

05

Расчет коэффициента интенсивности напряжения в наводороженном пластичном кристалле с трещиной

© Д.Н. Карпинский, С.В. Санников

Научно-исследовательский институт механики и прикладной математики
Ростовского государственного университета,
E-mail: karp@math.rsu.ru

В окончательной редакции 4 июня 2003 г.

Получены временные распределения коэффициента интенсивности напряжения (КИН) при растяжении наводороженного пластичного кристалла с трещиной. Расчет учитывает влияние растворенного межзельного водорода на эволюцию пластической деформации у вершины трещины в нагруженном кристалле, обусловленное конкуренцией механизмов несовместности размеров растворенных атомов водорода и межзельных пустот кристаллической решетки и снижения предела текучести из-за пластифицирующего действия водорода. Численные расчеты выполнены для кристалла α -Fe.

Исследования последних лет прояснили ряд особенностей роста трещины в наводороженных металлах [1]. В частности, обнаружено, что образование дислокационных скоплений у вершины трещины в кристалле происходит под действием суммарного напряжения, создаваемого трещиной, дислокациями в пластической зоне и межзельными атомами водорода [2,3]. Растворенный водород „экранирует“ упругие поля трещины и дислокации у ее вершины.

Цель настоящей работы заключается в получении оценок влияния растворенного водорода в объемно-центрированном кубическом (ОЦК) кристалле на эволюцию пластической деформации у вершины трещины на основании представлений [3]. Ранее [4] авторами выполнен аналогичный расчет на основе модели [5], которая учитывает пластифицирующее влияние межзельного водорода. Представляется актуальным сравнить результаты расчетов, выполненных в соответствии с моделями [3] и [5]. Отметим двойственное действие растворенного водорода на развитие пластической деформации. С одной стороны, сжимающие упругие поля межзельных атомов водорода (механизм

дилатации) экранируют упругие поля трещины и дислокаций, что приводит к снижению подвижности дислокаций, а с другой стороны — растворенный водород снижает предел текучести и этим повышает их подвижность (механизм пластификации). Исследованию конкурентного влияния этих механизмов посвящена данная работа.

Рассмотрим плоскую задачу об эволюции пластической деформации у вершины трещины длиной $2l$, расположенную в плоскости скола $\{100\}$ бесконечного ОЦК кристалла с постоянной решетки a . К плоскостям кристалла $y = \pm\infty$ приложено однородное напряжение растяжения $\sigma_a(t)$ (мода 1), монотонно возрастающее до некоторого значения σ_{\max} , достаточного для пластического деформирования кристалла, но недостаточного для роста трещины. После достижения нагрузкой $\sigma_a(t)$ своего максимального значения σ_{\max} расчет проводился в режиме релаксации напряжения у вершины трещины, которому соответствует постоянство внешнего растягивающего напряжения. В кристалле равномерно распределены источники дислокаций, испускающие прямоугольные петли, лежащие в плоскостях легкого скольжения. За счет концентрации напряжения у вершины трещины, релаксирующего путем пластической деформации, в этой области достигаются значительные плотности эффективных дислокаций (избыточные дислокации одного знака среди дислокаций с параллельными векторами Бюргера) и, следовательно, возникает поле, существенно влияющее на эволюцию пластической деформации.

Далее будем предполагать, что пластическая деформация ОЦК кристалла осуществляется путем термоактивированного скольжения полных дислокаций с вектором Бюргера $\mathbf{b} = a/2\langle 111 \rangle$ вдоль плоскостей легкого скольжения $\{110\}$ смешанная дислокация). В расчетах учитываются только краевые компоненты смешанных дислокаций. Плоскости $\{110\}$, пересекаясь с плоскостью Oxy , образуют на ней два семейства линий скольжения, направления которых заданы векторами ($k = 1, 2$).

Скорость пластического деформирования, обусловленного движением дислокаций у вершины трещины [6],

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

где U_0 — энергия активации, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, $\dot{\varepsilon}_0$ и τ_0 — постоянные, $\sigma_e^k(\mathbf{r}, t)$ — эффективное напряжение

сдвига в плоскостях легкого скольжения [7–9]:

$$\sigma_e^k(\mathbf{r}, t) = \sigma^k(\mathbf{r}, t) - \sigma_s(\mathbf{r}, t) \text{sign } \sigma^k(\mathbf{r}, t) \text{ при } |\sigma^k(\mathbf{r}, t)| > |\sigma_s(\mathbf{r}, t)|;$$

$$\sigma_e^k(\mathbf{r}, t) = 0 \text{ при } |\sigma^k(\mathbf{r}, t)| < |\sigma_s(\mathbf{r}, t)|. \quad (2)$$

В (2) сдвиговое напряжение в плоскостях легкого скольжения

$$\sigma^k(\mathbf{r}, t) = \sigma_k^c(\mathbf{r}, t) + \sigma_k^l(\mathbf{r}, t) + \sigma_k^t(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

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

— напряжение, препятствующее пластическому сдвигу за счет трения решетки σ_0 и локального упрочнения материала σ_f . В (3) $\sigma_k^c(\mathbf{r}, t)$ — напряжение Вестергарда, а $\sigma_k^l(\mathbf{r}, t)$ — дальнедействующее упругое напряжение, создаваемое дислокациями одного знака в пластической зоне. Величина $\sigma_k^t(\mathbf{r}, t)$ — сдвиговое упругое напряжение, создаваемое межузельными атомами водорода [3].

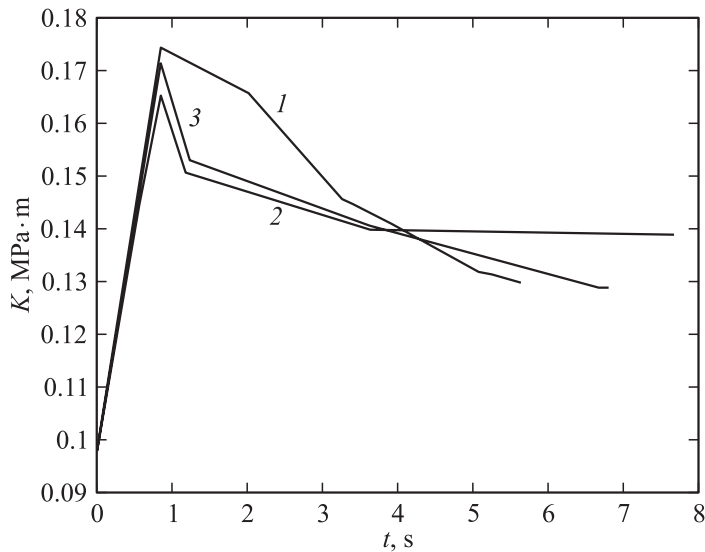
Уравнение механодиффузии использовано для описания миграции межузельных атомов водорода под действием гидростатической компоненты тензора эффективных напряжений $\sigma_{ii}^e(\mathbf{r}, t)$ (см., например, [4])

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 c(\mathbf{r}, t) + \frac{Dc(\mathbf{r}, t)}{k_B T(\mathbf{r}, t)} \nabla c(\mathbf{r}, t) \nabla V(\mathbf{r}, t), \quad (5)$$

где D — коэффициент диффузии, $V(\mathbf{r}, t) = \Delta v \sigma_{ii}^e(\mathbf{r}, t)$, Δv — изменение объема ячейки кристаллической решетки за счет содержащегося в ней межузельного атома. Аналогично [4] выбраны начальные и граничные условия для (5), а также предполагается, что газ в полости трещины идеальный.

Совместное решение уравнений (1)–(5) позволило получить распределения эффективного напряжения $\sigma_e^k(\mathbf{r}, t)$ и концентрации межузельных атомов водорода $c(\mathbf{r}, t)$ в различные моменты времени t . В расчете задавался максимальный КИН трещины K_I^{\max} , при достижении которого внешняя нагрузка кристалла оставалась постоянной, а заканчивался расчет в момент времени t_f , когда $\sigma_e^k(\mathbf{r}, t_f) = 0$ по всей окрестности вершины трещины.

Расчеты эволюции пластической деформации и миграции межузельных атомов водорода у вершины трещины в нагруженном кристалле α -Fe выполнен при следующих значениях постоянных: $2l = 10^{-3}$ м,



Временная зависимость коэффициента интенсивности напряжения для пластичной трещины растяжения в ОЦК кристалле, содержащем межузельные атомы водорода с начальной концентрацией $c_0 = 1.25 \cdot 10^{-4}$: 1 — расчет не учитывает механизма пластификации кристалла растворенным водородом; 2 — расчет не учитывает механизма дилатации, создаваемой межузельными атомами; 3 — учтены оба механизма.

$K_I^{\max} = 0.2 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$, $a = 2.876 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $U_0 = 0.9 \text{ В}$, $\tau_0 = 330 \text{ МПа}$, $\sigma_0 = 18 \text{ МПа}$ [6], $T = 300 \text{ К}$, $D = 4.88 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ [10]; $\Delta v = 3 \times 10^{-30} \text{ м}^3$. Остальные постоянные задачи выбраны аналогично [4].

На основе этих результатов далее была вычислена временная эволюция КИН. В расчете предполагалось, что для КИН трещины имеет место представление [4,7]

$$K(t) = K^c(t) + K^p(t) + K^i(t). \quad (6)$$

В (6) $K^c(t)$ — КИН трещины без учета пластической деформации у ее вершины, $K^p(t)$ — поправка, учитывающая влияние пластической деформации на КИН, а величина $K^i(t)$ характеризует вклад напряжений, создаваемых межузельными атомами водорода [3].

На рисунке показаны временные зависимости КИН в кристалле, содержащем межузельные атомы водорода при начальных концентрациях $c_0 = 1.25 \cdot 10^{-4}$. Из расчетов кривой 1 на этом рисунке исключен механизм пластификации, кривой 2 — механизм дилатации, а для расчета кривой 3 учтены оба механизма. Конечные точки этих кривых соответствуют моментам времени t_f остановки эволюции пластической деформации ε^k . Из сравнения кривых 1–3 видно, что исключение механизма пластификации заметно снижает релаксацию напряжения у вершины трещины и время до остановки пластической деформации. Результаты расчетов с учетом механизма пластификации показали заметное снижение КИН ($\approx 5\%$, кривые 2, 3) в момент завершения нагружения t_m по сравнению с расчетом без учета этого механизма. Следует упомянуть также о том, что учет механизма пластификации существенно увеличивает ($\approx 20\%$) максимальную величину деформации ε_{\max} в пластической зоне. Это обстоятельство позволяет сделать вывод о том, что при выбранных значениях физических величин в данной задаче механизм пластификации играет главную роль в эволюции пластической деформации у вершины трещины в наводороженном кристалле.

Список литературы

- [1] *Engineering Fracture Mechanics*. 2001. V. 68. N 4.
- [2] *Magnin T., Chambreuil A., Chateau J.P.* // *Int. J. Fracture*. 1996. V. 79. P. 147.
- [3] *Chateau J.P., Delafosse D., Magnin T.* // *Acta Materialia*. 2002. V. 50. P. 1523.
- [4] *Карпинский Д.Н., Санников С.В.* // *ФТТ*. 2000. Т. 42. В. 12. С. 2171.
- [5] *Власов Н.М., Зазноба В.А.* // *ФТТ*. 1999. Т. 41. В. 3. С. 451.
- [6] *Spitzig W.A.* // *Acta metallurgica*. 1970. V. 18. P. 1275.
- [7] *Карпинский Д.Н., Санников С.В.* // *ПМТФ*. 1993. Т. 34. В. 3. С. 154.
- [8] *Карпинский Д.Н., Санников С.В.* // *ФТТ*. 1995. Т. 37. В. 2. С. 505.
- [9] *Карпинский Д.Н., Санников С.В.* // *ФММ*. 1998. Т. 85. В. 2. С. 121.
- [10] *Brotzen F.R., Seeger A.* // *Acta metallurgica*. 1989. V. 37. P. 2985.