

УДК 539.2.219.3:539.4

©1995

ВЛИЯНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ПЕРЕМЕЩЕНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ У ВЕРШИНЫ ТРЕЩИНЫ

Д.Н.Карпинский, С.В.Санников

Научно-исследовательский институт механики и прикладной математики при Ростовском государственном университете, Ростов-на-Дону
(Поступила в Редакцию 1 сентября 1994 г.
В окончательной редакции 31 октября 1994 г.)

Произведен расчет эволюции распределения пластической деформации у вершины трещины в кристалле, нагруженном внешним растягивающим напряжением. В расчетах предполагалось, что пластическая деформация осуществляется путем движения дислокаций в упругом поле трещины. Оценено действие пластической деформации на потоки межузельных примесных атомов у вершины трещины. Потоки точечных дефектов определяются 1) гидростатической компонентой упругого напряжения у вершины трещины, которая обусловлена наложением упругих полей трещины и дислокаций, 2) упругим полем движущихся дислокаций (выметание межузельных примесных атомов), 3) переносом дислокациями точечных дефектов, накопившихся в их ядрах. Вычислены вклады каждого из механизмов переноса точечных дефектов к вершине трещины. Численные расчеты выполнены для межузельных атомов водорода, растворенных в кристалле α -Fe.

Экспериментальные исследования показали (см., например, [1-4]), что растворенные в твердых телах межузельные примесные атомы, такие как водород, могут накапливаться у вершины трещины и способствовать ее росту. В [5-6] получено, что накопление примесных атомов энергетически выгодно в случае моды I (трещина растяжения), а в [7-8] рассчитан поток примесных атомов в вершину трещины мод I и II. Исследования [5-8] предполагали упругую дисторсию кристаллической решетки вокруг примесного атома в виде дилатации сферической симметрии, а в [9] эти расчеты обобщены на случай тетрагональной дисторсии, как это происходит при наличии межузельного атома в ОПК решетке.

Остановимся подробнее на постановке задачи и результатах, полученных в [7-9]. В этих работах предполагалось, что поток примесных атомов \mathbf{J} в вершину трещины определяется формулой

$$\mathbf{J} = -Dc/(k_B T) \text{grad } U - D \text{grad } c \quad (1)$$

В (1) D — коэффициент диффузии примесных атомов, $c = c(\mathbf{r}, t)$ — концентрация примесных атомов в данной точке образца \mathbf{r} и момент времени t , k_B — постоянная Больцмана, T — температура, U — упругая

энергия взаимодействия примесного атома с полем трещины. Первое слагаемое в (I) связано с диффузией примеси под действием гидростатических напряжений у вершины трещины, а второе — с диффузией под действием градиента концентрации примесных атомов. На начальной стадии процесса диффузии $|\nabla c/c| \ll |\nabla U/k_B T|$ и $c = c_0$, тогда поток примесных атомов определяется $\mathbf{J} = c_0 \mathbf{v}$, где \mathbf{v} — скорость перемещения атомов примеси определяется формулой Эйнштейна $v_i = D/k_B T F_i$, где коэффициент диффузии $D = D_0 \exp(-Q/k_B T)$ [1], $F_i = -\nabla U$ — движущая сила, действующая на примесный атом за счет неоднородности гидростатической компоненты упругого поля трещины, $U = -\sum_{m,n} \sigma_{mn} \varepsilon_{mn} a^3$, σ_{mn} — компоненты тензора напряжения, создаваемого трещиной в нагруженном образце, ε_{mn} — компоненты тензора деформации элементарной ячейки, содержащей межузельный атом, a — постоянная решетки. Тогда в общем случае [9]

$$F^j = -\nabla U^j = -K_j a^3 / (8\pi)^{1/2} r^{3/2} \left\{ \left(\sum_{m=1}^3 \varepsilon_m \Theta_m^j \right) \mathbf{u}_r - 2 \left(\sum_{m=1}^3 \varepsilon_m \partial \Theta_m^j / \partial \Theta \right) \mathbf{u}_\Theta \right\}, \quad (2)$$

где K_j — коэффициент интенсивности напряжения (КИН) трещины, соответствующий моде j ($j = I, II, III$), ε_m — главные деформации элементарной ячейки, содержащей межузельный атом, $\Theta_m^j(\Theta)$ — функция угловой зависимости и напряжений Вестергарда, соответствующих моде j [9], \mathbf{u}_r и \mathbf{u}_Θ — единичные векторы в радиальном и азимутальном направлениях полярной системы координат с началом в вершине трещины. В частном случае сферической дисторсии решетки вокруг межузельного атома в (2) полагают [7-8] $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$ и $\Theta_1^j = \Theta_2^j = \Theta_3^j = 2/3(1 + \nu) \cos(\Theta/2)$ [10]. Расчеты в [8] показали, что количество примесных атомов, которые накапливаются у вершины трещины из-за упругого взаимодействия, пропорционально параметру $c_0 (DK_1 t / k_B T)^{4/5}$, где c_0 — начальная концентрация атомов водорода, t — время накопления примесных атомов.

В [11-15] созданы первые модели роста трещины в нагруженном образце, содержащем растворенный в нем водород. Эти модели основаны на предположении, что перед вершиной магистральной трещины, в области максимального гидростатического растяжения накапливался водород. Когда концентрация водорода на этом участке достигала критической величины, то в нем образовывалась микротрещина, которая прорастала навстречу магистральной трещине. В [16-18] рассчитана эволюция распределения атомов водорода у вершины трещины, гидростатическая компонента упругого напряжения которой аппроксимировалась простым законом. Решение одномерного уравнения диффузии в упругом поле, обусловленном совместным действием упругого поля затупленной трещины и пластической деформации у ее вершины, получено в [16-18] в предположении приближенного распределения всестороннего растяжения, правдоподобно описывающего напряженное

состояние на линии продолжения трещины. Таким образом, в [11-18] делались попытки создать более реалистичную модель процесса переноса примесных атомов у вершины трещины по сравнению с [5-9] за счет учета образования пластической зоны и затупления вершины. Подчеркнем, что в [11-18] предполагался перенос водорода к участку его накопления за счет решеточной или зернограницной диффузии.

В то же время результаты опытов [19] показали необходимость учета влияния движения дислокаций на перенос атомов водорода в пределах пластической зоны (дислокационное «выметание» точечных дефектов). Подробное обсуждение результатов [19] в [20-21] показало, что механизм дислокационного «выметания» может успешно конкурировать с диффузионными механизмами переноса точечных дефектов.

В [21] предложена простая оценка скорости «выметания» v_s атомов водорода дислокациями в пластической зоне у вершины трещины

$$v_s = (D/k_B T) \mathbf{F}, \quad |\mathbf{F}| = \tau b / (1/b) = \tau b^2, \quad (3)$$

где \mathbf{F} — эффективная движущая сила, действующая на атом водорода со стороны дислокации, величина \mathbf{F} определяется отношением силы, действующей на единицу длины дислокации к числу атомов водорода на единицу ее длины (предполагается, что при комнатной температуре один атом водорода находится на каждом атомном участке вдоль линии дислокации), b — величина вектора Бюргерса дислокации. Далее в [21] предполагается оценка сдвигового напряжения $\tau = \sigma_{yy}(r)/2$, где σ_{yy} — растягивающее напряжение как функция расстояния от вершины трещины r . Для σ_{yy} предполагалась простая оценка [22]

$$\sigma_{yy}(r) = (2/\sqrt{3}) \sigma_{ys} [\exp(-Cnr/\rho)] \{1 + \ln[1 + (r/\rho)]\}, \quad (4)$$

где C — постоянная, зависящая от геометрии и свойств материала, n — показатель деформационного упрочнения, σ_{ys} — предел текучести и ρ — радиус кривизны вершины трещины. Снова обратим внимание на приближенный выбор распределения напряжения у вершины трещины (4).

Рассмотрим теперь более подробно проблему влияния дислокационной пластичности на перенос точечных дефектов в твердых телах. Исследование этой проблемы имеет многолетнюю историю (см., например, [23]), оно выявило определяющее влияние перегибов дислокации на перенос точечных дефектов, отсутствие трубочной диффузии и т.д. В [24-25] исследовалось проникновение водорода в монокристалл α -Fe под действием движущихся дислокаций в системе легкого скольжения $\{112\} \langle 111 \rangle$ в зависимости от ориентации оси растяжения, скорости деформации, концентрации решеточного водорода и температуры. Результаты опытов показали, что скорость переноса водорода обычно увеличивается при уменьшении скорости деформирования из-за того, что при более высоких скоростях деформирования скорость дислокаций может приблизиться или превысить скорость отрыва, выше которой водород не может удерживаться в ядре дислокации. Обнаружено отсутствие сильного влияния концентрации решеточного водорода на скорость переноса водорода дислокациями. В температурном интервале от 12 до 78°C не обнаружена заметная зависимость скорости переноса водорода от температуры.

Модельные расчеты [26] показали, что основная доля растворенного водорода c_d сконцентрирована в ядре дислокации α -Fe, а ее зависимость от концентрации водорода в отсутствие дислокации c_0 , скорости движения дислокации v_d , температуры T , энергии связи атома водорода с ядром дислокации F_B , среднего расстояния между положениями атомов водорода в тетраэдрических пустотах кристаллической решетки s , параметра ϕ (плотность участков расположения атомов водорода вдоль оси дислокации) определяется следующей формулой

$$c_d = \frac{16c_0 + 5v_d c_0}{\phi(s/2b)v_d + 16c_0(1 - q) + 16q}, \quad q = \exp(-E_B/k_B T) \quad (5)$$

Другой важный результат расчета [26] указал на основной вклад ядра дислокации как стока для точечных дефектов по сравнению с примесной атмосферой, обусловленной упругой дисторсией решетки около ядра дислокации.

Краткий обзор основных результатов, полученных в последние годы, позволяет выделить три основных механизма влияния пластической деформации на эволюцию водорода, растворенного в твердом теле: 1) решеточная диффузия межузельных атомов водорода под действием поля всестороннего растяжения, создаваемого скоплениями дислокаций, имеющих краевую компоненту вектора Бюргерса, 2) «выметание» межузельных атомов упругим полем движущихся дислокаций, 3) перенос дислокациями точечных дефектов, накопившихся в их ядрах.

Задача об эволюции распределения точечных дефектов особенно актуальна при исследованиях явления водородной хрупкости [1]. В частности, это явление проявляется в резком снижении релаксационной способности пластической зоны у вершины трещины, что приводит к падению прочности нагруженных твердых тел. Однако о реальной структуре пластической зоны и законах ее эволюции в разных материалах и при разных условиях нагружения пока имеется еще недостаточно сведений, чтобы делать обобщающие выводы о законах развития процесса разрушения в различных условиях [27]. В последние годы удалось построить новые физические модели [28–29] перестройки дислокационной структуры у вершины трещины в сильно деформированном материале, которые позволили заметно расширить представления о процессах деформирования у вершины трещины и условиях ее роста. С другой стороны ощущается недостаток расчетов влияния эволюции пластической деформации на формирование потоков межузельных примесных атомов у вершины трещины, тогда как данные потоки достаточно подробно исследованы в случае «голой» трещины [5–9]. Дальнейшему развитию этих представлений посвящена данная работа.

Аналогично [29] предположим, что в плоскости скола (010) бесконечного кристалла с объемноцентрированной кубической (ОЦК) решеткой расположена трещина длиной $2l$ (рис. 1). К плоскостям кристалла $y = \pm\infty$ приложено однородное напряжение растяжения $\sigma_{yy}(t) = \sigma'_a(t)$, монотонно возрастающее до некоторого значения σ_a , достаточного для пластического деформирования кристалла, но недостаточного для роста трещины.

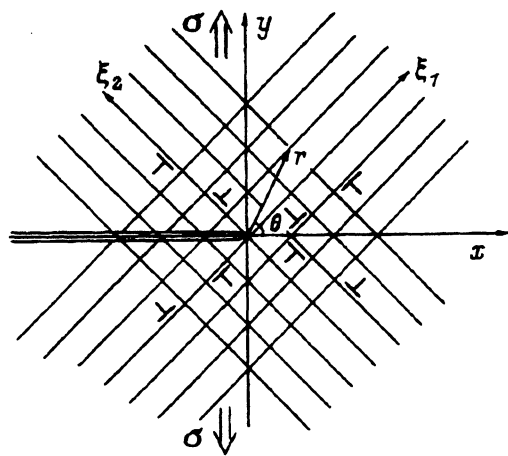


Рис. 1. Кристаллографическая схема трещины и плоскостей легкого скольжения в ОЦК кристалле при растягивающей нагрузке.

Пластическая деформация ОЦК кристалла осуществляется путем перемещения полных дислокаций с вектором Бюргера $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ вдоль плоскостей легкого скольжения $\{110\}$. Плоскости $\{110\}$, пересекаясь с плоскостью Oxy , образуют на ней два семейства линий скольжения $\xi_j (j = 1, 2)$. В кристалле равномерно распределены источники дислокаций, испускающие прямоугольные петли, лежащие в плоскостях легкого скольжения. В дальнейшем будут учитываться только отрезки петель, перпендикулярные плоскости Oxy , и краевые компоненты их векторов Бюргера. Последнее упрощение связано с видом приложенной нагрузки, действующей только на указанные компоненты дислокаций. За счет концентрации у вершин трещины напряжения, релаксирующего путем пластической деформации, в этой области достигаются значительные плотности эффективных дислокаций (избыточных дислокаций одного знака среди дислокаций с параллельными векторами Бюргера) и, следовательно, возникает внутреннее упругое поле, существенно влияющее на эволюцию пластической деформации.

Аналогично ^[29] предположим, что пластические зоны, образующиеся в кристалле, имеют в плоскости Oxy линейные размеры настолько малые по сравнению с l , что правомерно описание пластического деформирования кристалла у отдельной вершины трещины, как у вершины полубесконечной трещины.

Скорость пластического деформирования в кристалле определяется скольжением дислокаций вдоль $\xi_j (j = 1, 2)$ с термически активированным преодолением энергетических барьеров ^[28,29] и в плоскостях легкого скольжения у вершины трещины равна

$$\frac{d\varepsilon^j(\mathbf{r}, t)}{dt} = \varepsilon_0 \exp \left\{ -\frac{U_0 \{1 - [\sigma_e^j(\mathbf{r}, t)/\tau_0]^{1/2}\}}{k_B T(\mathbf{r}, t)} \right\} \text{sign } \sigma_e^j(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

где $\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y$, (x, y) — координаты точки плоскости в декартовой системе координат Oxy , \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_y — единичные векторы, задающие положительные направления осей Ox , Oy , а ε_0 , τ_0 , U_0 , — постоянные

(U_0 — энергия активации), температура, а

$$\sigma_e^j(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \sigma^j(\mathbf{r}, t) - \sigma_s(\mathbf{r}, t) \operatorname{sign} \sigma^j(\mathbf{r}, t), & \text{если } |\sigma^j(\mathbf{r}, t)| > |\sigma_s(\mathbf{r}, t)| \\ 0, & \text{если } |\sigma^j(\mathbf{r}, t)| < |\sigma_s(\mathbf{r}, t)| \end{cases} \quad (7)$$

— эффективное касательное напряжение в плоскостях легкого скольжения. В (7)

$$\sigma^j(\mathbf{r}, t) = \sigma_j^c(\mathbf{r}, t) + \sigma^l(\mathbf{r}, t) \quad (8)$$

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

$$\sigma_s(\mathbf{r}, t) = \sigma_0 + \sigma_f(\mathbf{r}, t) \quad (9)$$

— напряжение, препятствующее пластическому сдвигу за счет трения решетки (σ_0) и локального упрочнения материала (σ_f). В (8) σ_j^c внешнее для кристалла (исчезающее вместе с $\sigma_a^l(t)$) поле напряжения сдвига для выбранной системы скольжения, определяющееся формулой Вестергарда [10] для упругого поля у вершины трещины

$$\sigma_j^c(\mathbf{r}, t) = K_j(t)(2\pi r)^{-1/2} \Theta_j(\Theta), \quad (10)$$

в которую при $r < R_g$ вместо $r^{-1/2}$ подставляется $(R_g^2 - r^2)/4R_g^{5/2} + R_g^{-1/2}$. Это обеспечивает конечность напряжений в вершине трещины и гладкость $\sigma_j^c(\mathbf{r}, t)$ при $r = R_g$. В (8) величина

$$\sigma^l(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^2 \int_{D_k} \sigma^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta \rho_k(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \quad (11)$$

— поле напряжений, создаваемое у вершины трещины дислокациями пластической зоны, D_k — часть пластической зоны, образовавшейся в верхней полуплоскости ($y > 0$) в результате скольжения дислокаций вдоль ξ_k . Для вычисления σ_f в (9) используется соотношение

$$\sigma_f(\mathbf{r}, t) = \sigma_1 \left[\sum_{j=1}^2 |\varepsilon^j(\mathbf{r}, t)| \right]^m \quad (12)$$

(σ_1 и m — постоянные), являющееся обобщением эмпирического $\sigma_f = \sigma_1 \varepsilon^m$ [28]. В (10) $K_j(t) = \sigma_a^l(t) \sqrt{\pi l}$, а $\mathbf{r} = \mathbf{r}(r, \vartheta)$ — полярные координаты (рис. 1). В (11) $\sigma^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — сдвиговое напряжение в плоскостях легкого скольжения в бесконечной упругой среде с полубесконечным разрезом, содержащей пару краевых дислокаций, симметрично расположенных относительно оси Ox и отстоящих от вершины разреза на расстоянии r'

$$\sigma^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \overset{\circ}{\sigma}^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \hat{\sigma}^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (13)$$

где компоненты тензора $\hat{\sigma}^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ характеризует собственное поле пары дислокаций (приведем соответствующие формулы для одной дислокации ввиду громоздкости выражений для пары)

$$\hat{\sigma}_{xx}^k(z, z') = A/4\sqrt{2} \left\{ \left[1/z_1 + 1/\bar{z}_1 + z/\bar{z}_1^2 + \bar{z}_1/z_1^2 \right] + \right. \\ \left. + i \left[3/z_1 - 3/\bar{z}_1 - z_1/\bar{z}_1^2 + \bar{z}_1/z_1^2 \right] (-1)^k \right\},$$

$$\hat{\sigma}_{xy}^k(z, z') = A/4\sqrt{2} \left\{ \left[1/z_1 + 1/\bar{z}_1 + z_1/\bar{z}_1^2 + \bar{z}_1/z_1^2 \right] (-1)^{k+1} - \right. \\ \left. - i \left[1/z_1 - 1/\bar{z}_1 + z_1/\bar{z}_1^2 - \bar{z}_1/z_1^2 \right] \right\},$$

$$\hat{\sigma}_{yy}^k(z, z') = A/4\sqrt{2} \left\{ \left[3/z_1 + 3/\bar{z}_1 - z_1/\bar{z}_1^2 - \bar{z}_1/z_1^2 \right] + \right. \\ \left. + i \left[1/z_1 - 1/\bar{z}_1 + z_1/\bar{z}_1^2 - \bar{z}_1/z_1^2 \right] (-1)^k \right\},$$

$$z = x + iy, \quad z' = x' + iy', \quad z_1 = z - z', \quad A = \mu b / 2\pi(1 - \nu),$$

а компоненты тензора $\hat{\sigma}^k(z, z')$ описывают поле напряжений полубесконечной трещины, нагруженной на ее берегах усилиями $-\hat{\sigma}_{xy}^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')e_x - \hat{\sigma}_{yy}^k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')e_y$. При малых $r \rightarrow 0$ компоненты этого тензора имеют следующий вид

$$\hat{\sigma}_{xx}^k(re^{i\theta}, z') = (2\pi r)^{-1/2} \left[\hat{K}_1^p(z', k)\Theta_{xx}^1(\Theta) + \hat{K}_{11}^p(z', k)\Theta_{xx}^{11}(\Theta) \right]$$

$$\hat{\sigma}_{xy}^k(re^{i\theta}, z') = (2\pi r)^{-1/2} \left[\hat{K}_1^p(z', k)\Theta_{xy}^1(\Theta) + \hat{K}_{11}^p(z', k)\Theta_{xy}^{11}(\Theta) \right]$$

$$\hat{\sigma}_{yy}^k(re^{i\theta}, z') = (2\pi r)^{-1/2} \left[\hat{K}_1^p(z', k)\Theta_{yy}^{11}(\Theta) + \hat{K}_{11}^p(z', k)\Theta_{yy}^{11}(\Theta) \right]$$

Здесь $\hat{K}_1^p(z', k)$ и $\hat{K}_{11}^p(z', k)$ — КИН, нагруженной на берегах напряжениями $-\hat{\sigma}_{yy}^k(x, z')$ или $-\hat{\sigma}_{xy}^k(x, z')$ соответственно, а $\Theta_{lm}^j(\Theta)$ — угловая часть формулы Вестергарда (10) $j = I, II; l, m = x, y$. Величины КИН определены формулами

$$\hat{K}_1^p(z', k) - 1\hat{K}_{11}^p(z', k) = A/\sqrt{\pi} \left[J_1 + iJ_2(-1)^k \right],$$

где $J_1 = -\pi[1/\sqrt{z'} + 3/2\sqrt{\bar{z}'} - z'/2(\bar{z}')^{3/2}]$, $J_2 = -\pi[1/\sqrt{z'} + 1/2\sqrt{\bar{z}'} + z'/2(\bar{z}')^{3/2}]$. Выражения для соответствующих компонент тензоров

дислокации, расположенной симметрично относительно оси Ox , получают из приведенных выше заменой z' на \bar{z}' , тогда сдвиговое напряжение в (13) легко вычисляется с помощью известных формул теории упругости. Величина

$$\Delta\rho_k(\mathbf{r}', t) = -\frac{1}{b} \frac{d}{d\xi_k} \varepsilon^k(\mathbf{r}', t) \quad (14)$$

— плотность в точке \mathbf{r}' эффективных дислокаций [30]. Температурное поле $T(\mathbf{r}, t)$ в (6) определяется аналогично [31].

Уравнения (6)–(14) образуют систему, из которой при начальных

$$\varepsilon^j(\mathbf{r}, t=0) = 0, \quad \sigma'_a(t=0) = 0, \quad T(\mathbf{r}, t=0) = T_0 \quad (15)$$

и граничных

$$\sigma'_e^j(\mathbf{r}, t) = (x \leq 0, y = 0, t) = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial y}(y = 0, t) = 0 \quad (16)$$

условиях определяются $\varepsilon^j(\mathbf{r}, t)$, $\sigma^j(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$.

Численное решение краевой задачи (6–16) выполнено аналогично [31]. Оно позволяет оценить вклад каждого из указанных выше механизмов переноса водорода в данный момент времени. Поток межузельных атомов, обусловленный первым механизмом, вычислялся по формуле

$$\mathbf{J}_1 = (1 - kb/\lambda_0 - b^2/\lambda_0^2)c_0v = (1 - kb\sqrt{\Delta\rho} - b^2\Delta\rho)c_0D/k_B T \nabla U, \quad (17)$$

вторым механизмом

$$\mathbf{J}_2 = kb/\lambda_0 c_0 v_s = kb^3 \sqrt{\Delta\rho} c_0 D \sigma'_e^j / k_B T \xi_i, \quad (18)$$

а третьим —

$$\mathbf{J}_3 = b^2/\lambda_0^2 c_d v_d = b \dot{\varepsilon} c_d \xi_i, \quad (19)$$

В (17)–(18) предполагалось, что коэффициент $k > 1$ учитывает конечную ширину захвата примесных атомов дислокацией (обычно несколько постоянных решетки) при «выметании», площадь сечения ядра дислокации $\sim b^2$ [26], $\lambda_0 = 1/\sqrt{\rho} \sim$ среднее расстояние между дислокациями (в нашем случае $\rho \sim \Delta\rho$), c_d определяется формулой (5), $\dot{\varepsilon}$ — (6). В расчетах предполагалась сферическая упругая дисторсия решетки вокруг межузельного атома водорода.

Расчеты выполнены для кристалла α -Fe при следующих значениях постоянных: $2l = 1$ мм, $R_g = 0.1$ мкм, $h = 0.5$ мкм, $\varepsilon_0 = 10^{11}$ с⁻¹, $U_0 = 0.9$ эВ, $\tau_0 = 330$ МПа [32], $T_0 = 300$ К, $\sigma_0 = 18$ МПа, $b = 2.47 \cdot 10^{-4}$ мкм, $\sigma_1 = 2$ ГПа, $\mu = 60$ ГПа [33], $\nu = 0.3$, $a^2 = 2 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $\lambda = 78.2$ Вт/К, $\rho_0 = 7870$ кг/м³, $C = 456$ Дж/К [31], $k = 5$, $c_0 = 10^{-6}$ [26], $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 \cong 0.13$ [34], $D_0 = 10^{-7}$ м²/с, $Q = 2.3$ эВ [35], $s = 0.125$ нм, $E_B = 0.6$ эВ [26].

Скорость нагружения кристалла выбиралась так, чтобы максимальная скорость деформации в пластической зоне была равна 0.1 с⁻¹.

После достижения внешней нагрузкой $\sigma'_a(t)$ своего верхнего предела $\sigma_a = 5$ МПа в дальнейшем она оставалась постоянной. Расчет показал, что в эволюции $\varepsilon^j(\mathbf{r}, t)$ можно выделить два этапа. На первом этапе (от $t = 0$ до $t = 1$ s) пластическая зона постепенно подрастает, ее форма меняется подобно самой себе, распределение $\varepsilon^j(\mathbf{r}, t)$ в пластической зоне в основном повторяет распределение $\sigma_j^c(\mathbf{r}, t)$. На втором этапе (при $t > 1$ s) происходит существенное изменение формы пластической зоны и перераспределение $\varepsilon^j(\mathbf{r}, t)$ в ней, обусловленное влиянием дислокационной структуры кристалла. Отмечены значительные качественные расхождения в распределении $\sigma^j(\mathbf{r}, t)$ и $\sigma_j^c(\mathbf{r}, t)$, которые углубляются в процессе развития пластической деформации (ср. [29]). При выбранных условиях нагружения, тепловых и механических свойствах кристалла влияние разогрева в пластической зоне трещины на эволюцию деформации ничтожно мало.

На рис. 2 показаны распределения упругих напряжений всестороннего растяжения у вершины трещины в момент времени а) $t = 0.96$ s и б) после окончания процесса релаксации напряжения $t = 4.8$ s. Расчет показал, в частности, что при выбранных значениях параметров задачи максимум гидростатических напряжений у вершины трещины, «одетой в дислокационную шубу» понижается на 35% по сравнению с соответствующими напряжениями для «голой» трещины. На рис. 3 в последовательные моменты времени показаны изолинии потоков межузельных атомов водорода, переносимых рассмотренными механизмами. Отметим, что направление указанных потоков меняется на

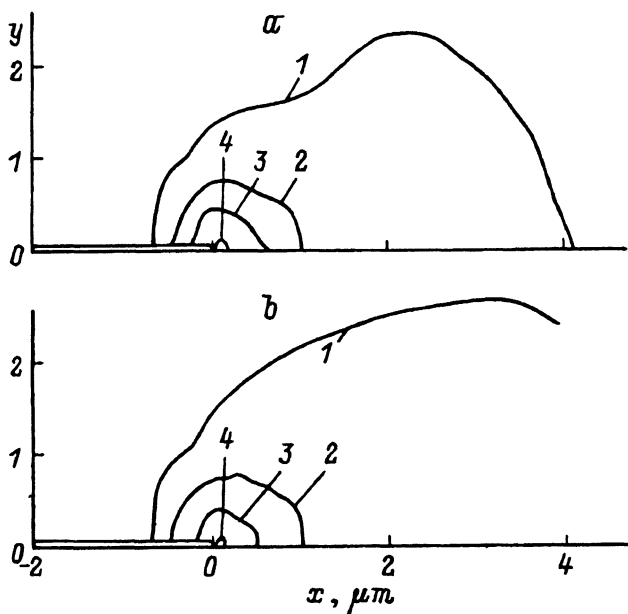


Рис. 2. Распределение упругих напряжений (в МПа) всестороннего растяжения у вершины трещины, в моменты времени $t = 0.96$ (а) и 4.8 s (б).

а) 1 — 110, 2 — 213, 3 — 317, 4 — 420; б) 1 — 100, 2 — 194, 3 — 288, 4 — 380.

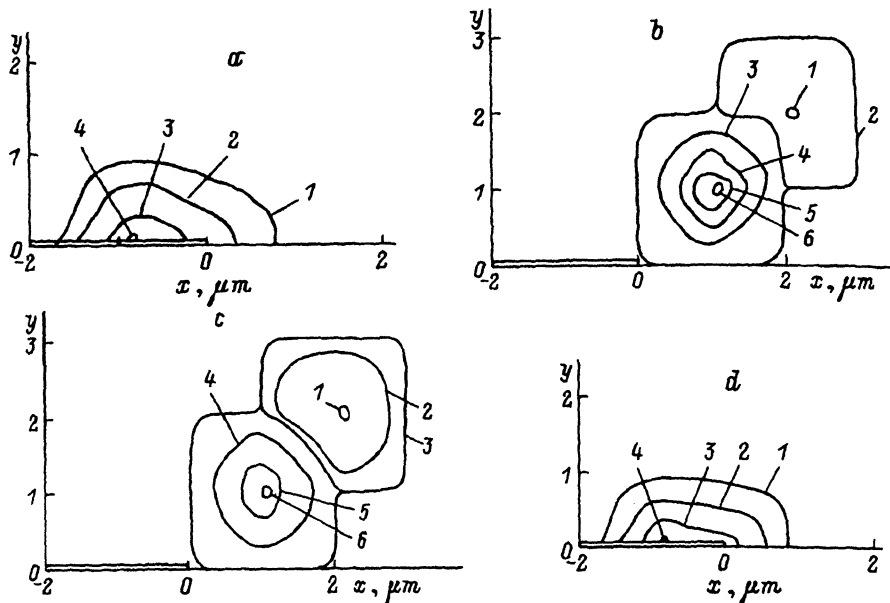


Рис. 3. Изолинии потоков (в $\mu\text{m/s}$) междузельных примесных атомов водорода в моменты времени $t = 0.96$ (a-c) и 4.8 s (d).

a, d — решеточная диффузия, b — «выметание» дислокациями (sweeping), c — перенос в ядрах дислокаций (dragging). a) 1 — $0.48 \cdot 10^{-4}$, 2 — $0.94 \cdot 10^{-4}$, 3 — $1.4 \cdot 10^{-4}$, 4 — $1.86 \cdot 10^{-4}$; b) 1 — $3.5 \cdot 10^{-7}$, 2 — 0, 3 — $2.4 \cdot 10^{-6}$, 4 — $5.2 \cdot 10^{-6}$, 5 — $8 \cdot 10^{-6}$, 6 — $10.8 \cdot 10^{-6}$; c) 1 — $-4.2 \cdot 10^{-8}$, 2 — $-0.8 \cdot 10^{-8}$, 3 — 0, 4 — $2.5 \cdot 10^{-8}$, 5 — $5.9 \cdot 10^{-8}$, 6 — $9.3 \cdot 10^{-8}$; d) 1 — $3.6 \cdot 10^{-5}$, 2 — $4.1 \cdot 10^{-5}$, 3 — $1.1 \cdot 10^{-4}$, 4 — $1.4 \cdot 10^{-4}$. Для c_0 в $\text{H} \cdot \mu\text{m}^{-3}$ следует числовые значения у изолиний умножить на $5 \cdot 10^{11} \text{H} \cdot \mu\text{m}^{-3}$.

противоположное в различных областях пластической зоны. Данный расчет показал, что первый механизм переноса междузельных атомов (решеточная диффузия) дает основной вклад в поток, однако следует ожидать существенного перераспределения вкладов указанных механизмов при большем нагружении образца, когда суммарная гидростатическая компонента упругих напряжений у вершины трещины еще значительно понизится. Еще раз следует отметить, что приведенные оценки потоков относятся лишь к начальной стадии процесса переноса, когда можно пренебречь составляющими потока, связанными с градиентом концентрации примесных атомов. В данной работе также не затрагивались вопросы учета торможения движущихся дислокаций примесными атомами, хотя его вклад в (9) может быть существенным.

Таким образом, выполненные в работе вычисления дали следующие основные результаты.

1. Эволюция упругого поля кристалла, нагруженного растягивающим напряжением за счет изменения его дислокационной структуры вблизи вершины трещины, существенно влияет на эволюцию пластической деформации в этой области. В условиях нагружения кристалла $\alpha\text{-Fe}$ при комнатной температуре, со скоростью, обеспечивающей термоактивированный механизм движения дислокаций в нем, влиянием разогрева в вершине трещины на эволюцию пластической деформации можно пренебречь.

2. При выбранных значениях параметров задачи наибольший поток атомов водорода в окрестности вершины трещины обеспечивает механизм решеточной диффузии, связанный с гидростатической компонентой упругого поля. Влияние дислокационной пластичности приводит к уменьшению величины данной компоненты и, в свою очередь, к понижению вклада механизма решеточной диффузии по сравнению с вкладом этого механизма в случае «голой» трещины.

3. Потоки атомов водорода под действием второго и третьего механизмов переноса меняют свое направление в различных участках кристалла у вершины трещины.

Список литературы

- [1] Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов. М. (1985), 216 с.
- [2] Williams D.P., Nelson H.C. Metall. Trans. 1, P. 63 (1970).
- [3] Gangloff R.P., Wei R.P. Metall. Trans. A. 7, 235 (1970).
- [4] Simmons G.W., Pao P.S., Wei R.P. Metall. Trans. A. 9, 1147 (1978).
- [5] Chou Y.T., Wei R.P., Acta Met. 23, 279 (1975).
- [6] Chou Y.T., Tsao K.Y., Wei R.P., Mater. Sci. Eng. 24, 101 (1976).
- [7] Chou Y.T., Wu R.S., Wei R.P. Scripta Met. 12, 249 (1978).
- [8] Iino M, Eng. Fract. Mech. 10, 1, 1 (1978).
- [9] Chou Y.T., Gao M., Lu M., Wei R.P. Mater. Sci. Eng. 58, 245 (1983).
- [10] Westergard H.M. J. Appl. Mech. 6, 2, 220 (1939).
- [11] Gerberich W.W. L: Hydrogen in Metals, ASM, Metals Park, (1974), p. 115.
- [12] Gerberich W.W., Chen Y.T., John C.St. Metall. Trans. 6, 1485 (1975).
- [13] Gerberich W.W., Chen Y.T., Metall. Trans. 6, 271 (1975).
- [14] Van Leeuwen. Corrosion. 31, 2, 42 (1975).
- [15] Raj R., Varadan V.K., In: Mechanisms of Environment Sensitive Cracking of Materials, p. 426, The Metals Society, London, 1977.
- [16] Андрейкив А.Е., Панасюк В.В., Харин В.С. ФХММ. 14, 3, 3 (1978).
- [17] Панасюк В.В., Андрейкив А.Е., Харин В.С. ФХММ. 17, 4, 71 (1981).
- [18] Фишгойт А.В., Колачев Б.А. ФХММ. 17, 4, 76 (1981).
- [19] Chu W.Y., Hsiao C.-M., Li S.-Q. Scripta Met. 13, 1063 (1979).
- [20] Tien J.K., Buck O., Bates R.C., Nair S. Scripta Met. 14, 583 (1980).
- [21] Tien J.K., Nair S., Bates R.C., Buck O. Scripta Met. 14, 591 (1980).
- [22] Bates R.C., Santhanam A.T. Int. J. Fract. 14, 5, 501 (1978).
- [23] Клявин О.В. ФТТ. 35. № 3. 513 (1993).
- [24] Hwang C., Bernstein I.M. Acta Met. 34, 6, 10 (1986).
- [25] Hwang C., Bernstein I.M. Acta Met. 34, 6, 1011 (1986).
- [26] Hashimoto M., Latanision R.M. Acta Met. 36, 7, 1837 (1988).
- [27] Карпинский Д.Н., Орлов А.Н. В кн.: Эволюция дефектной структуры кристаллов (Моделирование на ЭВМ). Л. (1984), С. 34.
- [28] Владимиров В.И., Карпинский Д.Н., Орлов А.Н., Санников С.В. Проблемы прочности. 12, 36 (1983).
- [29] Карпинский Д.Н., Санников С.В. ПМТФ. 36, 3, 154 (1993).
- [30] Kroner E. Kontinuumtheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. Berlin: Springer-Verlag, (1958), 198 t.
- [31] Карпинский Д.Н., Санников С.В. ФТТ. 37, 2, 505, 1995.
- [32] Spitzig W.A. // Acta. met. V. 18. P. 1275-1282. (1970).
- [33] Авербах Б.Л. // В кн.: Разрушение, М.: (1973) 1.
- [34] Messmer R.P., Briant C.L. In: Hydrogen degradation of ferrous alloys, p. 140, Noyes, Park Ridge (1985).
- [35] Смирнов А.А. Теория сплавов внедрения. Размещение и подвижность внедренных атомов в металлах и сплавах. М. (1979), 365 с.