

05;12

Энергия и механизм квазимикропластической деформации твердых тел

© Г.Г. Кочегаров

Институт геофизики СО РАН, Новосибирск

Поступило в Редакцию 10 января 2000 г.

Рассмотрен механизм ранее обнаруженной неупругой квазимикропластической деформации твердых тел, протекающей в области весьма малых деформаций ($\varepsilon \approx 10^{-6}$). На основании расчета плотности энергии квазимикропластической деформации показано, что она протекает по механизму единичных структурных релаксаций в окрестности локализации точечных дефектов структурной решетки твердых тел.

Необратимая квазимикропластическая (КМП) деформация регистрируется нами при комнатной температуре в области весьма малых деформаций ($\varepsilon \approx 10^{-6}$), традиционно относимой в литературе к упругой. КМП деформация обнаружена как у пластичных, так и у хрупких материалов всех типов, характеризующихся качественно противоположными физико-механическими свойствами, что позволяет отнести ее к фундаментальному свойству твердых тел [1].

Испытание образцов в виде плоскопараллельных пластинок проводилось методом трехточечного изгиба по схеме "нагружение–разгрузка" со ступенчатым возрастанием нагрузки и временем воздействия ее на образец в начальной области деформирования 1–2 с. У образца под нагрузкой оптико-механическим методом измерялась общая деформация, а у разгруженного — остаточная. Признаков ползучести материалов при испытании не наблюдалось (подробнее методика испытаний описана в [1]).

Напряжения, при которых регистрируется необратимая КМП деформация образцов ($\sigma = 5 \cdot 10^4 - 10^5$ Па), на ~ 6 порядков меньше их теоретической прочности на сдвиг, на ~ 4 порядка меньше предела текучести и реальной прочности и на 2 порядка меньше напряжения микропластического течения (стартового напряжения движения дисло-

каций [2]) металлов [1]. У ковалентных же кристаллов потенциальный барьер Пайерлса, который необходимо преодолеть дислокациям при их движении, значительно больше, чем у пластичных металлов. Расчет показывает, что энергия активации на единицу длины дислокации у меди меньше, чем у корунда, на пять порядков, а критическое напряжение сдвига σ_c — на четыре порядка, т. е. для критического напряжения движения дислокации в меди σ_c и в ковалентном кристалле σ справедливо соотношение $\sigma_c \sim 10^{-4}\sigma$ [1,3], что обуславливает повышенную хрупкость последних. Расчетная величина критического напряжения сдвига σ в ковалентных кристаллах на ~ 5 порядков больше, чем напряжение регистрируемой нами КМП деформации [1]. Все это свидетельствует о том, что механизм КМП имеет специфичный характер, не связанный с коллективным движением дислокаций. Для рассмотрения возможного механизма КМП деформации обратимся к оценке энергии, запасаемой твердым телом при его деформировании.

Потенциальная энергия упругих напряжений в твердом теле является функцией тензоров напряжений и смещений. В общем виде ее можно представить как

$$dU = \sum_{i,k=1}^3 \bar{\sigma}_{i,k} ds_{i,k},$$

где $\bar{\sigma}_{i,k}$ — компоненты тензора напряжений, $s_{i,k}$ — компоненты тензора деформаций.

При приведении к главным осям тензора напряжений получаем соотношение

$$dU = \sum_i^3 \bar{\sigma}_{ii} ds_{ii},$$

где $\bar{\sigma}_{ii}$ — главные напряжения, s_{ii} — диагональные компоненты тензора деформации, которые взаимосвязаны соотношением $s_{ii} = (\sigma_{11}/E) - \nu(\sigma_{22} + \sigma_{33}/E)$, справедливым для изотропной среды (здесь E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона).

Энергию, запасенную твердым телом при деформации, можно оценить, допуская в первом приближении, что $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma$. В результате принятых допущений имеем

$$dU = 3\sigma ds_{ii}, \quad (1)$$

$$s_{ii} = \sigma(1 - 2\nu)/E. \quad (2)$$

Решая совместно (1) и (2), интегрируя (примем $\nu = 0.3$) и учитывая, что $E = 2G(1 + \nu)$ (здесь G — модуль сдвига), получаем соотношение для оценки плотности энергии деформированного твердого тела при сдвиговой деформации:

$$U = 0.5\sigma^2/G.$$

Аналогичное выражение использовалось при оценке плотности упругой энергии образца в работе [4] для определения константы затухания при испытании меди на усталость.

При сдвиговых напряжениях $G = \sigma/\operatorname{tg} \alpha$ (α — угол сдвига), следовательно, $U = 0.5\sigma \operatorname{tg} \alpha$. При перемещении дислокации в направлении скольжения взаимное смещение двух атомов, расположенных по разные стороны от плоскости скольжения, определяется как функция $s(x) = s(\operatorname{tg} \alpha)$. Полное перемещение дислокации при ее движении в потенциальном рельефе Пайерлса составляет величину $S = \sum s_i(x) = \sum s_i(\operatorname{tg} \alpha) = \varepsilon_k$, где ε_k — относительная остаточная деформация образца (в нашем случае КМП деформация), определяемая экспериментально. Следовательно, для оценки плотности энергии КМП деформации имеет соотношение

$$U_k = 0.5\sigma \varepsilon_k. \quad (3)$$

Оценку плотности энергии пластической деформации можно провести по соотношению $U_k = E \cdot N$, где $N = l/V$ — плотность дислокаций в объеме V , $E = (Gb^2l/4\pi)\ln(R/r)$ [5] — энергия дислокации (b — вектор Бюргерса, R — радиус дислокации, r — радиус ядра дислокации, l — длина элемента). Энергия единицы длины дислокации для меди при подстановке характерных для нее параметров ($G = 4.9 \cdot 10^{10}$ Па, $b = 2.56 \cdot 10^{-10}$ м, $R = 1 \cdot 10^{-2}$ м, $r = 1 \cdot 10^{-10}$ м [6]) составляет величину $E = 4.47 \cdot 10^{-11}$ Дж на 1 см длины дислокации. У деформированных металлов $N = 10^{12}$ см $^{-2}$ [6], тогда для меди $U_k = 44.7$ Дж/см 3 (это коррелирует по порядку величины с экспериментально определенной скрытой энергией деформации меди при средней степени деформации образца 28.8 Дж/см 3 [7]).

Результаты оценки плотности энергии КМП деформации U_k по экспериментально определенной величине ε_k , согласно (3), для разных материалов приведены в таблице, из которой видно, что величина плотности энергии КМП деформации U_k испытанных материалов на

Плотность энергии КМП деформации твердых тел

№ п/п	Материал	U_k , J/cm ³	ε , 10 ⁻⁶	№ п/п	Материал	U_k , J/cm ³	ε , 10 ⁻⁶
1	Кварц (монокристалл природный)	$3.4 \cdot 10^{-8}$	0.8	2	Кварц (монокристалл синтезированный)	$7.1 \cdot 10^{-9}$	0.4
3	Кремний (монокристалл)	$4.1 \cdot 10^{-9}$	0.6	4	Кремний (поликристалл)	$1.0 \cdot 10^{-7}$	1.0
5	Германий (монокристалл)	$3.2 \cdot 10^{-8}$	0.9	6	Чугун	$4.8 \cdot 10^{-7}$	3.6
7	Медь	$1.1 \cdot 10^{-7}$	1.1	8	Стекло	$3.0 \cdot 10^{-8}$	0.8
9	Мрамор	$3.0 \cdot 10^{-8}$	2.1	10	Кварц (плавленый)	$2.1 \cdot 10^{-8}$	0.6

8–10 порядков меньше, чем плотность энергии U_p материала, подвергнутого пластическому течению. Из таблицы также видно, что свойствами КМП обладают такие типично хрупкие материалы, как чугун, стекло, мрамор, отличительной особенностью которых является отсутствие заметной пластической деформации перед разрушением. Особо необходимо отметить результаты по КМП деформации полированных образцов монокристаллов природного и синтезированного кварца, германия и кремния, которые характеризуются повышенной хрупкостью вследствие высокой степени совершенства кристаллической структуры монокристаллов по сравнению с их поликристаллическими аналогами. Структурные особенности химических связей в ковалентных кристаллах [1] исключают их заметное пластическое течение даже при достаточно высоких напряжениях и температурах [8,9]. В работе [10] подчеркивается, что ниже некоторой определенной температуры (250°C для германия и 600°C для кремния) механизм пластической деформации в ковалентных кристаллах претерпевает существенные изменения. Однако, как видно из таблицы, повышенная хрупкость ковалентных монокристаллов не исключает проявления ими заметных КМП свойств.

Полученные нами результаты по оценке плотности энергии при КМП деформации наряду с оценкой энергии активации и критического напряжения сдвига для перемещения дислокации [1] показывают, что генерирование дислокаций и формирование дислокационной структуры при КМП деформации исключается даже для такого типично пластичного материала, как медь. Следовательно, природа КМП деформации имеет специфический характер, отличающийся от механизма макро- и микропластического течения металлов, а общность уровня энергетических затрат при КМП деформации у материалов с противоположными физико-механическими свойствами свидетельствует о едином механизме эффекта КМП для разных твердых тел.

Изменение структурно-механических свойств твердых тел при механическом воздействии вследствие деструкции их кристаллической решетки и влияние жидкой фазы на кристаллическую структуру и прочность материалов рассмотрены в работах [11,12]. В них показано, что механические свойства твердых тел непосредственно связаны с характером несовершенств реальной кристаллической структуры, характеризующейся наличием в ней спектра дефектов и микроискажений (вакансии, атомы в метастабильном состоянии, дислокации, краудионы и др.). При прохождении упругих импульсов в твердом теле, вызванных уже незначительными механическими воздействиями, в области локализации дефектов могут протекать субструктурные изменения [12]. Исходя из этих представлений, можно подойти к рассмотрению механизма КМП.

Поскольку зарождение и движение дислокаций невозможно при КМП деформации вследствие недостаточности энергии, сообщаемой твердому телу, то можно предположить, что КМП деформация протекает по механизму единичных структурных релаксаций в окрестности локализации дефектов, что требует значительно меньших затрат энергии. Действительно, согласно литературным данным, энергия U генерирования и миграции точечных дефектов лежит в пределах $(1.2 - 4.4) \cdot 10^{-19} \text{ J}$ [6]. Следовательно, исходя из величины энергии U_k , поглощаемой твердым телом, при КМП деформации, например, меди может генерироваться до $\sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ точечных дефектов, что коррелирует с данными по их образованию при пластической деформации NaCl ($\varepsilon = 10\%$) в количестве $\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [13]. Однако атомы, находящиеся в неравновесном состоянии в области локализации дефектов, не расположены в потенциальном энергетическом минимуме,

вследствие чего при их смещении в более устойчивое положение необходимо преодолеть энергетический барьер более низкого уровня, чем при перемещении атома, находящегося в узле кристаллической решетки. Учитывая это, можно предположить, что энергия КМП деформации затрачивается в основном на смещение вакансий либо атомов, находящихся в метастабильном состоянии в дефектных областях решетки, в более устойчивое структурное положение. Этот вывод подтверждается и тем, что, согласно данным работы [6], энергия миграции дефектов в среднем в два раза меньше энергии их генерирования.

Список литературы

- [1] *Кочегаров Г.Г.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 17. С. 29–35.
- [2] *Дударев Е.Ф.* Микропластическая деформация и предел текучести поликристаллов. Томск: изд. Том. ун-та, 1988. 256 с.
- [3] *Cottrell A.H.* Theory of the crystal dislocation. London–Glasgow: Blackie and son LTD, 1964. 103 p.
- [4] *Mott N.* Dislokations and mechanical properties of crustals. N.Y.-London: J. Wiley and Sons, 1958. P. 315–337.
- [5] *Кочегаров Г.Г.* // ДАН. 1996. Т. 350. С. 187–190.
- [6] *Van Vueren H.G.* Interfections in crystals. Amsterdam: North-Holland Publ. Comp., 1960. 624 p.
- [7] *Хоткевич В.И., Чайковский Э.Ф., Заиквара В.В.* // ДАН СССР. 1954. Т. 90. С. 483–486.
- [8] *Делицин И.С., Жабин А.Г.* // ДАН СССР. 1977. Т. 234. С. 433–437.
- [9] *Цинзерлинг Е.В.* // ЗВМО. 1969. Ч. 986. С. 213–218.
- [10] *Трефилов В.И., Мильман Ю.В.* // ДАН СССР. 1963. Т. 153. С. 824–828.
- [11] *Кочегаров Г.Г.* // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. 1988. Т. 24. № 1. С. 73–76.
- [12] *Кочегаров Г.Г.* // Изв. Со АН СССР. Сер. хим. наук. 1986. В. 1. № 2. С. 65–71.
- [13] *Степанов А.В., Милькаманович Е.А.* // ЖЭТФ. 1951. Т. 21. С. 401–408.