

Аналитическая оценка распределения дислокаций в вершине остановившихся трещин

© Ю.И. Тялин, В.А. Федоров, Т.Н. Плужникова, В.А. Куранова

Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина,
392622 Тамбов, Россия

E-mail: feodorov@feodorov.tstu.ru

(Поступила в Редакцию 15 ноября 1999 г.
В окончательной редакции 21 января 2000 г.)

Методом машинного моделирования изучено пластическое течение в вершине остановившейся трещины применительно к кристаллам фтористого лития. Рассмотрены две стадии формирования дислокационной структуры в вершине трещины: образование линий скольжения в момент остановки трещины и их эволюция после разгрузки образца и частичного залечивания трещины. Определены размеры и количество дислокаций в линии скольжения в зависимости от величины нагружающего усилия в момент остановки трещины и напряжений трения. Показано, что при разгрузке и залечивании образца часть дислокаций выходит на плоскость трещины под действием сил взаимного отталкивания и изображения так, что плотность дислокаций максимальна на некотором расстоянии от вершины трещины. В непосредственной близости от вершины трещины имеется ограниченная зона, свободная от дислокаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-01-00617).

Разрушение большинства кристаллических твердых тел сопровождается пластической деформацией, интенсивность и степень локализации которой зависят от темпа движения трещины [1,2]. В щелочно-галоидных кристаллах при частичной или полной остановке трещины формируются пластические зоны в виде характерного "дислокационного креста" [3]. Испущенные дислокации создают некоторое пластическое вскрытие [4] и приводят к изгибу берегов трещины, что препятствует ее залечиванию после снятия нагрузки [5]. В настоящей работе сделана оценка эмиссионной способности трещины применительно к кристаллам фтористого лития. В экспериментах с этими кристаллами наблюдаются различные фигуры травления в вершине трещины в зависимости от условий ее торможения и остановки. При асимметричном сколе регистрируются как полностью симметричные, так и направленные только вперед линии скольжения. Для скачкообразно продвигающихся под действием импульсной нагрузки трещин чаще отмечаются линии и полосы скольжения, направленные в сторону, противоположную движению трещины. Общее же число дислокаций, как правило, не сильно зависит от того, каким образом останавливается трещина. Поэтому далее будет приведен анализ наиболее простого варианта пластической зоны, характерного для скачкообразно продвигающейся трещины — скольжение в полуплоскостях, примыкающих к поверхности трещины.

Представим пластическую зону одиночными, симметричными относительно плоскости трещины линиями скольжения (рис. 1). Будем различать два этапа формирования дислокационной структуры в вершине трещины: образование линий скольжения в момент остановки трещины, когда образец остается нагруженным, и их эволюцию после снятия нагрузки.

Предположим, что трещина расположена в плоскости (010) и двигалась до остановки в направлении [100]. При составлении уравнений равновесия дислокаций, эмитируемых трещиной в плоскости скольжения, следует учитывать напряжения сил изображения (действующие на дислокацию со стороны трещины), взаимодействие дислокаций и сопротивление кристалла сдвигу. Для схемы пластического течения (рис. 1) уравнения равновесия будут иметь следующий вид:

$$\tau^T(x_n) + \sum \tau^D(x_n, x_j) - \tau_S - \tau_i = 0, \quad n = 1, 2, \dots, m,$$

где $\tau^T(x_n)$ — напряжения, создаваемые в плоскости скольжения трещиной, $\tau^D(x_n, x_j)$ — напряжения, действующие на n -ю дислокацию со стороны j -й и ей сопряженной, τ_S — напряжения трения решетки, τ_i — напряжения, создаваемые силой изображения [6].

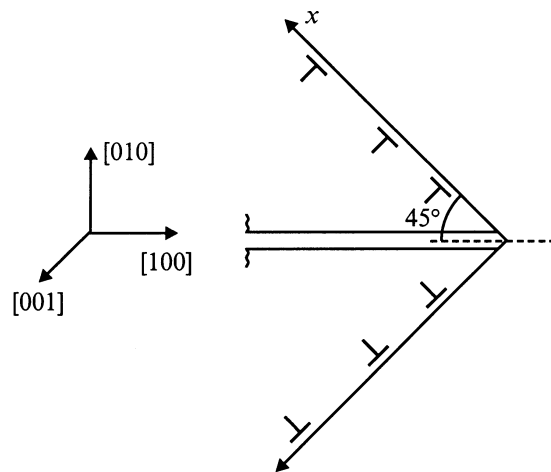


Рис. 1. Схема пластического течения в вершине трещины.

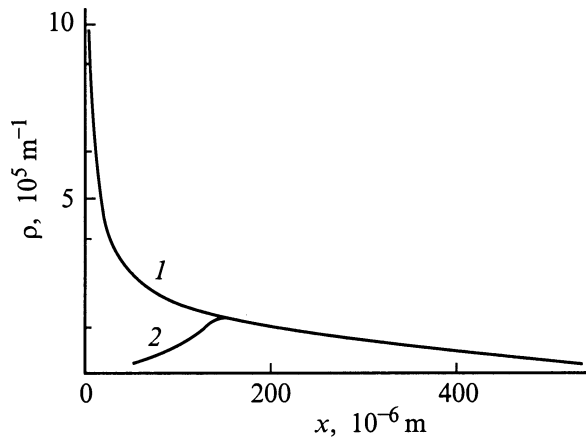


Рис. 2. Плотность дислокаций в линии скольжения. 1 — нагруженный образец; 2 — после разгрузки.

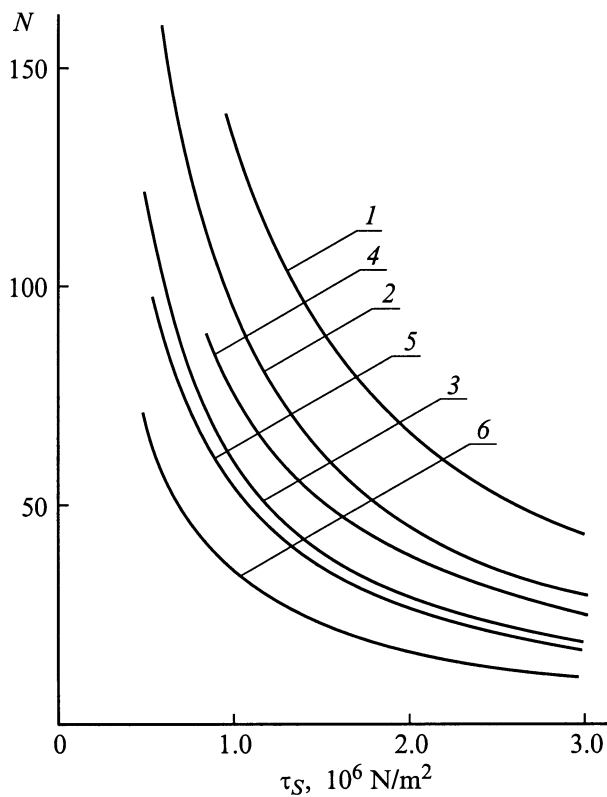


Рис. 3. Число дислокаций в линии скольжения в зависимости от расклинивающих усилий. P, N : 1 — 6, 2 — 5, 3 — 4 (4–6 — соответственно после снятия нагрузки).

Эмиссия дислокаций прекратится, когда напряжения трения в точке максимума станут меньше напряжений, инициирующих пластическое течение.

Система уравнений равновесия решалась численно, методом последовательной верхней релаксации [7].

Показано, что плотность дислокаций $\rho(x) = \Delta N / \Delta x$ (кривая 1 рис. 2) в хвостовой части линии скольжения, примыкающей к трещине, составляет $\approx 10^6 \text{ m}^{-1}$.

В области головных дислокаций ее величина уменьшается более чем на порядок.

Общее число дислокаций в линии скольжения зависит от нагружающего усилия в момент остановки трещины и напряжений трения и может изменяться в широких пределах (рис. 3). В общем случае при уменьшении сил сопротивления со стороны кристалла движению дислокаций лидирующие дислокации удаляются от трещины на большие расстояния, уменьшая тем самым величину запирающих источник напряжений. Их общее число N увеличивается. При неизменном τ_s число дислокаций в линии скольжения растет с увеличением расклинивающей силы p , т.е. в кристаллах с большей поверхностной энергией γ следует ожидать и более интенсивного пластического течения за счет увеличения напряжений в вершине трещины.

Длина линий скольжения l (кривые 1–3 на рис. 4) примерно также зависит от величин p (или γ) и τ_s . При используемых в расчетах значениях усилий и напряжений трения пробег головной дислокации меняется от десятков микрон до $\approx 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}$.

Интересным представляется то обстоятельство, что в голове скопления $\tau^T(x) < \tau_s$, т.е. в пробег лидирующих дислокаций больший вклад вносит взаимное отталкивание дислокаций в линии скольжения, чем напряжения сдвига от трещины. Действительно, если размер пластической зоны ограничить условием $\tau^T(x) = \tau_s$, то для определения длины скопления l^* получим выражение $l^* = (K/\tau_s)^2$, где K — коэффициент интенсивности напряжений. Рассчитанные по нему значения l^* приведены на рис. 4 (кривые 4–6). Видно, что l^* всегда меньше l , причем различие возрастает с увеличением длины скопления (или числа дислокаций в нем).

Отмеченный выше факт обладает, очевидно, достаточной общностью и будет иметь место при зарождении дислокаций на любых неоднородностях структуры,

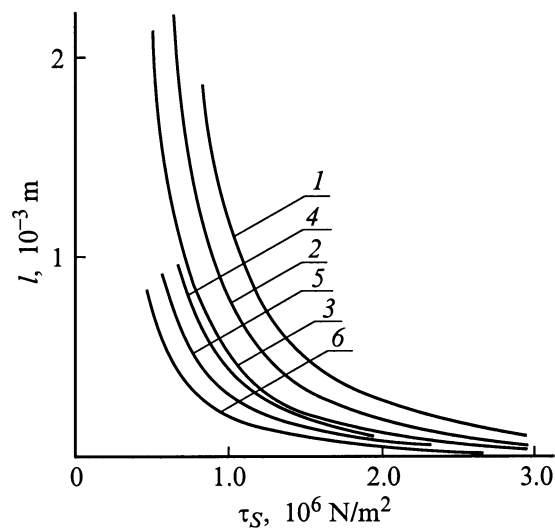


Рис. 4. Зависимость длины линий скольжения от напряжений трения. P, N : 1 — 6, 2 — 5, 3 — 4 (4–6 — соответственно после снятия нагрузки).

создающих локальную концентрацию напряжения. Размер пластической области в этом случае контролируется не пространственным распределением напряженного состояния, а амплитудным значением касательных напряжений.

Далее рассматривалась вторая стадия формирования дислокационной структуры в вершине трещины — трансформация рассчитанного выше скопления после снятия внешней нагрузки и частичного залечивания трещин. Дислокациям представляется возможность перемещаться из исходного состояния под действием сил отталкивания и изображения (процедура вычислений на этом этапе расчета аналогична использованной в [8]). неподвижными считаются дислокации, для которых абсолютная величина действующих сил не превосходит сил трения. Часть дислокаций может покинуть кристалл и выйти на поверхность трещины, если они в процессе движения приблизятся к ней на расстояние $r = A/\tau_s$, ($A = Gb/4\pi(1 - \nu)$, G — модуль сдвига, b — вектор Бюргера дислокации, ν — коэффициент Пуассона), где силы изображения превышают силы трения. Таким образом, в процессе релаксации скопления происходит не только изменение пространственного положения отдельных дислокаций, но может меняться и их число.

Расположение дислокаций в голове скопления (дислокации с номерами $j \leq 37$) сохранилось прежним. В области же, примыкающей к трещине, число дислокаций уменьшилось, одновременно изменились расстояния между ними. Существенно изменилось и распределение плотности дислокаций по длине скопления (кривая 2 на рис. 4). Зависимость ρ от x уже не является монотонной, а имеет сложный вид с экстремумом на значительном расстоянии от вершины трещины. Причем максимальное значение плотности дислокаций равно $2 \cdot 10^5 \text{ м}^{-1}$.

Информация о числе дислокаций, остающихся в кристалле после разгрузки, представлена на рис. 3 (кривые 4–6). Общая ситуация соответствует выходу на поверхность трещины $\sim 40\%$ дислокаций, т.е. наряду с односторонним течением имеет место заметная доля обратимой пластической деформации. Величина пластического вскрытия определяется числом дислокаций, испущенных трещиной в системе скольжения $\{110\} \{110\}$. При разгрузке образца вскрытие трещины уменьшается на величину $\delta = \sqrt{2}n_1b$, где n_1 — число дислокаций, вышедших на поверхность скола. Конечное же вскрытие определится количеством дислокаций, оставшихся в кристалле у вершины трещины.

Если при остановке трещины пластичность в ее вершине незначительна и $\delta < 20 \text{ нм}$, то после выхода части дислокаций на поверхность трещины ее берега могут сблизиться на расстояния, достаточные для восстановления ионных связей. В этом случае произойдет самопроизвольное залечивание.

Исследовалось также изменение характеристик пластического течения в вершине трещины для случаев, когда деформированная зона представлялась набором из нескольких линий скольжения. Предполагалось, что линии скольжения расположены на незначительном рас-

стоянии друг от друга, так что взаимодействие какой-либо дислокации с дислокациями в соседних плоскостях можно учесть с помощью увеличения вектора Бюргера пропорционально количеству линий скольжения. Суммарный вектор Бюргера дислокаций в линии скольжения примерно сохраняется $b_1N_1 \cong b_2N_2 \cong b_3N_3$, т.е. пластическое раскрытие трещины не будет зависеть от того, моделируется ли пластическая зона дискретными решеточными дислокациями или супердислокациями с вектором Бюргера $B = nb$. Длина линий скольжения уменьшается с увеличением вектора Бюргера дислокации так, что $l_1 > l_2 > l_3$. Относительное уменьшение размера пластической зоны также невелико, в частности при увеличении вектора Бюргера дислокации в 3 раза длина линии скольжения уменьшается на $\sim 10\%$.

Отметим, что расстояние N -й дислокации от вершины трещины гораздо больше расстояния между нею и $N-l$ -й дислокацией, т.е. в непосредственной близости от вершины трещины имеется ограниченная зона, свободная от дислокаций. Существование таких зон было показано в [8] для сдвиговых трещин. Для объяснения экспериментально наблюдаемых особенностей распределения дислокаций у вершины трещины [9] авторы рассмотрели модель пластического течения в виде линии скольжения на продолжении трещины. В отличие от модели течения в [10], не прогнозирующей существование свободной от дислокаций зоны, авторами [8] было предположено, что эмиссия дислокаций трещиной прекращается при уменьшении коэффициента интенсивности напряжений в ее вершине до заданного значения (в [10] это нулевое значение). Таким образом, фактически была рассмотрена линия скольжения в вершине трещины, число дислокаций в которой недостаточно для записания вершины трещины как источника дислокаций. В рамках предложенного подхода существование зоны, свободной от дислокаций, является естественным следствием разгрузки образца, когда часть дислокаций выходит на поверхность скола под действием сил отталкивания и изображения.

Список литературы

- [1] А. Тетельмен. В кн.: Разрушение твердых тел. Металлургия, М. (1967). С. 261.
- [2] А.Н. Орлов, В.Л. Инденбом. В сб.: Физика хрупкого разрушения. Ч. 2. Киев (1976). С. 18.
- [3] М.П. Шаскольская, Ван Янь-Вэнь, Гу Шу-Чжао. Кристаллография 6, 4, 605 (1961).
- [4] В.А. Федоров, Т.Н. Плужникова, Ю.И. Тялин. ФТТ 42, 4, 685 (2000).
- [5] В.М. Финкель, О.Г. Сергеева, В.В. Шегай. Кристаллография 36, 1, 170 (1991).
- [6] Ю.И. Тялин, В.А. Федоров, Т.Н. Плужникова, В.А. Куранова. Вестник ТГУ 4, 1, 23 (1999).
- [7] Дж. Ортега, В. Рейнболдт. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. Мир, М. (1975). 558 с.
- [8] В.И. Владимиров, Ш.Х. Ханнанов. ФММ 30, 2, 281 (1970).
- [9] Dai Shu-Ho, Y.C.M. Li. Scr. met. 16, 2, 183 (1982).
- [10] S. Kobayashi, S.H. Ohr. Phil. Mag. 42, 6, 763 (1980).