Шарифуллина, Э.Р. Описание деформирования бикристалла алюминия с реализацией зернограничного скольжения в рамках многоуровневой конститутивной модели с учетом влияния легирующих добавок / Э.Р. Шарифуллина, А.И. Швейкин, П.В. Трусов. – DOI: 10.15593/ perm.mech/2025.6.10 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – № 6. – С. 106–115.

Perm Polytech Style: Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Description of Aluminum Bicrystal Deformation with Grain Boundary Sliding within Multilevel Constitutive Model Taking into Account the Influence of Alloying Additives. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2025, no. 6, pp. 106–115. DOI: 10.15593/perm.mech/2025.6.10

пермский политех

**ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА**
**№ 6, 2025**
**PNRPU MECHANICS BULLETIN**
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2025.6.10
УДК 539.52

# ОПИСАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ БИКРИСТАЛЛА АЛЮМИНИЯ С РЕАЛИЗАЦИЕЙ ЗЕРНОГРАНИЧНОГО СКОЛЬЖЕНИЯ В РАМКАХ МНОГОУРОВНЕВОЙ КОНСТИТУТИВНОЙ МОДЕЛИ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ЛЕГИРУЮЩИХ ДОБАВОК

**Э.Р. Шарифуллина, А.И. Швейкин, П.В. Трусов**

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 29 сентября 2025 г.
Одобрена: 02 декабря 2025 г.
Принята к публикации:
10 декабря 2025 г.

*Ключевые слова:*

многоуровневые конститутивные модели, эволюция структуры материала, зернограничное скольжение, внутризеренное дислокационное скольжение, интерметаллидные частицы

АННОТАЦИЯ

Современное проектирование технологических процессов изготовления и термомеханической обработки ответственных промышленных изделий требует высокой точности – вследствие необходимости обеспечения функциональности получаемого изделия в широкодиапазонных и/или экстремальных условиях. При этом одним из важнейших факторов является то, что внутренняя структура материалов оказывает существенное влияние на механические и эксплуатационные характеристики изготовленных из них деталей и конструкций, поэтому при проектировании необходимо учитывать ее изменение в ходе технологических процессов. Одну из ключевых ролей при трансформации структуры материала играют границы зерен и интерметаллидные частицы – последние образуются за счет введения в основной металл легирующих элементов, имеют различные размеры, долю и распределение в материале. Сложные закономерности взаимодействия границ и частиц с носителями различных механизмов деформирования, в частности, внутризеренного дислокационного скольжения, зернограничного скольжения, в зависимости от температурно-скоростных условий и структуры материала могут приводить к различным сценариям. Поэтому для моделирования и оптимизации комплексных многостадийных процессов термомеханической обработки и изготовления изделий необходимо явным образом учитывать обозначенные механизмы и характеристики структуры.

В статье предлагается формулировка модифицированной статистической трехуровневой конститутивной модели на основе физической теории упруговязкопластичности с учетом внутризеренного дислокационного скольжения, зернограничного скольжения и влияния интерметаллидных частиц различного типа. В соотношениях для описания действия механизмов деформирования учитываются такие характеристики частиц, как размер, объемная доля и модуль сдвига. Полученные результаты численных экспериментов для бикристалла алюминия без и с учетом частиц вторичных фаз показывают значимое влияние последних на процесс деформирования.

© **Шарифуллина Эльвира Ривгатовна** – кандидат физико-математических наук, н.с. лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, e-mail: elvira16_90@mail.ru
**Швейкин Алексей Игоревич** – доктор физико-математических наук, доцент, в.н.с. лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, e-mail: shveykin@pstu.ru
**Трусов Петр Валентинович** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов, e-mail: tpv@pstu.ru

**Elvira R. Sharifullina** – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Researcher, Laboratory of Multilevel Modeling of Structural and Functional Materials, e-mail: elvira16_90@mail.ru
**Alexey I. Shveykin** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Ass. Professor, Leading Researcher, Laboratory of Multilevel Modeling of Structural and Functional Materials, e-mail: shveykin@pstu.ru
**Peter V. Truso** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, e-mail: tpv@pstu.ru

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

# DESCRIPTION OF ALUMINUM BICRYSTAL DEFORMATION WITH GRAIN BOUNDARY SLIDING WITHIN MULTILEVEL CONSTITUTIVE MODEL TAKING INTO ACCOUNT THE INFLUENCE OF ALLOYING ADDITIVES

**E.R. Sharifullina, A.I. Shveykin, P.V. Trusov**

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 29 September 2025
Approved: 02 December 2025
Accepted for publication:
10 December 2025

*Keywords:*

multilevel constitutive models, material structure evolution, grain boundary liding, intragranular dislocation sliding, intermetallic particles

ABSTRACT

Advanced manufacturing and thermomechanical processing technologies of critical industrial products require high precision and reliability of parts under extreme conditions. The internal structure of materials has a significant impact on mechanical and operational characteristics of parts and structures, thus the structural evolution during technological processes has to be considered. Grain boundaries and intermetallic particles play an important role in transforming material structure; the latter are formed due to introduction of alloying elements into the base metal, particles have different sizes, proportion and distribution in materials. Complex patterns of interaction between boundaries and particles with different deformation mechanisms, in particular, intragranular dislocation sliding, grain boundary sliding, can lead to different scenarios depending on temperature-strain rate conditions and material structures. Therefore, during modeling and optimization of complex multi-stage thermomechanical processing and manufacturing, it is necessary to take into account the designated mechanisms and structure characteristics. The article formulates a modified statistical three-level constitutive model based on crystal plasticity taking into account intragranular dislocation sliding, grain boundary sliding and the influence of intermetallic particles of various types. The equations describing deformation mechanisms take into account such particle characteristics as size, volume fraction and shear modulus. The results of numerical experiments for aluminum bicrystals without and with secondary phase particles show a significant influence of the latter on the deformation process.

## Введение

Одной из важных задач развития различных отраслей промышленности является разработка более функциональных металлических деталей и эффективных технологий их создания, способных улучшить физико-механические свойства материалов (повысить показатели прочности и пластичности, коррозионной стойкости, сопротивления к разрушению и усталости) и эксплуатационные характеристики изделий в целом [1–5]. Необходимость формирования определенной структуры материала, обеспечивающей требуемые макросвойства изделия в рабочих условиях, приводит к применению сложных режимов термомеханической обработки металлов и сплавов и изготовления деталей из них [6–9]. При этом реализуются различные механизмы деформирования, действие которых меняется в зависимости от таких факторов как температура, скорость и тип воздействий, исходный химический и фазовый состав материала, состояние зеренной структуры и др. В частности, ранее в [10–12] был предложен «сценарий» реализации механизмов при деформировании с переходом в режим структурной сверхпластичности (СП) и многоуровневая конститутивная модель (КМ) поведения материала (определяющие соотношения), позволяющая его описать.

Развитие КМ путем детализированного учета структуры материала с явным описанием действующих механизмов и их взаимодействия позволяет углубленно анализировать различные режимы деформирования, формулировать предложения по модификации существующих и созданию новых многостадийных технологических процессов. В данной работе рассматривается один из аспектов, связанных со структурой сплавов – учет влияния интерметаллидных частиц на реализующиеся механизмы при СП деформировании. При совершенствовании КМ целесообразно действовать последовательно – сначала проанализировать влияние частиц на основные механизмы (внутризеренное дислокационное скольжение и зернограничное скольжение) и предложить модификации соответствующих соотношений в рамках ранее разработанной трехуровневой модели [11; 12]. Оттестировать их можно при моделировании поведения бикристалла при повышенных температурах. Такая модель будет полезна не только для анализа процессов, происходящих при СП деформировании, но применима и для описания других режимов деформирования. Для компактности изложения в статье не повторяется ряд соотношений КМ, приведенных в [11; 12], внимание сосредоточено на предлагаемых модификациях.

## О структуре многоуровневой конститутивной модели для описания деформирования металлических материалов [11, 12]

В данной статье в качестве базовой используется трехуровневая статистическая КМ, подробное описание которой для деформирования с переходом к режиму СП приведено в [11; 12]. В ней учитываются основные механизмы деформирования (в соответствии с представленным в [10] сценарием): внутризеренное дислокационное скольжение (ВДС), развороты решеток кристаллитов, зернограничное скольжение (ЗГС), динамическая рекристаллизация (ДР), а также их взаимодействие.

Модель имеет три уровня: макроуровень (представительный макрообъем), уровень описания ЗГС (совокупность границ между кристаллитами), мезоуровень (кристаллиты). Напряжения макроуровня интегрально харак-

теризуют упругие связи в материале и равны осредненным напряжениям мезоуровня [11; 12]. Для связи кинематических воздействий на макро- и мезоуровне используется расширенная гипотеза Фойгта о равенстве градиента скорости перемещений на мезоуровне соответствующей характеристике макроуровня с учетом того, что часть деформаций реализуется за счет ЗГС [11; 12]. Для описания ВДС и ЗГС записываются уравнения для вычисления скорости сдвигов по системам скольжения внутри кристаллитов и в границах соответственно (соотношения ($2_4$), (9) в [11]). Для определения спина $\boldsymbol{\omega}$ подвижной системы координат кристаллита применяется приведенное (соотношение (3)) в [11] описание с учетом влияния ЗГС на ротации зерен (о связи этих механизмов указано, например, в [13,14]). Тензор спина используется при записи меры скорости деформации, определенной в виде транспонированного градиента вектора относительной (относительно подвижной системы координат мезоуровня) скорости перемещений и входящей в определяющее соотношение мезоуровня. Отметим, что формулировка КМ осуществляется в скоростной форме в актуальной конфигурации, что позволяет использовать гипотезу аддитивности вкладов в скорость деформации на макромасштабном уровне от ВДС и ЗГС [15].

## Модификация соотношений трехуровневой конститутивной модели путем учета влияния легирующих добавок

Важным элементом модели являются эволюционные уравнения для критических напряжений сдвига (законы упрочнения) по системам скольжения (СС) ВДС $\tau_{cs}^{(k)}$ и по направлениям смещения в границах $\tau_{\mathrm{cgb}}^{(k)}$, входящих в соотношения для скоростей соответствующих сдвигов [11; 12]. Данные величины характеризуют уровень касательных напряжений на системе скольжения, при достижении которого реализуется сдвиг. В соответствии с принципами построения численно эффективных статистических моделей в предлагаемой модели упрочняющие/разупрочняющие факторы учитываются эффективным образом (без явного описания отдельных элементов нижележащего масштабного уровня – дислокаций и частиц).

На основе аналитического обзора [16] принято, что при деформировании алюминиево-литиевого сплава 1420 наибольшую роль играют частицы $Al_3Li$ и $Al_3Zr$, имеющие сферическую форму и размер которых не превышает 50–60 нм [17–25]. Частицы $Al_3Li$ являются мягкими (перерезаемыми дислокациями) и распределены однородно в материале. Частицы $Al_3Zr$ являются жесткими (не перерезаемыми дислокациями), имеют менее однородное распределение и с большей плотностью располагаются на различных дефектах преимущественно в нерекристаллизованных зернах и на границах. Ниже при описании соотношений будет предложен вариант эффективного учета влияния обозначенных частиц на отклик материала путем модификации ранее предложенных в [11; 12] соотношений КМ.

***Закон упрочнения для внутризеренного дислокационного скольжения***

На мезоуровне принимается аддитивное разложение критических напряжений для СС ВДС по различным механизмам их изменения [11; 12; 26]:

$$\tau_{\mathrm{cs}}^{(k)} = \tau_{dis}^{(k)} + \tau_{ps}^{(k)} + \tau_{lat}^{(k)} + \tau_{boun}^{(k)}, \qquad (1)$$

где $\tau_{dis}^{(k)}$ характеризует междислокационные взаимодействия внутри зерна, $\tau_{ps}^{(k)}$ учитывает влияние частиц на движение внутризеренных дислокаций, $\tau_{lat}^{(k)}$ определяет сопротивление скольжению внутризеренных дислокаций со стороны решетки при текущих температурно-скоростных условиях, $\tau_{boun}^{(k)}$ характеризует изменение критических напряжений за счет границ кристаллитов.

Для описания изменения $\tau_{dis}^{(k)}$ применяется известный закон упрочнения в скоростной форме [27], дополненный слагаемым аррениусовского типа, учитывающим влияние диффузионных процессов на сопротивление внутризеренному скольжению (используется соотношение (5) из [11]). В настоящей работе соотношение модифицировано зависимостью модуля упрочнения $\mathrm{h}_0$ от температуры $\mathrm{h}_0 = \mathrm{h}_{0\mathrm{ref}} - \mathrm{f}_{\mathrm{h}_0}(\theta - \theta_{ref})$, где $\mathrm{h}_{0\mathrm{ref}}, \mathrm{f}_{\mathrm{h}_0}$ – параметры модели, $\theta$ – температура.

Уравнение для составляющей $\tau_{ps}^{(k)}$, принимаемой одинаковой для всех СС, записывается [28; 29] в виде:

$$\tau_{ps}^{(k)} = \tau_{ps} = \sum_{i=1}^{2} \frac{F_{ps}^{(i)}}{b_s \lambda_{ps}^{(i)}},$$
$$F_{ps}^{(i)} = \alpha_{ps}^{(i)} \Delta\mu_{psm}^{(i)} b_s^2 \left( \frac{r_{ps}^{(i)}}{b_s} \right)^{\beta_{ps}^{(i)}}, \qquad (2)$$

где индекс $i$ идентифицирует тип частиц, для определенности примем $i = 1$ – для частиц $Al_3Li$, $i = 2$ – для частиц $Al_3Zr$, $F_{ps}^{(i)}$ – характерная дополнительная сила взаимодействия между натыкающейся на частицу дислокацией и частицей в зерне [28; 29] (в дополнение к силе взаимодействия с самой матрицей), $\Delta\mu_{psm}^{(i)} = \left|\mu_p^{(i)} - \mu_{sm}\right|$ – разница между модулями сдвига частицы $\mu_p^{(i)}$ и основного материала зерна (матрицы) $\mu_{sm}$, $b_s$ – модуль вектора Бюргерса внутризеренной дислокации, $r_{ps}^{(i)}$ – средний радиус частиц в зерне, $\lambda_{ps}^{(i)}$ – среднее расстояние между частицами данного типа в зерне, $\alpha_{ps}^{(i)}$ и $\beta_{ps}^{(i)}$ – параметры, связанные с жесткостью частиц.

Среднее расстояние между частицами одного типа $\lambda_{ps}^{(i)}$, используемое в ($2_1$), можно определить с помощью модифицированного соотношения из [30]:

$$\lambda_{ps}^{(i)} = 2\chi \left( \sqrt{\frac{\pi}{3 f_{ps}^{(i)}}} - 1 \right) r_{ps}^{(i)}, \qquad (3)$$

где $f_{ps}^{(i)}$ – объемная доля частиц в зерне, $\chi$ – параметр, характеризующий пространственное распределение частиц (для равномерно распределенных частиц принимается $\chi = 1$, для неравномерно распределенных частиц $\chi = 0{,}8$). С помощью соотношений (2) и (3) в модели закладывается влияние частиц на ВДС: чем больше их объемная доля, разница между модулями сдвига частицы и матрицы, а также чем меньше среднее расстояние между частицами, тем больше вклад в упрочнение.

В разложении (1) критических напряжений ВДС также учитывается составляющая $\tau_{lat}^{(k)}$, определяющая сопротивление скольжению внутризеренных дислокаций со стороны решетки при текущих температурно-скоростных условиях [26].

В $\tau_{boun}^{(k)}$ учитывается закон Холла – Петча и влияние ЗГС на ВДС: при реализации ЗГС часть дислокаций ориентационного несоответствия диссоциирует в зернограничные дислокации, что приводит, в зависимости от соотношения скоростей ВДС и ЗГС, к ослаблению зернограничного упрочнения или к разупрочнению (изменение $\tau_{boun}^{(k)}$ определяется в скоростной форме соотношениями (5), (6) из [12]).

***Закон упрочнения для зернограничного скольжения***

Для ЗГС также принимается аддитивное разложение критических напряжений в зависимости от различных факторов (для сокращения записи индексы номеров систем скольжения ЗГС фасеток границ опускаются):

$$\tau_{cgb} = \tau_{dgb} + \tau_{pgb}, \qquad (4)$$

где в $\tau_{dgb}$ учитывается влияние дислокационных и диффузионных механизмов, определенных при физическом анализе известных экспериментальных данных [10], а в $\tau_{pgb}$ – дополнительное влияние частиц. Поскольку в настоящей работе тестирование соотношений осуществляется при моделировании поведения бикристалла (раздел 3), в $\tau_{cgb}$ не учитывается возможное влияние рекристаллизации, которая реализуется, к примеру, в ходе подготовки к сверхпластическому деформированию (СПД) [11].

Для описания изменения слагаемого $\tau_{dgb}$ в (4) используются соотношения, учитывающие повышение критических напряжений ЗГС за счет движения зернограничных дислокаций, при котором по аналогии с ВДС возможно образование препятствий, приводящее к упрочнению, а также их понижение в результате выглаживания границ за счет процессов, связанных с зернограничной диффузией и притоком решеточных дислокаций в границы (применяются соотношения (11)–(13) из [12]). Соотношения модифицированы зависимостью модуля упрочнения $\nu$ от температуры $\nu = \nu_{ref} - \mathrm{f}_{\nu}(\theta - \theta_{ref})$, где $\nu_{ref}$, $\mathrm{f}_{\nu}$ – параметры модели, $\theta$ – температура.

Для составляющей $\tau_{pgb}$, описывающей дополнительное влияние частиц на ЗГС, применяется соотношение сходного с (2) вида [28; 29]:

$$\tau_{pgb} = \sum_{i=1}^{2} \frac{F_{pgb}^{(i)}}{b_{gb}\lambda_{pgb}^{(i)}},$$
$$F_{pgb}^{(i)} = \alpha_{pgb}^{(i)} \Delta\mu_{pgb}^{(i)} b_{gb}^{2} \left( \frac{r_{pgb}^{(i)}}{b_{gb}} \right)^{\beta_{pgb}^{(i)}}, \qquad (5)$$

где индекс $i$ идентифицирует тип частиц, $i = 1$ – для частиц $Al_3Li$, $i = 2$ – для частиц $Al_3Zr$, $F_{pgb}$ – характерная дополнительная сила взаимодействия между натыкающейся на частицу зернограничной дислокацией и частицей в границе, $\Delta\mu_{pgb}^{(i)} = \left|\mu_{p}^{(i)} - \mu_{gb}\right|$ – разница между модулями сдвига частицы в границе $\mu_p$ и основного материала границы $\mu_{gb}$ (для упрощения полагается соответствующей матрице зерен), $b_{gb}$ – модуль вектора Бюргерса зернограничной дислокации, $r_{pgb}^{(i)}$ – средний радиус пересечения границы частицами данного типа, $\lambda_{pgb}^{(i)}$ – среднее расстояние между частицами в границе, $\alpha_{pgb}^{(i)}$ и $\beta_{pgb}^{(i)}$ – параметры, характеризующие способность частиц перерезаться дислокациями, связанные с жесткостью частиц.

Среднее расстояние между частицами одного типа можно определить с помощью соотношения:

$$\lambda_{pgb}^{(i)} = \chi\left( \sqrt{\frac{2\pi}{f_{pgb}^{(i)}}} - 2 \right) r_{pgb}^{(i)}, \qquad (6)$$

где $f_{pgb}^{(i)}$ – доля частиц, имеющих общие подобласти с фасеткой границы, $\chi$ – параметр, характеризующий пространственное распределение частиц (для равномерно распределенных частиц принимается $\chi = 1$, для неравномерно распределенных частиц – $\chi = 0{,}8$). С помощью соотношений (5) и (6) в модели закладывается влияние частиц на ЗГС: чем больше их доля, разница между модулями сдвига частицы и матрицы, а также чем меньше среднее расстояние между частицами, тем больше вклад в упрочнение. Также важно отметить, что в общем случае необходима формулировка эволюционных уравнений для изменения плотности частиц с учетом их взаимосвязи.

Таким образом, предлагается модификация соотношений трехуровневой КМ в части описания ВДС и ЗГС учетом влияния частиц. Это влияние заключается в учете зависимости критических напряжений по обозначенным механизмам в зависимости от размеров частиц, их объемной доли в материале и модуля сдвига.

## Результаты моделирования и их анализ

В данном разделе приведены и сопоставлены с известными экспериментальными данными [31] результаты численного моделирования сдвига бикристалла алюминия вдоль плоскости границы со скоростью $1{,}85 \cdot 10^{-5}$ с$^{-1}$ при температурах $\theta$=350°C (идентификация), $\theta$=375°C (верификация). Также представлены результаты расчетов, полученные с помощью модифицированных законов упрочнения трехуровневой модели, и проанализировано влияние частиц на действующие механизмы деформирования.

Начальные критические напряжения ВДС $\tau_{\mathrm{cs0}}^{(k)}$ во всех зернах на всех СС принимаются одинаковыми и определяются из условия равенства отношения предела текучести на макроуровне к величине начальных критических напряжений значению 2.2 [26]. Начальные критические напряжения ЗГС для всех СС определяются из условия $\tau_{\mathrm{cgb0}}^{(k)} = \tau_{\mathrm{cgb0ref}}^{(k)} - \mathrm{f}_{\tau_{\mathrm{cgb0}}^{(k)}}\left(\theta - \theta_{\mathrm{ref}}\right)$, где $\tau_{\mathrm{cgb0}}^{(k)}, \mathrm{f}_{\tau_{\mathrm{cgb0}}^{(k)}}$ – параметры модели. В таблице 1 приведены значения параметров КМ со ссылками на источники; значения, указанные без ссылки на источник, определены в ходе процедуры идентификации параметров модели при $\theta$ = 350 °C.

Таблица 1/Table 1

Значения параметров конститутивной модели
Values of constitutive model parameters

| $\pi_{1111}$ | $\pi_{1122}$ | $\pi_{1212}$ | $m$, $n$ | a | β |
|---|---|---|---|---|---|
| 106,8 ГПа [32] | 60,4 ГПа [32] | 28,3 ГПа [32] | 10 [11] | 2,25 [11,12] | 1 [11,12] |
| ψ | $\bar{\sigma}$ | $q$ | κ | U | $U_d$ |
| 1,7 Н/м [12] | 35 МПа [11,12] | 3 [11,12] | $1{,}38\cdot10^{-23}$ Дж/К | $3.008\cdot10^{-19}$ Дж [33] | $1.66\cdot10^{-19}$ Дж [34] |
| α | $h_0$ | $f_{h_0}$ | $\tau_{sat}$ | $A$ | $\bar{\tau}$ |
| 0,05 | 55 МПа | 0,2 МПа | 3 МПа | $3{,}6\cdot10^{10}$ МПа/с | 0,5 МПа |
| $\tau_{cgb0}^{(k)}$ | $f_{\tau_{cgb0}^{(k)}}$ | ν | $f_\nu$ | $g$ | $c$ |
| 1,1 МПа | 0,036 МПа/°С | 800 МПа | 28,8 МПа | 110 МПа | $7\cdot10^{6}$ МПа/с |

На рис. 1 приведены зависимости интенсивности напряжений от времени и величины зернограничного сдвига от времени, полученные в вычислительном эксперименте при θ = 350 °С с идентифицированными параметрами. Наблюдается приемлемое соответствие результатов расчетов и экспериментальных данных [31]. В связи со структурными особенностями отдельных кристаллитов бикристалла, подвергаемого эксперименту, достигнутое соответствие с экспериментальными данными полагается приемлемым (представляется, что нет необходимости достигать большей близости результатов). В конкретном случае проявляется немонотонность в реализации ЗГС, сдвиг имеет сложную зависимость от времени, объяснение которой, к сожалению, в [31] не приведено.

На рис. 2 представлены результаты численного эксперимента, полученные в ходе верификации модели при θ=375ºС, и соответствующие экспериментальные данные [31]. Отметим, что в расчетах на малом начальном этапе наблюдается чистая упругость, но осуществляется быстрый переход к пластичности.

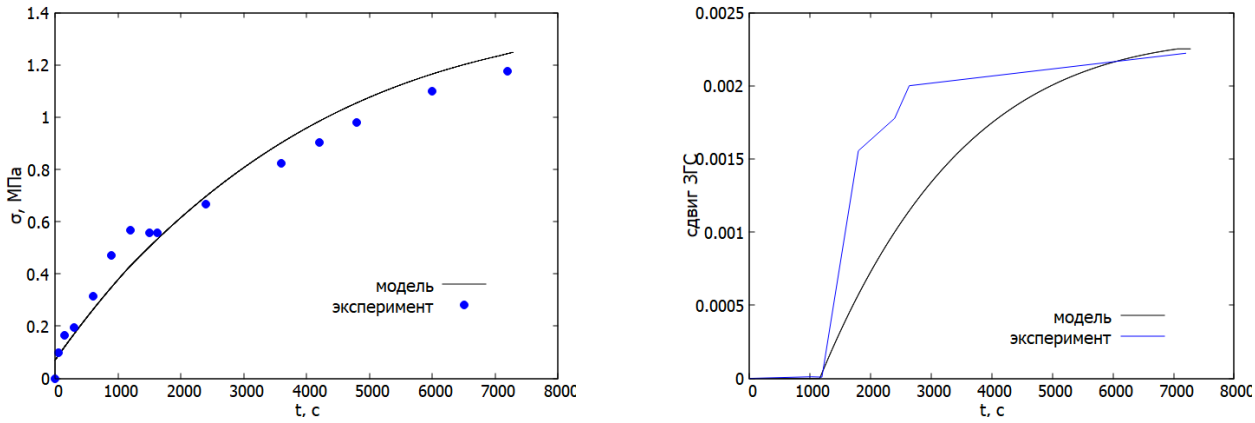



Рис. 1. Зависимость интенсивности напряжений от времени (слева, точки соответствуют эксперименту) и величины сдвига ЗГС от времени (справа, синяя линия соответствует эксперименту) для бикристалла алюминия, испытанного при температуре 350ºС [31]

Fig. 1. Stress intensity on time (on the left, the dots correspond to the experiment) and magnitude of grain boundary shear on time (on the right, the blue line corresponds to the experiment) for aluminum bicrystal tested at temperature of 350°C [31]

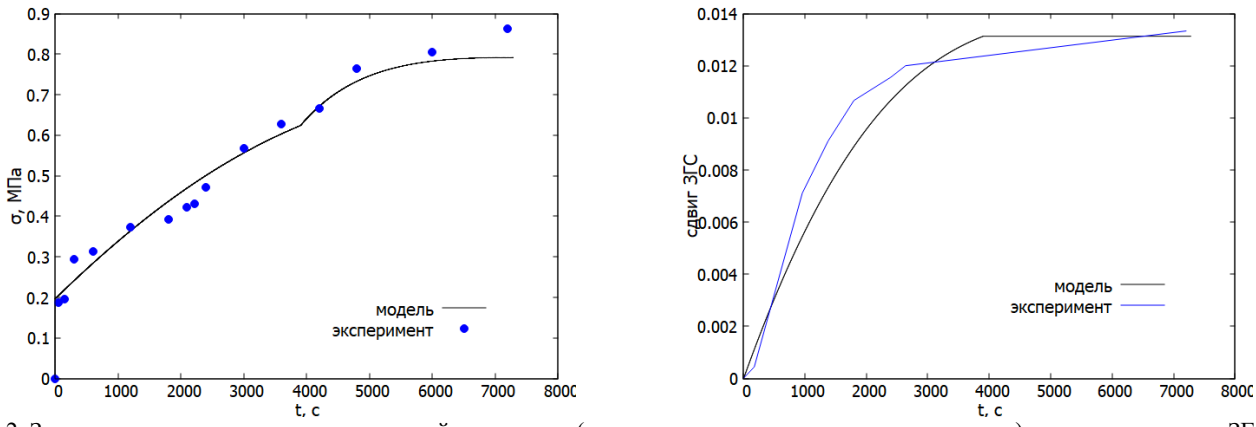



Рис. 2. Зависимость интенсивности напряжений от времени (слева, точки соответствуют эксперименту) и величины сдвига ЗГС от времени (справа, синяя линия соответствует эксперименту) для бикристалла алюминия, испытанного при температуре 375ºС [31]

Fig. 2. Stress intensity on time (on the left, the dots correspond to the experiment) and magnitude of grain boundary shear on time (on the right, the blue line corresponds to the experiment) for aluminum bicrystal tested at temperature of 375°C [31]

Приведенные результаты (рис. 1, 2) свидетельствуют о том, что модель дает качественно хорошее описание диаграмм нагружений, полученных при различных температурах, при удовлетворительном соответствии сценариям реализации зернограничного сдвига.

Ниже на рис. 3 и 4 представлены результаты модельных численных расчетов для бикристалла алюминия с учетом частиц $Al_3Li$ и $Al_3Zr$ при температуре испытания θ=350ºC (для другой температуры наблюдаются аналогичные закономерности). Объемная доля частиц варьируется, радиус частиц $r_{ps}^{(1)}$ и $r_{ps}^{(2)}$ принимает значения от 10 до 25 нм в соответствии с типовыми характеристиками таких частиц в алюминиевых сплавах [35; 36], $\alpha_{ps}$ и $\alpha_{pgb}$ выбраны из физических соображений, остальные параметры приведены в табл. 2.

На рис. 3 приведены результаты численных экспериментов с учетом влияния частиц в зависимости от их доли внутри кристаллитов и границ (взяты одинаковые доли частиц в кристаллитах и границе, для сравнения на рис. 3 нанесен график без учета частиц с рис. 1). Увеличение доли частиц в материале приводит к повышению напряжений: более затрудненным становится ВДС вследствие появления препятствий для реализации множественного скольжения, по этой причине ЗГС начинается несколько раньше, однако наличие в границе частиц приводит к уменьшению величины зернограничного сдвига.

Таблица 2/Table 2

Значения параметров конститутивной модели, учитывающих влияние частиц

Values of constitutive model parameters taking into account the influence of particles

| $\mu_p^{(1)}$ | $\mu_p^{(2)}$ | $\mu_{sm}$, $\mu_{gb}$ | $b_s$ , $b_{gb}$ | $\chi$ | $\beta_{ps}$, $\beta_{pgb}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 40 ГПа [37–39] | 63 ГПа [37–39] | 26.2 ГПа [37–39] | 0.286 нм [39,40] | 0.8 [28,30] | 0.8 [28,30] |

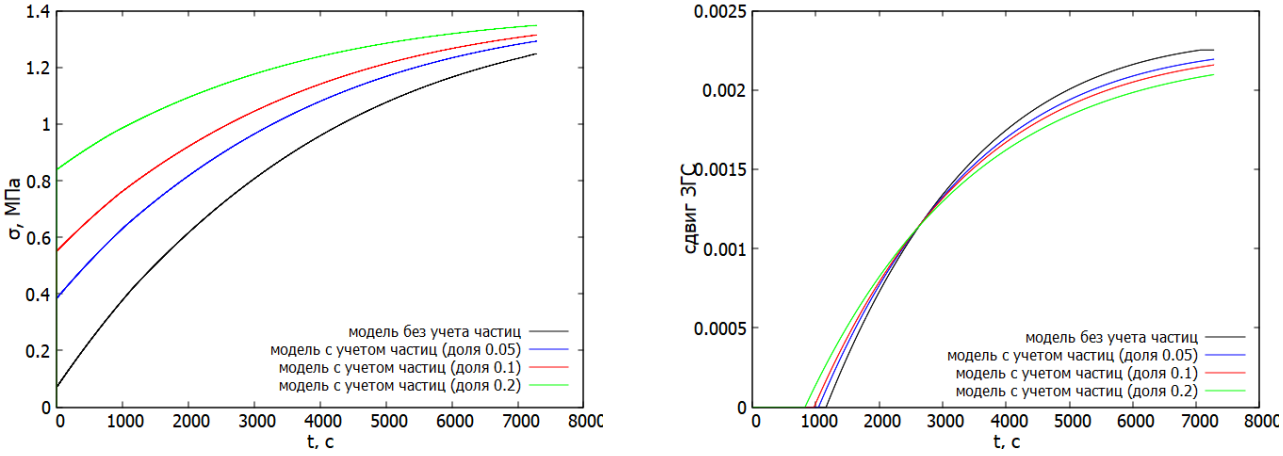



Рис. 3. Зависимости интенсивности напряжений от времени (слева) и величины сдвига ЗГС от времени (справа) для бикристалла алюминия, полученные в ходе численных расчетов при температуре 350ºC с учетом разной доли частиц

Fig. 3. Stress intensity on time (on the left) and magnitude of grain boundary shear on time (on the right) for an aluminum bicrystal obtained during numerical calculations at temperature of 350°C taking into account different fractions of particles

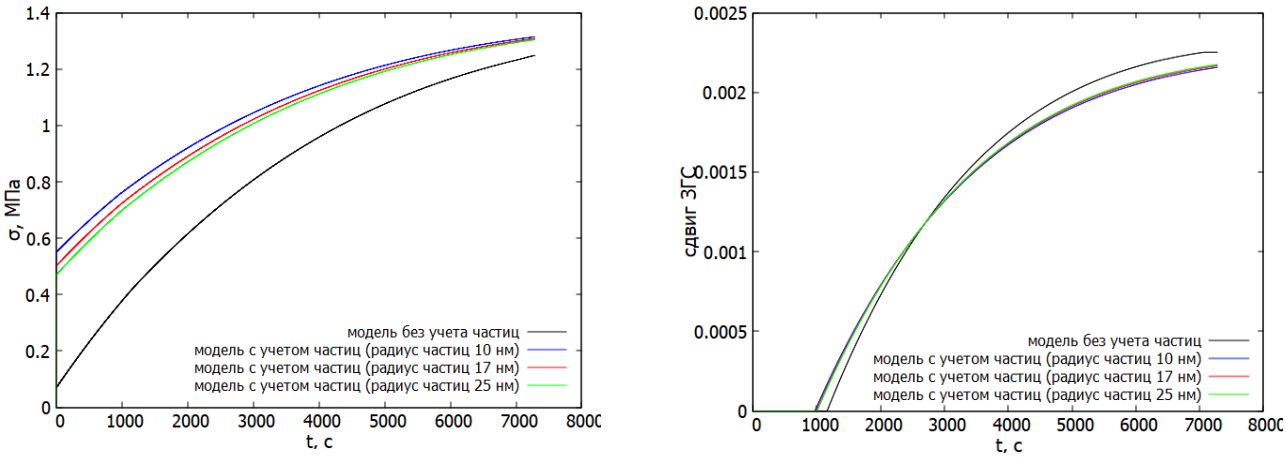



Рис. 4. Зависимости интенсивности напряжений от времени (слева) и величины сдвига ЗГС от времени (справа) для бикристалла алюминия, полученные в ходе численных расчетов при температуре 350ºC с учетом разного радиуса частиц

Fig. 4. Stress intensity on time (on the left) and magnitude of grain boundary shear on time (on the right) for an aluminum bicrystal obtained during numerical calculations at temperature of 350°C taking into account different particle radius

На рис. 4 приведены результаты численных экспериментов с учетом влияния частиц в зависимости от их радиуса при сохранении тех же объемной и поверхностной долей. Уменьшение радиуса в соответствии с (2), (3) приводит к некоторому повышению величины напряжений за счет того, что при меньшем радиусе при той же доле частиц в материале их количество больше, соответственно – меньше среднее расстояние между частицами.

## Заключение

В статье изложены общая структура и описание соотношений модифицированной статистической трехуровневой конститутивной модели с учетом важных для исследования и оптимизации комплексных многостадийных процессов обработки и изготовления изделий физических механизмов и характеристик мезоструктуры. В частности, приведена формулировка соотношений, учитывающих влияние интерметаллидных частиц, на механизмы внутризеренного и зернограничного скольжения. Модель оттестирована для случая бикристалла. Проведена серия вычислительных расчетов для образцов бикристалла алюминия без и с учетом частиц. Результаты без учета влияния частиц вторичных фаз сопоставлены с известными экспериментальными данными, получено приемлемое качественное соответствие между расчетными и натурными экспериментами.

## Библиографический список


1. Zhou B., Zhang S. The advancement of 7XXX series aluminum alloys for aircraft structures: a review // Metals. – 2021. – 11, 718. – 29 p. Doi:10.3390/met11050718
2. Atxaga G., Arroyo A., Canflanca B. Hot stamping of aerospace aluminium alloys: automotive technologies for the aeronautics industry // Journal of Manufacturing Processes. – 2022. – V.81. – Pp. 817–827. Doi:10.1016/j.jmapro.2022.07.032
3. Development and applications of aluminum alloys for aerospace industry / S. Li [et al.] // Journal of Materials Research and Technology. – 2023. – V.27. – Pp. 944–983. Doi:10.1016/j.jmrt.2023.09.274
4. Silvayeh Z., Brillinger M., Domitner J. Deformation behavior of aluminum alloy rivets for aerospace applications // Journal of Materials Research and Technology. – 2024. – V.33. – Pp. 3482–3491. Doi:10.1016/j.jmrt.2024.09.259
5. A review of research on aluminum alloy materials in structural engineering / X. You. [et al.] // Developments in the Built Environment. – 2024. – V.17. – 100319. Doi:10.1016/j.dibe.2023.100319
6. Zhang W., He H., Yi Y., Huang S. Influence of thermomechanical processing on coarse particles, grain structure, and mechanical properties of Al–Cu alloy rings // Journal of materials research and technology. – 2023. – V.22. – Pp. 1136–1150. Doi:10.1016/j.jmrt.2022.11.171
7. Chaubey N., Kumar N. Effect of thermomechanical processing on mechanical properties and microstructural evolution of Al-Mg-Zn alloy // Materials Today Communications. – 2024. – V.40. – 109426. Doi:10.1016/j.mtcomm.2024.109426
8. Severe plastic deformation for producing superfunctional ultrafinegrained and heterostructured materials: an interdisciplinary review / K. Edalati [et al.] // Journal of Alloys and Compounds. – 2024. – V.1002. – 174667. Doi:10.1016/j.jallcom.2024.174667
9. Structure refinement and performance balance of high-strength aluminum alloys using an improved thermomechanical treatment process / D. Wang [et al.] // Materials Science and Engineering: A. – 2024. – V.904. – 146675. Doi:10.1016/j.msea.2024.146675
10. Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И., Трусов П.В. Обзор экспериментальных исследований структурной сверхпластичности: эволюция микроструктуры материалов и механизмы деформирования // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – С.103–127. Doi:10.15593/perm.mech/2018.3.11
11. Трусов П.В., Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И. Многоуровневая модель для описания пластического и сверхпластического деформирования поликристаллических материалов // Физическая мезомеханика. – 2019. – Т.22, №2. – С.5–23. Doi:10.24411/1683-805X-2019-12001
12. Shveykin A.I., Trusov P.V., Sharifullina E.R. Statistical crystal plasticity model advanced for grain boundary sliding description // Crystals. – 2020. – Vol.10, Is.9. – 18 p. Doi:10.3390/cryst10090822
13. Accommodation mechanisms for grain boundary sliding as inferred from texture evolution during superplastic deformation / H. Watanabe [et al.] // Philos. Mag. – 2013. – V.93. – Pp. 2913–2931.
14. Yang J., Wu J. Grain rotation accommodated GBS mechanism for the ti-6al-4v alloy during superplastic deformation // Crystals. – 2021. – V.11. – 991. Doi:10.3390/cryst11080991
15. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. – 605 с.
16. Шарифуллина Э.Р., Швейкин А.И., Трусов П.В. Влияние легирующих добавок на структуру Al-Li-сплавов и механизмы деформирования в условиях сверхпластичности (аналитический обзор) // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2023. – №6. – С. 135–157. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.6.13
17. Superplasticity and true grain-boundary sliding in Al–Mg–Li alloys produced by equal-channel angular pressing / Yu.R. Kolobov [et al.] // Metally. – 2004. – №2. – Pp. 12–20.
18. Prasad K.S., Prasad N.E., Gokhale A.A. Microstructure and precipitate characteristics of aluminum–lithium alloys // Aluminum-lithium Alloys. Processing, properties, and applications, 2014. – Pp.99–137. Doi:10.1016/B978-0-12-401698-9.00004-5
19. Effect of Li and Zr addition on microstructure and mechanical properties of modified LM25 aluminium alloy / G. Venkatachalam [et al.] // International Journal of Applied Engineering Research. – 2015. – V.10, no.50. – Pp.647–651.

20. Колобнев Н.И. История развития, фазовый состав и свойства сплавов системы Al–Cu–Li // Технология легких сплавов. – 2015. – №2. – С.46–52.

21. Betsofen S.Ya., Antipov V.V., Knyazev M.I. Al–Cu–Li and Al–Mg–Li alloys: phase composition, texture, and anisotropy of mechanical properties (review) // Russian Metallurgy (Metally). – 2016. – Vol. 2016, no. 4. – Pp. 326–341. Doi:10.1134/S0036029516040042

22. Effects of Sc and Zr on microstructure and properties of 1420 aluminum alloy / Y. Wang [et al.] // Materials Characterization. – 2019. – V.154. – Pp.241–247. Doi:10.1016/j.matchar.2019.06.001

23. Naydenkin E.V., Mishin I.P., Zabudchenko O.V. Thermal stability and S-phase evolution in ultrafine-grained Al-Mg-Li alloy produced by equal-channel angular pressing // Advanced Engineering Materials. – 2021. – 2100181. Doi:10.1002/adem.202100181

24. Liu S., Wrobel J.S., LLorca J. First-principles analysis of the Al-rich corner of Al-Li-Cu phase diagram // Acta Materialia. – 2022. – V.236. – 118129. Doi:10.1016/j.actamat.2022.118129

25. Multicomponent aging Al-Li-based alloys of the latest generation: structural and phase transformations, treatments, properties, and future prospects / D.Y. Rasposienko [et al.] // Materials. – 2022. – V.15. – 4190. Doi:10.3390/ma15124190

26. Швейкин А.И., Вшивкова А.А., Трусов П.В. Двухуровневая конститутивная модель металла с комплексным учетом изменяющихся температурно-скоростных условий // Физическая мезомеханика. – 2024. – Т. 27, №2. – С. 50–68.

27. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2004. – Vol.193. – Pp. 5359–5383.

28. Nembach E. Precipitation hardening caused by a difference in shear modulus between particle and matrix // Phys. stat. sol. – 1983. – V.78. – Pp. 571–581.

29. Takahashi A., Ghoniem N.M. A computational method for dislocation–precipitate interaction // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2008. – V.56. – Pp. 1534–1553. Doi:10.1016/j.jmps.2007.08.002

30. Long N.J., Loretto M.H., Lloyd C.H. The deformation behaviour of single crystals of the Cu-Cr-$SiO_2$ system – I. Yield and pre-yield behaviour // Acta Metallurgica. – 1980. – V. 28. – Pp. 709–719.

31. Halliday M.D., Beevers C.J. Some observations of grain-boundary sliding in aluminium bicrystals tested at constant strain rate and constant rate of stress increase // Journal of materials science. – 1971. – No.6. – Pp. 1254–1260.

32. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.

33. Ashraf F., Castelluccio G.M. A robust approach to parameterize dislocation glide energy barriers in FCC metals and alloys // J Mater Sci. – 2021. – V.56. – Pp. 16491–16509. Doi:10.1007/s10853-021-06376-1

34. Векман А.В., Демьянов Б.Ф., Шмаков И.А. Коэффициенты зернограничной самодиффузии в алюминии (компьютерный расчет) // Физика. – 2013. – С.141–145. DOI:10.14258/izvasu(2013)1.2-28

35. Naydenkin E.V., Ivanov K.V., Rudenskii G.E. Evolution of structure and phase composition of aluminum alloy under severe plastic deformation // Advanced Materials Research. – 2014. – V.880. – Pp.179–183. Doi:10.4028/www.scientific.net/AMR.880.179

36. Naydenkin E.V., Ivanov K.V. Characteristic features of structure evolution and phase composition of an ultrafine-grained Al–Mg–Li–Zr alloy produced by severe plastic deformation // Russian Physics Journal. – 2014. – V.56, no.9. – Pp.1025–1029. DOI:10.1007/s11182-014-0135-8

37. First-principles study of the nucleation and stability of ordered precipitates in ternary Al–Sc–Li alloys / Z. Mao [et al.] // Acta Materialia. – 2011. – V.59. – Pp. 3012–3023. Doi:10.1016/j.actamat.2011.01.041

38. Tian T., Wang X.F., Li W. Ab initio calculations on elastic properties in L12 structure $Al_3X$ and $X_3Al$-type (X=transition or main group metal) intermetallic compounds // Solid State Communications. – 2013. – V.156. – Pp. 69–75. Doi: 10.1016/j.ssc.2012.10.021

39. The influence of shearable and nonshearable precipitates on the Portevin-Le Chatelier behavior in precipitation hardening AlMgScZr alloys / H. Chen [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2021. – V.147. – Pp.103–120. Doi:10.1016/j.ijplas.2021.103120

40. Особенности упрочнения структурированного интенсивной пластической деформацией сплава Al−Cu−Zr / Т.С. Орлова [и др.] // Физика твердого тела. – 2021. – Т.63, вып.10. – С.1572–1584. Doi:10.21883/FTT.2021.10.51408.104

## References

1. Zhou B., Zhang S. The advancement of 7XXX series aluminum alloys for aircraft structures: a review // Metals. – 2021. – 11, 718. – 29 p. Doi:10.3390/met11050718

2. Atxaga G., Arroyo A., Canflanca B. Hot stamping of aerospace aluminium alloys: automotive technologies for the aeronautics industry // Journal of Manufacturing Processes. – 2022. – V.81. – Pp. 817–827. Doi:10.1016/j.jmapro.2022.07.032

3. Development and applications of aluminum alloys for aerospace industry / S. Li [et al.] // Journal of Materials Research and Technology. – 2023. – V.27. – Pp. 944–983. Doi:10.1016/j.jmrt.2023.09.274

4. Silvayeh Z., Brillinger M., Domitner J. Deformation behavior of aluminum alloy rivets for aerospace applications // Journal of Materials Research and Technology. – 2024. – V.33. – Pp. 3482–3491. Doi:10.1016/j.jmrt.2024.09.259

5. A review of research on aluminum alloy materials in structural engineering / X. You. [et al.] // Developments in the Built Environment. – 2024. – V.17. – 100319. Doi:10.1016/j.dibe.2023.100319

6. Zhang W., He H., Yi Y., Huang S. Influence of thermomechanical processing on coarse particles, grain structure, and mechanical properties of Al–Cu alloy rings // Journal of materials research and technology. – 2023. – V.22. – Pp. 1136–1150. Doi:10.1016/j.jmrt.2022.11.171

7. Chaubey N., Kumar N. Effect of thermomechanical processing on mechanical properties and microstructural evolution of Al-Mg-Zn alloy // Materials Today Communications. – 2024. – V.40. – 109426. Doi:10.1016/j.mtcomm.2024.109426

8. Severe plastic deformation for producing superfunctional ultrafinegrained and heterostructured materials: an interdisciplinary review / K. Edalati [et al.] // Journal of Alloys and Compounds. – 2024. – V.1002. – 174667. Doi:10.1016/j.jallcom.2024.174667

9. Structure refinement and performance balance of high-strength aluminum alloys using an improved thermomechanical treatment process / D. Wang [et al.] // Materials Science and Engineering: A. – 2024. – V.904. – 146675. Doi:10.1016/j.msea.2024.146675

10. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Obzor eksperimentalnykh issledovaniy strukturnoy sverkhplastichnosti: evolyutsiya mikrostruktury materialov i mekhanizmy deformirovaniya [Review of experimental studies on structural superplasticity: internal structure evolution of material and deformation mechanisms] // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2018, no. 3. – Pp. 103–127. Doi: 10.15593/perm.mech/2018.3.11

11. Trusov P.V., Sharifullina E.R., Shveykin A.I. Multilevel model for the description of plastic and superplastic deformation of polycristalline materials // Physical Mesomechanics. – 2019. – Vol.22, No.5. – Pp.402–419. DOI: 10.1134/S1029959919050072

12. Shveykin A.I., Trusov P.V., Sharifullina E.R. Statistical crystal plasticity model advanced for grain boundary sliding description // Crystals. – 2020. – Vol.10, Is.9. – 18 p. Doi:10.3390/cryst10090822

13. Accommodation mechanisms for grain boundary sliding as inferred from texture evolution during superplastic deformation / H. Watanabe [et al.] // Philos. Mag. – 2013. – V.93. – Pp. 2913–2931.

14. Yang J., Wu J. Grain rotation accommodated GBS mechanism for the ti-6al-4v alloy during superplastic deformation // Crystals. – 2021. – V.11. – 991. Doi:10.3390/cryst11080991

15. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniya [Multilevel models of mono- and polycrystalline materials: theory, algorithms, application examples]. – Novosibirsk: Izd-vo SO RAN, 2019. – 605 s.

16. Sharifullina E.R., Shveykin A.I., Trusov P.V. Vliyanie legiruyushchikh dobavok na strukturu Al-Li-splavov i mekhanizmy deformirovaniya v usloviyakh sverkhplastichnosti (analiticheskiy obzor) [Analysis of the influence of alloying additions on the structure of Al-Li alloys and deformation mechanisms under superplastic conditions (an analytical review)] // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2023, no. 6. – Pp. 135–157. Doi:10.15593/perm.mech/2023.6.13

17. Superplasticity and true grain-boundary sliding in Al–Mg–Li alloys produced by equal-channel angular pressing / Yu.R. Kolobov [et al.] // Metally. – 2004. – №2. – Pp. 12–20.

18. Prasad K.S., Prasad N.E., Gokhale A.A. Microstructure and precipitate characteristics of aluminum–lithium alloys // Aluminum-lithium Alloys. Processing, properties, and applications, 2014. – Pp.99–137. Doi:10.1016/B978-0-12-401698-9.00004-5

19. Effect of Li and Zr addition on microstructure and mechanical properties of modified LM25 aluminium alloy / G. Venkatachalam [et al.] // International Journal of Applied Engineering Research. – 2015. – V.10, no.50. – Pp.647–651.

20. Kolobnev N.I. Istoriia razvitiia, fazovyi sostav i svoistva splavov sistemy Al–Cu–Li // Tekhnologiia legkikh splavov. – 2015. – №2. – Pp.46–52.

21. Betsofen S.Ya., Antipov V.V., Knyazev M.I. Al–Cu–Li and Al–Mg–Li alloys: phase composition, texture, and anisotropy of mechanical properties (review) // Russian Metallurgy (Metally). – 2016. – Vol. 2016, no. 4. – Pp. 326–341. Doi:10.1134/S0036029516040042

22. Effects of Sc and Zr on microstructure and properties of 1420 aluminum alloy / Y. Wang [et al.] // Materials Characterization. – 2019. – V.154. – Pp.241–247. Doi:10.1016/j.matchar.2019.06.001

23. Naydenkin E.V., Mishin I.P., Zabudchenko O.V. Thermal stability and S-phase evolution in ultrafine-grained Al-Mg-Li alloy produced by equal-channel angular pressing // Advanced Engineering Materials. – 2021. – 2100181. Doi:10.1002/adem.202100181

24. Liu S., Wrobel J.S., LLorca J. First-principles analysis of the Al-rich corner of Al-Li-Cu phase diagram // Acta Materialia. – 2022. – V.236. – 118129. Doi:10.1016/j.actamat.2022.118129

25. Multicomponent aging Al-Li-based alloys of the latest generation: structural and phase transformations, treatments, properties, and future prospects / D.Y. Rasposienko [et al.] // Materials. – 2022. – V.15. – 4190. Doi:10.3390/ma15124190

26. Shveykin A.I., Vshivkova A.A., Trusov P.V. Two-level constitutive model of metal with a comprehensive account of temperature and strain rate changes // Physical Mesomechanics. – 2024. – V. 27. – № 4. – P. 370-386. DOI: 10.1134/S1029959924040027

27. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2004. – Vol.193. – Pp. 5359–5383.

28. Nembach E. Precipitation hardening caused by a difference in shear modulus between particle and matrix // Phys. stat. sol. – 1983. – V.78. – Pp. 571–581.

29. Takahashi A., Ghoniem N.M. A computational method for dislocation–precipitate interaction // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2008. – V.56. – Pp. 1534–1553. Doi:10.1016/j.jmps.2007.08.002

30. Long N.J., Loretto M.H., Lloyd C.H. The deformation behaviour of single crystals of the Cu-Cr-$SiO_2$ system – I. Yield and pre-yield behaviour // Acta Metallurgica. – V. 28. – Pp. 709–719.

31. Halliday M.D., Beevers C.J. Some observations of grain-boundary sliding in aluminium bicrystals tested at constant strain rate and constant rate of stress increase // Journal of materials science. – 1971. – No.6. – Pp. 1254–1260.

32. Shermergor T.D. Teoriya uprugosti mikroneodnorodnykh sred. – M.: Nauka, 1977. – 400 s.

33. Ashraf F., Castelluccio G.M. A robust approach to parameterize dislocation glide energy barriers in FCC metals and alloys // J Mater Sci. – 2021. – V.56. – Pp. 16491–16509. Doi:10.1007/s10853-021-06376-1

34. Vekman A.V., Demyanov B.F., Shmakov I.A. Koeffitsienty zernogranichnoy samodiffuzii v alyuminii (kompyuternyy raschet) // Fizika. – 2013. – S.141–145. DOI:10.14258/izvasu(2013)1.2-28

35. Naydenkin E.V., Ivanov K.V., Rudenskii G.E. Evolution of structure and phase composition of aluminum

alloy under severe plastic deformation // Advanced Materials Research. – 2014. – V.880. – Pp.179–183. Doi:10.4028/www.scientific.net/AMR.880.179

36. Naydenkin E.V., Ivanov K.V. Characteristic features of structure evolution and phase composition of an ultrafine-grained Al–Mg–Li–Zr alloy produced by severe plastic deformation // Russian Physics Journal. – 2014. – V.56, no.9. – Pp.1025–1029. DOI:10.1007/s11182-014-0135-8

37. First-principles study of the nucleation and stability of ordered precipitates in ternary Al–Sc–Li alloys / Z. Mao [et al.] // Acta Materialia. – 2011. – V.59. – Pp. 3012–3023. Doi:10.1016/j.actamat.2011.01.041

38. Tian T., Wang X.F., Li W. Ab initio calculations on elastic properties in L12 structure $Al_3X$ and $X_3Al$-type (X=transition or main group metal) intermetallic compounds // Solid State Communications. – 2013. – V.156. – Pp. 69–75. Doi: 10.1016/j.ssc.2012.10.021

39. The influence of shearable and nonshearable precipitates on the Portevin-Le Chatelier behavior in precipitation hardening AlMgScZr alloys / H. Chen [et al.] // International Journal of Plasticity. – 2021. – V.147. – Pp.103–120. Doi:10.1016/j.ijplas.2021.103120

40. Osobennosti uprochneniya strukturirovannogo intensivnoy plasticheskoy deformatsiey splava Al−Cu−Zr / T.S. Orlova [i dr.] // Fizika tverdogo tela. – 2021. – T.63, vyp.10. – S.1572–1584. Doi:10.21883/FTT.2021.10.51408.104

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002.
**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
**Вклад авторов** равноценен.

**Funding.** The study was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of a state assignment in the laboratory of multilevel Modeling of Structural and functional materials, project No. FSNM-2024-0002.
**Conflict of interest.** The authors declare no conflict of interest.
**The authors' contributions** are equal.