

05

Возникновение зародышей мезополос локализованной деформации на интерфейсе „поверхностный слой—подложка“ и их распространение в объеме нагруженного твердого тела, находящегося в неравновесном состоянии

© В.Е. Панин, Д.Д. Моисеенко, А.Л. Жевлаков, П.В. Максимов

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

E-mail: mdd@ispms.tsc.ru

Поступило в Редакцию 28 мая 2007 г.

Проведено исследование зарождения и распространения мезополос неупругой деформации в двухуровневой неравновесной системе „поверхностный слой—подложка“ при одноосном растяжении. Применен метод стохастических возбудимых клеточных автоматов, подробно изложенный в [1]. Показано, что мезополосы неупругой деформации зарождаются в областях растягивающих нормальных напряжений на интерфейсе и распространяются в глубь материала по сопряженным направлениям максимальных касательных напряжений τ_{\max} . При пересечении мезополос, распространяющихся в двух смежных сопряженных направлениях τ_{\max} , их развитие прекращается.

PACS: 68.35.Gy

В цикле работ [1–5] была вскрыта роль поверхностного слоя как самостоятельной подсистемы в иерархии масштабных уровней потери сдвиговой устойчивости в деформируемом твердом теле. Эксперименты с использованием приборов нового поколения (в особенности атомно-силовой микроскопии) показали, что поверхностные слои твердого тела имеют „кластерную“ структуру, в которой структурные элементы — „кластеры“ — характеризуются широким спектром атомных конфигураций. Размеры кластеров варьируются от десятков до сотен нанометров.

В равновесном кристалле распределение кластеров на поверхности носит стохастический характер. Это обуславливает высокий уровень энтропийной составляющей внутренней энергии всего поверхностного

слоя. При этом, помимо колебательной („тепловой“) составляющей энтропийного вклада, следует особо выделить энтропию конфигурационную, ответственную за сугубо вероятностный характер пространственного распределения разнородных по своей структуре кластеров, а также энтропию, связанную с дисперсией уровней потенциальной энергии в системе кластеров. Последний фактор, как это было показано в [1], можно учесть посредством использования двухъямного многочастичного потенциала, отражающего, кроме равновесных узлов кристаллической решетки, возникновение неравновесных структурных состояний в системе кластеров.

Если в поверхностном слое специальной обработкой создать сильно неравновесное состояние, то на его интерфейсе с подложкой возникает „шахматное“ распределение растягивающих и сжимающих нормальных и касательных напряжений [4]. Это обуславливает самоорганизацию атомных кластеров различных конфигураций в „шахматном“ поле напряжений на интерфейсе. Закономерности такой самоорганизации экспериментально изучены в [5], численное моделирование проведено в [1].

Особый интерес представляет рассмотрение деформируемого твердого тела, в котором не только тонкий поверхностный слой, но и основной объем материала имеет неравновесную структуру. Это соответствует деформации сильно дефектных материалов (большие степени деформации, наноструктурные материалы и др.). Согласно многочисленным экспериментам, в таких материалах интенсивно развиваются мезополосы локализованной пластической деформации в сопряженных направлениях максимальных касательных напряжений τ_{\max} . Природа их зарождения и распространения широко дискутируется в литературе. В настоящей работе предлагается решение этого вопроса на основе многоуровневого моделирования, которое учитывает возникновение на интерфейсе „ослабленный поверхностный слой–подложка“ „шахматного“ распределения напряжений и деформаций.

Для проведения численного эксперимента использован метод стохастических возбудимых клеточных автоматов (SECAM), который получил свое дальнейшее развитие на основе идеи об аналогии распространения мезополосы локализованной деформации в сильно неравновесном материале и прерывистого распада пересыщенного твердого раствора.

Моделировали одноосное растяжение композиции „поверхностный слой–основной материал“, при этом образец представлял собой куб из стали-3 с исследуемой поверхностью в виде правильного квадрата

со стороны в 1 мм. Клеточные автоматы, на которые разбивался образец, представляли собой кубы с длиной ребра, равной $5 \mu\text{m}$. На нулевом шаге алгоритма для каждого клеточного автомата случайным образом (с помощью логарифмически нормального распределения вероятностей) задавали значения энтропии. Значения температуры каждого автомата задавали равными между собой. Предполагалось также, что изначально потенциальная энергия упругой деформации каждого клеточного автомата равна нулю, т.е. что в ненагруженном образце отсутствуют напряжения.

Процесс растяжения образца имитируется таким образом, что за 1 с в каждый из автоматов, лежащих на одной из противоположных торцевых граней образца, должна поступить механическая энергия $\Delta A = 3 \cdot 10^{-11} \text{ J}$, что соответствует натурному эксперименту по растяжению образца размерами $80 \times 10 \times 1 \text{ mm}$ со скоростью $3.3 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$. Учитывая механические и термические свойства материала (плотность, модуль упругости, теплоемкость стали-3), а также объем клеточного автомата, нетрудно получить ограничение на продолжительность Δt одного временного шага: $\Delta t < 1.5 \text{ s}$.

Основной объем деформируемого твердого тела задан в состоянии пересыщения деформационными дефектами, которые могут самоорганизоваться в поле внутренних напряжений в нагруженном образце. Проведенное моделирование показывает, что на границе раздела „поверхностный слой–подложка“ формируется „шахматное“ распределение зон растягивающих нормальных напряжений с ослабленными силами связи. В рамках концепции сильно возбужденных состояний в этих зонах задается возникновение новых разрешенных структурных состояний, которые эффективно учитываются посредством использования двухъямного многочастичного потенциала с характерной „полочкой“ на кривой его изменения в пространстве (рис. 1).

При нагружении сильно неравновесного образца, одновременно с формированием „шахматной“ структуры, в зонах нормальных растягивающих напряжений в поверхностном слое постепенно возникают области пониженной плотности, в которых формируются зародыши мезополос неупругой деформации (рис. 2, *a*). Из рис. 2, *b* видно, что на дальнейшей стадии нагружения от этих зародышей в направлении максимальных касательных напряжений начинают расти мезополосы локализованной деформации.

Структурно-термодинамическое обоснование формирования мезосубструктур и соответственно полос локализованной деформации в

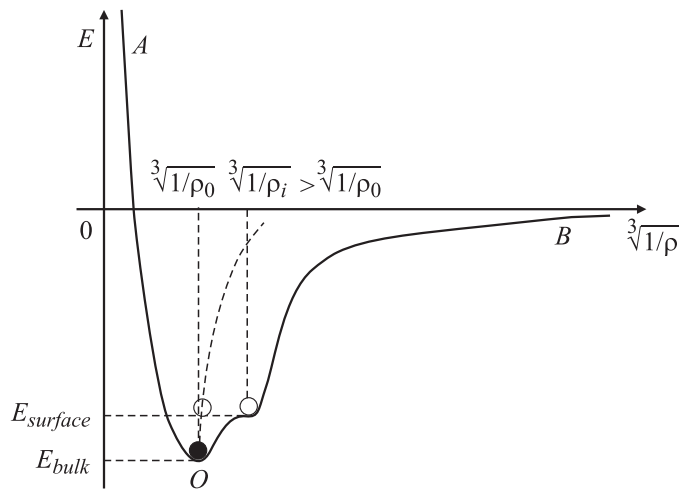


Рис. 1. Аналог двухъямного потенциала, используемый при расчете взаимодействия возбудимых клеточных автоматов. ρ — плотность материала, содержащегося в клеточном автомате; ρ_0 — начальная плотность автомата (в ненагруженном состоянии); ρ_i — плотность автомата в дополнительном структурном состоянии; A — ветвь, соответствующая сжатию; B — ветвь, соответствующая растяжению; $E_{surface}$ — энергия дополнительного структурного состояния, свойственного поверхности или границе раздела; E_{bulk} — энергия основного состояния подложки. Стрелкой указан минимум внутренней энергии, соответствующий дополнительному разрешенному структурному состоянию в зоне растягивающего нормального напряжения.

сильно неравновесных материалах исходит из теории прерывистого распада в пересыщенном дефектами твердом растворе [6,7]. В случае крайне неоднородного распределения энтропии и соответственно свободной энергии по мезообъемам основного материала дефекты в подложке самоорганизуются, формируя мезополосы. При сравнении рис. 2, $a-d$ видно, что с ростом мезополос в объеме неравновесного материала в зонах, не затронутых деформацией, плотность неравновесных дефектов уменьшается. Данный процесс аналогичен прерывистому распаду в неравновесных твердых растворах. Только в деформируемом твердом теле этот процесс контролируется не диффузией, а обусловлен массопереносом в механическом поле внутренних напряжений.

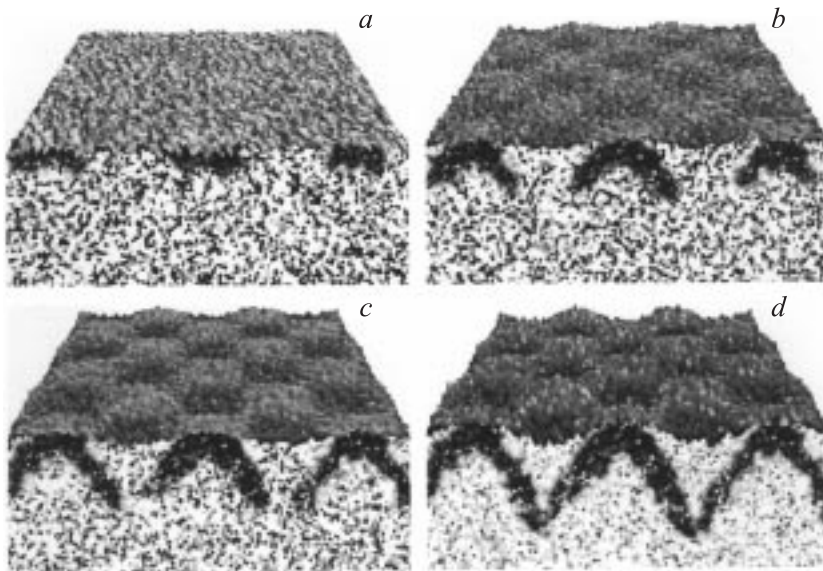


Рис. 2. Зарождение на интерфейсе „поверхностный слой–подложка“ и распространение в подложке мезополос неупругой деформации на различных стадиях деформирования образца: $\varepsilon = a$ — 0.01; b — 0.1; c — 0.2; d — 0.5%.

Отметим, что в классической постановке пластический сдвиг всегда ассоциируют только с касательными напряжениями. Сдвиг действительно реализуется посредством касательных напряжений, однако деформация как локальное структурное превращение может происходить по механизму сдвига только в тех областях, где имеются растягивающие нормальные напряжения, т. е. где силы связи ослаблены и в пространстве междоузлий появляются дополнительные разрешенные состояния, соответствующие структуре полос локализованной деформации. В зонах сжимающих нормальных напряжений происходит резкое возрастание внутренней энергии и дополнительные структурные состояния не возникают. Соответственно в этих зонах не могут происходить локальные структурные превращения, определяющие распространение полос локализованной деформации.

Весьма важным результатом численного эксперимента также является и тот факт, что при пересечении смежных мезополос, распростра-

няющихся по сопряженным направлениям τ_{\max} , их развитие в глубь подложки останавливается. При формировании подобных мезополос локализованной деформации, распространяющихся от квазипериодических трещин в хрупком покрытии, данный факт был отмечен ранее в экспериментах [8].

В заключение отметим, что, благодаря введению в модель много-частичного межатомного взаимодействия двухъямного потенциала и новых представлений о развитии мезополос локализации деформации как аналога реакции прерывистого распада, в настоящем исследовании убедительно показана важная роль растягивающих нормальных напряжений в формировании зародышей полос локализованной деформации и их роста по сопряженным направлениям τ_{\max} в объеме сильно неравновесного материала. Данный термодинамический подход представляется очень эффективным для описания деформации сильно неравновесных систем, в которых полосы локализованной деформации распространяются как локальное структурное превращение.

Авторы благодарят А.В. Панина, Е.А. Мельникову, М.С. Казаченок и А.А. Сон за предоставление экспериментальных данных, использованных при проведении численного эксперимента.

Список литературы

- [1] Панин В.Е., Моисеенко Д.Д., Максимов П.В., Панин А.В. // Физ. мезомех. 2006. Т. 9. № 5. С. 5–15.
- [2] Панин А.В. // Физ. мезомех. 2005. Т. 8. № 3. С. 5–17.
- [3] Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Панин А.В. // Физ. мезомех. 2006. Т. 9. № 3. С. 9–22.
- [4] Панин В.Е., Панин А.В., Моисеенко Д.Д. и др. // Доклады РАН. 2006. Т. 409. № 5. С. 606–610.
- [5] Панин В.Е., Панин А.В., Сергеев В.П., Шугуров А.Р. // Физ. мезомех. 2007. Т. 10. № 3. С. 5–15.
- [6] Суховаров В.Ф. Прерывистое выделение фаз в сплавах. Новосибирск: Наука, 1983.
- [7] Кортаев А.Д., Тюменцев А.Н., Суховаров В.Ф. Дисперсное упрочнение тугоплавких металлов. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1989.
- [8] Антипина Н.А. Механизмы пластической деформации и разрушения на мезомасштабном уровне поверхностно упрочненной хромистой стали: Дис... канд. техн. наук. Томск: ИФПМ СО РАН, 1998.