

УДК 622:223; 530:3

ЭНТРОПИЙНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ИНВАРИАНТА ДЕФОРМАЦИИ

Л. Б. Зуев, А. Г. Лунев, О. С. Стаскевич

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055 Томск, Россия
E-mails: lbz@ispms.tsc.ru, agl@ispms.tsc.ru, solessya@inbox.ru

Предложена интерпретация природы соотношения, называемого упругопластическим инвариантом деформации и определяющего взаимосвязь упругой и пластической деформаций, которая учитывает изменение энтропии системы при генерации автоволн на стадии линейного деформационного упрочнения. Показано, что такой подход позволяет непротиворечиво объяснить природу инварианта и его роль в описании пластичности.

Ключевые слова: пластичность, упругая деформация, пластическая деформация, локализация, упругие волны, дефекты, дислокации.

DOI: 10.15372/PMTF20180613

Введение. Результаты экспериментальных исследований, обобщенные в работе [1], показывают, что пластическая деформация твердых тел локализуется на макроскопическом уровне, от этой деформации зависят предел текучести и разрушение. Локализованная деформация представляет собой самопроизвольное расслоение материала на чередующиеся объемы: активно деформирующиеся в данный момент и пассивные (рис. 1). Картины распределения таких объемов по образцу, называемые паттернами, определяются действующим на данной стадии законом деформационного упрочнения и интерпретируются как автоволновые моды [2, 3] локализованного пластического течения. В металлах и сплавах, находящихся в различных структурных состояниях (моно- и поликристаллы), экспериментально наблюдались автоволны переключения, фазовые автоволны, стационарные диссипативные структуры и коллапс автоволн [1–3]. Фазовые автоволны локализованного пластического течения, возникающие на стадиях линейного деформационного упрочнения, когда зависимость деформирующего напряжения от деформации $\sigma(\varepsilon)$ является линейной, имеют длину $\lambda \approx 10^{-2}$ м и распространяются со скоростью 10^{-5} м/с $\leq V_{aw} \leq 10^{-4}$ м/с. Упругие процессы в среде зависят от расстояний между атомными плоскостями $\chi \approx 10^{-10}$ м и скоростей распространения поперечных упругих волн $V_t \approx 3 \cdot 10^3$ м/с (справочные данные). Эти характеристики входят в равенство $\lambda V_{aw} \approx \chi V_t / 2$, члены которого имеют размерность коэффициента диффузии или кинематической вязкости. Целью настоящей работы является объяснение природы данного соотношения, указывающего на взаимосвязь упругих и пластических процессов деформации. Для этого проводятся экспериментальная проверка общности соотношения $\lambda V_{aw} \approx \chi V_t / 2$ и его интерпретация с помощью термодинамической теории.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 16-19-10025).

© Зуев Л. Б., Лунев А. Г., Стаскевич О. С., 2018

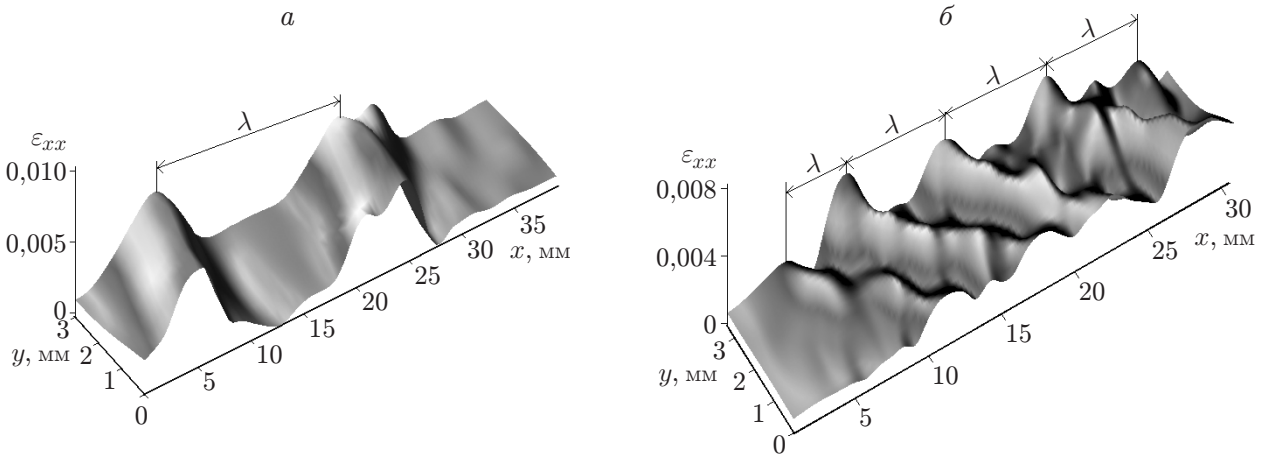


Рис. 1. Локализация пластической деформации в образце из сплава 88 % Fe — 12 % Mn на стадиях легкого скольжения (а) и линейного деформационного упрочнения (б)

Экспериментальные данные. Для проверки общности увеличивалось количество исследуемых материалов и анализировалось выполнение равенства $\lambda V_{aw} \approx \chi V_t / 2$ для различных материалов с разными механизмами деформации. Характеристики автоволн локализованной пластической деформации λ и $V_{aw} = \lambda / T$ определены с помощью метода построения $(X-t)$ -диаграмм (рис. 2) (X — координата очага локализованной пластичности в образце, t — время) [1] при линейном деформационном упрочнении металлов, легком скольжении в монокристаллах металлов, сжатии щелочно-галлоидных монокристаллов, сжатии образцов из горных пород, деформации, возникающей в результате фазового превращения в монокристалле NiTi.

Для 18 исследованных металлов значения λV_{aw} (табл. 1, 2) различаются незначительно, среднее значение $\langle \lambda V_{aw} \rangle_{lwh} = (2,52 \pm 0,36) \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

В случае легкого скольжения в монокристаллах Cu, Ni, α -Fe, γ -Fe, Zn и Sn, где также имеет место линейная зависимость напряжения от деформации $\sigma(\epsilon)$ и наблюдается фазовая автоволна, $\langle \lambda V_{aw} \rangle_{eg} \approx (2,95 \pm 1,05) \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ (см. табл. 1, 2).

Стадии линейного деформационного упрочнения и фазовые автоволны локализованной пластичности наблюдались также при сжатии образцов из щелочно-галлоидных кристаллов и горных пород [4, 5]. Согласно представленным в табл. 3 результатам этих экспериментов $\langle \lambda V_{aw} \rangle_{ahc} = (3,44 \pm 0,49) \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$, $\langle \lambda V_{aw} \rangle_{rock} = (1,44 \pm 0,34) \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

Пластическая деформация интерметаллического соединения TiNi эквиатомного состава возникает в результате фазового превращения [6]. В случае автоволны локализованной пластичности с использованием экспериментальных данных получено значение $\langle \lambda V_{aw} \rangle_{pt} \approx 0,85 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

Элементарным механизмом пластической деформации является скольжение отдельных дислокаций. Этот процесс обычно характеризуется длиной пробега дислокаций l и скоростью их движения V_{disl} , которые определяются при анализе имеющихся экспериментальных данных о подвижности отдельных дислокаций в различных монокристаллах [7–11]. Использовались известные данные о скоростях квазивязкого движения дислокаций в случае линейной зависимости скорости дислокаций от напряжений $V_{disl}(\sigma)$ [12]. Для оценки значения произведения величин l и V_{disl} использовалось соотношение $lV_{disl} \approx V_{disl}^2 \tau$ (τ — длительность импульса нагрузки, действующего при нагружении кристаллов). Результаты этих вычислений, представленные в табл. 4, показывают, что $\langle lV \rangle_{disl} = (3,20 \pm 0,35) \times 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

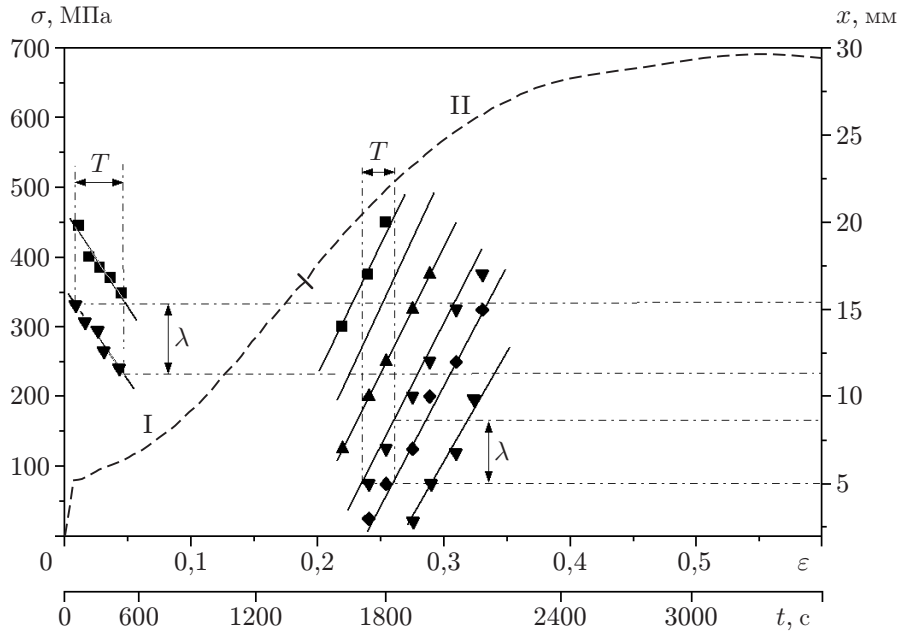


Рис. 2. Определение величин λ и T с помощью $(X-t)$ -диаграммы для образцов из сплава 88 % Fe — 12 % Mn, построенной для случая, показанного на рис. 1, при скорости автоволн $V_{aw} = \lambda/T$:

штриховая линия — зависимость $\sigma(\varepsilon)$; I — стадия легкого скольжения, II — стадия линейного деформационного упрочнения; точки — координаты X очагов локализованной деформации

Из приведенных в табл. 1–4 эмпирических данных следуют соотношения

$$\langle \lambda V_{aw} \rangle_{lwh} \approx \langle \lambda V_{aw} \rangle_{eg} \approx \langle \lambda V_{aw} \rangle_{pt} \approx \langle \lambda V_{aw} \rangle_{ahc} \approx \langle \lambda V_{aw} \rangle_{rock} \approx \langle lV_{disl} \rangle. \quad (1)$$

Значения величин, входящих в (1), сравнивались попарно путем вычисления t -критерия Стьюдента [13]. Установлено, что полученные значения различаются незначимо, т. е. принадлежат одной генеральной совокупности.

Нормируя члены соотношения (1) на соответствующие произведения упругих характеристик деформируемой среды χV_t (см. табл. 1–4), можно перейти к безразмерным величинам

$$\frac{\langle \lambda V_{aw} \rangle_{lwh}}{\langle \chi V_t \rangle_{el}} = \hat{Z}_{lwh}, \quad \frac{\langle lV_{disl} \rangle}{\langle \chi V_t \rangle_{el}} = \hat{Z}_{disl}, \quad \frac{\langle \lambda V_{aw} \rangle_{eg}}{\langle \chi V_t \rangle_{el}} = \hat{Z}_{eg},$$

$$\frac{\langle \lambda V_{aw} \rangle_{pt}}{\langle \chi V_t \rangle_{el}} = \hat{Z}_{pt}, \quad \frac{\langle \lambda V_{aw} \rangle_{ahc}}{\langle \chi V_t \rangle_{el}} = \hat{Z}_{ahc}, \quad \frac{\langle \lambda V_{aw} \rangle_{rock}}{\langle \chi V_t \rangle_{el}} = \hat{Z}_{rock}.$$

В результате расчетов имеем

$$\hat{Z}_{lwh} \approx \hat{Z}_{disl} \approx \hat{Z}_{eg} \approx \hat{Z}_{pt} \approx \hat{Z}_{ahc} \approx \hat{Z}_{rock} \approx 1/2,$$

откуда следует окончательное выражение

$$\left\langle \frac{\lambda V_{aw}}{\chi V_t} \right\rangle = \hat{Z} \approx \frac{1}{2}, \quad (2)$$

называемое упругопластическим инвариантом деформации [14].

Выполнение соотношения (2) для различных материалов и механизмов деформации является доказательством его универсальности. В общем смысле упругопластический инвариант (2) формализует связь двух волновых процессов, реализующихся в ходе пластической деформации среды. Первый из них (распространение упругих волн со скоростью V_t)

Таблица 1

Значения χV_t и λV_{aw} при линейном деформационном упрочнении металлов

Металл	$\lambda V_{aw} \cdot 10^7$, м ² /с	$\chi V_t \cdot 10^7$, м ² /с	$\lambda V_{aw}/(\chi V_t)$
Cu	3,60	4,8	0,75
Zn	3,70	11,9	0,30
Al	7,90	7,5	1,10
Zr	3,70	11,9	0,30
Ti	2,50	7,9	0,30
V	2,80	6,2	0,45
Nb	1,80	5,3	0,30
α -Fe	2,55	4,7	0,54
γ -Fe	2,20	6,5	0,34
Ni	2,10	6,0	0,35
Co	3,00	6,0	0,50
Mo	1,20	7,4	0,20
Sn	2,40	5,3	0,65
Mg	9,90	15,8	0,63
Cd	0,90	3,5	0,20
In	2,60	2,2	1,20
Pb	3,20	2,0	1,60
Ta	1,10	4,7	0,20
Hf	1,00	4,2	0,25

Таблица 2

Значения χV_t и λV_{aw} при легком скольжении в монокристаллах металлов

Металл	$\lambda V_{aw} \cdot 10^7$, м ² /с	$\chi V_t \cdot 10^7$, м ² /с	$\lambda V_{aw}/(\chi V_t)$
α -Fe	7,4	6,5	1,1
γ -Fe	2,9	6,0	0,5
Cu	1,9	4,7	0,4
Zn	1,0	5,0	0,2
Ni	1,3	6,0	0,2
Sn	3,3	4,9	0,7

Таблица 3

Значения χV_t и λV_{aw} при сжатии щелочно-галоидных кристаллов [4] и образцов горных пород [5]

Вещество	$\lambda V_{aw} \cdot 10^7$, м ² /с	$\chi V_t \cdot 10^7$, м ² /с	$\lambda V_{aw}/(\chi V_t)$
KCl	3,00	7,0	0,4
NaCl	3,10	7,5	0,4
LiF	4,30	8,8	0,5
Мрамор	1,75	3,7	0,5
Песчаник	0,60	1,5	0,4

обусловлен процессами быстрого распада и образования концентраторов упругих напряжений в материале, второй (распространение автоволн со скоростью V_{aw}) является следствием медленного перераспределения очагов локализации пластической деформации в материале.

Интерпретация экспериментальных данных. Для объяснения природы упруго-пластического инварианта будем учитывать развиваемую в последние годы точку зрения [15], согласно которой локализация пластической деформации является результатом самоорганизации (структурообразования) в активной деформируемой среде, состоящей из нелинейных структурных дефектов [16, 17]. Основным признаком наличия процессов самоорганизации в термодинамически открытой системе, какой является деформируемый образец, служит уменьшение ее энтропии [18]. Такое условие реализуется при формировании автоволн локализованного пластического течения [19]. Поэтому использование энтропии для детального описания процессов локализации пластической деформации обоснованно и перспективно.

Таблица 4

Значения χV_t и lV_{disl} , определенные при сложении отдельных дислокаций в монокристаллах

Монокристалл	$lV_{disl} \cdot 10^7, \text{ м}^2/\text{с}$	$\chi V_t \cdot 10^7, \text{ м}^2/\text{с}$	$lV_{disl}/(\chi V_t)$
NaCl [7]	4,1	7,3	0,60
LiF [8]	4,1	8,6	0,50
CsI [9]	1,9	4,0	0,50
KCl [10]	4,1	6,8	0,60
Zn [11]	1,8	4,0	0,45

Пластическое течение сопровождается пространственно-временной трансформацией полей напряжений $\sigma(x, y, t)$ и пластических деформаций $\varepsilon(x, y, t)$ [1]: в результате релаксации напряжений происходит деформация, изменение которой приводит к изменению поля напряжений. Кинетика этих процессов определяется скоростями, входящими в инвариант (2): скоростью распространения поперечных упругих волн V_t и скоростью распространения фазовых автоволн V_{aw} .

В предположении, что процессы трансформации полей обусловлены смещениями частиц среды, рассмотрим связь упругих (обратимых) и пластических (необратимых) смещений при малом отклонении деформируемой системы от равновесного состояния, в окрестности которого скорости смещений при трансформациях полей деформаций и напряжений с точностью до малых величин первого порядка могут полагаться линейно зависящими от градиентов пластических и упругих деформаций: $\dot{u}_{pl}^{(p)} \approx D_{\varepsilon\varepsilon} \nabla \varepsilon_{pl}$, $\dot{u}_{el}^{(p)} \approx D_{\sigma\sigma} \nabla \varepsilon_{el}$ ($\lambda V_{aw} \equiv D_{\varepsilon\varepsilon}$, $\chi V_t \equiv D_{\sigma\sigma}$).

Вследствие существенной нелинейности связи между деформациями и напряжениями необходимо также учитывать возникновение дополнительных скоростей $\dot{u}_{el}^{(ad)} \approx D_{\varepsilon\sigma} \nabla \varepsilon_{pl}$ и $\dot{u}_{pl}^{(ad)} \approx D_{\sigma\varepsilon} \nabla \varepsilon_{el}$. Тогда аналогично [20] систему уравнений для пластической и упругой составляющих скоростей смещений можно записать в виде

$$\dot{u}_{pl} = D_{\varepsilon\varepsilon} \nabla \varepsilon + D_{\varepsilon\sigma} \nabla \varepsilon_{el}, \quad \dot{u}_{el} = D_{\sigma\varepsilon} \nabla \varepsilon_{pl} + D_{\sigma\sigma} \nabla \varepsilon. \quad (3)$$

Коэффициенты уравнений системы (3) представим в виде матрицы

$$D = \begin{pmatrix} D_{\varepsilon\varepsilon} & D_{\varepsilon\sigma} \\ D_{\sigma\varepsilon} & D_{\sigma\sigma} \end{pmatrix},$$

в которой в соответствии с принципом симметрии кинетических коэффициентов Онзагера [21, 22] недиагональные компоненты равны: $D_{\varepsilon\sigma} = D_{\sigma\varepsilon}$. Диагональные коэффициенты $D_{\varepsilon\varepsilon}$, $D_{\sigma\sigma}$, являющиеся коэффициентами автоволновых уравнений локализованной пластичности, полученных в [1], не обязательно должны быть равными; в работе [23], например, показано, что $D_{\varepsilon\varepsilon} \ll D_{\sigma\sigma}$.

В уравнении (2) длины χ , $\lambda \gg \chi$ представляют собой пространственные масштабы трансформации полей упругой и пластической деформаций, а скорости V_t и $V_{aw} \ll V_t$ характеризуют кинетику трансформации. Упругопластический инвариант деформации (2) записывается в виде отношения масштабов λ/χ и кинетических величин V_t/V_{aw} :

$$\frac{\lambda V_{aw}}{\chi V_t} = \frac{\lambda}{\chi} \frac{V_{aw}}{V_t} = \frac{\lambda/\chi}{V_t/V_{aw}} = \hat{Z} < 1, \quad (4)$$

где λ/χ интерпретируется как число зон, в которых возможно зарождение автоволны локализованной пластической деформации, V_t/V_{aw} характеризует скорость автоволны в диапазоне возможных значений скоростей в твердом теле $0 \leq V_{aw} \leq V_t$. Тогда отношения

$\lambda/\chi \gg 1$ и $V_t/V_{aw} \gg 1$ можно рассматривать в качестве термодинамических вероятностей [22].

С использованием уравнения (4) возможна численная оценка \hat{Z} путем вычисления изменения энтропии системы при самопроизвольном формировании автоволн локализованного пластического течения. В силу аддитивности энтропии выражение для ее полного изменения при генерации автоволны запишем в виде суммы масштабного и кинетического вкладов

$$\Delta S = \Delta S_{scale} + \Delta S_{kin} < 0. \quad (5)$$

Для выполнения условия $\Delta S < 0$, означающего уменьшение энтропии при формировании автоволн локализации пластического течения [18, 19], хотя бы одно слагаемое в уравнении (5) должно быть отрицательным.

Используя формулу Больцмана и учитывая, что $\lambda/\chi \gg 1$, получаем

$$\Delta S_{scale} = k_B \ln(\lambda/\chi) > 0 \quad (6)$$

(k_B — постоянная Больцмана). Полагая кинетический вклад отрицательным, имеем

$$\Delta S_{kin} = -k_B \ln(V_t/V_{aw}) = k_B \ln(V_{aw}/V_t) < 0. \quad (7)$$

Величины $\Delta S_{scale} > 0$, $\Delta S_{kin} < 0$ в уравнениях (6), (7) имеют разные знаки, следовательно, масштабный и кинетический факторы по-разному влияют на развитие локализованной пластической деформации. Из уравнений (5)–(7) следует

$$\ln(\lambda/\chi) - \ln(V_t/V_{aw}) = \Delta S/k_B < 0,$$

соответственно

$$\hat{Z} = \frac{\lambda V_{aw}}{\chi V_t} = \frac{\lambda/\chi}{V_t/V_{aw}} = \exp\left(\frac{\Delta S}{k_B}\right).$$

Окончательно получаем

$$\hat{Z} = \exp(\Delta S/k_B) \approx 1/2,$$

откуда следует, что приращение $\Delta S = k_B \ln(1/2) \approx -0,7k_B$ при реализации элементарного акта релаксации [24].

Заключение. Проведены оценки значений экспериментально обнаруженного упруго-пластического инварианта деформации для различных материалов и механизмов пластической деформации и показано, что соотношение $\langle \lambda V_{aw}/(\chi V_t) \rangle = \hat{Z} = 1/2$ выполняется для всех исследованных материалов, на кривой течения которых имеется участок линейного деформационного упрочнения.

Установлено, что существование упругопластического инварианта деформации определяется не только зависимостью напряжения σ от деформации ε , но и взаимодействием механизмов пластического и упругого деформирования. Таким образом, упругопластический инвариант описывает процесс развития макроскопически локализованной пластичности материалов.

Объяснена природа упругопластического инварианта на основе представления о том, что пластическая деформация является процессом самоорганизации в дефектной структуре деформируемой среды и сопровождается уменьшением энтропии этой среды. Такая самоорганизация является формой образования деформационной структуры деформируемой среды в процессе пластического течения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Зуев Л. Б.** Физика макролокализации пластического течения / Л. Б. Зуев, В. И. Данилов, С. А. Баранникова. Новосибирск: Наука. Сиб. издат. фирма, 2008.
2. **Nekorkin V. I., Kazantsev V. B.** Autowaves and solitons in a three-component reaction-diffusion system // Intern. J. Bifurcat. Chaos. 2002. V. 12, N 11. P. 2421–2434.
3. **Davydov V. A., Davydov N. V., Morozov V. G., et al.** Autowaves in the moving excitable media // Condensed. Matter Phys. 2004. V. 7, N 3. P. 565–578.
4. **Баранникова С. А., Надежкин М. В., Зуев Л. Б.** О взаимосвязи векторов Бюргерса дислокаций и картин локализации пластической деформации при сжатии щелочно-галоидных кристаллов // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37, № 16. С. 15–21.
5. **Зуев Л. Б., Баранникова С. А., Надежкин М. В., Горбатенко В. В.** Локализация деформации и возможность прогнозирования разрушения горных пород // Физ.-техн. пробл. разраб. полез. ископаемых. 2014. № 1. С. 49–56.
6. **Otsuka K., Shimizu K.** Pseudoelasticity and shape memory effects in alloys // Intern. Metals Rev. 1986. V. 31, N 3. P. 93–114.
7. **Курилов В. Ф., Зуев Л. Б., Громов В. Е. и др.** Динамическое торможение дислокаций в кристаллах NaCl разной чистоты // Кристаллография. 1977. Т. 22, № 3. С. 653–654.
8. **Даринская Е. В., Урусовская А. А., Опекунов В. Ф. и др.** Изучение вязкого торможения дислокаций в кристаллах LiF по подвижности индивидуальных дислокаций // Физика твердого тела. 1978. Т. 20, № 4. С. 1250–1252.
9. **Даринская Е. В., Урусовская А. А.** Вязкое торможение дислокаций в кристаллах CsI при температуре 77–300 К // Физика твердого тела. 1975. Т. 17, № 8. С. 2421–2422.
10. **Зуев Л. Б., Громов В. Е., Алексанкина О. И.** Зависимость скорости движения дислокаций от напряжения в электрическом поле // Кристаллография. 1974. Т. 19, № 4. С. 889–891.
11. **Зуев Л. Б., Громов В. Е., Курилов В. Ф., Гуревич Л. И.** Подвижность дислокаций в монокристаллах цинка при действии импульсов тока // Докл. АН СССР. 1978. Т. 239, № 1. С. 874–876.
12. **Судзуки Т.** Динамика дислокаций и пластичность / Т. Судзуки, Х. Есианага, С. Такеути. М.: Мир, 1989.
13. **Худсон Д.** Статистика для физиков. М.: Мир, 1967.
14. **Зуев Л. Б.** Об упругопластическом инварианте при деформации твердых тел // ПМТФ. 2013. Т. 54, № 1. С. 125–133.
15. **Seeger A., Frank W.** Structure formation by dissipative processes in crystals with high defect densities // Non-linear phenomena in material science. N. Y.: Trans. Tech. Publ., 1987. P. 125–138.
16. **Langer J. S., Bouchbinder E., Lookman T.** Thermodynamic theory of dislocation-mediated plasticity // Acta Materialia. 2010. V. 58, N 10. P. 3718–3732.
17. **Ishii A., Yu Li, Ogata S.** Shuffling-controlled versus strain-controlled deformation twinning: The case for HCP Mg twin nucleation // Intern. J. Plasticity. 2016. V. 82, N 1. P. 32–43.
18. **Климонтович Ю. Л.** Введение в физику открытых систем. М.: Янус-К, 2002.
19. **Зуев Л. Б.** Энтропия волн локализованной пластической деформации // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31, № 3. С. 1–4.
20. **Най Дж.** Физические свойства кристаллов. М.: Мир, 1967.
21. **Ландау Л. Д.** Статистическая физика. Т. 1 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. М.: Физматлит, 2005.
22. **Румер Ю. Б.** Термодинамика и статистическая физика / Ю. Б. Румер, М. Ш. Рывкин. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2000.

23. **Зуев Л. Б.** Макроскопическая физика пластической деформации металлов // Успехи физики металлов. 2015. Т. 16, № 1. С. 35–60.
24. **Гиляров В. Л., Слуцкер А. И.** Анализ энергетики нагружаемого квантового ангармонического осциллятора в широкой области температур // Журн. техн. физики. 2010. Т. 80, № 5. С. 94–99.

*Поступила в редакцию 31/X 2017 г.,
в окончательном варианте — 6/II 2018 г.*
