МЕХАНИКА
ТВЕРДОГО ТЕЛА
№ 1 • 2006

УДК 539.375

© 2006 г. Р.В. ГОЛЬДШТЕЙН, М.Е. САРЫЧЕВ

ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ НА КРИТЕРИЙ РОСТА ТРЕЩИН ПО ГРАНИЦЕ СОЕДИНЕНИЯ ДЕФОРМИРУЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ

Развита модель оценки "пластической" работы (работы пластической деформации) w_p, необходимой для поддержания роста трещины по границе деформируемых материалов. Согласно модели эта работа обусловлена эмиссией дислокаций от края (конца) трещины. Получено общее выражение w_p с учетом механизма термодинамического зарождения дислокаций. В ряде важных асимптотических случаев аналитически проанализирована зависимость w_p от работы адгезионного отрыва материалов.

1. Введение. Согласно принятой точке зрения [1] при адгезии на границе двух материалов должно происходить уменьшение свободной энергии w_a соединяемых поверхностей:

$$w_a = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \tag{1.1}$$

где γ_1 и γ_2 – поверхностные натяжения свободных поверхностей граничащих материалов 1 и 2; γ_{12} – натяжение границы.

Величина w_a, называемая работой адгезионного отрыва, играет важнейшую роль в теории трещин. Она, в частности, входит в критерий Гриффитса [2] роста трещин

$$E_s = w_a \tag{1.2}$$

где E_s – энергия деформаций, затрачиваемая на образование единицы площади трещины при ее росте. В то время как E_s и ее зависимость от геометрии тела, свойств соединенных материалов и приложенных нагрузок определяется из решения соответствующей краевой задачи механики деформируемого твердого тела, w_a представляет собой характеристику адгезионных свойств соединяемых материалов и использованного адгезива. Эта характеристика может быть найдена экспериментально или принята определенная модель деформирования адгезионных связей и механизма адгезионного разрушения.

Следует отметить, что критерий (1.2) не всегда применим в случае деформируемых материалов, например, металлов, так как не учитывает работу пластической деформации. С учетом этого фактора вместо (1.2) имеем [3, 4]:

$$E_s = w_a + w_p \tag{1.3}$$

где w_p – так называемая работа пластической деформации или необратимые затраты энергии на пластическую деформацию непосредственной окрестности края (конца) трещины. В ряде экспериментальных работ было показано, что w_p является функцией величины w_a [4–6]. В работе [3] была предложена модель процесса роста трещины в объеме однородного деформируемого тела. Однако для границы материалов теоретического исследования этого вопроса не проводилось.

В настоящей работе развита модель, описывающая вклад пластических деформаций w_p в критерий (1.3) роста трещин по границе двух материалов под действием внешнего механического напряжения. В модели считается, что пластические деформации в материалах обусловлены испускаемыми трещиной дислокациями. Показано, что действительно $w_p = w_p(w_a)$, исследованы различные асимптотики этой зависимости. Учтено влияние термодинамических флуктуаций на эмиссию дислокаций.

2. Формулировка модели, основные соотношения. Как и в [3], на основании экспериментальных данных будем считать, что в ходе распространения трещины помимо разрыва атомных связей имеет место испускание трещиной краевых дислокаций; работа, расходуемая на эту эмиссию и является "пластической работой" w_p, фигурирующей в (1.3). Однако при оценке w_p настоящая модель имеет следующие существенные отличия от [3].

1. Рассматривается рост трещины не в объеме однородного материала, а по границе соединения двух различных материалов.

2. Учитывается, что согласно результатам [7], эмиссия краевых дислокаций трещиной является активационным процессом, причем, в общем случае, испускаемые дислокации имеют форму трехмерных полупетель. Как и в [7] для упрощения математического описания примем, что эти полупетли являются плоскими полуокружностями радиуса r. Тогда энергия взаимодействия испускаемых дислокаций с трещиной является функцией r и при некотором его значении достигает максимума u_{ac}, который является активационным барьером для процесса эмиссии. Наличие u_{ac} приводит к аррениусовской зависимости скорости υ ухода дислокаций от трещины

$$\upsilon = f(\tau)\exp(-u_{ac}/kT), \quad \tau^2 = \sigma_i^2 n_i^2 - (\sigma_i n_i)^2 \ (i = 1, 2, 3) \tag{2.1}$$

где T – температура, k – постоянная Больцмана, $f(\tau)$ – некоторая эмпирическая зависимость υ от напряжения сдвига τ по плоскости скольжения дислокаций; σ_i – главные напряжения, n_i – компоненты вектора нормали к плоскости скольжения в главных осях тензора напряжений, по повторяющимся индексам производится суммирование.

Возьмем $f(\tau)$ в наиболее часто используемом для аппроксимации экспериментальных данных виде [8]:

$$f = \upsilon_0(\tau/G)^n$$

где G – модуль сдвига материала, в котором происходит скольжение дислокаций, а υ_0 и n – эмпирические параметры.

3. В качестве критерия роста трещины используется не условие разрыва атомных связей в конце трещины [3], а условие роста параметра раскрытия трещины ϕ до критической величины ϕ_c [9], по достижении которой длина трещины увеличивается скачком и происходит сброс величины ϕ; затем процесс повторяется. За время t_c, требуемое для достижения ϕ_c, производится работа w_p, связанная с испусканием соответствующего (критического) числа дислокаций n_c.

В соответствии с этими положениями величина w_p оценивается как удельная (на единицу площади трещины) работа, которую необходимо затратить, чтобы сообщить кинетическую энергию такому количеству n_c дислокаций, рождающихся в конце трещины, которое требуется для ее роста.

Кинетическая энергия E_k одной дислокации длины L, движущейся со скоростью υ, дается выражением [8]:

$$E_k = 1/2m^*\upsilon^2 L \tag{2.2}$$

Здесь m^* – эффективная масса дислокации единичной длины; для краевых дислокаций

$$m^* = w_0/[Lc_t^2(1 + c_t^4/c_l^4)] \tag{2.3}$$

где w_0 – энергия неподвижной дислокации, c_t и c_l – скорости поперечной и продольной волн в том материале, в котором лежит плоскость скольжения дислокации. В рассматриваемом случае $w_0 = u(r)$ – энергия взаимодействия дислокации с испустившей ее трещиной. Как отмечено в [7] трещина испускает дислокационные полупетли радиуса r (здесь и далее радиус дислокационной петли считается нормированным на величину вектора Бюргерса b) с энергией $u = u(r)$. Если $u(r)$ имеет максимум u_{ac} при $r = r_{ac}$, то эмиссия дислокаций носит активационный характер, и дислокация может считаться испущенной только когда $r \geq r_{ac}$, в этом случае можно считать $w_0 \cong u_{ac}$.

Используя (2.2) и (2.3), запишем кинетическую энергию E_p такого числа дислокаций n_c, которое необходимо для достижения критической величины ϕ_c параметра раскрытия трещины

$$E_p = n_c E_k$$

Поскольку вклад каждой дислокации в ϕ_c равен проекции b_p краевой компоненты $b_c = b\cos\psi$ вектора Бюргерса дислокаций b (ψ – угол между вектором Бюргерса и плоскостью, перпендикулярной линии дислокации) на направление, перпендикулярное плоскости трещины, т.е. $b_p = b_e \sin\varphi = b\cos\psi\sin\varphi$ (φ – угол между краевой компонентой вектора Бюргерса и плоскостью трещины), имеем $n_c = \phi_c/b_p$ и, следовательно, E_p запишется в виде

$$E_p = (\phi_c/b_p)E_k \tag{2.4}$$

Подставляя (2.2) и (2.3) в (2.4) и переходя от E_p к ее удельной на единицу площади дислокационной полупетли при $r = r_{ac}$ величине, т.е. величине "пластической работы" $w_p = 2E_p/(\pi r_{ac}^2)$, получим ($w_0 \cong u_{ac}$):

$$w_p = A\frac{u_{ac}\upsilon^2}{r_{ac}^2 b^2}(\phi_c/b_p), \quad A = \frac{1}{\pi c_t^2(1 + c_t^4/c_l^4)} \tag{2.5}$$

Для оценки величины ϕ_c используем критерий гриффитсовского типа (1.2), когда $E_s = E_e$ – упругая энергия, связанная с деформацией ϕ_c/δ (δ – толщина границы), приравнивается к работе адгезии w_a [2]. Записывая E_e в виде

$$E_e = \int_0^{\phi_c}\tau d\phi = 2\int_0^{\phi_c} G\frac{\phi}{\delta}d\phi = G\phi_c^2/\delta \tag{2.6}$$

где использован закон Гука $\tau = 2G(\phi/\delta)$ (в данной работе считается, что модули сдвига граничащих материалов $G_1 \cong G_2 \cong G$). Приравнивая энергию (2.6) к w_a, находим

$$\phi_c = (\delta w_a/G)^{1/2} \tag{2.7}$$

Подставляя теперь в (2.7) ϕ_c, выраженное с помощью закона Гука через сдвиговое напряжение τ, обеспечивающее рост трещины, получим также, что

$$\tau = [4Gw_a/\delta]^{1/2} \tag{2.8}$$

т.е. $\tau \sim \phi_s \sim \sqrt{w_a}$.

Наконец, подставляя (2.1), (2.7) и (2.8) в (2.5), получим

$$w_p = A\upsilon_0^2\sqrt{\frac{\delta b}{b_p^2}}\left(\frac{4b}{\delta}\right)^n\left(\frac{w_a}{Gb}\right)^{n+1/2}\frac{u_{ac}}{r_{ac}^2 b^2}\exp\left(-\frac{2u_{ac}}{kT}\right) \tag{2.9}$$

где u_{ac} и r_{ac} сами зависят от w_a.

Выражение (2.9) носит достаточно общий характер и применимо как для случая активационной эмиссии дислокаций из трещины в объеме однородного материала ($w_a = 2\gamma$, $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$), так и в случае трещины на границе – все определяется видом зависимости $u(r)$.

3. Пластическая работа в случае трещины в однородном материале. В этом случае энергия взаимодействия дислокационной петли с трещиной дается выражением [7]:

$$u(r) = Gb^3\left[ru_0\ln\frac{r}{\xi_0} + u_l(r-\xi_0) - \frac{2}{3}u_s(r^{3/2}-\xi_0^{3/2})\right]$$

$$u_0 = \frac{2-\nu}{8(1-\nu)},\quad u_l = \frac{w_a}{Gb}\cos\psi\sin\varphi,\quad w_a = 2\gamma \tag{3.1}$$

$$u_s = \frac{\Gamma(1/4)}{\sqrt{2}\Gamma(3/4)\sqrt{1-\nu}}\sqrt{\frac{w_a}{2Gb}}\cos\psi\sin\varphi\cos(\varphi/2)$$

Здесь ξ_0 – радиус ядра дислокации, обезразмеренный на величину вектора Бюргерса b, ν – коэффициент Пуассона, $\Gamma(1/4)$ и $\Gamma(3/4)$ – значения гамма-функции $\Gamma(x)$ при $x = 1/4$ и $x = 3/4$.

Радиус r_{ac}, отвечающий максимуму энергии (3.1), т.е. энергии активации u_{ac}, является решением уравнения $du(r)/dr = 0$:

$$u_0\ln(r_{ac}/\xi_0) + u_0 + u_e - u_s r_{ac}^{1/2} = 0 \tag{3.2}$$

Решая уравнение (3.2) и подставляя решение $r_{ac}(w_a)$ в (3.1), получим $u_{ac} = u(w_a)$. Анализ (3.2), (3.1) показывает, что r_{ac} растет с уменьшением w_a. В то же время, согласно [7] $u_{ac}(w_a)$ растет с уменьшением w_a при $w_a/Gb \ll 1$. Тогда из (2.7) имеем, что $w_p(w_a)$ стремится к нулю при $(w_a/Gb) \to 0$.

Рассмотрим подробнее асимптотики u_{ac} по параметру $\mu = w_a/Gb$. С этой целью запишем уравнение (3.2) в виде

$$2u_0\ln x + (u_0 + u_l) = p_s x,\quad x = \sqrt{r_{ac}/\xi_0} \tag{3.3}$$

Здесь $p_s = u_s\sqrt{\xi_0}$, т.е. $p_s \sim \sqrt{\mu}$ и $u_l \sim \mu$ (при условии $\varphi \neq 0$ и $\psi \neq \pi/2$ см (3.1)). Графический анализ (3.3) показывает, что его решение $x \to \infty$ как с уменьшением μ при $\mu \ll 1$, так и с его увеличением при $\mu \gg 1$.

(a). *Случай $\mu \ll 1$.* Этот случай представляет наибольший интерес, поскольку такому условию удовлетворяют реальные величины $\gamma = w_a/2$ (например, для металлов: $\gamma \sim 1$ Дж/м^2, $G \sim 50$ ГПа, $b \sim 2$ Å).

При $\mu \ll 1$ имеет место $u_l \ll p_s \ll 1$. В этих условиях и с учетом того, что $u_0 \sim O(1)$, можно пренебречь членом $(u_0 + u_l)$ в уравнении (3.3). Тогда асимптотика x имеет вид

$$x = \frac{2u_0}{p_s^{1+\alpha(p_s)}},\quad \alpha(p_s) = \frac{\ln[\ln(2u_0/p_s)]}{\ln(1/p_s)} \tag{3.4}$$

т.е. $\alpha(p_s) \to 0$ при $p_s \sim \sqrt{\mu} \to 0$. Из (3.4) имеем, что

$$r_{ac}(\mu) = (2u_0/p_s^{1+\alpha})^2\xi_0 \sim \xi_0/\mu^{1+\alpha} \tag{3.5}$$

Подставляя (3.5) в (3.1), получим асимптотику $u_{ac}(\mu)$ при $\mu \ll 1$:

$$u_{ac}(\mu) = (4Gb^3u_0^3/Q^2)\frac{1}{\mu^{1+\alpha}}\ln\left(\frac{4u_0^2}{Q^2\xi_0\mu^{1+\alpha}}\right)$$
$$Q = \frac{\Gamma(1/4)}{\sqrt{2}\Gamma(3/4)\sqrt{1-\nu}}\sin\varphi\cos\psi\cos\frac{\varphi}{2} \tag{3.6}$$

Аналитическое выражение (3.6) описывает рост u_{ac} при $\mu \to 0$, полученный в [7] лишь численными расчетами.

Подставляя далее асимптотики (3.5) и (3.6) в (2.7), получим $w_p(\mu)$ при $\mu \ll 1$ в виде

$$w_p(\mu) = \frac{Ba}{d^2}\mu^{n+3/2+\alpha}\left(\frac{\mu^{1+\alpha}}{d}\right)^{2a/\mu^{1+\alpha}kT}\ln\left(\frac{d}{\mu^{1+\alpha}}\right)$$
$$a = 4Gb^3u_0^3/Q^2, \quad d = 4u_0^2/Q^2\xi_0, \quad B = A\sqrt{\delta b/b_p^2}[4b/\delta]^n/b^2 \tag{3.7}$$

Зависимость (3.7) стремится к нулю при $\mu = w_a/Gb \to 0$ значительно быстрее, чем чисто степенная функция $\mu^{n+\alpha+3/2}$.

(*b*). *Случай $\mu \gg 1$.* При $\mu \gg 1$ из (3.2) можно получить, что асимптотика $r_{ac}(\mu)$ имеет вид

$$r_{ac} = \left(\frac{u_l}{p_s}\right)^2\xi_0 = \left(\frac{u_l}{u_s}\right)^2 = g\mu, \quad g = \frac{(1-\nu)}{2}\cos^{-2}\left(\frac{\varphi}{2}\right) \tag{3.8}$$

Подставляя далее (3.8) в (3.1), получим асимптотику $u_{ac}(\mu)$

$$u_{ac} \cong \frac{1}{3}(1-\nu)(\cos\psi)\,\mathrm{tg}\left(\frac{\varphi}{2}\right)\mu^2 \tag{3.9}$$

т.е. u_{ac} растет с ростом μ при $\mu \gg 1$.

Таким образом, $u_{ac}(\mu)$ растет как при $\mu \ll 1$, так и при $\mu \gg 1$ и, следовательно, имеет минимум при $\mu \sim O(1)$. Соответствующая асимптотика $w_p(\mu)$ при $\mu \gg 1$ получается подстановкой (3.8), (3.9) в (2.7) и здесь ввиду громоздкости не приводится.

4. Пластическая работа в случае трещины на границе двух материалов. В этом случае для энергии $u(r)$ используем выражение, предложенное в работе [10] (см. также [11]) для границ, образованных материалами с близкими упругими свойствами:

$$u(r) = Gb^3\left[\frac{2-\nu}{8(1-\nu)}r\ln\left(\frac{r}{\xi_0}\right) + \frac{2}{\beta'}\frac{\gamma_{lat}}{Gb}(r-\xi_0) - \right.$$
$$\left. - \frac{\Gamma(1/4)}{\sqrt{2}\Gamma(3/4)\sqrt{1-\nu}}\frac{1}{\beta}\sqrt{\frac{w_a}{2Gb}}(r^{3/2}-\xi_0^{3/2})\right] \tag{4.1}$$
$$\frac{1}{\beta'} = \sin\varphi\cos\psi, \quad \frac{1}{\beta} = \sin\varphi\cos\psi\cos\frac{\varphi}{2}$$

Здесь γ_{lat} – поверхностное натяжение на ступеньке, образующейся в конце трещины при испускании дислокации (здесь рассматривается только случай, когда γ_{lat} равно либо γ_1, либо γ_2), w_a – определяется выражением (1.1), а все остальные обозначения имеют прежний смысл.

Величины r_{ac} и $u_{ac} = u(r_{ac})$ находятся из уравнения

$$u_0 \ln(r_{ac}/\xi_0) + u_0 + u_L - u_w r_{ac}^{1/2} = 0$$

$$u_L = \frac{2\gamma_{lat}}{Gb}\frac{1}{\beta'}, \quad u_w = \frac{\Gamma(1/4)}{\sqrt{2}\Gamma(3/4)\sqrt{1-\nu}}\frac{1}{\beta}\sqrt{\frac{w_a}{2Gb}} \tag{4.2}$$

а u_0 – то же, что и в (3.1). Из (4.2) следует, что $r_{ac} = r_{ac}(w_a, \gamma_{lat})$ и $u_{ac} = u_{ac}(w_a, \gamma_{lat})$, т.е. в отличии от случая трещины в однородной среде эти величины являются функциями двух параметров.

Рассмотрим теперь зависимость величин r_{ac}, u_{ac} и w_p от параметра $\mu_w = w_a/Gb$ при заданном значении параметра $\varepsilon = \gamma_{lat}/Gb$. Вводя переменную $x = \sqrt{r_{ac}/\xi_0}$, запишем (4.2) в виде

$$2u_0 \ln x + (u_0 + u_L) = p_w x$$

$$p_w = u_w\sqrt{\xi_0} \sim \sqrt{\mu_w}, \quad u_L \sim \varepsilon \text{ и } x = x(\mu_w, \varepsilon) \tag{4.3}$$

Графический анализ уравнения (4.3) показывает, что решение для x существует, только если p_w меньше некоторого критического значения $p_w^*(\varepsilon)$:

$$p_w \le p_w^*(\varepsilon) = 2u_0 \exp[(u_L - u_0)/2u_0] \tag{4.4}$$

Поскольку $p_w \sim \sqrt{\mu_w}$, отсюда следует, что параметр $\mu_w = w_a/Gb$ также должен быть меньше соответствующего критического значения $\mu_w^* \sim (p_w^*)^2$.

В рамках условия (4.4) рассмотрим подробнее два предельных случая.

(*a*). *Случай $p_w \ll 1$.* Для металлов (Cu, Al, Ta) типичными значениями параметров, входящих в уравнение (4.2), являются $G \cong 50$ ГПа, $\nu \cong 0.3$, $b \cong 2.5$–3 Å [7], откуда $u_0 \cong 0.3$, $u_L \cong 0.3$ и, следовательно, согласно (4.4), $p_w^* < 1$, что и дает основание рассмотреть асимптотику $p_w \ll 1$, т.е. $\mu_w = w_a/Gb \ll 1$. Оценки показывают [12], что именно такие величины w_a имеют место для реальных границ металл-металл.

Нетрудно показать, что решение уравнения (4.3) растет с уменьшением p_w, т.е. $x \gg 1$ при $p_w \ll 1$, и следовательно, членом $(u_0 + u_L)$ можно пренебречь. Такое же уравнение получалось из (3.3) в предыдущем разделе для асимптотики $\mu \ll 1$, и его решение имело вид (3.4). Таким образом, используя выражения (3.4)–(3.7) с заменой в них p_s на p_w, найдем асимптотику пластической работы $w_p(\mu_w)$:

$$w_p(\mu_w) = \frac{Ba}{d^2}\mu_w^{n+3/2+\omega}\left(\frac{\mu_w^{1+\omega}}{d}\right)^{2a/\mu_w^{1+\omega}kT} \ln\left(\frac{d}{\mu_w^{1+\omega}}\right), \quad \omega = \frac{\ln[\ln(2u_0/p_w)]}{\ln(1/p_w)} \tag{4.5}$$

Здесь параметры B, d и a те же, что и в (3.7).

Особенностью выражения (4.5) является то, что для типичных границ металл-металл ($\mu_w = w_a/Gb \ll 1$) пластическая работа оказывается функцией только идеальной работы адгезии w_a границы и не зависит от параметра $\varepsilon \sim \gamma_{lat}$, хотя энергия дислокационной петли была функцией как w_a, так и γ_{lat}. Это свойство может объяснять ряд экспериментальных данных, согласно которым как в случае трещин в объеме материалов [3], так и трещин на границах [4] w_p зависит только от w_a.

(*b*). *Случай $p_w = p_w^*(\varepsilon)$.* В этом случае нетрудно получить, что

$$x = x^* = 2u_0/p_w^* \tag{4.6}$$

Учитывая, что $x = \sqrt{r_{ac}/\xi_0}$ и соотношение (4.4), из (4.6) имеем

$$r_{ac} = (2u_0/p_w^*)^2\xi_0 = \xi_0\exp[(u_0 - u_L)/u_0]$$

Подставляя u_0 и u_L из (4.2), находим, что

$$r_{ac}(\varepsilon) = (\xi_0 e)\exp\left[-\frac{16(1-\nu)}{\beta'(2-\nu)}(\gamma_{lat}/Gb)\right] \tag{4.7}$$

Из (4.7) следует, что если

$$\gamma_{lat} > Gb\frac{\beta'(2-\nu)}{16(1-\nu)} \tag{4.8}$$

то $r_{ac} < \xi_0$, т.е. активационный радиус дислокационной петли оказывается меньше радиуса ее ядра. Следовательно, в этом случае должна происходить спонтанная эмиссия дислокаций из трещины.

При выполнении обратного неравенства

$$\gamma_{lat} < Gb\frac{\beta'(2-\nu)}{16(1-\nu)} \tag{4.9}$$

имеет место $r_{ac} > \xi_0$, т.е. активационный барьер эмиссии.

Оценим величину активационного барьера u_{ac} в случае $u_L \sim \varepsilon = \gamma_{lat}/(Gb) \ll 1$. Тогда из (4.7) имеем $r_{ac} = e\xi_0$. Подставляя это значение в (4.1) и используя (4.6), находим

$$u_{ac} = Gb^3u_0\xi_0 e\left[1 - \frac{4}{3e^2}(e^{3/2} - 1)\right] > 0$$

Например, для металлов типа ванадия или тантала $G \sim 10^2$ ГПа, $\nu \cong 0.3$, $\gamma_{lat} \cong 2.5$ Дж/м^2; $\xi_0 = 1$, $b \cong 2.7$ Å [13]), откуда $u_0 \cong 0.3$, а $u_L \cong 0.5\sin\varphi\cos\psi$. Тогда при достаточно малых углах φ (эмиссия идет в плоскостях близких к плоскости границы) или углах ψ, близких к $\pi/2$ (краевая компонента вектора Бюргерса мала), можно удовлетворить условию $u_L \ll 1$ и получить $u_{ac} \cong 5$ эВ, что значительно меньше, чем вычисленная в [3] величина $u_{ac} \cong 329$ эВ для трещины в объеме однородного ванадия.

Соответствующее выражение для пластической работы $w_p = w_p(\varepsilon)$ можно получить, используя выражения (4.6), (4.7), (4.1) и (2.7).

(*c*) Отметим еще интересную особенность, возникающую при p_w, близких к p_w^*, т.е. $p_w \le p_w^*$ и при выполнении условия (4.9). Тогда уравнение (4.3) может иметь два решения x_1, $x_2 > 1$, причем меньший из корней x_1 отвечает минимуму $(-u_1)$ энергии $u(r)$, а больший x_2 – максимуму u_{ac}.

В соответствии с этим дислокация должна спонтанно испускаться трещиной, переходя в состояние с радиусом $r_1 = x_1^2\xi_0$. Из этого состояния у нее есть два пути. Первый связан с дальнейшим увеличением радиуса; это переход с энергией активации $u_{ac}^{(1)} = u_1 + u_{ac}$. Второй – с возвратом в трещину с энергией активации $u_{ac}^{(2)} = u_1 < u_{ac}^{(1)}$. Поэтому в зависимости от соотношения скоростей этих переходов может реализоваться стационарное состояние в минимуме, отвечающем радиусу r_1.

Таким образом, согласно полученным в данном разделе результатам, активационное испускание дислокаций из трещин на границе материалов имеет место, если работа адгезии w_a меньше некоторой критической величины w_a^* (см. (4.4)). В противном случае происходит их спонтанная генерация.

5. Влияние термодинамических флуктуаций на дислокационную эмиссию. Учтем здесь помимо движения испущенной дислокации механизм ее зарождения. В соответствии с известной теорией гомогенного зарождения дислокационных петель из флуктуационных дискообразных скоплений вакансий [8] рассмотрим изменение свободной энергии ΔF, связанное с образованием петли

$$\Delta F(r) = w(r) - w_R + w_\gamma - w_\tau \tag{5.1}$$

Здесь $w(r)$ – энергия дислокации, w_R – изменение термодинамического потенциала вакансий в результате их "конденсации" (скопления) в полость цилиндрической формы [8], w_γ – увеличение свободной энергии вследствие образования поверхности полости, w_τ – уменьшение ΔF, вызванное работой механического напряжения τ.

В случае трещины на границе соединенных материалов энергия $w(r) = u(r)$, где $u(r)$ дается выражением (4.1). Тогда для вакансионных скоплений в виде полуцилиндра (зарождение полупетли) [8] радиуса r и высоты d изменение свободной энергии (5.1) запишется следующим образом:

$$\begin{aligned}\Delta F(r) = {} & Gb^3\left[u_0 r\ln\left(\frac{r}{\xi_0}\right) + u_L(r-\xi_0) - \frac{2}{3}u_w(r^{3/2} - \xi_0^{3/2})\right] - \\ & -\frac{\pi d b^2}{2\Omega}Rr^2 + \pi b^2\gamma_{lat}r^2 - b^3\left[\frac{4\pi^2 G}{\delta}w_a\right]^{1/2} r^2\end{aligned} \tag{5.2}$$

Здесь Ω – объем вакансий в том материале, в котором располагается плоскость скольжения испускаемой дислокации, $R = kT\ln(C_v/C_{ve})$ – химический потенциал вакансий, возникающий вследствие отличия их концентрации C_v от равновесного значения C_{ve} [8]. Последний член w_τ в (5.2) должен иметь вид $w_\tau = \pi b r^2 \tau$ [8], но, как и в случае (2.7), здесь произведена замена в нем τ с использованием критерия (2.8). Отметим, что в (5.2) не включено увеличение ΔF за счет образования боковой поверхности полости, так как оно мало по сравнению с вкладом $\pi b^2 r^2 \gamma_{lat}$ при достаточно больших радиусах r (по малости отношения d/r).

Если ΔF имеет максимум ($d\Delta F/dr = 0$) при некотором $r = r_m$, то расти могут только петли с радиусом $r \geq r_m$. При $r < r_m$ зарождение петли термодинамически невыгодно, т.е. устойчивые петли такого радиуса образоваться не могут. С учетом (5.2) уравнение для r_m имеет вид

$$\begin{gathered} 2u_0\ln x + u_0 + u_L = p_w x - q x^2 \\ u_R = \frac{\pi d\xi_0}{\Omega}\frac{R}{Gb}, \quad u_\tau = 2\pi\left(\frac{2G\xi_0^2 w_a}{\delta G^2}\right)^{1/2}, \quad u_\gamma = 2\pi\xi_0\frac{\gamma_{lat}}{Gb}, \quad q = u_R + u_\tau - u_\gamma \end{gathered} \tag{5.3}$$

Здесь x, u_0, u_L, p_w те же, что в предыдущем разделе, а $u_\tau \sim \sqrt{\mu_w}$, $u_\gamma \sim \varepsilon$.

Если в (5.3) коэффициент $q > 0$, то решение $x > 1$ существует при достаточно малых величинах q и p_w и этот случай аналогичен рассмотренному в п. 4. Если же $q < 0$, то решение $x > 1$ существует только при достаточно больших p_w и $|q|$.

Оценки показывают, что при реальных величинах вакансионного пересыщения (C_v/C_{ve}), которое может быть создано макроскопической пластической деформацией, закалкой или под действием излучения, параметр $u_R \gg u_\tau$, u_γ, т.е. $q > 0$. Поэтому далее рассмотрим именно этот случай.

Графический анализ уравнения (5.3) дает, что при $q > 0$ его решение существует только при условии

$$p_w x_1 + q x_1^2 - 2u_0 \ln x_1 \le u_0 + u_L \tag{5.4}$$

Здесь x_1 – решение уравнения

$$2\bar{q}x_1^2 + p_w x_1 - 2u_0 = 0 \tag{5.5}$$

а $\bar{q}$ и $\bar{p}_w$ таковы, что в (5.4) выполняется равенство при $p_w = \bar{p}_w$ и $q = \bar{q}$.

Например, в предельном случае $p_w \ll qx$ вторым членом в (5.5) можно пренебречь, откуда $x_1 = (u_0/\bar{q})^{1/2}$ и из (5.4) имеем

$$q \le u_0 \exp(u_L/u_0) \equiv \bar{q}$$

т.е. $x_1 = \exp(-u_L/u_0) < 1$. В этом случае для того, чтобы имела место активационная эмиссия дислокаций, т.е. $x > 1$, необходимо выполнение условия, которое следует из (5.3), если потребовать, чтобы правая часть была меньше левой при $x = 1$. Это дает

$$p_w + q \le u_0 + u_L \tag{5.6}$$

а с учетом $p_w \ll qx$ имеем $q \le u_0 + u_L$.

В тех случаях, когда уравнение (5.3) имеет решение $x > 1$, свободная энергия (5.2) имеет максимум при $r = r_m > \xi_0$, который является термодинамическим барьером для образования дислокационной петли. Только петли с $r > r_m$ растут дальше. Если же условия (5.4), (5.6) не выполняются, как например, при достаточно высоком вакансионном пересыщении (т.к. $q \cong u_R \sim R \sim \ln(C_v/C_{ve})$), должна иметь место спонтанная эмиссия дислокаций из носика трещины.

Следовательно, максимум свободной энергии $\Delta F_m = \Delta F(r_m)$ играет ту же роль, что энергия активации u_{ac} в п. 4. Поэтому для учета термодинамических эффектов в величине пластической работы w_p надо просто заменить в (2.9) u_{ac} на ΔF_m и r_{ac} на r_m, что дает

$$w_p = A v_0^2 \sqrt{\frac{\delta b}{b_p^2}}\left(\frac{4b}{\delta}\right)^n \left(\frac{w_a}{Gb}\right)^{n+1/2} \frac{\Delta F_m}{r_m^2 b^2} \exp\left(-\frac{2\Delta F_m}{kT}\right) \tag{5.7}$$

Здесь все остальные параметры имеют тот же смысл, что и в (2.9).

6. Влияние вакансионного пересыщения на активационный барьер и пластическую работу. Как отмечалось в предыдущем разделе, для реальных вакансионных пересыщений $u_R \gg u_T, u_\gamma$, т.е. $q \cong u_R \sim \ln(1 + S)$, где $S = (C_v - C_{ve})/C_{ve}$ – параметр пересыщения. Пусть далее для простоты $p_w \ll 1$ так, что выполняется $p_w \ll qx$ при $x > 1$. Тогда уравнение (5.3) примет вид

$$2u_0 \ln x + u_0 + u_L - qx^2 = 0 \tag{6.1}$$

Как было показано выше, в этом случае $x_1 < 1$ и решение $x > 1$ существует, только если $q < u_0 + u_L$. Поскольку $u_0 \sim O(1)$ и $u_L \cong 2\varepsilon < 1$ (см. п. 4), то оправдано рассмотреть решение $x > 1$ при $q \ll 1$, но таких, что условие $p_w \ll qx$ продолжает выполняться. В этом случае асимптотика решения уравнения (6.1) имеет вид (см. также п. 4, случай a):

$$x \cong \sqrt{u_0/q}/q^\lambda, \quad \lambda = \{\ln[\ln(u_0/q)]\}/4\ln(1/q) \tag{6.2}$$

Переходя от (6.2) к r_m, получим

$$r_m(q) = (u_0/q^{1+2\lambda})\xi_0 \tag{6.3}$$

Соответствующая асимптотика ΔF_m определяется первым членом в (5.2), который с учетом (6.3) дает

$$\Delta F_m(q) = Gb^3 u_0 \xi_0 \frac{1}{q^{1+2\lambda}} \ln \frac{u_0}{q^{1+2\lambda}} \tag{6.4}$$

т.е. $\Delta F_m(q)$ растет при $q \to 0$.

Подставляя (6.3) и (6.4) в (5.7), получим асимптотику пластической работы w_p:

$$w_p(q, w_a) = D w_a^{n+1/2} q^{1+2\lambda} \left(\frac{q^{1+2\lambda}}{u_0} \right)^{m/q^{1+2\lambda}kT} \ln \left(\frac{u_0}{q^{1+2\lambda}} \right) \tag{6.5}$$

Здесь выделены зависимости от w_a и q; D и m – достаточно громоздкие коэффициенты, определяемые механическими характеристиками материалов, параметрами трещины и дислокаций, которые легко могут быть выписаны.

Согласно (6.5) $w_p \sim w_a^{n+1/2}$ – степенная функция w_a, что наблюдалось в ряде экспериментов [4]. Поскольку $q \sim kT\ln(1 + S)$, то коэффициент пропорциональности в (6.5) зависит от параметра вакансионного пересыщения S и температуры.

Последнее свойство дает возможность эффективно влиять на величину w_p и тем самым на условия роста трещины. В частности, можно показать, что множитель, зависящий от q в (6.5), растет с ростом q.

Если не ограничиваться случаем $q \ll 1$, то условием активационной эмиссии дислокаций является неравенство (5.6), имеющее при $p_w \ll qx$ $(x > 1)$ вид $q < u_0 + u_L$. Тогда для рассматриваемого случая $q \cong u_R$ и с учетом (5.3), получим, что для активационного режима необходимо, чтобы параметр пересыщения S удовлетворял условию

$$S \le S^*(T) = \exp[Gb\Omega(u_0 + u_L)/\pi d\xi_0 kT] - 1 \tag{6.6}$$

Если $S > S^*(T)$, то имеет место спонтанная эмиссия дислокаций, т.е. при $S = S^*(T)$ должен меняться режим эмиссии, что может быть проверено, например, в температурных экспериментах.

Оценим величину критического пересыщения $S^*(T)$. Например, взяв, как и в п. 4, $G \cong 50$ ГПа, $\nu = 0.3$, $b \cong 2.5$ Å и $\xi_0 = 2$ [7] и считая, что по порядку величины $b \cong d \sim \Omega^{1/3}$, для комнатных температур ($kT \cong 0.025$ эВ) получим $S^* \sim 10^4$, а для $T = 550$ K ($kT \cong$ $\cong 0.04$ эВ) имеем $S^* \sim 10^2$. Такие уровни вакансионного пересыщения вполне достижимы под действием ионного излучения [14].

Отметим, что дополнительная возможность воздействовать на величину w_p может быть связана с результатами работ [12, 15, 16], где показано, что коэффициент поверхностного натяжения границы γ_{12}, входящий в w_a, зависит от концентрации микродефектов в материалах, образующих границу.

7. Заключение. В работе развита модель для оценки пластической работы w_p, которую необходимо дополнительно (к работе w_a) затратить для поддержания роста трещины на границе соединения деформируемых материалов. Модель использует представление о том, что вклад w_p обусловлен эмиссией дислокаций из конца трещины и учитывает, что этот процесс является активационным. Величина w_p оценивается путем подсчета числа дислокаций, которое необходимо испустить для критического раскрытия трещины в ее конце. Получено общее выражение w_p как функции от w_a. В ряде важных асимптотических случаев эта зависимость проанализирована аналитически.

Развитая модель пластической работы была также дополнена учетом термодинамического механизма зарождения дислокационных петель. Получена зависимость w_p от w_a и уровня вакансионного пересыщения S. Показано, что при S, меньших критической величины $S^*(T)$, эмиссия дислокаций является активационной, а при $S > S^*(T)$ –

спонтанной. Величина $S^*(T)$ является функцией температуры и механических параметров материалов и дислокаций. В работе даны оценки $S^*(T)$ при различных температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 05-01-00191).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Кинлок Э.* Адгезия и адгезивы: наука и технология. М.: Мир, 1991. 484 с.
2. *Биггс В.Д.* Разрушение // Физическое металловедение. Под ред. Р. Канна. М.: Мир, 1968. Вып. 3. С. 443–484.
3. *Jokl M.L., Vitek V., McMahon C.J.* (Jr). A microscopic theory of brittle fracture in deformable solids: a relation between ideal work to fracture and plastic work // Acta metallurg. 1980. V. 28. № 11. P. 1479–1488.
4. *Hong Ji., Gary S.W. et al.* Modification of fracture energy of niobium/sapphire interface by impurity doping // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1997. V. 458. P. 191–196.
5. *Elssner G., Suga T., Turwitt M.* Fracture of ceramic-to-metal interaces // J. Phys. 1985. V. 46–C4. Suppl. № 4. P. 597–612.
6. *Elssner G., Korn D., Ruhle M.* The influence of interface impurities on fracture energy of UHV diffusion bonded metal-ceramic bicrystals // Scripta Metallurg. Mater. 1994. V. 31. № 8. P. 1037–1042.
7. *Rice J.R., Thomson R.* Ductile versus brittle behaviour of crystals // Phil. Mag. 1974. V. 29. № 1. P. 73–97.
8. *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций, М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
9. *Ewing D.J.F.* Strip yield models of creep crack incubation and growth // Intern. J. Fracture. 1978. V. 14. № 1. P. 101–117.
10. *Rice J.R.* Hydrogen and interfacial cohesion // 'Effect of Hydrogen on Behaviour of Materials'. Ed. A.W. Thompson and J.M. Bernstein, N.Y.: American Institute of Mining Engineers, 1976. P. 455–466.
11. *Mason D.D.* Segregation-induced embrittlement of grain boundaries // Phil. Mag. A. 1979. V. 39. № 4. P. 455–468.
12. *Гольдштейн Р.В., Сарычев М.Е.* О влиянии вакансий на поверхностное натяжение на границе соединения двух материалов // Докл. РАН. 2001. Т. 380. № 4. С. 476–478.
13. 'Физические величины'. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова М.: Энергоатомиздат. 1991. 1232 с.
14. *Mansur L.K., Yoo M.H.* The effects of impurity trapping on irradiation-induced swelling and creep // J. Nucl. Mater. 1978. V. 74. № 2. P. 228–241.
15. *Гольдштейн Р.В., Сарычев М.Е.* О зависимости поверхностного натяжения на границе соединения материалов от содержания примесей // Докл. РАН. 2002. Т. 385. № 5. С. 621–624.
16. *Гольдштейн Р.В., Сарычев М.Е.* О влиянии микродефектов на работу адгезионного отрыва соединенных материалов // Докл. РАН. 2003. Т. 389. № 6. С. 753–756.

Москва

Поступила в редакцию 20.07.2005