of additional twin in its transition zone. Forming of the extra twin is some way of relaxation of high stresses in the tips. The performed mathematical modeling of the stress distribution in the region of the twinning process, taking into account the presence of the detected accumulation of formed low-angle boundaries, makes it possible to state that the interaction of structural defects with defects formed during the development of the twinning layer is regular. The proposed model indicates that the formation of low-angle boundaries due to the interaction of existing material defects and twinning dislocations leads to a change in the stress diagram in the transition area, which, in turn, generates multiple low-angle borders in the form of the dislocation walls. Shown physical mechanism and mathematic model gives rather clear picture of forming of structure and spreading stresses in zone of forming of two parallel twins. An accumulation of low-angle boundaries was found in the accommodation zone of the wedge-shaped twin, which were regularly formed during its growth.

Conclusion. In the work, we have presented the results of experimental studies and mathematical modeling for the processes of the structure formation in a transition zone of wedge-type twins system in commercially pure titanium. The process of interaction of structure defects with twinning dislocations during the formation of a wedge-type twin was taken into consideration. It is shown that the interaction alters the stress maximum in vicinity of boundaries in the system two wedge-type twins.

Keywords: twinning; dislocation walls; grain boundaries; stress; mathematical modeling.

Conflict of interest: The authors declare the absence of obvious and potential conflicts of interest related to the publication of this article.

For citation: Mishunin M. V., Nikulicheva T. B., Zakhvalinskii V. S., Nikulin I. S. Formation of a Dislocation Structure of the Accommodation Zone in a System of Two Mechanical twins in Titanium. *Izvestiya Yugo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Tekhnika i tekhnologii = Proceedings of the Southwest State University. Series: Engineering and Technologies*. 2022; 12(3): 118–129. (In Russ.) <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2022-12-3-118-129>

Received 29.07.2022

Accepted 29.08.2022

Published 28.09.2022

Введение

В связи с возросшим интересом к титановым и циркониевым сплавам, а также Тwір-сталлям, вновь возник интерес к исследованию процесса образования и роста механических двойников. Прочностные характеристики металлов напрямую зависят от размеров зерен. Активизация пластической деформации двойникованием при интенсивной пластической деформации способствует дроблению зерен, что, в свою очередь, приводит к увеличению прочностных характеристик металлов. Дальнейший рост двойников приводит к повышению внутренних напряжений [1]. В реальных поликристаллических металлах образование двойников и их рост характеризуются протеканием сложных процессов взаимодействия и движения дислокаций. Образование двойниковых прослоек способствует росту механических характеристик металла, однако вместе с этим приводит к увеличению концентрации напряжений на границах зерен и дефектов, что способствует охрупчиванию [2]. Для полноценного анализа проходящих при деформации процессов следует рассматривать механизмы скольжения и двойникования не только как конкурирующие, но и как явления взаимосопровождаемые и равноответственные за формирование структуры в зоне двойниковой прослойки. Так, в работе [3] экспериментально показано, что локализованные в области двойника напряжения релаксируют с помощью дислокационного скольжения в зонах аккомодации.

Можно предположить, что в данных зонах происходит закономерная перестройка структуры с образованием дислокационных скоплений и областей кристалла с минимальной и максимальной плотностью дефектов [4].

Однако в проведенном эксперименте на образцах технически чистого титана обнаружено, что за счет больших внутренних напряжений в зонах аккомодации двойниковых прослоек и перемещении дефектов при релаксации этих напряжений [2] происходит закономерное формирование малоугловых границ, что, в свою очередь, может оказывать влияние на механические и эксплуатационные свойства изделий, изготавливаемых из двойникующихся материалов.

Материалы и методы

В качестве экспериментального материала использовался титан (класс ВТ1-0), который подвергался деформации прокаткой на $\varepsilon = 75\%$ и отжигался при 700°C . Методика получения и исследования клиновидных двойников микроиндентированием в зернах, для которых кристаллографическая плоскость (0001) совпадала с поверхностью образца, была описана ранее в [3]. В эксперименте было индентировано более 1000 зерен. Исследования рельефа протравленных образцов показывают, что аккомодирующая область двойного слоя имеет неоднородное строение. Поскольку картина, полученная после травления, характеризует общий уровень упругих напряжений области, можно

предположить, что формируются области с минимальной и максимальной плотностью дефектов [5; 6].

Для более детального анализа поля остаточных внутренних напряжений математически моделируется непрерывное распределение двойниковых дислокаций на границах двойниковых областей, описываемое в макроскопической дислокационной модели [7].

Рассматриваемая система представляет собой группу клиновидных двойников, возникающих на поверхности образца из титана. В общем случае в плоскости $ХОУ$ форма границ клиновидного двойника описывается функциями $f_1(x_0)$, $f_2(x_0)$, $f_3(x_0)$ и $f_4(x_0)$ (рис. 1). Плотности двойнивающих дислокаций на границах клиновидного двойника различны и задаются как функции от линейных размеров двойников. Тогда напряжения, создаваемые рассматриваемой системой

клиновидных двойников, можно определить по формуле [7; 8]:

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(2)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(3)}(x, y) + \sigma_{ij}^{(4)}(x, y), \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{(1)} &= \int_{L_{AB}} \rho_1 \sigma_{ij}^{(1,0)} ds; & \sigma_{ij}^{(2)} &= \int_{L_{CB}} \rho_2 \sigma_{ij}^{(2,0)} ds; \\ \sigma_{ij}^{(3)} &= \int_{L_{DE}} \rho_3 \sigma_{ij}^{(3,0)} ds; & \sigma_{ij}^{(4)} &= \int_{L_{FE}} \rho_4 \sigma_{ij}^{(4,0)} ds, \end{aligned}$$

где $\sigma_{ij}^{(1)}$, $\sigma_{ij}^{(2)}$, $\sigma_{ij}^{(3)}$ и $\sigma_{ij}^{(4)}$ – напряжения, создаваемые каждой границей в системе клиновидных двойников (напряжения определяются вычислением криволинейных интегралов вдоль профиля границ системы двойников L_{AB} , L_{CB} , L_{DE} и L_{FE} соответственно); $\sigma_{ij}^{(1,0)}$, $\sigma_{ij}^{(2,0)}$, $\sigma_{ij}^{(3,0)}$ и $\sigma_{ij}^{(4,0)}$ – напряжения, соответственно создаваемые на границах системы двойников отдельными дислокациями [9].

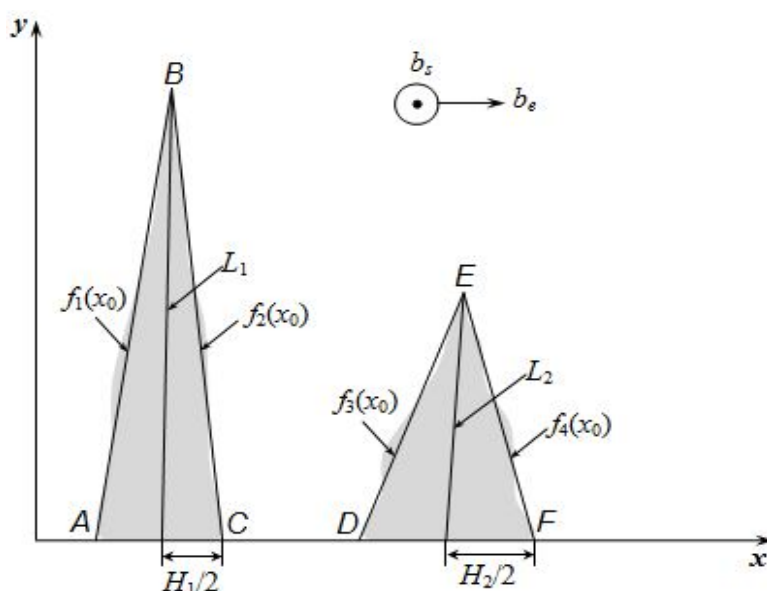


Рис. 1. Схематическое изображение двойников, используемое в моделировании

Fig. 1. Scheme The schematic illustration of twins in the simulation

Криволинейные интегралы (1) сводятся к определенным интегралам [7]:

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}^{(1)}(x, y) &= \\ &= \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) dx_0; \\ \sigma_{ij}^{(2)}(x, y) &= \\ &= \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0) dx_0; \\ \sigma_{ij}^{(3)}(x, y) &= \\ &= \int_0^L \sqrt{1 + (f_3'(x_0))^2} \rho_3(x_0) \sigma_{ij}^{(3,0)}(x, y, x_0) dx_0; \\ \sigma_{ij}^{(4)}(x, y) &= \\ &= \int_0^L \sqrt{1 + (f_4'(x_0))^2} \rho_4(x_0) \sigma_{ij}^{(4,0)}(x, y, x_0) dx_0,\end{aligned}$$

где L – длина двойника. Вектор Бюргера частично двойникующих дислокаций имеет две составляющие – краевую $b_{кр}$ и винтовую $b_{в}$. Поле напряжений

вблизи системы клиновидных двойников (см. рис. 1) определяется в соответствии с [7]:

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}(x, y) &= \\ &= \int_0^L \sqrt{1 + (f_1'(x_0))^2} \rho_1(x_0) \sigma_{ij}^{(1,0)}(x, y, x_0) dx_0 + \\ &+ \int_0^L \sqrt{1 + (f_2'(x_0))^2} \rho_2(x_0) \sigma_{ij}^{(2,0)}(x, y, x_0) dx_0 + \\ &+ \int_0^L \sqrt{1 + (f_3'(x_0))^2} \rho_3(x_0) \sigma_{ij}^{(3,0)}(x, y, x_0) dx_0 + \\ &+ \int_0^L \sqrt{1 + (f_4'(x_0))^2} \rho_4(x_0) \sigma_{ij}^{(4,0)}(x, y, x_0) dx_0,\end{aligned}$$

где $f_1(x_0)$, $f_2(x_0)$, $f_3(x_0)$ и $f_4(x_0)$ – функции, описывающие форму границ клиновидного двойника (рис. 2); $\rho_1(x_0)$, $\rho_2(x_0)$, $\rho_3(x_0)$ и $\rho_4(x_0)$ – плотности двойникующих дислокаций на границах двойника; $\sigma_{ij}^{(1,0)}$, $\sigma_{ij}^{(2,0)}$, $\sigma_{ij}^{(3,0)}$ и $\sigma_{ij}^{(4,0)}$ – напряжения, создаваемые на границах двойника отдельными дислокациями.

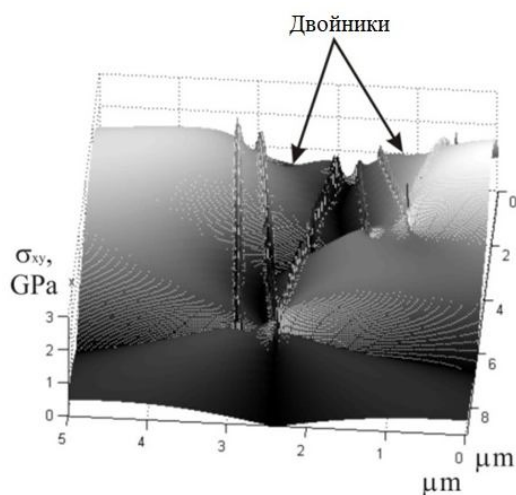
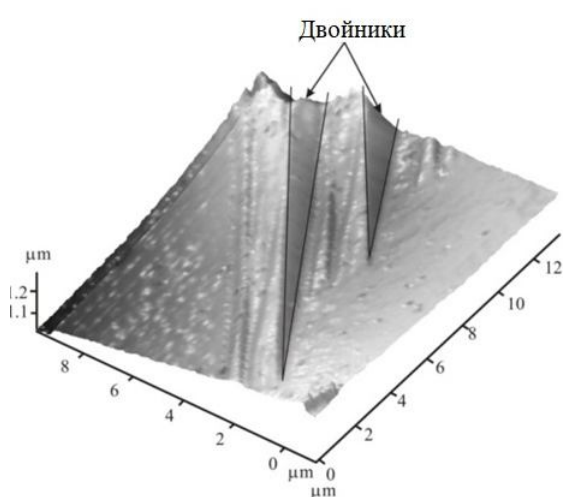


Рис. 2. Изображение поверхности титана после травления в области сформированного двойника, полученное с помощью сканирующей зондовой микроскопии (а), и моделирование распределения напряжений в области двойникования (б)

Fig. 2. The image of titanium surface after etching in the area of the formed twin obtained with a scanning probe microscopy (a) and modeling of stress distribution in the area of twinning (б)

Основываясь на экспериментальных данных, форма некогерентных границ механического клиновидного двойника в образце задавалась в линейном приближении. При моделировании предполагалось, что плотность двойникующих дислокаций на границах одинакова, что приводит к симметрии сдвиговых напряжений [10].

Результаты и их обсуждение

Касательные напряжения имеют отрицательные значения вблизи устья двойника и близки к нулю в средней части двойника. Вблизи границ напряжения изменяются экспоненциально [11]. Полные и частичные двойникующие дислокации с коллинеарными векторами Бюргерса, отталкиваясь, образуют стенку в аккомодационной зоне [12]. Математически верное описание поля напряжений, создаваемого двумя двойниками, должно основываться на наличии границ двойников и стенки, образованной взаимодействием двойникующих дислокаций с дефектами в аккомодационной зоне. Это подтверждается экспериментальными данными [13].

Полученные результаты (см. рис. 2, а) показывают, что, помимо максимума напряжений, образованного границей двойника и учитываемой при моделировании малоугловой границы, возникают дополнительные максимум и минимум напряжений, возникающие в результате суперпозиции полей от разных источников [14]. Данные, полученные с помо-

щью моделирования, качественно согласуются с экспериментальными данными (см. рис. 2, б). Таким образом, представленная модель дает возможность объяснить физику процессов, ответственных за формирование дополнительной зоны, расположенной между двойниками. Из рисунка 2, б следует, что зона, соответствующая максимальным напряжениям, отклоняется от границы двойника и приближается к его вершине за счет суперпозиции полей, создаваемых двойной границей и стенкой дислокаций [15].

Двойникование в некотором смысле можно считать аналогом скольжения, поскольку оба процесса активируются в тот момент, когда сдвиговые напряжения достигают критического значения в плоскости скольжения [16]. Из экспериментальных результатов следует, что процесс двойникования может также зависеть от компонент тензора напряжений, отличных от напряжения сдвига. Можно предположить, что формирование напряжения в аккомодационной зоне клиновидного двойника помогает зарождению и росту новых двойников в той же плоскости [17].

Локальная концентрация напряжений должна быть достаточно высокой, чтобы близлежащие зародыши двойников достигли критического размера, но как только они достигают этого критического размера, дальнейший рост двойника может протекать при относительно низком локальном напряжении [18; 19]. Экспериментально доказано, что в пере-

ходной зоне полные и частичные двойнивающие дислокации с коллинеарными векторами Бюргерса, отталкиваясь, образуют стенку в зоне аккомодации. Это вызывает неоднородность напряжений, что обеспечивает дальнейшее формирование клиновидного двойника [13].

Стоит отметить, что разделение одного большого двойника на несколько двойников создает дополнительное взаимодействие между двойником и матрицей зерна, увеличивая общую поверхностную энергию, что немного меняет соотношение в пользу большого двойника [20].

На рисунке 2, а показаны экспериментальные результаты, описывающие области напряжений в системе двух двойников, образованных в одной и той же плоскости двойникования. В отличие от эпюры напряжений, создаваемых одним двойником, обсуждаемой в [20], в случае двух двойников следует рассматривать перераспределение напряжений в области первого в результате растягивающих напряжений, вызванных ростом второго двойника.

Стоит отметить, что максимальный уровень напряжений в случае одиночного двойника расположен в его вершине. Это можно объяснить высокой плотностью дислокаций, а также суперпозицией полей напряжений от двух границ двойника.

Согласно экспериментальным результатам, приведенным на рисунке 2, а,

в области вершин системы клиновидных двойников концентрация напряжений отсутствует. Это указывает на то, что существуют растягивающие процессы, непосредственно связанные с образованием системой двух клиновидных двойников.

Предложенная модель учитывает реорганизацию дислокаций в аккомодационных зонах, и получаемая эпюра напряжений согласуется с экспериментальными данными, как показано на рисунке 2, б. В этом случае математическая модель и экспериментальные результаты совместно указывают на то, что в аккомодационных зонах наблюдается та же стенка дислокаций, что и в случае одиночного двойника [13].

Выводы

При формировании клинового двойника в поликристаллическом титане образуются условия для формирования дополнительного двойника в его зоне аккомодации. Формирование дополнительного двойника – это в некотором роде способ снятия высоких напряжений на вершинах.

Предложенная модель показывает, что образование малоугловых границ в результате взаимодействия существующих дефектов материала и двойнивающих дислокаций приводит к изменению эпюры напряжений в зоне аккомодации, что, в свою очередь, порождает множественные малоугловые границы в виде стенок дислокаций.

Представленный физический механизм и математическая модель дают достаточно ясную картину формирования структуры и эпюры растягивающих напряжений в зоне формирования двух параллельных двойников.

Список литературы

1. Никифоров А. С. Математическое моделирование неупругого деформирования ГЦК поликристаллов с учетом эволюции дислокационных скоплений // XLV Гагаринские чтения. М.: ИПМех РАН, 2019. С. 119–121.
2. Классен-Неклюдова М. В. Механическое двойникование кристаллов. М.: Изд-во Акад. наук СССР, 1960. 261 с.
3. Investigation of twinning dynamics in VT1-0 titanium using acoustic emission / N. V. Kamyshanchenko, I. S. Nikulin, M. S. Kungurtsev [et al.] // Inorganic materials: applied research. 2011. Vol. 2, no. 2. P. 192–196. <https://doi.org/10.1134/S2075113311020109>.
4. Федоров В. А., Тялин Ю. И., Тялина В. А. Дислокационные механизмы разрушения двойникующихся материалов : монография. М.: Машиностроение-1, 2004. 336 с.
5. Влияние распределения дислокаций в границах двойника на зарождение микротрещин в его вершине / В. А. Федоров, В. А. Куранова, Ю. И. Тялин, С. Н. Плужников // Физика твердого тела. 2002. Т. 44, № 6. С. 1057–1059.
6. Курганов А. В. Развитие математического моделирования процесса двойникования в титане // Системный анализ и информационные технологии в науках о природе и обществе. 2017. № 1-2. С. 79–83.
7. Ostrikov O. M. Effect of the density of twinning dislocations on the configuration of stress fields near a wedge twin with different shapes of the boundaries // Applied Mechanics and Technical Physics. 2008. Vol. 49, no. 5. P. 872–876.
8. Теребушко О. И. Основы теории упругости и пластичности. М.: Наука, 1984. 320 с.
9. Тялина В. А., Мищенко С. В., Тялин Ю. И. Математическое моделирование развития и взаимодействия упругих двойников // Вестник Тамбовского государственного технического университета. 2014. Т. 20, № 3. С. 579–585.
10. The role of twinning deformation on the hardening response of polycrystalline magnesium from discrete dislocation dynamics simulations / H. Fan, S. Aubry, A. Arsenlis, J. A. El-Awady // Acta Mater. 2015. Vol. 92. P. 126–139.
11. Бразгина О. В., Трусков П. В. Двухуровневая модель для описания упруговязкопластического деформирования ГПУ-металлов: упрочнение для двойников // Вестник Пермского государственного технического университета. Прикладная математика и механика. 2011. № 9. С. 19–28.
12. Numerical analysis of twin-precipitate interactions in magnesium alloys / F. Siska, L. Stratil, J. Cizek, T. Guo, M. Barnett // Acta Materialia. 2020. Vol. 202. P. 80–87.

13. Formation of low-angle boundaries accompanying the deformation process by twinning in titanium / I. S. Nikulin, N. V. Kamyshanchenko, T. B. Nikulicheva, M. V. Mishunin, K. A. Vokhmyanina // *Materials Letters*. 2016. Vol. 182. P. 253–256.
14. Bayley C. J., Brekelmans W. A. M., Geers M. G. D. A comparison of dislocation induced back stress formulations in strain gradient crystal plasticity // *International Journal of Solids and Structures*. 2006. Vol. 43. P. 7268–7286.
15. Arsenlis A., Parks D. M. Modeling the evolution of crystallographic dislocation density in crystal plasticity // *J. Mech. Phys. Solids*. 2002. Vol. 50. P. 1979–2009.
16. Mechanism-based strain gradient crystal plasticity. II. Analysis / C. S. Han, H. Gao, Y. Huang, W. D. Nix // *J. Mech. Phys. Solids*. 2005. Vol. 53. P. 1204–1222.
17. Boundary layers in constrained plastic flow: comparison of nonlocal and discrete dislocation plasticity / J. Y. Shu, N. A. Fleck, E. Van der Giessen, A. Needleman // *J. Mech. Phys. Solids*. 2001. Vol. 49. P. 1361–1395.
18. Yaghoobi M., Allison J. E., Sundararaghavan V. Multiscale modeling of twinning and detwinning behavior of HCP polycrystals // *Int. J. Plast.* 2020. Vol. 127. P. 102653.
19. Мацюк К. В., Трусов П. В. Модель неупругого деформирования ГПУ-поликристаллов: несимметричные меры напряженно-деформированного состояния, законы упрочнения, ротация решетки // *Математическое моделирование в естественных науках*. 2013. Т. 1. С. 105–107.
20. Zhang R. Y., Daymond M. R., Holt R. A. A finite element model of deformation twinning in zirconium // *Materials Science and Engineering: A*. 2008. Vol. 473, no. 1-2. P. 139.
21. Yefimov S., Groma I., Van der Giessen E. A comparison of a statistical-mechanics based plasticity model with discrete dislocation plasticity calculations // *J. Mech. Phys. Solids*. 2004. Vol. 52. P. 279–300.

References

1. Nikiforov A. S. Matematicheskoe modelirovanie neuprugogo deformirovaniya GTsK polikristallov s uchetom evolyutsii dislokatsionnykh skoplenii [Mathematical modeling of inelastic deformation of fcc polycrystals taking into account the evolution of dislocation clusters]. *XLV Gagarinskie chteniya = XLV Gagarin Readings*, Moscow, IPMekh RAN Publ. 2019, pp. 119–121.
2. Klassen-Neklyudova M. V. Mekhanicheskoe dvoinikovanie kristallov [Mechanical twinning crystals]. Moscow, Akad. nauk SSSR Publ., 1960.
3. Kamyshanchenko N. V., Nikulin I. S., Kungurtsev M. S., eds. Investigation of twinning dynamics in VT1-0 titanium using acoustic emission. *Inorganic materials: applied research*, 2011, vol. 2, no. 2, pp. 192–196. <https://doi.org/10.1134/S2075113311020109>.

4. Fedorov V. A., Tyalin Yu. I., Tyalina V. A. Dislokatsionnye mekhanizmy raz-rusheniya dvoynikuyushchikhsya materialov [Dislocation mechanisms of destruction of twinning materials]. Moscow, Mashinostroenie-1 Publ., 2004. 336 p.

5. Fedorov V. A., Kuranova V. A., Tyalin Yu. I., Pluzhnikov S. N. Vliyanie raspredeleniya dislokatsii v granitsakh dvoynika na zarozhdenie mikrotreshchin v ego vershine [Influence of distribution of dislocations within the boundaries of a twin on the initiation of microcracks in its tip]. *Fizika tverdogo tela = Solid State Physics*, 2002, vol. 44, no 6, pp. 1057–1059.

6. Kurganov A. V. Razvitie matematicheskogo modelirovaniya protsessa dvoynikovaniya v titane [Development of mathematical modeling of the process of twinning in titanium]. *Sistemnyi analiz i informatsionnye tekhnologii v nauках o prirode i obshchestve = System analysis and information technology in the sciences of nature and society*, 2017, no. 1-2, pp. 79–83.

7. Ostrikov O. M. Effect of the density of twinning dislocations on the configuration of stress fields near a wedge twin with different shapes of the boundaries. *Applied Mechanics and Technical Physics*, 2008, vol. 49, no. 5, pp. 872–876.

8. Terebushko O. I. Osnovy teorii uprugosti i plastichnosti [Fundamentals of the theory of elasticity and plasticity]. Moscow, Nauka Publ., 1984. 320 p.

9. Tyalina V. A., Mishchenko S. V., Tyalin Yu. I. Matematicheskoe modelirovanie razvitiya i vzaimodeistviya uprugikh dvoynikov [Mathematical modeling of development and interaction of elastic twins]. *Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta = Bulletin of the Tambov State Technical University*, 2014, vol. 20, no. 3, pp. 579–585.

10. Fan H., Aubry S., Arsenlis A., El-Awady J. A. The role of twinning deformation on the hardening response of polycrystalline magnesium from discrete dislocation dynamics simulations. *Acta Mater.*, 2015, vol. 92, pp. 126–139.

11. Brazgina O. V., Trusov P. V. Dvukhurovnevaya model' dlya opisaniya uprugovyazkoplasticheskogo deformirovaniya GPU-metallor: uprochnenie dlya dvoynikov [A two-level model for describing the elastoviscoplastic deformation of hcp metals: hardening for twins]. *Vestnik Permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Prikladnaya matematika i mekhanika = Bulletin of the Perm State Technical University. Applied mathematics and mechanics*, 2011, no. 9, pp. 19–28.

12. Siska F., Stratil L., Cizek J., Guo T., Barnett M. Numerical analysis of twin-precipitate interactions in magnesium alloys. *Acta Materialia*, 2020, vol. 202, pp. 80–87.

13. Nikulin I. S., Kamyshanchenko N. V., Nikulicheva T. B., Mishunin M. V., Vokhmyanina K. A. Formation of low-angle boundaries accompanying the deformation process by twinning in titanium. *Materials Letters*, 2016, vol. 182, pp. 253.

14. Bayley C. J., Brekelmans W. A. M., Geers M. G. D. A comparison of dislocation induced back stress formulations in strain gradient crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 2006, vol. 43, pp. 7268–7286.

15. Arsenlis A., Parks D. M. Modeling the evolution of crystallographic dislocation density in crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2002, vol. 50, pp. 1979–2009.
16. Han C. S., Gao H., Huang Y., Nix W. D. Mechanism-based strain gradient crystal plasticity. II. Analysis. *J. Mech. Phys. Solids*, 2005, vol. 53, pp. 1204–1222.
17. Shu J. Y., Fleck N. A., Van der Giessen E., Needleman A. Boundary layers in constrained plastic flow: comparison of nonlocal and discrete dislocation plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2001, vol. 49, pp. 1361–1395.
18. Yaghoobi M., Allison J. E., Sundararaghavan V., Multiscale modeling of twinning and detwinning behavior of HCP polycrystals. *Int. J. Plast.*, 2020, vol. 127, pp. 102653.
19. Matsyuk K. V., Trusov P. V. Model' neuprugogo deformirovaniya GPU-polikristallov: nesimmetrichnye mery napryazhenno-deformirovannogo sostoyaniya, zakony uprochneniya, rotatsiya reshetki [A model of inelastic deformation of hcp polycrystals: asymmetric measures of the stress-strain state, hardening laws, lattice rotation]. *Matematicheskoe modelirovanie v estestvennykh naukakh = Mathematical modeling in natural sciences*, 2013, vol. 1, pp. 105–107.
20. Zhang R. Y., Daymond M. R., Holt R. A. A finite element model of deformation twinning in zirconium. *Materials Science and Engineering: A*, 2008, vol. 473, no. 1–2, pp. 139.
21. Yefimov S., Groma I., Van der Giessen E. A comparison of a statistical-mechanics based plasticity model with discrete dislocation plasticity calculations. *J. Mech. Phys. Solids*, 2004, vol. 52, pp. 279–300.

Информация об авторах / Information about the Authors

Мишунин Максим Вадимович, научный сотрудник, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Российская Федерация, e-mail: maks_mish@mail.ru, ORCID: 0000-0003-1843-0052

Maksim V. Mishunin, Researcher, Belgorod State National Research University, Belgorod, Russian Federation, e-mail: maks_mish@mail.ru, ORCID: 0000-0003-1843-0052

Никulichева Татьяна Борисовна, кандидат физико-математических наук, заведующая лабораторией перспективных материалов и технологий, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Российская Федерация, e-mail: nikulicheva@bsu.edu.ru, ORCID: 0000-0001-6661-3959

Tatiana B. Nikulichева, Cand. of Sci. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of Advanced Materials and Technologies, Belgorod State National Research University, Belgorod, Russian Federation, e-mail: nikulicheva@bsu.edu.ru, ORCID: 0000-0001-6661-3959

Захвалинский Василий Сергеевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и экспериментальной физики, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Российская Федерация, e-mail: zakhvalinskii@bsu.edu.ru, ORCID: 0000-0001-7055-8243

Vasilii S. Zakhvalinskii, Dr. of Sci. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Theoretical and Experimental Physics, Belgorod State National Research University, Belgorod, Russian Federation, e-mail: zakhvalinskii@bsu.edu.ru, ORCID: 0000-0001-7055-8243

Никулин Иван Сергеевич, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией физико-химических методов исследования растений, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Российская Федерация, e-mail: nikulin@bsu.edu.ru, ORCID: 0000-0003-4929-8162

Ivan S. Nikulin, Cand. of Sci. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of Physical and Chemical Methods of Plant Research, Belgorod State National Research University, Belgorod, Russian Federation, e-mail: nikulin@bsu.edu.ru, ORCID: 0000-0003-4929-8162