УДК 541.64 : 539.3

К ТЕРМОФЛУКТУАЦИОННОЙ ТЕОРИИ ХРУПКОГО РАЗРУШЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ

В. В. Шевелев, Э. М. Карташов

Получено выражение для частоты образования очагов разрушения в нагруженном теле в рамках дилатонной модели хрупкого разрушения материалов. Рассмотрены особенности релаксации нагруженных прочных и высокопрочных материалов и получено выражение для параметра τ_0 формулы Журкова. Результаты расчета τ_0 хорошо согласуются с экспериментальными данными.

С помощью многочисленных экспериментальных данных установлено, что хрупкое разрушение материалов, находящихся под нагрузкой, является термоактивированным процессом [1-3]. В работах [4-8] предложен атомный механизм разрушения твердых тел — дилатонный. Согласно этому механизму, возникающие в твердом теле отрицательные флуктуации плотности — дилатоны — являются (вследствие пониженной плотности) ловушками для фононов. Если деформация растяжения в образовавшемся дилатоне больше некоторой критической величины, то происходит необратимая накачка энергии в дилатон путем поглощения фононов из окружающей его среды. Последнее приводит к распаду дилатона и образованию очага разрушения. В работах [6-8] в рамках указанного подхода получены выражения для параметров уравнения долговечности τ Журкова [9] U_0, γ

$$\tau = \tau_0 \exp\left[(U_0 - \gamma\sigma)/kT\right], \tag{1}$$

где k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, σ — приложенное к телу растягивающее напряжение. Однако выражение для параметра τ_0 при этом не было получено. Кроме этого, остается неясным вопрос: почему долговечность нагруженного тела определяется энергией активации образования в нем одного критического дилатона? Ответ на этот вопрос может быть дан, если воспользоваться результатами, полученными в рамках термофлуктуационной теории хрупкого разрушения материалов, развитой в работах [10-13]. Остановимся на этом подробнее. Рассмотрим тело, находящееся под действием растягивающего напряжения σ. Так как нагруженное тело является метастабильной системой, то анализ процесса его хрупкого разрушения должен базироваться на кинетическом уравнении, описывающем распад этого метастабильного состояния. Известно [14], что нагруженное тело релаксирует путем развития в нем трещин, одна из которых, опередив в своем развитии остальные, разрушает его. Поэтому долговечность нагруженного тела определяется эволюцией $f(\mathbf{l}, t)$ функции распределения трещин по необходимому для их описания набору параметров $\mathbf{l}$ (t — время). Функция $f(\mathbf{l}, t)$ должна удовлетворять следующему кинетическому уравнению:

$$\frac{\partial f(\mathbf{l}, t)}{\partial t} = \int \left[f(\mathbf{l}', t)\, W(\mathbf{l}'/\mathbf{l}, t) - f(\mathbf{l}, t)\, W(\mathbf{l}/\mathbf{l}', t)\right] d\mathbf{l}'. \tag{2}$$

Здесь $W(\mathbf{l}/\mathbf{l}', t)$ есть вероятность перехода трещины с набором параметров $\mathbf{l}$ в состояние с набором параметров $\mathbf{l}'$ в момент времени t. Функция

$W(\mathrm{l/l'},\ t)$ определяется элементарными актами разрушения нагруженного тела, одним из которых, как показано в работах [4–8], являются образование и последующий распад критического дилатона. Найдем частоту ω_+ образования критического дилатона в нагруженном теле.

Как и в работах [4, 8], будем рассматривать область дилатона как некоторую достаточно большую подсистему, в которой путем соответствующего усреднения можно ввести термодинамические величины. Анализ, проведенный в работе [8], показал, что время установления равновесия в дилатоне меньше времени тепловой релаксации во всей системе (нагруженном теле) $\tau_p \sim \Lambda/s$, где Λ — длина свободного пробега фононов, s — скорость звука. Поэтому можно считать, что область дилатона нагруженного тела находится в квазиравновесном состоянии, и, следовательно, для частоты образования очага разрушения после распада дилатона ω_+ и частоты его распада в результате фононной накачки ω_d имеем соотношение

$$\omega_+ Z_0 = \omega_d Z_d. \tag{3}$$

Здесь Z_0, Z_d — статсуммы области нагруженного тела до и после образования из нее критического дилатона. В работах [1–7] показано, что среднее время жизни критического дилатона до распада с образованием очага разрушения порядка τ_p, поэтому

$$\omega_d \sim s/\Lambda. \tag{4}$$

Так как образование критического дилатона происходит в результате тепловой флуктуации при постоянном напряжении σ и постоянной температуре T окружающих дилатон частей нагруженного тела, то $Z_d/Z_0 = \exp(-\Delta\Phi_d/kT)$, где $\Delta\Phi_d$ — изменение термодинамического потенциала области нагруженного тела при образовании из нее критического дилатона. Очевидно, что $\Delta\Phi_d$ равно минимальной работе, необходимой для образования критического дилатона. Эта работа в свою очередь равна той минимальной тепловой энергии ΔQ, которую необходимо подвести в область нагруженного тела для того, чтобы ее деформация стала равной деформации в критическом дилатоне ε_d. Для определения ΔQ воспользуемся уравнением равновесной деформации дилатона, которое справедливо ввиду его квазиравновесия. Имеем

$$\varepsilon_d = K_T\sigma + \beta\Delta T, \tag{5}$$

K_T — изотермическая сжимаемость, β — объемный коэффициент теплового расширения, ΔT — изменение температуры области в результате подвода тепла.

Первое слагаемое в (5) описывает изменение деформации дилатона за счет приложенного растягивающего напряжения σ, а второе слагаемое равно изменению деформации дилатона в результате теплового расширения. Очевидно, что тепловое расширение дилатона $\beta\Delta T$ вызвано подводом количества тепла

$$\Delta Q = \int\limits_{T}^{T+\Delta T} C(T)\, dT,$$

C — теплоемкость при постоянном давлении. Умножая обе части уравнения (5) на ΔQ и деля на ΔT, получим

$$\bar{C}\varepsilon_d = \bar{C}K_T\sigma + \beta\Delta Q, \tag{6}$$

$$\bar{C} = \int\limits_{T}^{T+\Delta T} C(T)dT/\Delta T$$

— средняя теплоемкость на интервале $(T,\ T+\Delta T)$. Из уравнения (6) получим

$$\Delta Q = \frac{\bar{C}\varepsilon_d}{\beta} - \frac{\bar{C} K_T}{\beta}\sigma. \tag{7}$$

Учтем, что число деформированных связей в дилатоне равно $n \approx \Lambda/a$, где a — характерное межатомное расстояние в области дилатона до нагружения тела. Тогда выражение (7) можно переписать в виде

$$\Delta Q = \frac{\bar{C}_0 \varepsilon_d^* n}{\beta} - \frac{\bar{C}_0 K_T}{\beta a}\Lambda\sigma, \tag{8}$$

где ε_d^* — деформация одной связи в критическом дилатоне, $\bar{C}_0$ — средняя атомная теплоемкость. С учетом выражений (8) и (4) получим из (3), полагая $\Delta\Phi_d = \Delta Q$,

$$\omega_+ \sim \frac{s}{\Lambda} \exp\left(\left(\bar{C}_0 \varepsilon_d^* n - \frac{\bar{C}_0}{a} K_T \Lambda \sigma\right)\Big/\beta k T\right). \tag{9}$$

Из формулы (9) следует, что энергия активации U образования очага разрушения равна $U_0 - \gamma\sigma$, где

$$U_0 = \bar{C}_0 \varepsilon_d^* n/\beta, \quad \gamma = C_0 K_T \Lambda/\beta a. \tag{10}$$

Полученные выражения для составляющих энергии активации U_0 и γ совпадают в точности с выражениями, найденными в работах [6-8], за исключением того, что (10) содержит среднюю атомную теплоемкость.

При достаточно малых приложенных к телу растягивающих напряжениях в случае хрупкого разрушения становятся существенными процессы восстановления разорванных связей. Частоту восстановления связей в распавшемся дилатоне ω_- можно найти, если заметить, что между ω_+ и ω_- должно выполняться соотношение $\omega_+ (N - N_0) = \omega_- N_0$, где N_0 — равновесное число распавшихся дилатонов в нагруженном теле, а N — число мест в теле, наиболее благоприятных для образования критических дилатонов. Из термодинамических соображений следует, что $N_0/(N - N_0) = \exp(-\Delta\Phi(\sigma, T)/kT)$, где $\Delta\Phi$ — изменение термодинамического потенциала нагруженного тела в результате распада дилатона и образования очага разрушения.

Таким образом, на основании изложенного имеем

$$\omega_- = \omega_+ \exp(\Delta\Phi(\sigma, T)/kT). \tag{11}$$

В работах [11, 12] было показано, что величина $\Delta\Phi$ может быть представлена в виде

$$\Delta\Phi(\sigma, T) = \Delta\Phi_п(\sigma, T) + \Delta\Phi_у(\sigma, T), \tag{12}$$

$\Delta\Phi_п$ — изменение термодинамического потенциала нагруженного тела вследствие образования новых поверхностей при распаде дилатона; $\Delta\Phi_у$ — изменение упругой энергии нагруженного тела при образовании очага разрушения. Заметим, что из (11) и (12) следует, что $\omega_+ = \omega_-$ при $\Delta\Phi_п = -\Delta\Phi_у$, что совпадает с известным условием Грифитса [15], которое является критерием начала процесса разрушения.

Величину $\Delta\Phi_п(\sigma, T)$ можно представить в виде $\Delta\Phi_п = \alpha(\sigma, T) S_d$, где α — удельная свободная поверхностная энергия нагруженного тела, S_d — площадь поверхности образующегося после распада дилатона очага разрушения (субмикротрещины). Точная зависимость $\alpha(\sigma, T)$ от σ нам неизвестна, однако в том же приближении, что и (5), имеем

$$\alpha \approx \alpha(0, T) - (\partial\alpha/\partial\sigma)_{\sigma=0}\sigma \equiv \alpha_0 - \alpha_1\sigma.$$

Подставляя полученные результаты в (11), найдем в конечном итоге

$$\omega_- \sim \frac{s}{\Lambda} \exp[-(U_0' + \gamma'\sigma - \Delta\Phi_у)/kT]. \tag{13}$$

Здесь

$$U_0' = U_0 - \alpha_0 S_d, \quad \gamma' = -\gamma + \alpha_1 S_d. \tag{14}$$

В качестве оценки параметра γ' можно принять $\gamma'=\gamma$, где γ определяется формулой (10).

Таким образом, как следует из (13) и (14), энергия активации восстановления разорванных связей при не очень малых σ оказывается существенно больше энергии активации их разрыва [11, 12], что связано еще и с тем, что $\Delta\Phi_y \sim -\sigma^2$ и эта энергия также добавляется к U_0'. Однако при достаточно малых σ (см. выше) возможность восстановления разорванных связей необходимо учитывать, поскольку это ведет, как показано в работах [13, 16], к отклонению зависимости τ от σ от задаваемой формулой Журкова (1).

Для определения долговечности нагруженного тела необходимо решить кинетическое уравнение (2), задав вероятности перехода $W(\mathrm{l}'/\mathrm{l},\ t)$ и начальное распределение трещин $f(\mathrm{l},\ 0)$. Затем по известной функции $f(\mathrm{l},\ t)$ необходимо найти тот момент времени, когда первая из имеющихся в нагруженном теле трещин достигнет размеров образца и тем самым разрушит его. При этом существенную роль в долговечности нагруженного тела играет структура материала. Так, в низкопрочных материалах всегда имеется начальное распределение трещин по степени опасности и поэтому долговечность в этом случае определяется временем развития наиболее опасной трещины.

В прочных и высокопрочных материалах долговечность определяется в основном длительностью процесса накопления очагов разрушения и их коалесценции до образования трещины, разрушающей нагруженное тело, а не временем ее развития [17-20]. Для таких материалов кинетическое уравнение (2) существенно упрощается, если пренебречь частотой восстановления связей, ввиду их малой вероятности при не очень малых напряжениях. Имеем для однородного тела

$$dN_d(t)/dt = (N - N_d(t))\,\omega_+. \qquad (15)$$

Здесь $N_d(t)$ — число образовавшихся к моменту времени t очагов разрушения (субмикротрещин) в результате распада критических дилатонов; $N=V/V_d$ — исходное число разрушаемых элементов нагруженного тела; V, V_d — объемы тела и дилатона. Решение уравнения (15) имеет вид

$$c = 1 - \exp(-\omega_+ t), \qquad (16)$$

где $c=N_d/N$.

Уравнение (16) описывает релаксацию нагруженного тела до момента начала процесса коалесценции субмикротрещин, которое можно принять примерно равным долговечности τ. Коалесценция субмикротрещин начинается тогда, когда среднее расстояние между ними становится по порядку величины равным их размеру, т. е. $\sqrt[3]{V/N_d} \sim \Lambda$. Отсюда следует, что $c \sim V_d/\Lambda^3$. Так как $V_d \sim \Lambda a^2$, то $c \sim (a/\Lambda)^2$. Подставляя это значение c в уравнение (16) и учитывая, что $c \ll 1$, получим следующее выражение для долговечности прочных и высокопрочных материалов:

$$\tau \sim \tau_0 \exp((U_0 - \gamma\sigma)/kT), \qquad (17)$$

где

$$\tau_0 \sim \tau_d (a/\Lambda)^2, \quad \tau_d = 1/\omega_d. \qquad (18)$$

Так как $\tau_d \sim 10^{-9} \div 10^{-10}$ с [4, 6-8], а $(a/\Lambda)^2 \sim 10^{-3} \div 10^{-4}$ (для металлов), то $\tau_0 \sim 10^{-12} \div 10^{-14}$ с, что хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Долговечность сверхпрочных материалов рассмотрена в работе [13]. Однако и в этом случае оказалось, что $\tau \sim \exp(U_0 - \gamma\sigma)/kT)$, так как подавляющая часть долговечности определяется временем появления первого очага разрушения.

Список литературы

[1] Журков С. Н., Закревский В. А., Томашевский Э. Е. // ФТТ. 1964. Т. 6. № 6. С. 1912—1914.
[2] Журков С. Н., Корсуков В. Е. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 7. С. 2071—2080.

[3] Журков С. Н., Куксенко В. С., Слуцкер А. И. // ФТТ. 1969. Т. 11. № 2. С. 269—307.
[4] Кусов А. А. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 10. С. 3095—3099.
[5] Кусов А. А., Веттегрень В. И. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 11. С. 3350—3358.
[6] Журков С. Н. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 11. С. 3344—3349.
[7] Журков С. Н. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 10. С. 3119—2123.
[8] Петров В. А. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 10. С. 3124—3127.
[9] Журков С. Н. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1967. Т. 3. № 10. С. 1767—1776.
[10] Бартенев Г. М. // Изв. АН СССР, ОТН. 1955. № 9. С. 53—54.
[11] Карташов Э. М., Шевелев В. В., Валишин А. А., Бартенев Г. М. // Высокомолек. соед. А. 1986. Т. 28. № 4. С. 805.
[12] Bartenev G. M., Shevelev V. V., Kartashov E. M., Valishin A. A. // Acta polimerica. 1987. V. 38. N 12. P. 674—678.
[13] Шевелев В. В., Карташов Э. М. // Физ.-хим. механика материалов. 1988. № 6. С. 49—53.
[14] Регель В. Р., Слуцкер А. И., Томашевский Э. Е. Кинетическая природа прочности твердых тел. М.: Наука, 1974. С. 560.
[15] Griffith A. A. // Phil. Trans. Roy. Soc. A. 1920. V. 221. P. 162.
[16] Карташов Э. М., Бартенев Г. М. // Высокомолек. соед. А. 1981. Т. 23. № 4. С. 904—912.
[17] Журков С. Н., Куксенко В. С. // Механика полимеров. 1974. Т. 5. С. 792—801.
[18] Слуцкер А. И., Куксенко В. С. // Механика полимеров. 1975. Т. 1. С. 84—94.
[19] Готлиб Ю. Я., Добродумов А. В., Ельяшевич А. М., Светлов Ю. Е. // ФТТ. 1973. Т. 15. С. 801.
[20] Петров В. А. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 10. С. 3110—3113.

Московский институт тонкой
химической технологии им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
22 ноября 1988 г.
В окончательной редакции
2 марта 1989 г.