Физика твердого тела, 2013, том 55, вып. 11

01,07

Температурно-временна́я зависимость откольной прочности α-железа

© А.М. Молодец

Институт проблем химической физики РАН,
Черноголовка, Московская обл., Россия

E-mail: molodets@icp.ac.ru

(Поступила в Редакцию 22 апреля 2013 г.)

Обобщены экспериментальные данные по температурной зависимости откольной прочности α-железа. Собственные и литературные данные истолкованы в рамках кинетической концепции прочности твердых тел. Представлена температурно-временна́я зависимость прочности α-железа в диапазоне времен 10^5-10^{-9} s.

1. Введение

Железо является основой многих практически важных конструкционных сталей, и поэтому исследованию его прочностных характеристик посвящено большое число работ с использованием широкого спектра методик. Например, в [1] исследована температурно-временна́я зависимость прочности чистого α-железа в диапазонах температур 77–670 K и времен $10-10^5$ s. Исследованию температурной зависимости прочности железа в волнах растяжения (откольной прочности) при температурах 77–1000 K также посвящен ряд работ, в частности [2–4].

Хорошо известно, что время разрушения при отколе на несколько порядков меньше времени статического разрушения, а максимальные растягивающие напряжения в несколько раз выше статической прочности материала. С этой точки зрения измерения температурной зависимости откольной прочности важны не только в прикладном отношении, но и для теории прочности твердых тел.

В указанных выше работах представлена экспериментальная зависимость откольной прочности образцов из железа от их начальной температуры при временах от $\sim 10^{-7}$ s в [2,3] и до $\sim 10^{-9}$ s в [4]. При одинаковых начальных температурах откольная прочность в [4] более чем в 2 раза превышает данные [2,3] и более чем на порядок превышает квазистатические данные [1]. Цель настоящей работы заключается в согласовании экспериментальных данных по температурно-временно́й зависимости прочности железа [1–4] с позиций кинетической концепции [5] прочности твердых тел.

2. Параметры модели

Согласно [5,6], при растяжении металлов в результате неоднородности протекания пластической деформации в микрообъемах материала возникают высокие локальные растягивающие напряжения σ_L, которые связаны с прикладываемым макроскопическим напряжением σ посредством коэффициента перенапряжения q соотношением $\sigma_L = q\sigma$. На фоне высоких локальных напряжений происходит термофлуктуационное образование зародышевых несплошностей. Длительность стадии накопления зародышевых несплошностей τ описывается соотношением Журкова

$$\tau(\sigma, T) \cong \tau_0 \exp\left(\frac{U_0 - \gamma\sigma}{RT}\right), \qquad (1)$$

где T — температура, $\tau_0 \sim 10^{-12}-10^{-13}$ s — время, близкое к обратной дебаевской частоте, $U_0 = \text{const}$ — начальный барьер элементарного акта разрушения, γ — структурно-чувствительный коэффициент, R — газовая постоянная.

Одной из первых публикаций, где откол рассматривается с позиций кинетической концепции прочности, была работа [7]. В развитие представлений [5,7] процесс откольного разрушения в [8] анализируется как двухстадийный процесс; предполагается, что образование зародышей разрушения на первой стадии откола развивается при высоких скоростях пластической деформации во фронте волны растяжения (см. схему в [9]). При этом модификация термофлуктуационного соотношения (1) применительно к отколу основывается на том факте, что локальные напряжения возникают не мгновенно, а требуют некоторого времени θ. В [10] предложено приближенное функциональное соотношение для температурно-временно́й зависимости откольной прочности [8], учитывающее конечность времени θ, в виде

$$\sigma(\tau, T) \approx \frac{\sigma_{\mathrm{Th}}}{q}\left(1 - T\frac{R}{U_0}\ln\frac{\tau}{\tau_0}\right), \qquad (2)$$

где σ_{Th} — теоретическая прочность; R и U_0 — то же, что в (1); τ — время стадии зарождения несплошностей при отколе; q — зависящий от τ коэффициент перенапряжения, определяемый эмпирическим соотношением

$$q = 1 + \kappa_0\left\{1 - \exp\left[-\frac{1}{\alpha}\left(\frac{\tau}{\theta_0}\right)^{\alpha}\right]\right\}. \qquad (3)$$

График $q = q(\tau)$ (3) представляет собой несимметричную размытую ступеньку с характерным временем

$\theta \sim \alpha^{1/\alpha}\theta_0$, где α, θ_0, κ — подгоночные коэффициенты. Случай $\tau \ll \theta$ соответствует $q = 1$, т.е. отсутствию перенапряжений и мгновенному разрушению при максимально возможной прочности, приближающейся к σ_{Th}. Противоположный случай $\tau \gg \theta$ соответствует $q = \text{const} = \kappa_0 + 1$, т.е. температурно-временно́й зависимости прочности при больших временах квазистатического нагружения, когда локальные напряжения $\sigma_L = q\sigma$ успевают достичь максимальной величины. Для учета этой ситуации величина третьего подгоночного коэффициента κ_0 в (3) заранее определяется так, чтобы при $\tau \gg \theta$ функция (2) совпадала с (1), что выполняется при

$$\kappa_0 = \frac{\gamma\sigma_{\text{Th}}}{U_0} - 1, \qquad (4)$$

где γ и U_0 — те же, что в (1); σ_{Th} — теоретическая прочность из (2).

Таким образом, соотношение (2) содержит параметры γ, U_0, характеризующие прочность при больших временах, и два подгоночных параметра α и θ_0, характеризующих разрушение при малых временах разрушения. Параметры α и θ_0 могут быть оценены, если известна экспериментальная зависимость растягивающих напряжений от времени при отколе.

3. Нахождение параметров модели по экспериментальным данным

Способ реконструкции зависимости растягивающих напряжений σ от времени t при отколе $\sigma(t)$ (профиль $\sigma(t)$) в сечении откола (плоскости в образце, отстоящей от его свободной поверхности на величину δ) был предложен в [7]. Согласно приближению [7], профиль $\sigma(t)$ можно построить, если известны профиль $W(t)$ скорости свободной поверхности разрушающегося образца и время Δt реверберации откольного импульса в откольной пластине толщиной δ. В этом случае значение действующих в сечении откола растягивающих напряжений рассчитывается по формуле

$$\sigma(t) = 0.5\rho C\Delta W(t), \qquad (5)$$

где ρ и C — плотность материала образца и скорость звука в нем, а $\Delta W(t)$ — положительная часть разности ординат зависимости $W(t)$ (профиль *1* на рис. 1, *a*) и этого же профиля, смещенного относительно первого на отрезок $\Delta t = 2\delta/C$ (профиль *2* на рис. 1, *a*).

В качестве иллюстрации соотношения (5) на рис. 1 приведен пример обсчета одного из профилей $W(t)$, скопированного с рис. 2 из работы [4]. На рис. 1, *a* затемненная область соответствует профилю $\Delta W(t)$. На рис. 1, *b* затемненная область отвечает профилю $\sigma(t) = 0.5\rho C\Delta W(t)$.

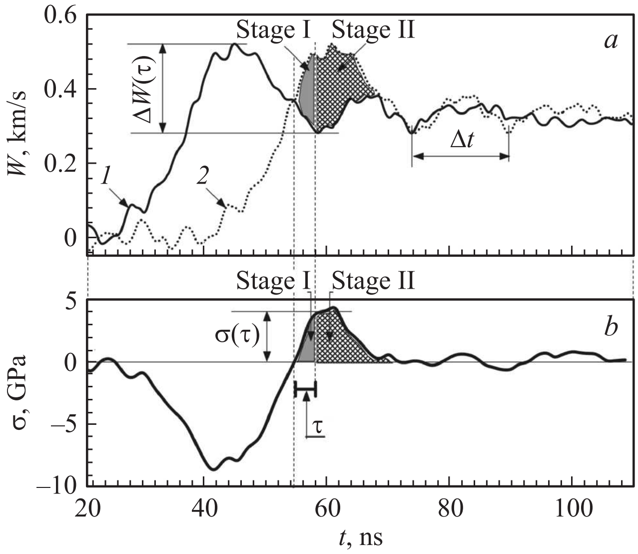

Рис. 1. Реконструкция зависимости растягивающих напряжений σ от времени t при отколе: профиль $\sigma(t)$ в сечении откола согласно [7] и подразделение процесса откольного разрушения на две стадии согласно [8]. Пояснения приведены в тексте.

Согласно [8–10], стадия зарождения несплошностей (stage I на рис. 1) при отколе протекает с момента появления растягивающего напряжения и длится в течение времени τ до момента достижения растягивающими напряжениями максимального значения $\sigma(\tau)$ (см. рис. 1, *b*). Величина $\sigma(\tau)$ является откольной прочностью в общепринятом смысле и вычисляется в первом приближении как

$$\sigma(\tau) = 0.5\rho C\Delta W(\tau). \qquad (6)$$

Заштрихованная область на рис. 1 соответствует второй стадии откола — стадии роста и объединения несплошностей (stage II на рис. 1), которая развивается при временах $t > \tau$ и сопровождается релаксацией растягивающих напряжений до нуля в момент отделения откольной пластины (см. [9]).

Зависимость откольной прочности (6) от времени τ при различных температурах $T(\tau)$ разрушающегося материала представляет собой температурно-временну́ю зависимость откольной прочности $\sigma(\tau, T)$. На рис. 2, *a* представлены данные по временно́й зависимости откольной прочности железа $\sigma(\tau, T_0)$ в интерпретации рис. 1 при начальной температуре $T_0 \sim 300\,\text{K}$ [3,4], полученные с использованием формулы (6) с учетом

Таблица 1. Параметры функционального соотношения для температурно-временно́й зависимости прочности α-железа

α	$\lg(\theta_0,\ \text{s})$	κ_0	$\lg(\tau_0,\ \text{s})$	U_0, kJ/mole	γ cm^3/mole	σ_{Th}, GPa
0.39	−3.95	163.66	−13	447.9 [1]	1883.7 [1]	39.15

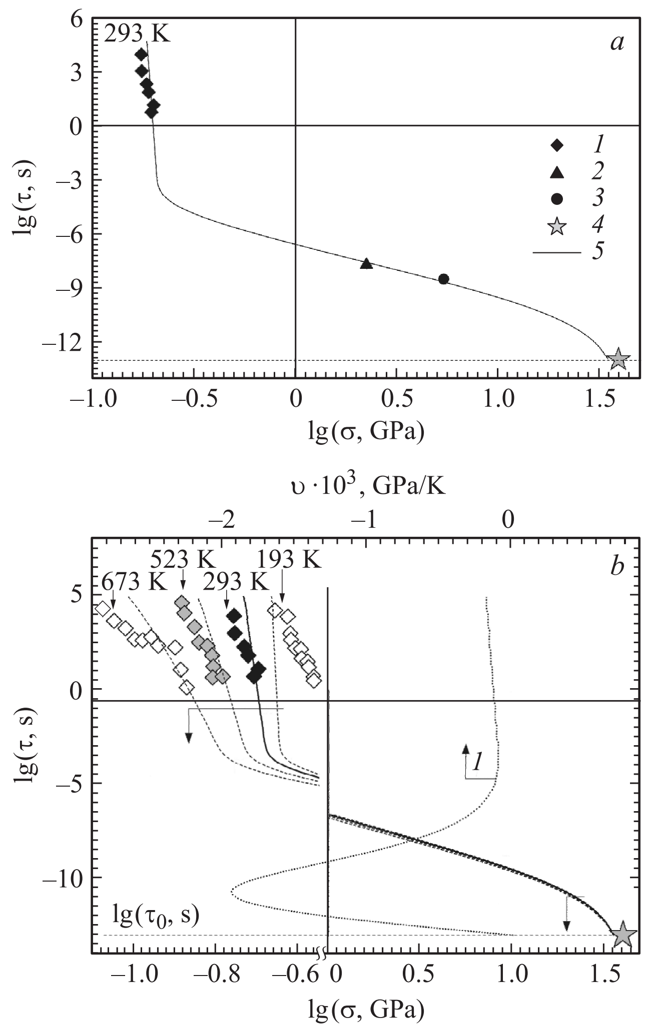

Рис. 2. Экспериментальные данные по температурно-временно́й зависимости прочности железа в диапазоне времен нагружения 10^5-10^{-9} s. *a*) *1* — долговечность железа при температуре $T_0 \sim 300$ K (данные [1]), *2* — откольная прочность железа при начальной температуре $T_0 \sim 300$ K (данные [3]), *3* — откольная прочность железа при начальной температуре $T_0 \sim 300$ K (данные [4]), *4* — оценка теоретической прочности железа по формуле (17), *5* — объединяющий график функции (2) с коэффициентами из табл. 1. *b*) Расчетный „веер" температурно-временно́й зависимости прочности железа в сравнении с экспериментальными данными [1] (точки). Сплошная кривая и звездочка — то же, что и на части *a*, *1* — график частной производной (2) по температуре.

упругопластической поправки Степанова [11]. При этом для данных [3] величина τ составляла ~ 30 ns, а для данных [4] величина τ составила ~ 3 ns в согласии с рис. 1, *a*. На рис. 2, *a* представлены также квазистатические данные по долговечности чистого α-железа при температуре 293 K из работы [1] и значение теоретической прочности железа σ_{Th} при $\tau = \tau_0 = 10^{-13}$ s. Вариацией подгоночных коэффициентов α и θ_0 была найдена оптимальная временна́я зависимость прочности железа при температуре ~ 300 K в диапазоне времен 10^5-10^{-9} s. Эта зависимость в виде графика функции (2) показана на рис. 2, *a*. Значения α и θ_0, а также значения остальных параметров (2) приведены в табл. 1.

4. Обсуждение результатов

Как следует из структуры формулы (2), „веер" графиков $\sigma(\tau, T_0)$ при различных T_0 центрирован относительно точки ($\sim \sigma_{\mathrm{Th}}$, τ_0) и имеет точки перегиба в области между θ_0 и τ_0. Благодаря этому соотношение (2) с найденными коэффициентами единообразно аппроксимирует экспериментальные данные по температурно-временно́й зависимости прочности железа как при больших (10^5-1 s), так и при малых ($10^{-7}-10^{-9}$ s) временах разрушения.

Действительно, на рис. 2, *b* показана температурно-временна́я зависимость прочности α-железа (2) в квазистатической области при $\sigma \sim 0.5$ GPa. Видно, что соотношение (2) в пределах погрешностей согласуется с экспериментом [1] в интервале температур 600–300 K.

Согласно (2), в координатах $\sigma - \ln\tau$ температурная зависимость прочности представляет собой прямую линию с наклоном υ, зависящим от τ как $\upsilon = \partial\sigma/\partial T = -((R\sigma_{\mathrm{Th}})/(qU_0))\ln(\tau/\tau_0)$. Для железа график $\upsilon = \upsilon(\lg\tau)$ представлен кривой *1* на рис. 2, *b*. Как видно, эта кривая предсказывает существенные изменения температурной зависимости прочности железа в диапазоне времен $\tau \sim 10^{-4}-10^{-11}$ s. В „откольной" области ($\tau \sim 10^{-7}-10^{-9}$ s) эта особенность подтверждается экспериментальными данными [2–4]. Действительно, на рис. 3 прямой *1* показан график функции (2) с наклоном $\upsilon = \upsilon_1$ при значении $\tau = 30$ ns, характерном для первой стадии откола в [2,3]. Прямая *2* — это график функции (2) с наклоном $\upsilon = \upsilon_2$ при значении $\tau = 3$ ns,

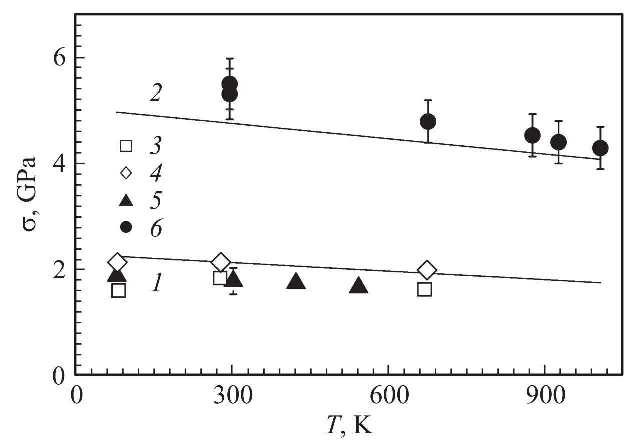

Рис. 3. Температурная зависимость откольной прочности железа. *1, 2* — расчет по формуле (2) с коэффициентами из табл. 1 при значениях $\tau \sim 30$ и 3 ns соответственно, *3, 4* — максимальные растягивающие напряжения для зарождающегося откола [2] и полного откола [2] соответственно, *5, 6* — экспериментальные данные [3] и [4] соответственно. Экспериментальные погрешности взяты из указанных работ.

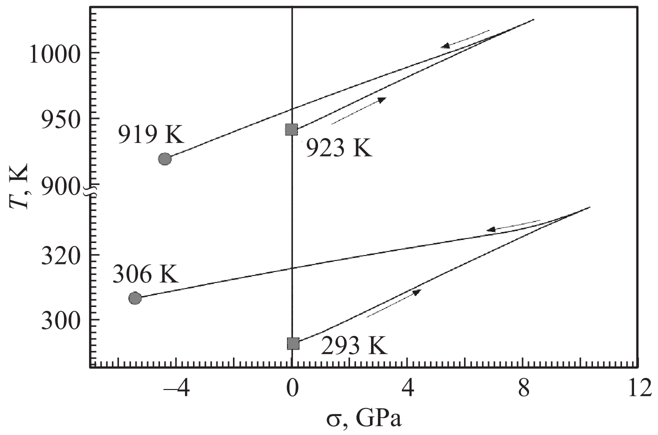

Рис. 4. Изменение температуры в сечении откола при начальных температурах 293 и 923 K для условий нагружения, близких к указанным в [4]. Стрелки слева направо — процесс ударного сжатия, стрелки справа налево — процесс разгрузки и растяжения. Около точек в конце кривых указаны значения температур в сечении откола в момент достижения растягивающими напряжениями значений откольной прочности железа.

соответствующем времени первой стадии откола в [4]. Видно, что рассчитанные зависимости согласуются с экспериментом как в качественно (наклон прямой *1* меньше, чем наклон прямой *2*), так и количественно (расчетные кривые практически совпадают с данными эксперимента).

Как уже упоминалось, „веер“ графиков $\sigma(\tau, T_0)$ центрирован относительно точки ($\sim \sigma_{\mathrm{Th}}, \tau_0$). Это означает, что при дальнейшем уменьшении времени процесса разрушения механизм первой стадии разрушения приближается к атермическому. Основываясь на поведении кривой *1* на рис. 2, *b*, можно предположить, что переход к атермическому механизму разрушения железа происходит приблизительно в диапазонах времен $\tau < 10^{-11}$ s и напряжений $\sigma > 22$ GPa.

Во Введении отмечалось, что в [2–4] получены зависимости откольной прочности от начальной температуры образцов T_0. При этом очевидно, что температура внутренних слоев образца при ударном сжатии и последующем растяжении $T(\tau)$ изменяется и во время развития откольного разрушения не равна T_0. Для того чтобы оценить различие этих температур, были предложены уравнения состояния α-железа (см. раздел 5), а затем в рамках гидрокода, опирающегося на эти уравнения состояния рассчитано изменение температуры в сечении откола образца из железа в цикле ударное сжатие–растяжение.

На рис. 4 представлены результаты двух расчетов для начальных температур $T_0 = 293$ и 923 K. Согласно этим расчетам, температура разрушающегося железа при отколе может быть как больше, так и меньше начальной температуры образцов. Однако их различие невелико и находится на уровне 5–10 K, что составляет 0.5–5% от начальных температур для обсуждаемых экспериментов. Поэтому отличие $T(\tau)$ от T_0 для железа в рассмотренных „откольных“ экспериментах можно в согласии с (2) не принимать во внимание.

5. Уравнение состояния α-железа

Полуэмпирическое приближение (см. [12]) для фононной части свободной энергии твердого тела $F = F(V, T)$, где V — удельный объем материала, T — его температура, базируется на модели эйнштейновских осцилляторов

$$F = E_x + 3R\left[\frac{\Theta}{2} + T\ln\left(1 - \exp\left(-\frac{\Theta}{T}\right)\right)\right], \qquad (7)$$

$$\Theta = \Theta_0\left(\frac{\upsilon_0 - V}{\upsilon_0 - V_0}\right)^2\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3}, \qquad (8)$$

$$\upsilon_0 = V_0\left(1 + \frac{2}{\gamma_0 - 2/3}\right), \qquad (9)$$

где R — удельная газовая постоянная, $\Theta = \Theta(V)$ — характеристическая температура, зависящая только от объема, $\Theta_0 = \Theta(V_0)$, υ_0 — параметр, имеющий смысл характеристического объема, $\gamma_0 = \gamma_0(V_0, T_0)$ — параметр Грюнайзена, V_0 — начальный объем, T_0 — начальная температура.

Единственный подгоночный параметр модели υ_x входит в выражение для потенциальной энергии $E_x = E_x(V)$

$$E_x = -\upsilon_x(C_1H_x + C_2x) + C_3, \qquad (10)$$

$$H_x = 9\left(\frac{1}{10}x^{-2/3} + 2x^{1/3} + \frac{3}{2}x^{4/3} - \frac{1}{7}x^{7/3} + \frac{1}{10}x^{10/3}\right), \qquad (11)$$

$$x = \frac{V}{\upsilon_x}, \qquad (12)$$

где C_1, C_2, C_3 — константы, выражающиеся через справочные данные для свойств материала и параметр υ_x.

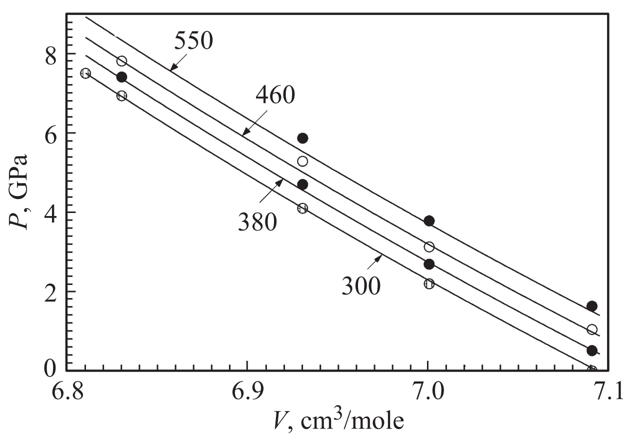

Рис. 5. Изотермы высокого давления α-железа. Точки — эксперимент [13], линии — расчет по уравнению состояния (13) с коэффициентами из табл. 2. Числа около изотерм — температура (в K).

Таблица 2. Коэффициент полуэмпирического выражения (7) для свободной энергии α-железа

T_0, K	V_0, cm^3/mole	Θ_0, K	υ_0, cm^3/mole	υ_x, cm^3/mole	C_1, GPa	C_2, GPa	C_3, kJ/g
298	7.093	357.8	21.092	21.019	-144.522	2971.035	-572.456

Согласно термодинамическим тождествам, уравнения состояния определяются частными производными свободной энергии (7). Так, термическое уравнение состояния $P = P(V, T) = -\partial F/\partial V$, т. е. зависимость давления P от объема и температуры в этой модели, имеет вид

$$P = P_x + 3R\,\frac{\gamma_G}{V}\,\Theta\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta/T) - 1}\right), \qquad (13)$$

где $P_x = P_x(V)$ — потенциальное давление,

$$P_x = 3C_1\left(-\frac{1}{5}x^{-5/3} + 2x^{-2/3} + 6x^{1/3} - x^{4/3} + \frac{1}{7}x^{7/3}\right) + C_2, \qquad (14)$$

$\gamma_G = \gamma_G(V)$ — объемная зависимость коэффициента Грюнайзена,

$$\gamma_G = -\frac{\partial \ln\Theta}{\partial \ln V} = \frac{2}{3} + \frac{2V}{\upsilon_0 - V}. \qquad (15)$$

Величина подгоночного параметра υ_x для α-железа находилась из условия наилучшего совпадения, полученной при комнатной температуре изотермы $P = P(V, T_0)$, рассчитываемой по формуле (13), и экспериментальной изотермы высокого давления из работы [13]. Найденная величина υ_x для α-железа составила $\upsilon_x = 21.019\,\mathrm{cm^3/mol}$. Полный комплект коэффициентов для (7) и соответственно для (13) представлен в табл. 2.

Достоверность и область применимости уравнения состояния устанавливалась путем сравнения расчетных и экспериментальных [13] изотерм высокого давления α-железа. Как видно из рис. 5, в области давлений $0-8$ GPa и температур $300-550$ K расчет практически совпадает с экспериментом [13].

Заметим, что минимальное значение потенциального давления (14) достигается при значении $x = 1$ и составляет величину

$$P_{x\,\mathrm{min}} = 20.82\,C_1 + C_2. \qquad (16)$$

Значение $P_{x\,\mathrm{min}}$, взятое по абсолютной величине, можно использовать в качестве оценки величины теоретической прочности $\sigma_{\mathrm{Th}} = |P_{x\,\mathrm{min}}|$, т. е.

$$\sigma_{\mathrm{Th}} = |20.82\,C_1 + C_2|. \qquad (17)$$

Величина σ_{Th} для α-железа, рассчитанная по формуле (17) с константами из табл. 2, составляет $\sigma_{\mathrm{Th}} = 39.15$ GPa. Это значение внесено в табл. 1 и использовано в выражении (2) для температурно-временнóй зависимости откольной прочности α-железа.

6. Заключение

Сопоставлены экспериментальные данные по квазистатическому и откольному разрушению α-железа. Экспериментальные данные по отколу объяснены с позиций кинетической концепции прочности твердых тел. Предложено соотношение для достоверного описания температурно-временнóй зависимости прочности железа в диапазонах времен 10^5-10^{-9} s и температур $300-600$ K. Представлены уравнения состояния α-железа, на основе которых проведены расчеты изменения температуры при ударно-волновом сжатии и последующем расширении железа в волне растяжения.

Автор выражает благодарность В.В. Киму за предоставление гидрокода.

Список литературы

[1] В.М. Алябьев, В.А. Павлов. ФММ **43**, 116 (1977).
[2] В.К. Голубев, С.А. Новиков, Ю.С. Соболев, Т.С. Юкина. Проблемы прочности *6*, 28 (1985).
[3] А.М. Молодец, В.И. Лебедев, А.Н. Дремин. ФГВ **25**, 101 (1989).
[4] T. de Rességuier, E. Lescoute, D. Loison. Phys. Rev. B **86**, 214 102 (2012).
[5] В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский. Кинетическая природа прочности твердых тел. Наука, М. (1974). 560 с.
[6] А.И. Слуцкер. ФТТ **46**, 1606 (2004).
[7] Н.А. Златин, С.М. Мочалов, Г.С. Пугачев, А.М. Брагов. ФТТ **16**, 1752 (1974).
[8] А.М. Молодец, А.Н. Дремин. ДАН СССР **265**, 1385 (1982).
[9] A.N. Dremin, A.M. Molodets. In: Shock compression of condensed matter / Eds by S.C. Schmidt, J.N. Jonson, L.W. Davison. Elsevier Science Publ. B.V. (1990). P. 415.
[10] А.М. Молодец, А.Н. Дремин. ФГВ **19**, 154 (1983).
[11] Г.В. Степанов. Проблемы прочности, *8*, 66 (1975).
[12] A.M. Molodets. High Pres. Res. **30**, 325 (2010).
[13] S. Klotz, Th. Strässle, A.L. Cornelius, J. Philippe, V. Pomjakushin. J. Phys. D **44**, 055 406 (2011).