Міністерство освіти і науки України
Донецький національний технічний університет

Кафедра "Вища математика"

Збірник науково-методичних робіт

Випуск 4

Донецьк -2006

УДК 5:371.214.114, 621.923, 517.95(09), 531.18, 915.77.54, 531.38, 517.9,
517, 518, 531, 517.8, 539.5, 517.926.

Рекомендовано до друку Радою Донецького Національного технічного Університету
Протокол № 9 від 22.12. 2006 р.

Збірник науково-методичних робіт. - Вип. 4. - Донецьк: ДонНТУ, 2006. -167с.

В збірнику представлено різні напрямки застосування математичних методів до розв'зання інженерних задач, а саме, задач механіки твердого тіла, фізики магнітних явищ, статистичної фізики та інших.

Науково-методичні роботи є узагальненням досвіду викладачів кафедри по удосконалюванню математичної підготовки спеціалістів.

Видання розраховано на широке коло наукових робітників, а також аспірантів та студентів старших курсів університетів.

Адреса редакційної колегії : Україна, 83050, м. Донецьк, вул. Артема, 96, ДонНТУ, 3-й учбовий корпус, кафедра "Вища математика", тел. (062) 3010901.

УДК 539.5

Влияние атомов водорода на динамическое поведение дислокаций в металлах при надбарьерном скольжении

В.В. Малашенко, Т.И. Малашенко

Донецкий национальный технический университет

Досліджено силу динамічного гальмування дислокацій атомами водню, показано, що ця сила немонотонно залежить від швидкості дислокаційного руху. Обчислено значення концентрації водоводу та температури, за яких вплив атомів водню на динамічний рух дислокації стає домінуючим.

Исследование механизма взаимодействия атомов водорода со структурными несовершенствами кристаллической решетки является важным вопросом теории металлов, решение которого необходимо для понимания природы влияния водорода на свойства металлов и сплавов [1-4]. Многочисленные исследования убедительно доказывают существование тесной связи водородного охрупчивания металлов с дефектами кристаллической решетки. Присутствие водорода в металлах может приводить как к отрицательным последствиям (например, водородное “ отравление” металлов [5]), так и положительным (пластифицирование сплавов [6]). В связи с этим весьма актуальной является проблема влияния атомов водорода на подвижность дислокаций, перемещение которых вызывает пластическую деформацию кристаллов. В работе [1] была предпринята попытка теоретического исследования влияния атомов водорода на подвижность краевой дислокации в результате ее вытеснения термодинамически неустойчивой примесной атмосферой из атомов водорода и получено выражение для силы вытеснения в приближении разбавленных твердых растворов. В настоящей работе вычисляется сила торможения, действующая на дислокацию благодаря ее упругому взаимодействию с атомами водорода, хаотически распределенными по объему металла.

Рассмотрим краевую дислокацию, движущуюся под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в металле, содержащем атомы водорода. Направим ось *OZ* параллельно линии дислокации, а ее вектор Бюргерса параллельно оси *OX*, в положительном направлении которой происходит скольжение дислокации с постоянной скоростью *v*. Дислокация может совершать малые колебания в плоскости скольжения *XOZ* . Исследуемый механизм диссипации заключается в переходе кинетической энергии поступательного движения дислокации в энергию дислокационных колебаний. Будем считать атом водорода дефектом типа центра дилатации. Так, например, в случае переходных металлов атомы водорода размещаются преимущественно в тетраэдрических позициях [1]. Соответствующий размер полости для металлов с

ОЦК решеткой составляет $r_1 = 0.29R$, где R - радиус атома растворителя. При $R = 1.56A$ (вольфрам) $r_1 = 0.45A$, а радиус атома водорода $r_{\text{H}} = 0.50A$. Следовательно, при размещении атома водорода в таком металле из-за несоответствия размеров тетрапор и радиуса атома водорода возникает изменение объема кристалла δV и появляется энергия упругого взаимодействия с полем напряжений краевой дислокации. Величину δV можно выразить через парциальный объем примесей водорода $\bar{V}$ (см. [1]), т.е. $\delta V = \bar{V} / N_A$, где N_A - число Авогадро.

Положение дислокации определяется функцией $S(z, t) = vt + w(z, t)$, где $w(z, t)$ – случайная величина, среднее значение которой по ансамблю дефектов и расположению элементов дислокации равно нулю.

Уравнение движения дислокации имеет следующий вид

$$m\frac{\partial S^2(z,t)}{\partial t^2} + \gamma\frac{\partial S(z,t)}{\partial t} - T\frac{\partial^2 S(z,t)}{\partial z^2} = b\left[\sigma_0 + \sigma_{xy}(vt + w; z)\right] \quad (1)$$

Здесь T - коэффициент линейного натяжения дислокации, $\gamma = B/m$, где B - коэффициент динамического торможения дислокации, m – масса единицы длины дислокации, величина которой определяется выражением

$$m = \frac{\rho b^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{L}{r_0}, \quad (2)$$

где ρ - плотность кристалла, L - величина порядка длины дислокации, r_0 - величина порядка атомных расстояний ($r_0 \sim b$). Характерное значение массы единичного сегмента имеет порядок 10^{-16} кг/м. Масса винтовой дислокации имеет тот же порядок, что и масса краевой.

Входящая в правую часть уравнения движения величина σ_{xy} является компонентой тензора напряжений, создаваемых атомами водорода на линии дислокации, $\sigma_{xy} = \sum_{i=1}^{N}\sigma_{xy,\,i}$, где $\sigma_{xy,\,i}$ - компонента тензора напряжений, создаваемых i-м дефектом, N – число атомов водорода в металле. Считая атом водорода дефектом типа центра дилатации, запишем создаваемый им тензор напряжений в следующем виде

$$\sigma_{ik} = \mu r_{\text{H}}^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k}\frac{1}{r}, \quad (3)$$

где μ - модуль сдвига, ε - параметр несоответствия атома водорода.

Во втором порядке теории возмущений сила торможения краевой дислокации может быть найдена по формуле (см. [7])

$$F = b < \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial S} G \sigma_{xy} > , \tag{4}$$

где G - тензор Грина уравнения (1), а символ $<\ldots>$ означает усреднение по хаотическому распределению атомов водорода и по длине дислокации

$$<\ldots>= \lim_{L\to\infty} \int_{L/2}^{-L/2} \frac{dz}{L} \int_V \prod_{i=1}^{N} \frac{dr_i}{V^N} . \tag{5}$$

Производя необходимые вычисления, получим выражение для силы торможения дислокации в виде

$$F = \frac{nb^2}{8\pi^2 m} \int \mathrm{d}^3 p \left| p_x \right| \left| \sigma_{xy}(p) \right|^2 \delta\left[p_x^2 v^2 - \Delta^2 - c^2 p_z^2 \right], \tag{6}$$

где интегрирование производится по всему импульсному пространству. Здесь c - скорость распространения в кристалле поперечных звуковых волн, Δ – щель в спектре дислокационных колебаний, выражение для которой можно получить, решая следующее уравнение

$$\Delta^2 = \frac{nb^2}{8\pi^3 m^2} \int \mathrm{d}^3 p \, \frac{p_x^2 \left| \sigma_{xy}(p) \right|^2}{\Delta^2 + c^2 p_z^2 - p_x^2 v^2} , \tag{7}$$

где n – объемная концентрация атомов водорода. В области независимых взаимодействий атомов водорода с дислокацией данное уравнение не имеет решения, т. е. активация в спектре дислокационных колебаний не возникает. В области коллективного взаимодействия в колебательном спектре появляется активация

$$\Delta_{\mathrm{ed}} = \frac{c}{b} \left(n_0 \varepsilon^2 \right)^{1/3} , \tag{8}$$

здесь n_0 – безразмерная концентрация точечных дефектов, $n_0 = n r_{\mathrm{H}}^3$. Сила торможения дислокации атомами водорода имеет вид

$$F = Bv\Phi(r_{\mathrm{H}}\Delta / v), \qquad B = \frac{\pi n_0 b^2 \mu^2 \varepsilon^2}{3mcr_{\mathrm{H}}\Delta^2}$$

$$\Phi(x) = x^2[1 + (6x^4 + 2x^2)\ln(1 + x^{-2}) - 6x^2]. \tag{9}$$

Исследуем теперь асимптотическое поведение этой функции. В интервале скоростей $v > v_0 = r_{\text{H}}\Delta$ получим $\Phi(x) \approx x^2$. Это область независимых столкновений. Сила торможения в этой области обратно пропорциональна скорости скольжения краевой дислокации

$$F = \frac{\pi n_0 r_{\text{H}} b^2 \mu^2 \varepsilon^2}{3mcv}. \tag{10}$$

В области коллективного взаимодействия ($v < v_0$) функция $\Phi(x) \approx 1$, и торможение дислокации атомами водорода приобретает квазивязкий характер, т. е. сила торможения в этом случае является линейной функцией скорости дислокационного движения

$$F = Bv. \tag{11}$$

Выполним численные оценки коэффициента динамического торможения краевой дислокации, обусловленного ее взаимодействием с атомами водорода, воспользовавшись данными работы [1]. Так для железа $\mu = 8.3\times10^{10}$ Н/м^2, $b = 2.48\times10^{-10}$ м. При значении объемной концентрации атомов водорода $n = 10^{27}$ м$^{-3}$ получаем $B = 8\times10^{-5}$ кг/(м с), а значение критической скорости $v_0 \approx 10^{-2}c$ (c - скорость распространения поперечных звуковых волн).

Попытаемся теперь ответить на вопрос: может ли взаимодействие атомов водорода с краевой дислокацией вносить главный вклад в формирование коэффициента торможения, т. е. определять скорость дислокационного движения, а, следовательно, и скорость пластической деформации металла, и при каких условиях это возможно? Для ответа на этот вопрос проведем сравнительный анализ вкладов различных механизмов торможения в константу демпфирования B, воспользовавшись результатами обзорной работы [8]. При температурах T < T_e =25 K основным каналом рассеяния энергии движущейся дислокации является взаимодействие с электронами проводимости B_{el} ~10^{-6} кг/(м с). При T_e < T < T_s $\approx$100K доминирующим становится магнонный механизм торможения (соответствующая ему константа демпфирования $B_{\text{S}} \sim 10^{-5} - 10^{-6}$ кг/(м с) в указанной области температур). При T_s < T < Θ_{C} ~1000 K (Θ_{C} - температура Кюри) торможение дислокаций определяется в основном фононными механизмами рассеяния : $B_{\mathrm{f}} \sim 10^{-4} - 10^{-5}$ кг/(м с). Приведенные оценки показывают, что учет взаимодействия атомов водорода с дислокацией может привести к значительному изменению суммарного коэффициента торможения, особенно при высоких концентрациях водорода и низких температурах (отметим, что рассматриваемый нами механизм диссипации является температурно-независимым). Вклад этого взаимодействия является существенным даже при комнатных температурах, а при температурах $T < T_{\mathrm{s}}$, когда фононные каналы диссипации становятся неэффективными, он может стать доминирующим.

Рассмотрим теперь взаимодействие атомов водорода с движущейся винтовой дислокацией, для чего воспользуемся результатами работ [9,10]. Движение винтовой дислокации в кристалле описывается уравнением, аналогичным уравнению (1), в котором в этом случае необходимо заменить компоненту тензора напряжений σ_{xy}, создаваемых в металле атомом водорода, компонентой σ_{zy}. Поскольку симметрия задачи при этом изменяется, такая замена приведет к существенному изменению конечного результата. Аналогичную замену необходимо выполнить также в уравнении
(7). Решая данное уравнение, получим выражение для активации в спектре дислокационных колебаний

$$\Delta_{\mathrm{scr}} = \frac{c\varepsilon n_0^{1/2}}{r_{\mathrm{H}}} \approx \frac{c}{L_{\mathrm{S}}}, \qquad (12)$$

где L_{S} - среднее расстояние между атомами водорода в плоскости скольжения. Таким образом, спектральная щель имеет различный характер зависимости от концентрации: в случае краевой дислокации она пропорциональна кубическому корню из объемной концентрации атомов водорода, т.е. определяется средним расстоянием между атомами водорода в объеме кристалла, в случае винтовой величина щели пропорциональна квадратному корню из концентрации, т.е. зависит от среднего расстояния между атомами водорода в плоскости скольжения дислокации, при этом численное значение активации во втором случае для $n = 10^{27}$ м$^{-3}$ оказывается на порядок меньше, чем в первом. Например, для железа величина активации в спектре краевой дислокации $\Delta_{\mathrm{ed}} = 10^{11} c^{-1}$, в спектре винтовой $\Delta_{\mathrm{scr}} = 10^{10} c^{-1}$. Сила торможения винтовой дислокации атомами водорода также значительно меньше силы торможения краевой. В области независимых столкновений для винтовой дислокации получаем

$$F_{\mathrm{scr}} = \frac{\pi}{3} n r_{\mathrm{H}}^3 \varepsilon^2 \mu b \frac{v}{c}, \qquad (13)$$

отношение этих сил равно

$$\frac{F_{\text{scr}}}{F_{\text{ed}}} = \frac{v^2}{c^2} \ll 1. \tag{14}$$

В области коллективного взаимодействия действующая на винтовую дислокацию сила торможения определяется выражением

$$F_{\text{scr}} = \mu b \frac{v^3}{c^3}, \tag{15}$$

а отношение сил торможения оказывается еще меньше

$$\frac{F_{\text{scr}}}{F_{\text{ed}}} = (n r_{\text{H}}^3 \varepsilon^2)^{-1/3} \frac{v^2}{c^2} \ll 1. \tag{16}$$

Как следует из формулы (16), в области коллективного взаимодействия сила торможения винтовой дислокации атомами водорода не зависит ни от их концентрации, ни от параметра несоответствия.

Критическая скорость v_0, при которой изменяется характер взаимодействия винтовой дислокации с атомами водорода, определятся выражением

$$v_0 = \varepsilon n^{1/2} r_{\text{H}} c. \tag{17}$$

При значении концентрации атомов водорода $n = 10^{27}$ м $^{-3}$ для винтовой дислокации в железе $v_0 \approx 10^{-3} c$, т.е. на порядок меньше, чем для краевой дислокации при том же значении концентрации.

Численные оценки показывают, что константа демпфирования, обусловленная взаимодействием винтовой дислокации с атомами водорода, при $n = 10^{27}$ м $^{-3}$ равна $B_{\text{scr}} \approx 10^{-6}$ кг/(м с), т. е. рассматриваемый механизм торможения для данной концентрации может играть существенную роль лишь при $T < T_e$.

Поскольку скорость пластической деформации пропорциональна средней скорости скольжения дислокаций, можно сделать вывод о том, что при определенных условиях упругое взаимодействие атомов водорода с дислокациями способно оказывать существенное и даже доминирующее влияние на скорость пластической деформации.

Литература

1. Власов Н. М., Зазноба В. А. Влияние атомов водорода на подвижность краевых дислокаций//ФТТ. 1999. Т.41. Вып.3. С.451-453.
2. Барьяхтар В. Г., Зароченцев Е. В., Колесников В. В. Влияние водорода на модули всестороннего сжатия переходных 3d-металлов// ФТТ. 1990.Т.32. №8. С.2449-2455.
3. Алефельд Г., Фелькль М. Водород в металлах // М.:Наука, 1981. 474 с.
4. Пещеренко М.П., Русаков В.В., Райхер Ю.Л. Модель деформационного поведения наводороженных металлов V группы // ФММ. 2004. Т.97. №4. С.17-27.
5. Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов. М.: Металлургия, 1985. 217 с.
6. Носов В.К., Колачев Б.А. Водородное пластифицирование при горячей деформации титановых сплавов. М.:Металлургия, 1986. 118 с.
7. Malashenko V. V., Sobolev V. L., Khudik B. I. Self-Consistent Description of the Effect of Point Defects on Spectrum and Dynamic Deceleration of Dislocations//phys. stat. sol. (b). 1987. V.143. №2. P. 425-431.
8. Альшиц В. И., Инденбом В. Л. Динамическое торможение дислокаций//УФН. 1975. Т.115. №1. С.3-39.
9. Малашенко В. В. Динамическое торможение винтовой дислокации точечными дефектами// ФТТ. 1990. Т.32. №2. С. 645-647.
10. Малашенко В. В. Коллективное взаимодействие точечных дефектов с движущейся винтовой дислокацией// ФТТ. 1997. Т.39. №3. С. 645-647.

СОДЕРЖАНИЕ