

УДК 539.21

ЗАРОЖДЕНИЕ МИКРОТРЕЩИН ПРИ ДВОЙНИКОВАНИИ В ОЦК И ГЦК МЕТАЛЛАХ

© В.А. Куранова, С.Н. Плужников, Ю.И. Тялин, В.А. Федоров

Kuranova V.A., Pluzhnikov S.N., Tyalin Y.I., Fedorov V.A. Micro-crack initiation under doubling in the FCC and BCC metals. The article analyses the behaviour of dislocation accumulations in the peaks and on the boundaries of doubles in the metals with FCC and BCC grids within the framework of the force and the heat-activated approaches to destruction initiation. The role is shown of the resilient constants of the materials in the process of destruction initiation.

Среди множества предложенных механизмов зарождения микротрещин [1] наибольший интерес представляют механизмы, основанные на образовании плоских дислокационных скоплений [2] при блокировке полос скольжения дефектами кристаллической решетки. Зарождение трещины в подобной ситуации наблюдалось в экспериментах [3] и происходит, как правило, при слиянии головных дислокаций скопления. При этом рассматриваются два подхода: силовой [4] и термоактивированный [5], а критические расстояния $d_{кр}$ между дислокациями, при которых возможно их объединение, составляют, соответственно, $d_{кр} = b$ и $d_{кр} = (5 - 7)b$ [6], где b – вектор Бюргерса дислокаций. В последнем случае слияние происходит за счет выброса парного перегиба на второй дислокации скопления. Энергия образования парного перегиба – это энергия активации зарождения микротрещины и для большинства металлов составляет $2 \div 4$ эВ [7]. Вероятность образования такой флуктуации мала, однако, этот потенциальный барьер может быть существенно понижен работой локальных напряжений. Вместе с тем, было показано [8], что учет реальной структуры скопления дислокаций, а также учет особенностей геометрического строения последних, например, расположение дислокаций в границах двойников [9], позволяет получить более реальные соотношения между величиной критических напряжений зарождения трещин и числом дислокаций в скоплениях.

Процесс деформирования металлов с ОЦК и ГЦК решетками часто осуществляется за счет пластической деформации двойникованием, которая может протекать в широком температурном интервале и при различных способах нагружения. Взаимосвязь двойникования и разрушения обсуждалась неоднократно [1], при этом, с одной стороны, отмечалась ответственность двойников за образование микротрещин, а с другой, – двойникованию приписывалось свойство быть дополнительным резервом пластичности материалов. Однако связь двойникования с процессом разрушения до настоящего времени остается неоднозначной, поэтому, в связи с изложенным выше, представляется полезным применить подход, развитый в [9], для оценки условий зарождения микротрещин на границах и в вершинах двойников в металлах с ОЦК и ГЦК решетками, а также выявить основные факторы, влияющие на условия зарождения трещин.

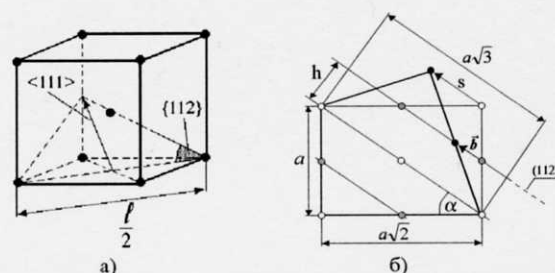


Рис. 1. Элементы двойникования в ОЦК решетке: а) плоскость двойникования и направление сдвига (l – ширина перегиба); б) геометрия двойникования: a – параметр решетки; b – вектор Бюргерса двойнивающей дислокации; h – межплоскостное расстояние; S – относительный сдвиг при двойниковании

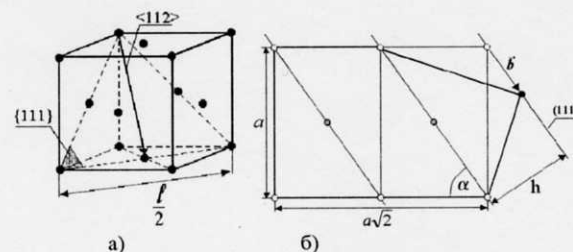


Рис. 2. Элементы двойникования в ГЦК решетке: а) плоскость двойникования и направление сдвига (l – ширина перегиба); б) геометрия двойникования: a – параметр решетки; b – вектор Бюргерса двойнивающей дислокации; h – межплоскостное расстояние

В настоящей работе рассмотрены условия зарождения микротрещин в вершинах заторможенной двойниковой границы и двойника в ряде ОЦК (Nb, V, W, Ta, α -Fe, Mo) и ГЦК (γ -Fe, Al, Cu, Pb, Ag, Ni) металлов.

Плоскостью двойникования в ОЦК металлах является $\{112\}$, а направлением двойнивающего сдвига – $\langle 111 \rangle$ (рис. 1, а). Геометрию процесса двойникования в ОЦК-решетке иллюстрирует схема на рис. 1, б. Плоскость рисунка совпадает с плоскостью $[\bar{1}\bar{1}0]$. Плоскости $\{112\}$ перпендикулярны плоскости чертежа, а межплоскостное расстояние между ними равно h . Величина вектора Бюргерса двойнивающей дислокации $b = a\sqrt{3}/6$.

Двойникование в ГЦК металлах наблюдается вдоль плотноупакованных плоскостей $\{111\}$, которые

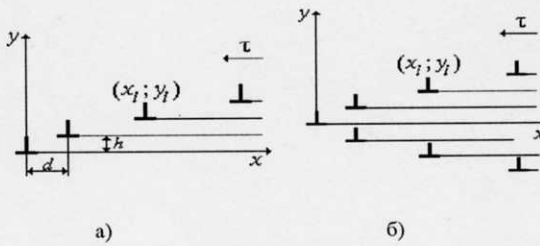


Рис. 3. Дислокационная модель двойниковой границы (а) и двойника (б)

представляют собой также плоскости скольжения во всех ГЦК металлах (рис. 2, а). Направление сдвига при двойниковании ГЦК металлов – $\langle 112 \rangle$. Элементы двойникования в ГЦК-решетке показаны на рис. 2, б. Плоскость рисунка совпадает с плоскостью $[1\bar{1}0]$. Величина вектора Бюргерса двойнивающей дислокации $b = a/\sqrt{6}$.

Граница двойника и двойник представлялись ступенчатыми скоплениями двойнивающих дислокаций (рис. 3, а-б). Каждая из дислокаций в границе смещена относительно соседней на расстояние, равное межплоскостному h . В двойнике дислокации располагались в границах симметрично относительно оси X , т. е. значения координат x_i для i -х дислокаций верхней и нижней границ двойника совпадали, а координаты y_i были равными по абсолютной величине, но противоположными по знаку. Головная дислокация считалась «запертой» в точке с координатами $x = y = 0$, а остальные дислокации скопления поджимались к ней внешним напряжением τ .

Для определения координат x_i и y_i дислокаций в границе двойника использовали уравнение их равновесного распределения в следующем виде

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n (x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} - \frac{\tau}{Db} = 0, \quad (1)$$

$i = 2, 3, \dots, n,$

где $D = \frac{G}{2\pi(1-\nu)}$; G – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона. Аналогичные уравнения для двойника отличались лишь дополнительными слагаемыми, учитывающими взаимодействие i -й дислокации с дислокациями нижней границы.

Уравнения равновесного распределения дислокаций решали численно методом последовательных приближений [12].

Рассматривались два критерия зарождения разрушения в вершине заторможенного дислокационного скопления – для силового и термоактивированного механизмов слияния головных дислокаций.

В первом варианте слияние головных дислокаций имеет место при их сближении до расстояния $d = 2,41h$. Именно при таком значении d сила отталкивания второй дислокации от дислокации-стопора достигает максимального значения (рис. 4). Поэтому для дальнейшего их сближения уже не требуется увеличения внешнего напряжения τ . Таким образом, под критическим значением напряжения $\tau_{кр}$ будем понимать напряже-

ние, обеспечивающее расстояние между головными дислокациями $d \leq 2,41h$.

На этом же рисунке приведена сила взаимодействия головных дислокаций и для случая их движения в одной плоскости скольжения. Видно, что в этом случае сила отталкивания дислокаций монотонно возрастает, и для сближения дислокаций до их слияния при $d = b$ (условие Стро) потребуются существенно большие напряжения, чем для дислокаций, движущихся в соседних плоскостях скольжения, как это имеет место в двойниковой границе или в двойнике (рис. 3, а-б).

При термоактивированном образовании микротрещины рассчитывается энергия активации ее зарождения. Последняя при $d < (5-7)b$ полностью определяется энергией образования парного перегиба, поскольку вскрытие зародыша трещины в ядре слившихся дислокаций и его подрастание требуют преодоления меньших энергетических барьеров.

Энергия образования парного перегиба на дислокации, ближайшей к дислокации-стополю, может быть представлена в следующем виде

$$W = W_1 + \Delta W - A, \quad (2)$$

где W_1 – энергия образования парного перегиба на одиночной дислокации; ΔW – изменение энергии взаимодействия краевого сегмента перегиба с дислокациями границы (кроме второй); A – работа внешнего напряжения.

Выражение для энергии парного перегиба на одиночной дислокации имеет вид [11]

$$W_1 = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \left\{ \left[\sqrt{l^2 + a^2} - l - a + l \cdot \ln \frac{2l}{\sqrt{l^2 + a^2} + l} \right] - (1-\nu) \left[l - \sqrt{l^2 + a^2} + a \cdot \ln \frac{(\sqrt{l^2 + a^2} + a)e\rho}{al} \right] \right\}, \quad (3)$$

где l – ширина перегиба, a – глубина перегиба, e – основание натурального логарифма, $\rho = b/2\alpha$, $\alpha = 4$.

Для определения входящей в (2) величины W рассмотрим выражение для удельной энергии взаимодействия прямолинейных параллельных дислокаций [11]

$$w_{ij} = -\frac{G(\bar{b}_i \cdot \bar{\xi})(\bar{b}_j \cdot \bar{\xi})}{2\pi} \ln \frac{R}{R_\alpha} - \frac{A}{b} [(\bar{b}_i \times \bar{\xi})(\bar{b}_j \times \bar{\xi})] \ln \frac{R}{R_\alpha} - \frac{A}{bR^2} [(\bar{b}_i \times \bar{\xi}) \cdot \bar{R}][(\bar{b}_j \times \bar{\xi}) \cdot \bar{R}] \quad (4)$$

где $\bar{b}_i$, $\bar{b}_j$ – векторы Бюргерса i -й и j -й дислокаций; $\bar{\xi}$ – единичный вектор дислокационной линии; R – расстояние между дислокациями; R_α – величина, обеспечивающая безразмерность аргумента логарифмической функции.

В нашем случае $b_i = b_j = b$. Тогда

$$(\bar{b}_i \times \bar{\xi})(\bar{b}_j \times \bar{\xi}) = b^2, \\ [(\bar{b}_i \times \bar{\xi}) \cdot \bar{R}][(\bar{b}_j \times \bar{\xi}) \cdot \bar{R}] = b^2(y_i - y_j)^2, \quad (5)$$

так что

$$w_{ij} = -Ab \left[\ln \frac{R}{R_0} + \frac{1}{R^2} (y_i - y_j)^2 \right]. \quad (6)$$

Используя (6), получим W для двойниковой границы

$$W = Lab \sum_{j=1, j \neq 2}^n \left(\ln \frac{R_H}{R_K} + \frac{y^2}{R_H^2} - \frac{y^2}{R_K^2} \right), \quad (7)$$

где $y = (j-2)h$; $R_H^2 = (d-x_j)^2 + y^2$; $R_K^2 = (d-x_j-a)^2 + y^2$.

Для двойника выражение (7) следует дополнить суммой энергий взаимодействия краевого сегмента с дислокациями двойниковой границы в нижней полуплоскости. А именно

$$W = Lab \sum_{j=2}^n \left(\ln \frac{R_H}{R_K} + \frac{y^2}{R_H^2} - \frac{y^2}{R_K^2} \right), \quad (8)$$

где $y = jh$.

Входящая в (2) работа внешнего напряжения равна

$$A = ab\tau. \quad (9)$$

Значения критических напряжений зарождения микротрещины при термоактивированном подходе оценивали следующим образом. Выбирали начальное значение d , при котором энергия парного перегиба, выбрасываемого до слияния с головной дислокацией, была заведомо больше критической. Затем, увеличивая внешнее напряжение, определяли расстояние d , для которого энергия образования парного перегиба совпадала с критическим значением. В качестве критической величины выбиралась энергия 1 эВ, сопоставимая с энергией образования вакансии в типичных ОЦК и ГЦК металлах.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В таблицах 1 и 2 приведены значения использованных в расчетах упругих констант материалов и геометрических величин, характеризующих параметры двойникования.

Типичные результаты двух вариантов расчета для Си приведены на рис. 5. Видно, что расстояние между головными дислокациями монотонно уменьшается с ростом внешнего напряжения. Характер зависимости d от τ близок к гиперболической. При приближении d к значению $2,41h$ наклон кривой немного увеличивается. Такое поведение кривой обусловлено, по-видимому, достаточно протяженным максимумом на кривой сил взаимодействия головных дислокаций (рис. 4).

Значение критических напряжений зависит от числа дислокаций n в границе (то же самое имеет место и для двойника). Если же перестроить зависимость d от τ в относительных единицах $\tau n/D$, то полученные точки, соответствующие различным n (рис. 5), с хорошей

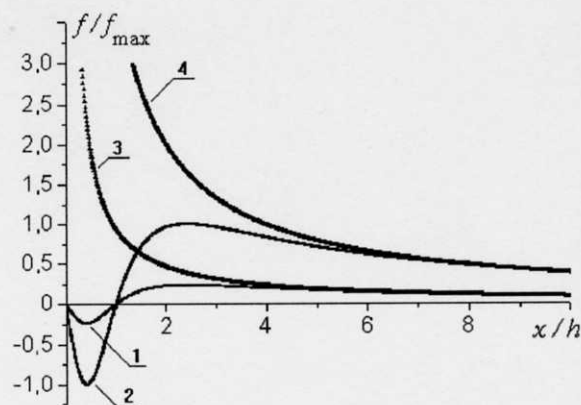


Рис. 4. Взаимодействие дислокаций, движущихся в параллельных плоскостях скольжения: 1, 3 – Cu; 2, 4 – α-Fe; 1, 2 – дислокации в плоскостях, удаленных друг от друга на расстояние h ; 3, 4 – дислокации в одной плоскости

Таблица 1

Параметры металлов с ОЦК решеткой

Металлы	Период решетки a , нм	Межплоскостное расстояние h , нм	Вектор Бюргерса b , нм	Ширина перегиба l , нм	Коэффициент Пуассона ν	Модуль сдвига G , ГПа
Нियोбий	0,330	0,135	0,095	0,933	0,38	37,3
Ванадий	0,304	0,124	0,088	0,860	0,36	47,6
Вольфрам	0,317	0,129	0,092	0,896	0,25	51,0
Тантал	0,331	0,135	0,096	0,936	0,35	70,0
α-железо	0,287	0,117	0,083	0,812	0,28	84,7
Хром	0,288	0,118	0,083	0,814	0,30	90,0
Молибден	0,315	0,129	0,091	0,891	0,30	122,0

Таблица 2

Параметры металлов с ГЦК решеткой

Металлы	Период решетки a , нм	Межплоскостное расстояние h , нм	Вектор Бюргерса b , нм	Ширина перегиба l , нм	Коэффициент Пуассона ν	Модуль сдвига G , ГПа
Свинец	0,495	0,286	0,202	0,700	0,44	5,7
Алюминий	0,405	0,234	0,165	0,573	0,34	27,2
Серебро	0,409	0,236	0,167	0,578	0,38	29,4
Медь	0,362	0,209	0,148	0,512	0,34	46,4
Никель	0,352	0,203	0,144	0,498	0,31	78,5
γ-железо	0,366	0,211	0,149	0,518	0,28	84,7

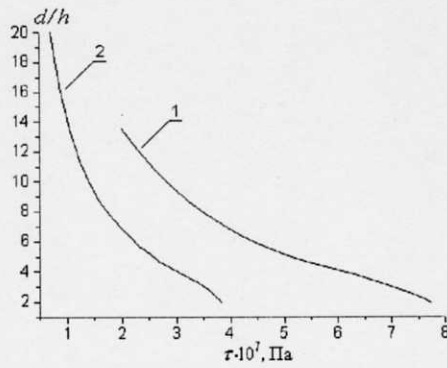


Рис. 5. Зависимость расстояния d между головными дислокациями в двойниковой границе от приложенного напряжения τ : 1) $n = 50$; 2) $n = 100$

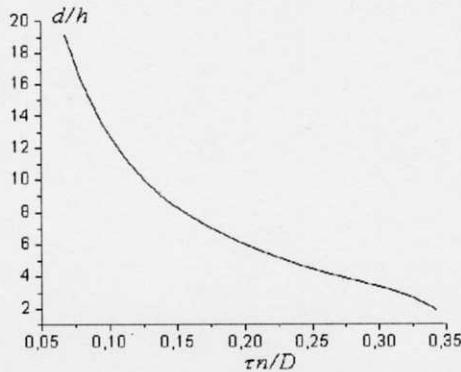


Рис. 6. Расстояние между головными дислокациями в зависимости от приложенного напряжения

точностью ложатся на одну кривую (рис. 6).

В относительных единицах исчезает так же различие аналогичных зависимостей от типа решетки. Последнее связано с тем, что в ОЦК и ГЦК решетках отношение модулей векторов Бюргерса и межплоскостных расстояний h одинаково. Действительно, модули векторов Бюргерса в данных решетках равны соответственно $a\sqrt{3}/6$ и $a/\sqrt{6}$, а межплоскостные расстояния $a/\sqrt{6}$ и $a/\sqrt{3}$.

Поэтому для каждого дефекта результаты могут быть представлены одной зависимостью, как для различных материалов, так и для различных решеток. На рис. 7 представлены данные для двойника, двойниковой границы и плоского скопления. Наименьшие критические напряжения зарождения $\tau_{кр}$ соответствуют двойнику. При прочих равных условиях для зарождения трещины в двойниковой границе с тем же числом дислокаций потребуются напряжения в 1,5 раза большие, чем в двойнике. Для плоского скопления критические значения в ~5 раз выше, чем при ступенчатом расположении дислокаций в соседних плоскостях скольжения.

Приведенные на рис. 7 зависимости достаточно хорошо (за исключением области, близкой к $\tau_{кр}$) аппроксимируются выражением

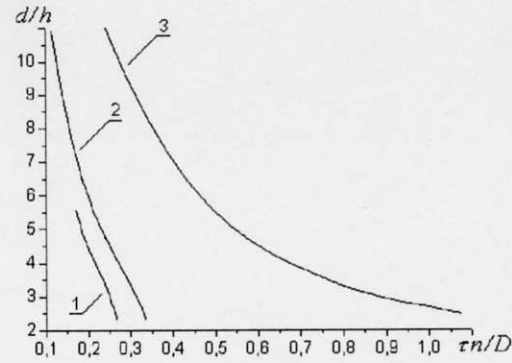


Рис. 7. Определение критических напряжений слияния дислокаций: 1) двойник; 2) граница; 3) плоское скопление

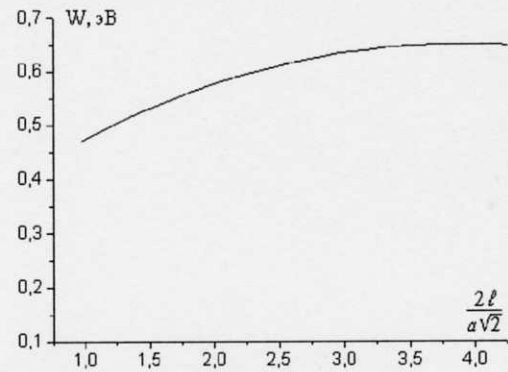


Рис. 8. Зависимость энергии перегиба W от его ширины l , где a – параметр решетки

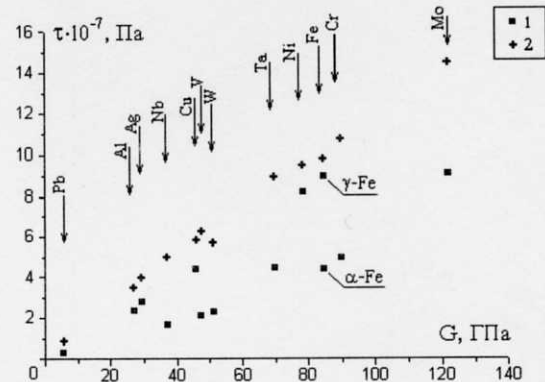


Рис. 9. Зависимость критических напряжений от модуля сдвига: 1) термоактивированное зарождение; 2) силовое зарождение

$$\frac{d}{h} = \frac{p}{\left(\frac{n\tau}{D}\right)^q},$$

где p и q – константы. Они равны для двойника $p = 0,286$, $q = 1,846$ и $p = 0,5$, $q = 1,53$ для границы двойника.

Аналогично определялись и критические напряжения при термоактивированном зарождении трещин по пересечению зависимостей $W(\tau)$ с прямой $W = 1$ эВ.

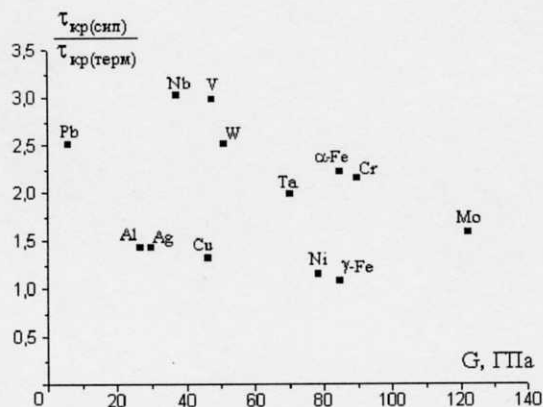


Рис. 10. Сравнение критических напряжений зарождения трещины в различных материалах

В предварительных расчетах выбиралась ширина двойного перегиба l . В [6] она принималась равной $2b$. Но в нашем случае $2b$ не кратно вектору трансляции вдоль линии дислокации. А именно ему, очевидно, и должна быть пропорциональна ширина перегиба l . На рис. 8 показано изменение энергии парного перегиба в зависимости от его ширины. В области приведенных значений l энергия перегиба меняется не более чем на 20 %. Поэтому в дальнейших расчетах l было выбрано одинаковым для обоих типов решеток и равным двум периодам трансляции в направлении $\langle 110 \rangle$, совпадающим с линией дислокации.

Найденные таким образом значения критических напряжений для рассмотренных в работе материалов приведены на рис. 9 и 10. Из рис. 9 видно, что значения критических напряжений увеличиваются с ростом модуля G . Причем критические напряжения, определяемые по силовому критерию, для всех материалов остаются выше напряжений, получающихся при термоактивированном подходе. Для некоторых материалов (Ni, γ -Fe) данные, полученные с помощью обоих подходов, практически совпадают, т. е. энергия зарождения микротрещины достаточно велика и приближается к 1 эВ при d , близком к $2,41h$.

Наоборот, в Nb и W более вероятно зарождение трещин по термоактивированному механизму. При этом критические напряжения могут быть в ~ 3 раза меньше, чем при силовом зарождении микротрещин.

ВЫВОДЫ

Выполнен сравнительный анализ условий зарождения микротрещин на двойниковых границах в ОЦК и

ГЦК металлах по силовому и термоактивированному механизмам зарождения микротрещин в предположении отсутствия скольжения. Показано, что для всех рассмотренных металлов зарождение разрушения происходит легче при термоактивированном слиянии головных дислокаций (энергия активации 1 эВ). Роль термических флуктуаций наиболее заметна в металлах с малыми значениями модуля сдвига, для которых величина критического расстояния между головными дислокациями может составлять $\approx (7-20)b$.

С повышением значения модуля сдвига для всех рассмотренных металлов отмечается сближение критических расстояний между головными дислокациями, определяемых по обоим механизмам. Очевидно, что характер зарождения разрушения может измениться при иных соотношениях геометрических параметров и упругих констант материалов.

Получены аналитические выражения условий зарождения микротрещин в ступенчатых скоплениях дислокаций, моделирующих границу двойника и двойник. Показано, что слияние дислокаций в двойнике происходит при меньших напряжениях, чем в изолированной границе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Финкель В.М. Физика разрушения. М.: Металлургия, 1970. 376 с.
2. Zener C. Fracturing of metals // Trans. Amer. Soc. Metals. 1948. № 40. P. 3-14.
3. Stroh A.N. The formation of cracks in plastic flow // Proc. Roy. Soc. 1955. V. A232. P. 548-560.
4. Stroh A.N. A theory of fracture of metals // Advances phys. 1957. V. 6. № 24. P. 418-428.
5. Владимиров В.И. Физическая природа разрушения металлов. М.: Металлургия, 1984. 275 с.
6. Владимиров В.И., Орлов А.Н. Энергия активации зарождения микротрещины в голове скопления дислокаций // ФТТ. 1965. Т. 11. Вып. 2. С. 370-378.
7. Владимиров В.И., Орлов А.Н. Термически активированное зарождение микротрещин в кристаллах // Проблемы прочности. 1971. № 2. С. 36-38.
8. Рыбин В.Н., Ханнанов Ш.Х. Учет реальной структуры скопления дислокаций в задаче о термоактивированном зарождении трещины // ФТТ. 1969. Т. 11. Вып. 4. С. 1048-1051.
9. Федоров В.А., Тялин Ю.И. О зарождении трещин на границах двойников в кальците // Кристаллография. 1981. Т. 26. Вып. 4. С. 775-781.
10. Федоров В.А., Финкель В.М., Плотников В.П., Тялин Ю.И., Куранова В.А. Механизм и кинетика зарождения упругих каналов Розе первого рода в кальците // Кристаллография. 1988. Т. 33. № 5. С. 1244-1250.
11. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
12. Ортега Дж., Рейнболт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975. 558 с.

Поступила в редакцию 24 августа 2001 г.