УДК 539.3

# ДИФФУЗИОННОЕ ОБРАЗОВАНИЕ МИКРОТРЕЩИН

© А.В. Гришкина, А.В. Проскура

*Россия, Санкт-Петербург, СПбГУ, ГМТУ*

Grishkina A.V., Proshkura A.V. Diffusion formation of microcracks.The tension of a plane on infinity with inclusion is considered. The possibility of formation of a macrocrack with the help of diffusions under action of stress is studied.

Известно, что разрушение твердого тела под воздействием нагрузки или других причин представляет собой процесс, обычно начинающийся задолго до появления макротрещин. Так, обычно возникновению последних предшествует «микроразрыхление» материала – накопление в теле микропор различной природы. В реальном моно– или поликристалле микропоры образуются вследствие слияния вакансий, при пересечениях полос скольжения и в местах других препятствий скольжению [1]. Одним из известных таких механизмов образования пор является механизм, намеченный Стро [2] и многократно наблюдающийся в эксперименте [3]. При температурах больших $0{,}5T_{пл}$ существенно возрастает роль границ в образовании пор. При достаточно малых внешних силах и высоких температурах поры образуются почти исключительно на границах между зернами и их появление полностью обусловливается диффузионными процессами.

Влияние вакансий как дефектов решетки не описывается в рамках модели сплошной среды. Однако вопрос об образовании полости из вакансий, то есть превращении щели с взаимодействующими на атомном уровне берегами в пору является одним из важных вопросов механики деформируемой среды.

Естественный путь здесь состоит в использовании в качестве модели вакансии сингулярности типа «центра сжатия» в упругом сплошном теле. Действительно, используя хорошо известное решение задачи о сосредоточенной силе, можно построить такую сингулярность из трех взаимоперпендикулярных силовых диполей (а в плоской задаче – из двух). Хотя это – точечная сингулярность, ей можно естественным образом приписать малый характерный объем (объем, освобождаемый с образованием вакансии и приблизительно равный $\omega_0 \cong 10^{-23}$ см$^3$ [4]) и с достаточными основаниями приписать значения силам, образующим диполи. Энергия такой модели вакансии может быть вычислена по формуле Клапейрона. В качестве критерия образования поры или полости из совокупности вакансий на макроуровне (то есть критерия появления новых границ и краевых условий на уровне сплошной среды) будем считать такую область, при заполнении вакансиями которой суммарная энергия вакансий будет не меньше поверхностной энергии границ щели.

Рассмотрим простейший пример указанной задачи. Поликристалл моделируется упругой плоскостью с некоторыми эффективными свойствами, внутри которой находится изотропное упругое тонкое кольцо и круговое включение. Таким образом в простейшем случае выделяется в кристалле зерно с прилегающей к нему границей. На бесконечности задается постоянный тензор напряжения с компонентами $\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}$, и по теореме Эшелби такими же будут напряжения и внутри включения. В полярных координатах для круговой формы они приведены в [5].

Напомним, что времена релаксации в малых частях реального кристалла всегда значительно меньше таких же времен для системы в целом. Один кристаллит – чрезвычайно малая часть даже небольшого поликристалла (отношение линейных размеров ~ $10^4$ и больше), поэтому возмущения равновесия в кристаллите исчезают во много раз быстрее, чем в целом в поликристалле. Тем самым, рассматривая диффузию во включении, заведомо можно ограничиться стационарным уравнением $\nabla^2 c = 0$ с краевым условием. Тогда граничное условие для круга будет $\sigma_{NN} > 0 = \sigma_r$ и при этом условии для решения уравнения $\nabla^2 c = 0$ в круге $r \le r_0$ получим следующую формулу:

$$c - c_0 = \frac{c_0}{2\rho kT}\left(\sigma_r + \sigma_\theta + \frac{r^2}{r_0^2}\left(\sigma_r - \sigma_\theta\right)\right), \tag{1.1}$$

а для вектора потока вакансий отсюда имеем

$$\mathbf{I_c} = -D\nabla c = -\frac{Dc_0}{\rho kT}\frac{r}{r_0^2}\left(\left(\sigma_r - \sigma_\theta\right)\ \mathbf{e_r} + 2\tau_{r\theta}\mathbf{e}_\theta\right). \tag{1.2}$$

Пусть, например, $\sigma_y > 0$, $\sigma_x = \tau_{xy} = 0$ (одноосное растяжение в направлении оси Оу). Тогда поток вектора вакансий можно переписать в следующем виде:

$$\mathbf{I_c} = \sigma_y \frac{Dc_0}{\rho kT}\frac{r}{r_0^2}\left(\cos 2\theta \mathbf{e_r} - \sin 2\theta \mathbf{e}_\theta\right). \tag{1.3}$$

На границе области при $r = r_0$, в точке А $\theta = 0$ и нормальная составляющая вектора потока $\mathbf{I_c}\cdot\mathbf{e_r} > 0$ (а это означает, что поток вещества, имеющий противоположное направление, уносит атомы из этой точки), тогда как касательная составляющая в окрестности точки А меняет знак ($\mathbf{I_c}\cdot\mathbf{e}_\theta < 0$ при $\theta > 0$ и $\mathbf{I_c}\cdot\mathbf{e}_\theta > 0$ при $\theta < 0$), и поток вакансий в касательном направлении согласно (1.3) стремится в направлении точки А. В целом картина получается следующей: к точкам А и С

($\theta = \pi$) направлен поток вакансий и из окрестностей этих точек уходит вещество, что создает возможность образования поры; к точкам же B и D ($\theta = \pi/2$ и $\theta = 3\pi/2$) направлен поток вещества и оттуда уходят вакансии.

**Определение размеров микрополостей.** В теории дефектов в кристаллах уже давно обсуждается вопрос об образовании микрополостей за счет скопления вакансий – вакансионных дисков, призм и т. д. Из-за большого разброса оценок энергии образования дефекта (оценка энергии образования одной вакансии при надлежащей постановке – это проблема многих тел) сколько-нибудь существенного прогресса в этом вопросе нет, по крайней мере, если иметь в виду образование таких дефектов внутри кристалла или зерна поликристалла.

Несколько иначе обстоит дело с образованием (и расширением) полостей на границах зерен вследствие потока к ним (равно как и по границам) вакансий. Вычислим длину микрополости на основе полученного решения. В качестве критерия образования поры или полости на макроуровне из совокупности вакансий будем считать такую область сплошной среды, при заполнении вакансиями которой суммарная энергия вакансий будет не меньше поверхностной энергии границ щели. Математически это можно выразить в виде неравенства

$$\gamma l \le E_0 n, \tag{2.1}$$

где $\gamma$ – плотность поверхностной энергии, которую обычно считают константой материала, $l$ – длина образовавшейся микротрещины, $E_0$ – энергия образования одной вакансии, $n$ – количество вакансий, образующих данную микрополость. Количество вакансий, попавших в эту зону, определим по концентрации, вычисленной по формулам (1.1), (2.1). Для этого выразим объем вновь образовавшийся полости двумя разными путями:

1) считаем, что полость образована вакансиями и общий объем - это сумма объемов входящих туда вакансий, поэтому $V = n\omega_0$;

2) с другой стороны, $V = \dfrac{m}{\rho_0} = \dfrac{S_0}{\rho_0}\int\limits_{-\theta}^{\theta} c(s)ds$ .

Здесь $m$ – масса частиц, занимавших места образования вакансий, $\rho_0$ – плотность вакансий, $S_0$ – площадь поперечного сечения. Выразим из этих двух равенств приблизительное количество вакансий, входящих в микрополость: $n = \dfrac{S_0}{\rho_0\omega_0}\int\limits_{-\theta}^{\theta} c(s)ds$, (под $n$ понимается целая часть от выражения).

Исходя из непрерывности входящих в неравенство (2.1) функций, будем искать длину микрополости вдоль окружности при таком значении параметра, когда неравенство (2.1) переходит в равенство $\gamma l = E_0 n$. В результате получаем уравнение для отыскания длины образовавшейся микрополости. Используя симметричность решения, найдем длину разреза $l = 2\theta r_0$, где

$$\theta = \frac{E_0 S_0}{2\rho_0\omega_0\gamma}\int\limits_{-\theta}^{\theta} c(\theta)d\theta, \tag{2.2}$$

Концентрация $c(\theta)$ задается формулой (1.1) и при $r = r_0$ может быть представлена формулой: $c = c_0\left(1 + \dfrac{\sigma_r}{\rho kT}\right)$. Внесем это значение в (2.2) и проинтегрируем концентрацию по углу:

$$\int\limits_{-\theta}^{\theta} c(\theta)d\theta = c_0\left[2\theta + \frac{1}{\rho kT}\left(\left(\sigma_x + \sigma_y\right)\ \theta + \frac{\left(\sigma_x - \sigma_y\right)}{2}\sin 2\theta\right)\right].$$

Вычисленное значение подставим в (2.2) и найдем нелинейное уравнение для отыскания длины микротрещины:

$$\theta = \frac{E_0 S_0 c_0}{2\rho_0\omega_0\gamma}\times$$
$$\times\left\{2\theta + \frac{1}{\rho kT}\left[\left(\sigma_x + \sigma_y\right)\ \theta + \frac{\left(\sigma_x - \sigma_y\right)}{2}\sin 2\theta\right]\right\}. \tag{2.3}$$

Найдем нетривиальные (отличные от нуля) решения уравнения (2.3). При $\sigma_x = \sigma_y$ (равностороннее растяжение плоскости) таких решений у (2.3) нет. С учетом этого (2.3) можно переписать в виде

$$\theta = \bar{s}\sin 2\theta, \tag{2.4}$$

где $s_* = \dfrac{\sigma_x - \sigma_y}{4\rho kT\left[\dfrac{\rho_0\omega_0\gamma}{E_0 S_0 c_0} - 1 - \dfrac{\sigma_x + \sigma_y}{\rho kT}\right]}$.

Энергия одной вакансии $E_0$ в случае однородной нагрузки на бесконечности моделируется разностью энергий плоскости и плоскости с круглым отверстием, имеющих одинаковые краевые условия на бесконечности в отсутствие нормальных напряжений на контуре отверстия (здесь в первом приближении не учитывается энергия взаимодействия вакансии с другими вакансиями). Легко показать, что $E_0$ имеет следующее значение в плоском случае:

$$E_0 = \frac{\pi\delta^2}{8\mu}\left[\left(\sigma_x + \sigma_y\right)^2 + \chi\left(\sigma_y - \sigma_x\right)^2 + 4\chi\tau_{xy}^2\right]$$

Решение уравнения налагает естественные ограничения на величину приложенной нагрузки. Например, в случае одноосного растяжения $\sigma_y = p$, $\sigma_x = \tau_{xy} = 0$ оно приводит к выполнению неравенств:

$$1 + \frac{p}{\rho_0 kT} > \frac{\rho_0\omega\gamma}{E_0 s_0 c_0}; \qquad \frac{\rho_0\omega\gamma}{E_0 s_0 c_0} > 1 + \frac{p}{2\rho_0 kT}.$$

Тогда приближенно нижняя граница нагрузки, с которой начинают появляться микротрещины, с учетом (2.11) примет вид:

$$p > 2\sqrt[3]{\frac{\rho_0^2\omega_0\gamma\mu kT}{(1+\chi)\pi\delta^2 s_0 c_0}}.$$

Вычислим величину микрополости, считая, что толщина вдоль дуги окружности составляет слой из трех вакансий (полагается, что это наименьшая величина, которую нужно учитывать в рамках сплошной среды [6]). Поскольку локально межзеренная граница, как показано выше, является местом перенасыщенности вакансиями (концентрация вакансий на границе превосходит значение равновесной концентрации внутри зерна при заданной температуре), можно сослаться на хорошо известные экспериментальные данные о поведении вакансий в металлах с пересыщенным их содержанием [3]. Эти данные показывают, что «избыточные» вакансии не существуют в виде точечных дефектов, а образуют малые вакансионные, почти монослойные, кластеры размером от 2–3 нм до 10 нм.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Голанд А.* Современное изучение точечных дефектов в металлах // Точечные дефекты в твердых телах: Сб. М.: Мир, 1979. С. 243-375.
2. *Cottrell A.H.* Structural Process in Creep Symposium of the Iron and Steel Institute of Metals. 1961. V. 8. P.109.
3. *Хоникомб Р.* Пластическая деформация металлов. М.: Мир, 1972. 408 с.
4. *Лифшиц И.М.* Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 552 с.
5. *Мусхелишвили Н.И.* Некоторые основные задачи математической теории упругости. М.: Наука, 1966. 707 с.
6. *Herring C.* The Physics of Powder Metallurgy / Ed. W.E. Kingston. New York: McGraw-Hill, 1951.Chap. 8. P.143-179.

УДК 539.3

# ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ОТ НАПРЯЖЕНИЯ

© Н.А. Никольская, А.В. Проскура

*Россия, Санкт-Петербург, СПбГУ, ГМТУ*

Nikolskay N.A., Proshkura A.V. Association of a diffusion from stress. Because of thermodynamicses the association of diffusion from stress is deduced.

Прочность любой реальной конструкции сильно зависит от неоднородности и дефектов внутреннего строения материала. Именно из-за этого и прежде всего представление, что разрушение какой-либо части конструкции начинается сразу же по достижению какой-либо комбинацией компонент тензора напряжения критического значения, редко соответствует действительности. В реальности, разрушение практически всегда – процесс, развивающийся во времени, причем на разных этапах могут проявляться и доминировать различные конкретные механизмы разрушения. В настоящей работе рассматривается влияние диффузии на механизм разрушения и в первую очередь – при повышенных температурах и относительно небольших и медленно меняющихся нагрузках на тело, когда времена до разрушения сравнительно велики. В этих условиях подрастание имеющейся трещины обусловливается, главным образом, притоком в концевую зону вакансий и вообще микропор, частиц примесей, что существенно изменяет значение коэффициента интенсивности напряжений в вершине трещины, давая возможность постепенного распространения трещины задолго до того, как оно может стать спонтанным.

Обратим внимание и на то, что диффузионная проницаемость внутри кристалла, в свою очередь, тоже сильно зависит от напряженно-деформированного состояния. В основном эта зависимость связана с изменением объема элементарной ячейки, что создает более благоприятную возможность (при увеличении объема элементарной ячейки) проницаемости. При более же тонком уровне континуального описания свойств монокристаллов, учитывающем неоднородности основных полей в предельно малом допустимом для такого описания масштабе, деформационная анизотропия диффузии частиц достаточно малых размеров (например, вакансий) должна проявляться в сущности всегда.

Соотношение для локального уравнения баланса энтропии в предположении, что поле температуры в теле можно считать однородным, имеет вид [1]:

$$T\theta = -I_c \cdot \nabla\mu_c + \sigma^{ij}\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt}\,, \tag{1}$$

где $I_c$ - вектор потока диффузии, $\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt}$ - скорости деформации; произведение температуры на плотность рождения энтропии $T\theta$ есть удельная мощность диссипации, $\mu_c$ - химический потенциал, а $\sigma^{ij}$ - тензор напряжения.

В силу второго начала термодинамики $\theta$, а поэтому и удельная мощность диссипации $T\theta$ должны быть неотрицательными и равными нулю тогда и только тогда, когда процесс протекает вполне обратимо. Принимая во внимание известные свойства металлических тел, можно считать, что в формуле (1) указанному условию неотрицательности удовлетворяет не только вся правая часть, но и каждый член в отдельности. Действительно, теория о локальных реологических свойствах неупругих сред обычно проверяется на образцах, испытывающих макрооднородное напряженное состояние. Время полной разгрузки такого образца в любых условиях измеряется (имеет порядок) секундами. Однако распределение вакансий и междуузельных атомов в образце за это время существенно не может измениться. Поэтому в любом состоянии из-за разномасштабности событий во времени на основании второго начала термодинамики должно быть неотрицательно выражение $-I_c \cdot \nabla\mu_c \geq 0$ с оговоркой относительно