

Моделирование поведения дислокационного ансамбля вблизи вершины трещины при постоянной нагрузке

Е. М. Борисовская

Проведено моделирование поведения дислокационного ансамбля вблизи вершины трещины при постоянной нагрузке. Получены зависимости энергии дислокационного ансамбля, числа и положения дислокаций от времени. Показано, что напряжение вблизи границы зерна незначительно растет со временем до тех пор, пока первая пара дислокаций не дойдет до границы. Также показано, что коэффициент интенсивности напряжений имеет немонотонную зависимость от времени. Однако со временем, поскольку дислокационный источник оказывается заблокированным и дислокационный ансамбль стремится к равновесию, значение коэффициента становится постоянным.

Ключевые слова: ансамбль дислокаций, вершина трещины, граница зерна.

Понимание процессов эволюции дислокационного ансамбля вблизи вершины трещины важно для изучения закономерностей разрушения материалов и прогнозирования их свойств. Результаты многочисленных экспериментов [1—4] показывают, что металлы при средних гомологических температурах не разрушаются хрупко путем раскрытия трещины, а перед вершиной трещины образуется пластическая зона, что приводит к резкому росту трещиностойкости.

Райс и Томсон впервые предложили модель, объясняющую поведение дислокации у вершины трещины и разработали критерий вязко-хрупкого перехода [5]. В этой работе показано, что при увеличении внешней нагрузки могут наблюдаться два процесса: либо вершина трещины будет продвигаться вдоль плоскости скола, либо произойдет эмиссия дислокаций. Основываясь на разработанном Райсом и Томсоном критерии, можно предсказать, будет ли разрушение материала абсолютно хрупким или оно будет сопровождаться образованием пластической зоны вблизи вершины трещины.

Установлено, что эмиссия дислокаций происходит при условии, что приложенное напряжение достигает определенного критического уровня. Эмитированная дислокация покидает вершину трещины, что вызывает напряжение, действующее на дислокационный источник и вершину трещины, и может опять привести либо к раскрытию трещины, либо к срабатыванию источника. Таким образом, со временем вблизи вершины трещины образуется дислокационное скопление. Особенности поведения дислокаций вблизи вершины трещины обусловлены, в первую очередь, действующими на них напряжениями.

Существует достаточно много теоретических работ [6—15], посвященных этой проблеме, однако в большинстве из них поставленные задачи решаются без учета напряжений, действующих на вершину трещины и дислокации ансамбля. В предыдущих наших работах детально проанализированы напряжения, действующие на дислокации вблизи вершины

трещины [16, 17], а также проведено моделирование дислокационного скопления, эмитируемого источником [18]. Цель настоящей работы — компьютерное моделирование поведения дислокационного ансамбля, зарождающегося от источника вблизи вершины трещины.

В данной работе пластическую зону моделировали двумя полосами скольжения с углом наклона 45° , исходящими из вершины трещины (рис. 1). Считалось, что трещина нагружена по типу I — нормальный отрыв. Дислокации эмитируются источником, расположенным на расстоянии $40b$ (b — вектор Бюргерса) от вершины трещины. Эмиссия происходит, если напряжение на источнике превосходит напряжение Пайерлса. Считалось, что дислокации не могут выйти за пределы зерна. Эволюция дислокационной структуры протекает во времени, внешнее напряжение остается постоянным (10 МПа).

Скорость дислокаций линейно зависит от напряжения [19]:

$$v = v_c \sigma, \quad (1)$$

где

$$v_c = \frac{D_s b}{kT}, \quad (2)$$

здесь D_s — коэффициент самодиффузии. Считается, что дислокации не переползают и могут двигаться только на своей плоскости скольжения.

Как известно, напряжение, действующее на дислокацию вблизи вершины трещины, состоит из трех компонентов.

1. Отталкивающее напряжение, создаваемое внешней силой с учетом концентрации напряжений у вершины [20], описывается формулой

$$\sigma_{cr} = \sigma_v \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \cos(3\theta/2) \cdot \sqrt{\frac{a}{r}}, \quad (3)$$

где σ_v — внешнее напряжение; θ — угол между плоскостью трещины и плоскостью скольжения дислокации; a — длина дислокации.

2. Притягивающее напряжение, вызываемое силами изображения [5], в случае только одной дислокации определяется выражением

$$\sigma_{im} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)r}, \quad (4)$$

где G — модуль сдвига; r — расстояние до вершины трещины.

3. Сила трения решетки, которая равна напряжению Пайерлса σ_f (рис. 2). Если вблизи вершины трещины находится ансамбль дислокаций, к этим напряжениям добавляются напряжения других дислокаций ансамбля и их сил изображения.

Моделирование проводили методом дислокационной динамики. В каждый момент времени рассчитывали напряжения, действующие на дислокации

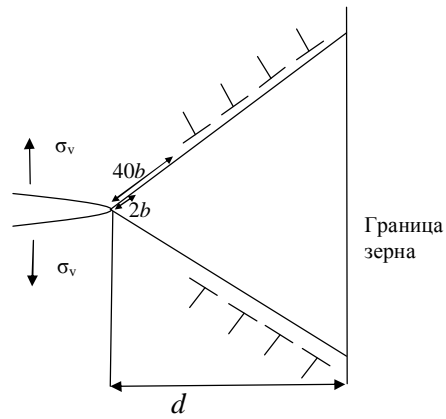


Рис. 1. Пластическая зона вблизи вершины трещины.

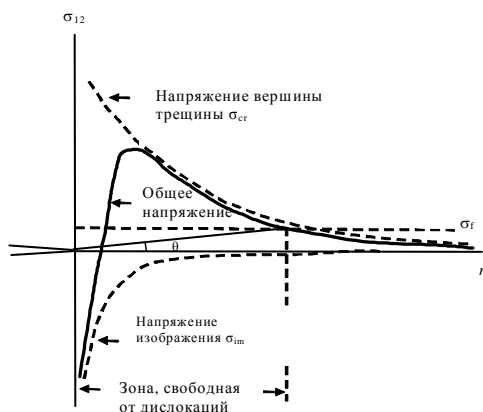


Рис. 2. Напряжения, действующие на дислокацию вблизи вершины трещины [1].

что источник сработал и эмитировал две дислокации.

Также определяли текущий коэффициент интенсивности напряжений K и энергию движения E как произведение действующего напряжения на пройденный путь (прирост энергии движения за шаг времени dt есть $\sigma b v dt$) всех подвижных дислокаций и касательного напряжения вблизи границы зерна σ_g .

В качестве объекта для моделирования выбран молибден: $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $G = 19$ ГПа, $\nu_c = 7 \cdot 10^{-6}$ м·с/кг [21], $T = 20$ °С, напряжение Пайерлса — 50 МПа [22], длина трещины $a = 0,2$ см.

Результаты работы

В результате численного моделирования получено значение коэффициента интенсивности напряжений K (рис. 3), оно зависит от времени немонотонно. Это обусловлено тем, что только что выпущенная источником пара дислокаций из-за близости источника к вершине трещины оказывает определяющее влияние на значение K . Затем родившаяся дислокационная пара отходит от вершины трещины и напряжение вблизи вершины трещины опять начинает расти. Коэффициент интенсивности напряжений достаточно быстро уменьшается вследствие большого количества дислокаций, которые быстро рождаются из-за бесконечной скорости нагружения. В случае квазиравновесного нагружения такого большого и быстрого падения K не наблюдалось бы. Значение K при малых временах не зависит от размеров зерна, поскольку дислокации не сразу “чувствуют” границу. Со временем оно стремится к константе, потому что дислокационный источник оказывается заблокированным, а сама система медленно стремится к равновесию. Равновесное значение K меньше для маленьких зерен из-за того, что граница не дает отойти дислокациям от вершины трещины.

Судя по полученным данным, вероятность подрастания трещины при достаточной внешней нагрузке на начальной стадии очень велика вследствие того, что дислокаций немного и они плохо экранируют вершину трещины от начального напряжения (рис. 3, а). Следует отметить, что полученные нами значения K несколько завышены, поскольку не учитывалось скругление трещины после каждой выпущенной пары дислокаций.

ансамбля, затем из этих напряжений определяли скорости и перемещения дислокаций. Шаг по времени выбирали таким образом, чтобы дислокация, на которую действует максимальное напряжение, прошла расстояние $2b$. Затем рассчитывали напряжение на источнике дислокаций. Для этого находили напряжения на двух виртуальных дислокациях на расстоянии $40b$ от вершины трещины, и если напряжения превышали напряжения Пайерлса, то считалось,

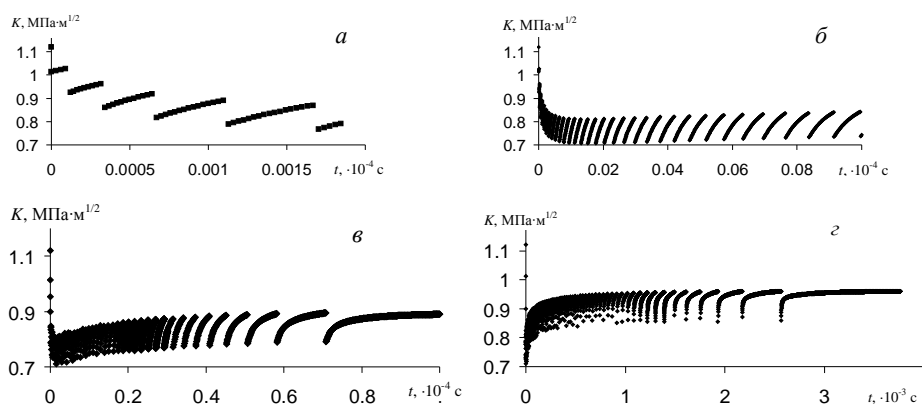


Рис. 3. Напряжение, раскрывающее трещину, в зависимости от времени для размеров зерна 1 (*a—б*) и 10 мкм (*в*): *a* — до $2 \cdot 10^{-6}$ с; *б* — до 10^{-5} с; *в* — до 10^{-4} с; *г* — до $4 \cdot 10^{-3}$ с.

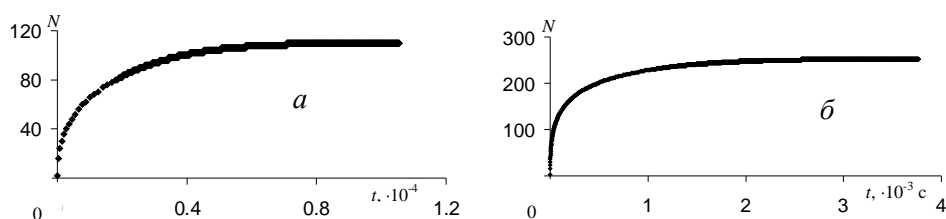


Рис. 4. Зависимость числа дислокаций от времени для размеров зерна 1 (*a*) и 10 мкм (*б*).

Учитывая скругление вершины трещины, можно утверждать, что дальнейшее движение трещины при постоянной нагрузке и при развитой пластической зоне вряд ли возможно (K_{Ic} для молибдена равен $\sim 5 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$). Поэтому дальнейшее разрушение может произойти только слиянием магистральной трещины с микротрещиной, которая может зародиться либо вблизи границы зерна из-за больших напряжений в голове скопления, либо вблизи вершины трещины из-за большой концентрации дислокаций. Число дислокаций и их распределение вблизи вершины трещины оказывают определяющее влияние на возможное дальнейшее разрушение материала.

Поскольку напряжение на дислокационном источнике падает после рождения каждой следующей пары дислокаций и нужно все больше времени, чтобы эта пара отошла от вершины трещины и разблокировала источник, число дислокаций (рис. 4) монотонно растет со временем, постепенно выходя на равновесное значение.

Распределение дислокаций вблизи вершины трещины представлено на рис. 5, 6. Как видно на рисунках, вначале эволюция дислокационного ансамбля протекает одинаково и не зависит от размера зерна, поскольку дислокации еще не чувствуют границы. При размере зерна 1 мкм влияние границы становится заметным значительно раньше, чем при размере 10 мкм. При уменьшении зерна эволюция дислокационной структуры протекает быстрее, потому что в этом случае в ансамбле меньшее количество дислокаций. При малом зерне значительная часть дислокационного ансамбля оказывается прижата к границе зерна внешним

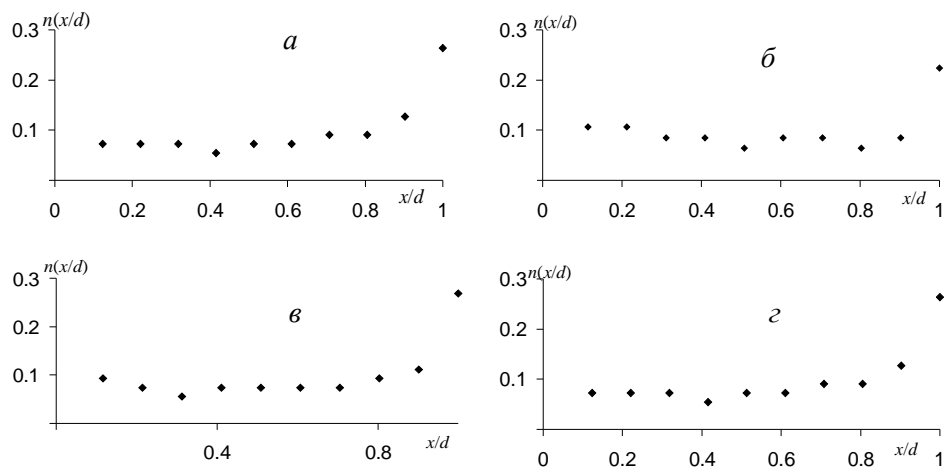


Рис. 5. Изменение распределения дислокаций в зависимости от времени (a — 10^{-5} с; $б$ — $3 \cdot 10^{-5}$ с; $в$ — $6 \cdot 10^{-5}$ с; $г$ — $9,24 \cdot 10^{-5}$ с) при размере зерна 1 мкм.

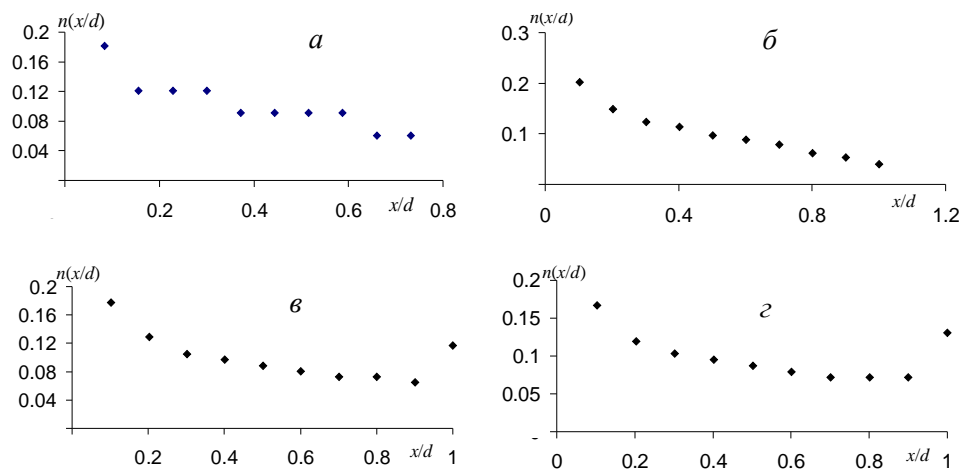


Рис. 6. Изменение распределения дислокаций в зависимости от времени при размере зерна 10 мкм: a — 10^{-5} с; $б$ — 10^{-3} с; $в$ — $2 \cdot 10^{-3}$ с; $г$ — $3,77 \cdot 10^{-3}$ с.

напряжением. В случае большого зерна дислокации располагаются вблизи вершины трещины. Это объясняется тем, что во втором случае притягивающие к вершине трещины силы изображения оказываются преобладающими из-за большего числа дислокаций в ансамбле. Поэтому из результатов проведенного моделирования следует, что если зерно мелкое, то более вероятно разрушение материала от границы зерна путем слияния магистральной трещины с микротрещиной, образованной из-за концентраций напряжений в голове скопления перед границей зерна.

Как известно [23], разрушение в данном объеме материала наступает при поглощении предельной энергии. Поэтому энергия, полученная материалом, и ее распределение в объеме является важной характеристикой. Энергия движения дислокационного ансамбля в зависимости от времени имеет монотонную зависимость, как и число дислокаций (рис. 7). Это обусловлено тем, что напряжения, действующие

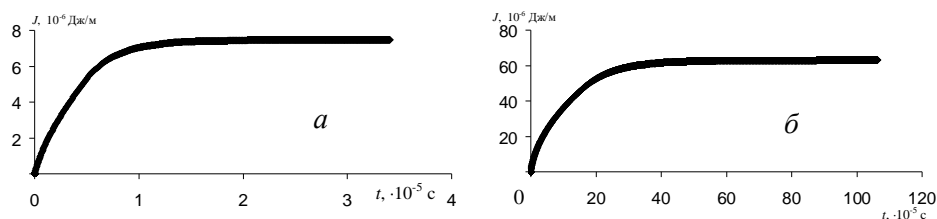


Рис. 7. Энергия движения дислокационного ансамбля в зависимости от времени для размеров зерна 1 (а) и 10 мкм (б).

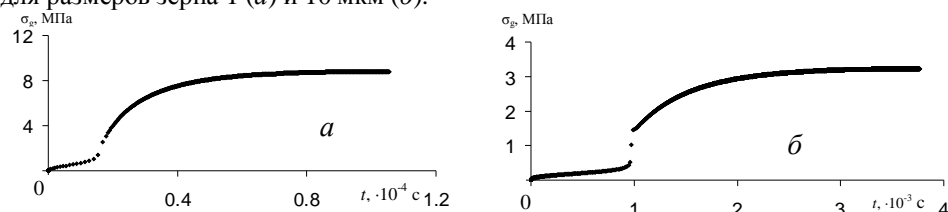


Рис. 8. Напряжение на расстоянии $40b$ от границы зерна размером 1 (а) и 10 мкм (б) в зависимости от времени.

на все дислокации ансамбля, имеют примерно один порядок, поэтому данная величина зависит от времени примерно так же, как число дислокаций.

Поскольку при большом размере зерна (10 мкм) значительная часть дислокаций находится вблизи вершины трещины на расстоянии 1—2 мкм, в этом небольшом объеме запасена большая энергия, что может привести к появлению микротрещин в этой области. Поэтому материал с большим размером зерна, скорее всего, разрушается из-за слияния микротрещин, находящихся вблизи вершины трещины, с магистральной трещиной. Это приводит к слабой зависимости прочностных характеристик от размера зерна при их больших размерах, что подтверждено экспериментально [24].

Суммарное касательное напряжение вблизи границы зерна является важной характеристикой, поскольку может инициировать работу дислокационного источника в соседнем зерне. Это напряжение (рис. 8) слабо растет со временем, пока первая пара дислокаций не дойдет до границы. Затем происходит резкий скачок, что вызвано торможением дислокаций о границу зерна, после чего напряжение опять начинает расти достаточно слабо, поскольку дислокационный ансамбль стремится к равновесию. Интересно отметить, что напряжение при размере зерна 1 мкм почти в 3 раза выше, чем при размере зерна 10 мкм, хотя число дислокаций в последнем случае почти в 2,5 раза больше. Это можно объяснить тем, что при большем числе дислокаций растут силы изображения, которые удерживают дислокации ансамбля вблизи вершины трещины.

Таким образом, в случае мелких зерен более вероятен процесс вовлечения в пластическую деформацию соседних зерен, то есть дислокационное скопление, сгенерированное вершиной трещины, вызывает работу дислокационного источника в соседнем зерне. Мелкозернистые материалы должны быть более прочными (что и подтверждается экспериментом), поскольку в этом случае пластическая зона распространяется на несколько зерен, а продвижение трещины происходит за счет ее слияния с микротрещиной, образовавшейся вблизи границы зерна.

Выводы

На ранних этапах развития эволюция дислокационного ансамбля не зависит от размера зерна. Это обусловлено тем, что дислокации еще не чувствуют границы. В случае малого зерна влияние границы становится заметным значительно раньше, чем при большом зерне.

При уменьшении зерна эволюция дислокационной структуры протекает быстрее, поскольку в этом случае в ансамбле меньшее количество дислокаций. При малом зерне значительная часть дислокационного ансамбля оказывается прижата к границе зерна внешним напряжением, однако при росте зерна значительная часть дислокаций оказывается вблизи вершины трещины, что вызвано ростом сил изображения при большем числе дислокаций в ансамбле.

Число дислокаций монотонно растет со временем, стремясь к равновесному значению. При большом зерне возрастает число дислокаций в ансамбле при одинаковом внешнем напряжении.

Напряжение вблизи границы зерна слабо растет со временем до тех пор, пока первая пара дислокаций не дойдет до границы, что приводит к резкому скачку его значения, поскольку дислокации тормозятся на границе зерна.

Коэффициент интенсивности напряжений имеет немонотонную зависимость от времени, потому что выпущенная источником пара дислокаций из-за близости к вершине оказывает определяющее влияние на его значение. Со временем, из-за блокировки дислокационного источника, оно стремится к константе.

Энергия движения дислокационного ансамбля имеет такую же монотонную зависимость от времени, как и число дислокаций, поскольку напряжения, действующие на все дислокации ансамбля, имеют примерно один порядок.

1. *Ohr S. M.* An electron microscopy study of crack tip deformation and its impact on the dislocation theory of fracture // *Mater. Science and Engineering*. — 1985. — **72**. — P. 1—35.
2. *Ferney B. D., Hsia K. J.* The influence of multiple slip systems on the brittle-ductile transition in silicon // *Ibid.* — 1999. — **A260**. — P. 1—9.
3. *Hsia K. J., Argon A. S.* Experimental study of the mechanisms of brittle-to-ductile transition of cleavage fracture in Si single crystals // *Ibid.* — 1994. — **A176**. — P. 111—119.
4. *Hirsch P. B., Roberts S. G., Samuels J.* The brittle-ductile transition in silicon. II. Interpretation // *Proc. R. Soc. London*. — 1989. — **A421**. — P. 25—53.
5. *Rice J. R., Thomson R.* Ductile versus brittle behaviour of crystals // *Phil. Mag.* — 1974. — **29**. — P. 73—97.
6. *Needleman A.* Computational mechanics at the mesoscale // *Acta Mater.* — 2000. — **48**. — P. 105—124.
7. *Hsia K. J., Argon A. S.* Experimental study of the mechanisms of brittle-to-ductile transition of cleavage fracture in Si single crystals // *Mater. Science and Engineering*. — 1994. — **A176**. — P. 111—119.
8. *Rice J. R.* Dislocation nucleation from a crack tip: an analysis based on the Peierls concept // *J. Mech. Phys. Solids*. — 1992. — **40**. — P. 239—271.
9. *Rice J. R., Beltz G. E.* The activation energy for dislocation nucleation at crack // *Ibid.* — 1994. — **42**. — P. 333—360.
10. *Wang T. C.* Dislocation behaviours ahead of crack tip // *Int. J. Solids and Structures*. — 1998. — **35**. — P. 5033—5050.
11. *Lackshmanan V., Li J. C. M.* Edge dislocations emitted along inclined planes from a mode I crack // *Mater. Science and Engineering*. — 1988. — **A104**. — P. 95—104.
12. *Подрезов Ю. Н., Даниленко Н. И., Вербило Д. Г.* О структурной чувствительности механических свойств предварительно деформированных ОЦК-металлов //

- Электронная микроскопия и прочность материалов. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины, 1996. — С. 52—63.
13. *Подрезов Ю. Н., Даниленко Н. И., Демидик А. Н.* Влияние пластической деформации на энергию разрушения порошкового и литого железа // Порошковая металлургия. — 1991. — № 9. — С. 74—79.
 14. *Подрезов Ю. Н., Фирстов С. А., Копылов В. И.* Влияние структуры на механические свойства деформированных ОЦК-металлов // Физика и техника высоких давлений. — 2001. — **11**, № 1.
 15. *Podrezov Yu., Kopylov V., Firstov S., Danylenko M.* Structural sensitivity of the mechanical properties of Fe-Armco high deformed by the equal-channel angular pressure // Там же. — 2001. — **11**, No. 2.
 16. *Борисовская Е. М., Подрезов Ю. Н., Слюняев В. Н.* Моделирования поведения дислокаций вблизи вершины трещины: особенности взаимодействия дислокаций в плоскости скольжения, выходящий из вершины трещины // Электронная микроскопия и прочность материалов. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2003. — Вып. 12. — С. 3—9.
 17. *Борисовская Е. М., Слюняев В. Н., Подрезов Ю. Н.* Особенности взаимодействия дислокаций вблизи вершины трещины // Современные проблемы физического материаловедения. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2006. — Вып. 15. — С. 74—80.
 18. *Борисовская Е. М., Подрезов Ю. Н., Фирстов С. А.* Динамика структурных перестроек с учетом процесса зарождения дислокаций // Электронная микроскопия и прочность материалов. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2007. — Вып. 14. — С. 3—11.
 19. *Хирт Дж., Лоте Н.* Теория дислокаций. — М.: Атомиздат, 1972. — 599 с.
 20. *Райс Дж.* Математические методы в механике разрушения. Разрушение. — Т. 2. — М.: Мир, 1975. — С. 205—331.
 21. <http://www.webelements.com/web/elements/text/Mo>.
 22. *Трефилов В. И., Моисеев В. Ф., Печковский С. П и др.* Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических материалов. — К.: Наук. думка, 1989. — 256 с.
 23. *Иванова В. С.* Усталостное разрушение металлов. — М.: Металлургиздат, 1963. — 272 с.
 24. *Пелло Р. М.* Влияние величины зерна на усталость // Сверхмелкое зерно в металлах. — М.: Металлургия, 1973. — С. 220—232.

Моделювання поведінки дислокаційного ансамблю поблизу вершини тріщини при постійному навантаженні

К. М. Борисовська

Проведено моделювання поведінки дислокаційного ансамблю поблизу вершини тріщини при постійному навантаженні. Отримано залежності енергії дислокаційного ансамблю, числа та положень дислокацій від часу. Показано, що напруга поблизу границі зерна слабо росте з часом до тих пір, доки перша пара дислокацій не дійде до границі. Також показано, що напруга, яка розкриває вершину тріщини, має немонотонну залежність від часу, але з часом, оскільки дислокаційне джерело блокується та дислокаційний ансамбль приходить до рівноваги, значення коефіцієнта стає сталим.

Ключові слова: ансамбль дислокацій, вершина тріщини, границя зерна.

The modelling of the behavior of dislocation ensemble near the crack tip in the case of constant stress

K. M. Borysovska

The behavior of dislocation ensemble near the crack tip was modeled in the case of constant stress. The time dependence of the total energy of the ensemble and the number and coordinates of dislocations was obtained. It was shown that the stress near the grain wall grows slowly until the first dislocation pair reaches to the wall. The crack opening stress is nonmonotonic in time, but finally, since the dislocation source becomes blocked and dislocation ensemble comes to equilibrium, it tends to constant.

Keywords: dislocation ensemble, crack tip, grain wall.