

Расчет пластифицирующего влияния растворенного в кристалле водорода на эволюцию пластической деформации у вершины трещины

© Д.Н. Карпинский, С.В. Санников

Научно-исследовательский институт механики и прикладной математики
Ростовского государственного университета,
344090 Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: karp@math.rsu.ru

(Поступила в Редакцию 13 апреля 2000 г.)

Дана оценка влияния межузельных атомов водорода на эволюцию пластической деформации в кристалле у вершины трещины растяжения с учетом газообмена на берегах трещины. Обнаружено, что при начальной концентрации не менее 10^{-4} пластифицирующее влияние растворенного водорода на основе выталкивания дислокации значительно и может по крайней мере частично объяснить явление пластификации. Что касается эволюции распределения атомов водорода, то обнаружено, что при концентрации менее $5 \cdot 10^{-4}$ происходит монотонный сток растворенных атомов водорода в полость трещины, а при больших концентрациях возникает режим периодического изменения концентрации примеси у берегов трещины: полный сток сменяется накоплением водорода, соответствующим "запиранию" стока давлением газа. Численные расчеты выполнены для кристалла α -Ge.

В последние годы экспериментально установлено явление пластификации материала в среде водорода (см., например, [1–6]). В связи с этим представляет значительный интерес объяснение этого эффекта с позиции энергетической выгоды при взаимодействии межузельных атомов водорода с дислокацией [7]. Известно [1–6], что процессы пластификации наиболее интенсивны в окрестности вершины трещины. Однако, как указано в [7], в настоящее время нет полной ясности об основной причине этого явления: либо основной вклад вносит механизм выталкивания дислокации межузельным атомом водорода, либо преобладает влияние молекулярного давления в полости трещины. Учет последнего механизма при расчете эволюции пластической деформации у вершины трещины в [8] показал, что незначительное увеличение начальной концентрации приводит к изменению режима деформирования кристалла с трещиной от "пассивного" (миграция точечных дефектов слабо влияет на условия деформирования) к "активному", при котором давление газа в полости трещины вызывает неограниченное нагружение в модельном расчете, которое на опыте соответствует росту трещины.

Цель настоящей работы заключается в расчете эволюции пластической деформации у вершины трещины в негидридообразующем кристалле под действием растягивающей механической нагрузки с учетом пластифицирующего действия растворенных в кристалле атомов водорода и газообмена на берегах трещины.

Проблема миграции точечных дефектов в нагруженном образце, содержащем трещины и поры, давно привлекает внимание исследователей (см., например, литературные ссылки в [9,10]). Исследование эволюции концентрации $c(r, t)$ межузельных атомов примеси

и соотношения вкладов дислокационных механизмов в процесс переноса примесных межузельных атомов выполнено в [8]. В этой работе рассмотрена трещина длиной $2l$, расположенная в плоскости скола (010) (вдоль отрицательной полуоси Ox) бесконечного кристалла с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой. К плоскостям кристалла $y = \pm\infty$ приложено однородное напряжение растяжения $\sigma_{yy}(t) = \sigma'_a(t)$ (мода I), монотонно возрастающее до некоторого значения σ_a , достаточного для пластического деформирования кристалла, но недостаточного для роста трещины. До начала нагружения в кристалле равномерно распределены межузельные атомы водорода с концентрацией c_0 .

Аналогично [8–11] будем предполагать, что пластическая деформация ОЦК кристалла осуществляется путем перемещения полных дислокаций с вектором Бюргера $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ вдоль плоскостей легкого скольжения $\{100\}$. Плоскости $\{110\}$, пересекаясь с плоскостью Oxy , образуют на ней два семейства линий скольжения, на которых равномерно распределены источники дислокаций, испускающие прямоугольные петли, лежащие в плоскостях легкого скольжения. Расчет эволюции пластической деформации в отсутствие точечных дефектов выполнен в [11], где скорость пластической деформации сдвига $\dot{\epsilon}$ у вершины трещины вычислялась по формулам

$$\frac{d\epsilon^j(r, t)}{dt} = \dot{\epsilon}_0 \exp \left\{ -\frac{U_0 \{1 - [\sigma_e^j(r, t)/\tau_0]^{1/2}\}}{k_B T(r, t)} \right\} \times \text{sign } \sigma_e^j(r, t), \quad (1)$$

где T — температура; k_B — постоянная Больцмана; $\dot{\epsilon}_0$, τ_0 , U_0 — постоянные (U_0 — энергия активации сколь-

жения дислокации), а

$$\sigma_e^j(r, t) = \begin{cases} \sigma^j(r, t) - \sigma_s(r, t) \text{sign } \sigma^j(r, t), & \text{если } |\sigma^j(r, t)| > |\sigma_s(r, t)| \\ 0, & \text{если } |\sigma^j(r, t)| < |\sigma_s(r, t)| \end{cases} \quad (2)$$

эффективное касательное напряжение в плоскостях легкого скольжения. В (2)

$$\sigma^j(r, t) = \sigma_j^c(r, t) + \sigma^l(r, t) \quad (3)$$

сдвиговое напряжение, характеризующее упругое поле в плоскостях легкого скольжения вблизи вершины трещины, а

$$\sigma_s(r, t) = \sigma_0 + \sigma_f(r, t) \quad (4)$$

напряжение, препятствующее пластическому сдвигу за счет трения решетки σ_0 и локального упрочнения материала σ_f , вычисляемого по формуле

$$\sigma_f(r, t) = \sigma_1 \left[\sum_{j=1}^2 |\varepsilon^j(r, t)| \right]^m, \quad (5)$$

где σ_1 и m — постоянные. В (3) σ_j^c определяется формулами Вестергарда для компонент упругого поля у вершины трещины, а величина

$$\sigma^l(r, t) = \sum_{k=1}^2 \int_{D_k} \sigma^k(r, r') \Delta \rho_k(r', t) dr' \quad (6)$$

поле напряжений, создаваемое у вершины трещины дислокациями, скользящими по двум легким плоскостям скольжения; D_k — соответствующая каждому типу скольжения пластическая зона ($k = 1, 2$); $\sigma^k(r, r')$ — сдвиговое напряжение в плоскостях легкого скольжения в бесконечной упругой среде с полубесконечным разрезом, содержащей краевую дислокацию, отстоящую от вершины разреза на расстоянии r' , а плотность эффективных дислокаций $\Delta \rho_k$ в точке r' определяется формулой

$$\Delta \rho_k(r', t) = -\frac{1}{b} \frac{d}{d\xi_k} \varepsilon^k(r', t). \quad (7)$$

Дополним теперь (1)–(7), внося изменение в (4), учитывающее пластифицирующее воздействие растворенного водорода на эволюцию распределения дислокаций у вершины трещины. Заменим (4) σ_0 на $\sigma'_0 = \sigma_0 + \sigma^\tau$, где [7]

$$\sigma^\tau = \frac{2\pi\beta^2 c_0}{3\sqrt{3}r_0 b k_B T}, \quad \beta = \frac{\mu b(1+\nu)}{3\pi(1-\nu)} \delta v. \quad (8)$$

В (8) r_0 — радиус ядра дислокации, μ — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, δv — изменение объема кристалла из-за несоответствия размеров тетрапор и радиуса атома водорода.

В [9,10] исследованы три механизма переноса межузельных атомов водорода у вершины трещины: 1) решеточная диффузия; 2) дислокационное ”выметание” точечных дефектов; 3) перенос примесных атомов в ядрах дислокаций, движущихся в пластической зоне. Результаты расчетов [9,10] показали, что первый механизм переноса межузельных атомов (решеточная диффузия) вносит основной вклад в поток примесных атомов. В дальнейшем будем учитывать лишь первый механизм переноса, который обусловлен гидростатическим напряжением вблизи вершины трещины, совместно создаваемым трещиной и дислокациями в пластической зоне. Влияние этого процесса переноса на эволюцию пластической деформации у вершины трещины будет учтено в расчете путем замены c_0 на $c(r, t)$ в (8).

Рассмотрим теперь основные уравнения механо-диффузии (см., например, [12])

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla J, \quad J = \frac{Dc}{k_B T} \nabla \mu, \quad (9)$$

где D — коэффициент диффузии, для слабого раствора примесей в упругом поле напряжений химический потенциал $\mu = k_B T \ln(c/c_0) - V(r, t)$. Здесь $V(r, t) = \Delta v \sigma_{ii}$, Δv — изменение объема ячейки кристаллической решетки за счет содержащегося в ней межузельного атома, σ_{ii} — шаровая компонента тензора напряжения. Из (9) получаем (учитывая, что $\nabla^2 V = 0$)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c(r, t) + \frac{D}{k_B T} \nabla c(r, t) \nabla V(r, t). \quad (10)$$

Начальные условия выбраны в виде $c = c_0$ при $t = 0$, а граничные условия — при $y = 0$ [13]

$$-\frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad \text{при } x > 0;$$

$$D \frac{\partial c}{\partial y} = k_m (c^2 - (\Gamma')^{-1} P(t)) \quad \text{при } x < 0, \quad (11)$$

где k_m — постоянная массообмена на границе газовой и твердой фаз, $P(t)$ — давление газа в полости трещины, Γ' — модифицированная постоянная Генри [14]

$$\Gamma'(T) = T(\Delta v)^2 \left(\frac{mT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp(\psi_H/T), \quad (12)$$

m — масса молекулы, \hbar — постоянная Планка, ψ_H — энергия растворения, затрачиваемая на разделение молекулы на два атома и последующее внедрение этих атомов в твердый раствор, и $c = c_0$ при $|r|^2 = x^2 + y^2 \rightarrow \infty$.

Обсудим теперь подробнее выбор граничных условий при $y = 0$, $x < 0$. Предположим, что газ идеальный, тогда его давление $P(t)$ внутри трещины равно [6]

$$P(t) = (\sigma'_a(t)/2) \left[\left(\frac{1 + 4\mu k_B T N(t)}{\pi(1-\nu)l^2 \sigma_a'^2(t)} \right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (13)$$

В отличие от [8] будем считать, что основной поток газа, растворенного в объеме кристалла, попадает в полость

трещины через ее берега. В этом случае количество молекул водорода в полости трещины $N(t) = \int_0^t J(t') dt'$,

где $J(t) = k_m \int_{-\infty}^0 [c^2(x, 0, t) - (\Gamma')^{-1} P(t)] dx$ — поток атомов газа через берега трещины.

Метод решения (1)–(13) заключался в последовательном решении систем уравнений (1)–(8) и (10)–(13) на каждом шаге по времени. Метод решения (1)–(8) аналогичен [11], а (10)–(13) — [8],

Расчет эволюции пластической деформации позволил оценить эволюцию коэффициента интенсивности напряжения (КИН) в нагруженном кристалле. Предполагалось, что для КИН трещины имеет место представление [11]

$$K(t) = K^c(t) + K^p(t), \quad (14)$$

где $K^c(t) = (\sigma'_a(t) + P(t))\sqrt{\pi l}$ — слагаемое КИН трещины, не учитывающее влияния на нее пластической деформации, а $K^p(t)$ определяется исключительно этим влиянием [11]

$$K^p(t) = \sum_{k=1}^2 \int_{D_k} \hat{K}^p(z'_k) \Delta \rho_k(z', t) dz', \quad (15)$$

где z' — координата в комплексной плоскости.

В нашем случае для $\hat{K}^p = \hat{K}_I^p - i\hat{K}_{II}^p$ используем формулу [11]

$$\hat{K}_I^p(z', k) - i\hat{K}_{II}^p(z', k) = A/\sqrt{\pi} [J_1 + iJ_2(-1)^k], \quad (16)$$

где

$$J_1 = -\pi [1/\sqrt{z'} + 3/2\sqrt{z'} - z'/2(z')^{3/2}],$$

$$J_2 = -\pi [1/\sqrt{z'} + 1/2\sqrt{z'} + z'/2(z')^{3/2}].$$

Расчеты выполнены для кристалла α -Fe при следующих значениях постоянных: $2l = 10^{-3}$ м, $\dot{\epsilon}_0 = 10^{11}$ с $^{-1}$, $T_0 = 300$ К, $b = 2.48 \cdot 10^{-4}$ мкм, $D = 4.88 \cdot 10^{-12}$ м $^2 \cdot$ с $^{-1}$, $\psi_H = 48.8$ кДж/мол, $E_B = 0.6$ эВ, $k_m = 4.88 \cdot 10^{-9}$ м \cdot с $^{-1}$ [8]; $r_0 = 2b$, $\mu = 83$ ГПа, $\nu = 0.28$, $\delta\nu = 3 \cdot 10^{-30}$ м 3 [7].

Скорость нагружения кристалла выбиралась так, чтобы максимальная скорость деформации в пластической зоне была равна 0.1 с $^{-1}$. Напряжения, создаваемые трещиной в кристалле, обусловлены совместным действием внешней нагрузки $\sigma'_a(t)$ и давлением газа $P(t)$ в ее полости. После достижения $\sigma'_a(t) + P(t)$ своего верхнего предела $\sigma_a = 5$ МПа в дальнейшем величина $\sigma'_a(t)$ оставалась постоянной и рост нагрузки в кристалле с трещиной обеспечивался лишь увеличением давления газа $P(t)$ за счет его стекания в полость трещины. Вычислительный процесс заканчивался при уменьшении эффективного напряжения $\sigma'_e(r, t)$ в (2) до нуля. Расчеты в рамках предложенной модели показали, что при начальной концентрации $c_0 < 10^{-3}$ давление газообразного водорода в полости трещины $P(t)$ не превышает 0.05 МПа к моменту времени, когда $\sigma'_e(r, t)$ полностью релаксирует. При $c_0 \geq 10^{-3}$ давление $P(t)$

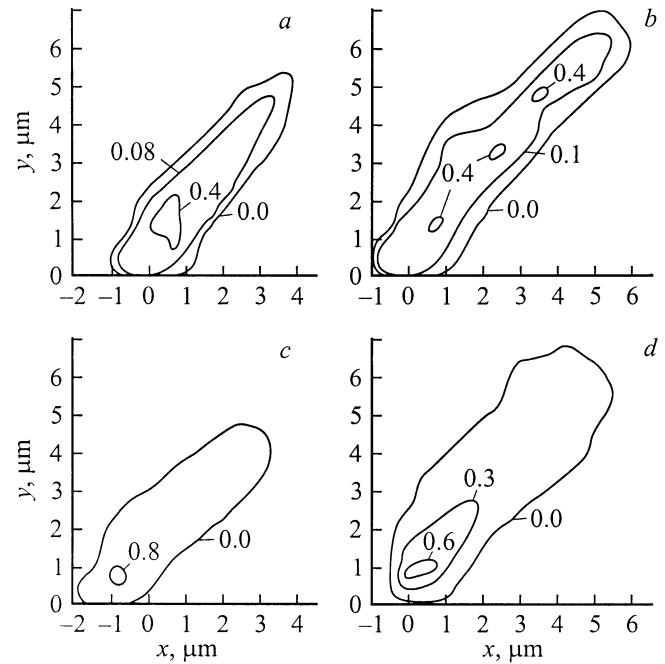


Рис. 1. Распределения пластической деформации $\varepsilon(r)$ (в %) у вершины трещины (*a, c* — без учета пластифицирующего влияния водорода; *b, d* — с его учетом) после окончания процесса релаксации напряжений в моменты времени *a* — $t = 5.15$ с, *b* — 9.18 с, *c* — 5 с, *d* — 3.94 с при начальной концентрации междузельных примесных атомов водорода $c_0 = 10^{-4}$ (*a, b*); $c_0 = 5 \cdot 10^{-4}$ (*c, d*).

столь значительно, что релаксация напряжений, обусловленная размножением и перемещением дислокаций в пластической зоне, не успевает подавить рост $\sigma'_e(r, t)$ за счет ее компоненты $\sigma'_j(r, t)$ в (3) прежде, чем пластическая зона выйдет за рамки расчетной сетки. В отличие от [9,10] данная модель учитывает "обратную связь", которая обеспечивает действие пластической деформации на трещину посредством заполнения ее полости газом в режиме, регулируемом той же эволюцией пластической деформации. В [8] уже использована подобная "обратная связь", но в данной работе она уточнена поправкой (8).

Обсудим теперь особенности пластифицирующего влияния растворенного водорода на эволюцию пластической деформации у вершины трещины при $c_0 < 10^{-3}$. Важно отметить, что влияние растворенного водорода на эволюцию пластической деформации у вершины трещины обусловлено совместным действием двух механизмов: 1) повышением подвижности дислокаций за счет пластифицирующего действия растворенного водорода, усиливающего процесс развития пластической деформации, что приводит к дополнительной релаксации напряжений у вершины; 2) уменьшением стока водорода в полость трещины за счет решеточной диффузии, которое обусловлено снижением гидростатической компоненты эффективных напряжений под влиянием дополнительной релаксации, упомянутой в п. 1.

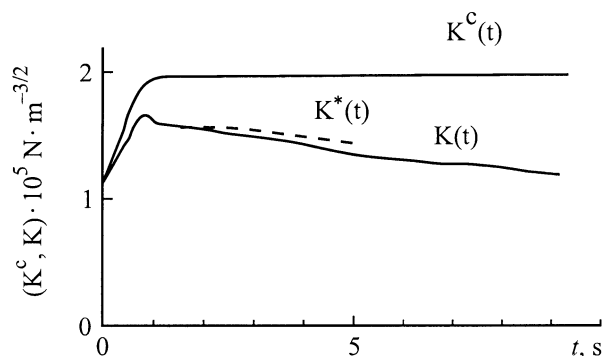


Рис. 2. Временная зависимость коэффициентов интенсивности напряжения в $(N \cdot m^{-3/2})$ для трещины растяжения в ОЦК кристалле: $K^c(t)$ — для хрупкой трещины в кристалле, полость которой заполнена газом, находящемся в равновесии с растворенным водородом; $K^*(t)$ — для газонаполненной трещины с учетом пластической зоны и без учета пластифицирующего действия растворенного водорода (пунктир); $K(t)$ — то же, что $K^*(t)$, но с учетом пластифицирующей поправки (8).

На рис. 1 показаны распределения пластической деформации у вершины трещины при двух значениях начальной концентрации c_0 межузельных атомов водорода в моменты времени, соответствующие остановке эволюции пластической деформации. Из этих рисунков видно увеличение размеров пластической области при учете поправки (8) (рис. 1, *b, d*) по сравнению с ее отсутствием (рис. 1, *a, c*). При этом важно отметить, что в обоих случаях учтен сток водорода в полость трещины. Другими словами, расчет показал, что пластифицирующее влияние растворенного водорода на основе выталкивания дислокации [7] значительно и может по крайней мере частично объяснить явление пластификации [1–6]. Следует упомянуть также о том, что максимальная деформация в пластической зоне одинакова при учете водородной пластификации и в ее отсутствие.

Теперь сравним эволюции КИН в кристалле с растворенным газом. На рис. 2 показаны временные зависимости КИН при расчетах: 1) для хрупкой трещины в кристалле $K^c(t)$, полость которой заполнена газом, находящемся в равновесии с растворенным водородом; 2) газонаполненной трещины с учетом пластической зоны $K^*(t)$ и без учета пластифицирующего действия растворенного водорода; 3) то же, что и 2), но с учетом пластифицирующей поправки (8) $K(t)$. Обрыв кривых на рис. 2 означает завершение процесса релаксации напряжений у вершины трещины. Из этого рисунка видно, что временная зависимость КИН хрупкой трещины $K^c(t)$ практически не меняется после достижения внешней нагрузкой величины σ_a в момент времени $t = 0.78$ с, несмотря на продолжающийся сток водорода в полость трещины. Из этого же рисунка видно, что $K(t)$ из-за действия пластифицирующей поправки (8) меньше $K^*(t)$ почти на 10%.

В заключение кратко упомянем о результатах расчета эволюции концентрации растворенного водорода у вершины трещины. При $c_0 < 5 \cdot 10^{-4}$ расчеты показали монотонное стекание водорода в полость трещины, а при больших концентрациях обнаружен режим периодического изменения концентрации примеси у берегов трещины: полный сток сменяется накоплением водорода, соответствующим ”запиранию” стока давлением газа. В связи с этим результатом отметим, что в расчетах [15] принята постоянная нулевая концентрация водорода на берегах трещины, но такой выбор граничного условия не подтверждается в данной работе.

Список литературы

- [1] T. Tabata, H.K. Birnbaum. Scripta Met. **18**, 231 (1984).
- [2] I.M. Robertson, H.K. Birnbaum. Acta Met. **34**, 2, 353 (1986).
- [3] G.M. Bond, I.M. Robertson, H.K. Birnbaum. Acta Met. **35**, 10, 2289 (1987).
- [4] D.S. Shin, I.M. Robertson, H.K. Birnbaum. Acta Met. **36**, 1, 111 (1988).
- [5] G.M. Bond, I.M. Robertson, H.K. Birnbaum. Acta Met. **36**, 8, 2193 (1988).
- [6] Л.В. Спивак, М.Я. Кац, Н.Е. Скрябина. ФММ **6**, 142 (1991).
- [7] Н.М. Власов, В.А. Зазноба. ФТТ **41**, 3, 451 (1999).
- [8] Д.Н. Карпинский, С.В. Санников. ФММ **85**, 2, 121 (1998).
- [9] Д.Н. Карпинский, С.В. Санников. ФТТ **37**, 6, 1713 (1995).
- [10] Д.Н. Карпинский, С.В. Санников. ФТТ **39**, 9, 1580 (1997).
- [11] Д.Н. Карпинский, С.В. Санников. ПМТФ **34**, 3, 154 (1993).
- [12] С.Д. Герцрикен, И.Я. Дехтяр. Диффузия в металлах и сплавах в твердой фазе. Физматгиз, М. (1960). 564 с.
- [13] Л.Л. Кунин, А.М. Головин, Ю.Н. Суровой, В.М. Хохрин. Проблемы дегазации металлов (Феноменологическая теория). Наука, М. (1972). 372 с.
- [14] Э.П. Фельдман, В.М. Юрченко, В.А. Стрельцов, Е.В. Володарская. ФТТ **34**, 2, 616 (1992).
- [15] Р.В. Гольдштейн, В.М. Ентов, Б.Р. Павловский. ДАН СССР **237**, 4, 828 (1977).