

УДК 539.374:539.4.019.3

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА НА МИГРАЦИЮ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ У ВЕРШИНЫ ТРЕЩИНЫ

Д. Н. Карпинский, С. В. Санников

Научно-исследовательский институт механики и прикладной математики
при Ростовском государственном университете, 344090 Ростов-на-Дону

Дана оценка влияния постоянного электрического тока на миграцию точечных дефектов, растворенных в кристалле у вершины трещины растяжения. В расчете учитываются пластическая деформация у вершины трещины в нагруженном образце, обусловленная движением дислокаций в плоскостях активного скольжения кристалла, выделение джоулева тепла, а также влияние газообмена на берегах трещины на эволюцию распределения межузельных примесных атомов. Численные расчеты выполнены для кристалла α -железа.

Введение. В настоящее время установлено резкое снижение сопротивления металла деформированию и повышение его пластичности под влиянием электрического тока большой плотности [1, 2]. В связи с этим значительный интерес представляет исследование эволюции точечных дефектов у вершины трещины при совместном действии сил механического и электрического происхождения. Зависимость распределения точечных дефектов от времени в отсутствие электрического тока получена в [3]. Однако для разработки методов электрохимического наполнения водородом [4] и для решения других прикладных задач важно знать закономерности влияния электрического тока на прочность образцов, существенно зависящую от миграции точечных дефектов в них. Насколько известно авторам, исследованиям в этой области посвящена только работа [5], в которой выполнен расчет эволюции распределения атомов водорода, растворенных вблизи надреза в токонесущем стержне. Однако в этом расчете предполагалось, что внешняя нагрузка не вызывает пластической деформации и накопление газообразной примеси в полости надреза отсутствует.

Целью настоящей работы является расчет эволюции распределения атомов водорода у вершины трещины в кристалле под действием постоянного электрического тока и механической нагрузки с учетом газообмена на берегах трещины.

1. Постановка задачи и метод решения. Проблема миграции точечных дефектов в нагруженном образце, содержащем трещины и поры, давно привлекает внимание исследователей [6]. Расчет эволюции концентрации $c(\mathbf{r}, t)$ межузельных атомов примеси и определение соотношения вкладов дислокационных механизмов в процесс переноса примесных межузельных атомов выполнены в [3]. В этой работе рассмотрена трещина длиной $2l$, расположенная в плоскости скола (010) (вдоль отрицательной полуоси Ox) бесконечного кристалла с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой. К плоскостям кристалла $y \rightarrow \pm\infty$ приложено однородное напряжение растяжения $\sigma_{yy}(t) = \sigma'_a(t)$ (мода I), монотонно возрастающее до некоторого значения σ_a , достаточного для пластического деформирования кристалла, но недостаточного для роста трещины. До начала нагружения в кристалле равномерно распределены межузельные атомы водорода с концентрацией c_0 . В дополнение к допущениям, принятым в [3], предположим, что через кристалл перпендикулярно плоскости трещины пропускается постоянный электрический ток плотностью j_0 в удаленной от трещины части кристалла ($j_x(\mathbf{r}) = 0$, $j_y(\mathbf{r}) = j_0$ при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$).

Аналогично [7] будем предполагать, что пластическая деформация ОЦК-решетки кристалла осуществляется путем перемещения полных дислокаций с вектором Бюргера $\mathbf{b} = (1/2)\langle 111 \rangle$ вдоль плоскостей легкого скольжения $\{110\}$. Плоскости $\{110\}$, пересекаясь с плоскостью Oxy , образуют на ней два семейства линий скольжения, на которых равномерно распределены источники дислокаций, испускающие прямоугольные петли, лежащие в плоскостях легкого скольжения. Расчет эволюции пластической деформации по данной модели выполнен в [7]. В расчете учтены только отрезки петель, перпендикулярные плоскости Oxy . В [8] расчет [7] обобщен на случай протекания через нагруженный кристалл с трещиной постоянного электрического тока. В расчете [8] учитывались три механизма действия тока на дислокации в пластической зоне трещины: джоулево тепло, эффект Томсона и “электронный ветер”. В [9] исследованы следующие три механизма переноса межузельных атомов водорода у вершины трещины: решеточная диффузия; дислокационное “выметание” точечных дефектов; перенос примесных атомов в ядрах дислокаций, движущихся в пластической зоне. Результаты расчетов [9] показали, что первый механизм переноса межузельных атомов (решеточная диффузия) дает основной вклад в поток примесных атомов.

Представляется актуальным уточнить результаты [3], учитывая в данном расчете действие постоянного электрического тока на растворенные в кристалле атомы водорода. Действие электрического тока обусловлено как его непосредственным влиянием на них, так и опосредованным, через изменение характера движения дислокаций. В соответствии с [8, 9] данный расчет учитывает выделение джоулева тепла в кристалле с трещиной из-за протекания постоянного электрического тока в нем, а также решеточную диффузию атомов водорода при совместном действии механического и электрического полей.

Рассмотрим основные уравнения электромехано-диффузии (см., например, [5])

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla J, \quad J = \frac{Dc}{k_B T} \nabla \mu, \quad (1)$$

где D — коэффициент диффузии; k_B — постоянная Больцмана; T — температура; для слабого раствора примесей в упругом поле напряжений и электрическом поле химический потенциал $\mu = k_B T \ln(c/c_0) - V(\mathbf{r}, t)$; $V(\mathbf{r}, t) = \Delta v \sigma_{ii}(\mathbf{r}, t) - eZ^* \varphi$; Δv — изменение объема ячейки кристаллической решетки за счет содержащегося в ней межузельного атома; $\sigma_{ii}(\mathbf{r}, t)$ — шаровая компонента тензора эффективных напряжений [7]; e — элементарный заряд; Z^* — эффективное зарядовое число; φ — электрический потенциал тока в кристалле. Из [10] следует, что при $|\mathbf{r}|/l \rightarrow 0$ $\varphi = -\rho j_0 \sqrt{2lr} \sin(\theta/2)$, где $\rho = \rho_0 [1 + \alpha(T - T_0)]$ — удельное электросопротивление кристалла; ρ_0 — удельное электросопротивление кристалла при комнатной температуре T_0 ; α — температурный коэффициент сопротивления. При $|\mathbf{r}|/l \rightarrow 0$ электропотенциалу φ соответствуют асимптотические значения плотности тока $j_x = j_0 \sqrt{l/(2r)} \sin(\theta/2)$ и $j_y = j_0 \sqrt{l/(2r)} \cos(\theta/2)$ [10]. Тогда с учетом $\Delta V = 0$ из (1) получим

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 c(\mathbf{r}, t) + \frac{Dc(\mathbf{r}, t)}{k_B T} \nabla c(\mathbf{r}, t) \nabla V(\mathbf{r}, t). \quad (2)$$

Задача решается при начальном условии $c(\mathbf{r}, 0) = c_0$ и граничных условиях

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial y} = \frac{eZ^* c(\mathbf{r}, t) j_0 \rho}{k_B T} \sqrt{\frac{l}{2r}} \quad \text{при } y = 0, x > 0; \quad (3)$$

$$D \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial y} = k_m (c^2(\mathbf{r}, t) - (\Gamma')^{-1} P(t)) \quad \text{при } y = 0, x < 0 \quad (4)$$

и $c(\mathbf{r}, t) = c_0$ при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Соотношение (4) выражает закон Зивертса [3]. В (4) k_m — постоянная массообмена на границе газовой и твердой фаз; $P(t)$ — давление газа в полости

трещины; Γ' — модифицированная постоянная Генри [3]. В расчете предполагается, что газ в полости трещины идеальный, тогда его давление $P(t)$ внутри трещины [3]

$$P(t) = \frac{1}{2} \sigma'_a(t) \left[\left(1 + \frac{4GTN(t)}{\pi(1-\nu)(2l)^2 \sigma'^2_a(t)} \right)^{1/2} - 1 \right]. \quad (5)$$

Аналогично [11] количество молекул водорода в полости трещины $N(t)$ вычисляется путем

$$\text{суммирования по времени потока точечных дефектов } \mathbf{J} = k_m \int_{-\infty}^0 [c^2(x, 0, t) - (\Gamma')^{-1}P(t)] dx$$

через берега в полость трещины:

$$N(t) = \int_0^t J(t) dt. \quad (6)$$

Ниже изложен метод решения задачи (2)–(6). Аналогично [3] сделаем замену переменной $c(\mathbf{r}, t)$: $F(\mathbf{r}, t) = c(\mathbf{r}, t) \exp(V(\mathbf{r}, t)/(2k_B T))$. Тогда из (2) следует уравнение

$$\frac{\partial F(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 F(\mathbf{r}, t) - D \frac{\nabla V(\mathbf{r}, t)}{2k_B T} F(\mathbf{r}, t) \quad (7)$$

с начальным условием $F(\mathbf{r}, 0) = c(\mathbf{r}, 0) \exp(V(\mathbf{r}, 0)/(2k_B T))$ и граничными условиями

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(\mathbf{r}, t)}{\partial y} &= F(\mathbf{r}, t) \frac{eZ^* j_0 \rho}{2k_B T} \sqrt{\frac{l}{2r}} && \text{при } x > 0, y = 0, \\ \frac{\partial F(\mathbf{r}, t)}{\partial y} &= k_m \frac{F(\mathbf{r}, t)^2 - (\Gamma')^{-1}P(t)}{D} && \text{при } x < 0, y = 0, \\ F(\mathbf{r}, t) &= F(\mathbf{r}, 0) && \text{при } |\mathbf{r}| \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Аналогично [3] метод приближенного решения уравнения (7) основан на замене времени t в функции $F(\mathbf{r}, t)$, входящей во второе слагаемое правой части, на $t - \Delta t$ и решении его в последовательные отрезки времени $[t_i, t_{i-1}]$ ($t_{i-1} = t_i - \Delta t_i$):

$$\frac{\partial F(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 F(\mathbf{r}, t) - D \frac{\nabla V(\mathbf{r}, t)}{2k_B T} F(\mathbf{r}, t - \Delta t),$$

причем в начальный момент времени $F(\mathbf{r}, 0) = c_0 \exp(V(\mathbf{r}, 0)/(2k_B T))$. Аналогичный прием используется для вычисления граничного условия

$$\frac{\partial F(x, 0, t)}{\partial y} = k_m \frac{F^2(\mathbf{r}, t - \Delta t) - (\Gamma')^{-1}P(t - \Delta t)}{D} \quad \text{при } x < 0, y = 0.$$

Выбор Δt_i зависит от схемы расчета эволюции пластической деформации и описан в [7]. При таких упрощениях классическое решение задачи (2)–(5) при выбранных начальных и граничных условиях имеет вид [12]

$$\begin{aligned} F(x, y, t_i) &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty F(x_1, y_1, t_{i-1}) G_2(x, y, x_1, y_1, t_i) dx_1 dy_1 - \\ &- k_m \int_{-\infty}^0 [F^2(x_1, 0, t_{i-1}) - (\Gamma')^{-1}P(t_{i-1})] \left[\int_0^{\Delta t_i} G_2(x, 0, x_1, 0, \Delta t_i - \tau) d\tau \right] dx_1 - \end{aligned}$$

$$-\frac{D}{(2k_{\text{BT}})^2} \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (\nabla V(\mathbf{r}, t_{i-1}))^2 F(x_1, y_1, t_{i-1}) \left[\int_0^{\Delta t_i} G_2(x, y, x_1, y_1, \Delta t_i - \tau) d\tau \right] dx_1 dy_1. \quad (8)$$

Особенности вычисления величины $F(\mathbf{r}, t)$ в (8) описаны в [3]. Обратная замена переменной в функции $F(\mathbf{r}, t)$ позволяет вычислить эволюцию распределения концентрации $c(\mathbf{r}, t)$ межузельных примесных атомов у вершины трещины.

Рассмотрим эволюцию коэффициента интенсивности напряжения (КИН) в нагруженном токопроводящем кристалле. Будем предполагать, что для КИНа трещины имеет место представление [7]

$$K(t) = K^c(t) + K^p(t),$$

где $K^c(t) = (\sigma'_a(t) + P(t))\sqrt{\pi l}$ — слагаемое в КИНе трещины, в котором не учитывается влияние на нее пластической деформации; $K^p(t)$ — слагаемое, обусловленное пластической деформацией [7].

2. Результаты расчетов и их обсуждение. Расчеты выполнены для кристалла α -железа при следующих значениях постоянных: $2l = 10^{-3}$ м, $T_0 = 300$ К, $Z^* = 1$, $\rho_0 = 8,6 \cdot 10^{-8}$ Ом·м, $\alpha = 3,3 \cdot 10^{-3}$ К $^{-1}$, $D = 4,88 \cdot 10^{-12}$ м 2 /с, $\Delta v = 2,06 \cdot 10^{-30}$ м 3 , $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, $k_m = 4,88 \cdot 10^{-9}$ м/с [3]. Остальные значения постоянных такие же, как в [7, 8].

Скорость нагружения кристалла выбиралась так, чтобы максимальная скорость деформации в пластической зоне была равна $0,1$ с $^{-1}$. После достижения внешней нагрузкой $\sigma'_a(t)$ верхнего предела $\sigma_a = 5$ МПа она оставалась постоянной, и наблюдался процесс релаксации напряжения у вершины трещины.

Проанализируем влияние электрического тока на эволюцию распределения точечных дефектов у вершины трещины. Сравним эволюцию КИНа в кристалле с током и без него. На рис. 1 показаны зависимости КИНа от времени для хрупкой трещины и трещины с зоной пластичности у ее вершины при наличии электрического тока и в его отсутствие. Из рис. 1 следует, что электрический ток вызывает дополнительную релаксацию напряжения у вершины трещины. Результаты расчета показали дополнительное уменьшение КИНа из-за действия электрического тока примерно на 10 % по сравнению с релаксацией напряжения только из-за пластической деформации у вершины трещины. Следует отметить, что уменьшение КИНа обусловлено двумя факторами: 1) повышением температуры за счет выделения джоулева тепла, усиливающего процесс развития пластической деформации, что приводит к дополнительной релаксации напряжений у вершины; 2) увеличением

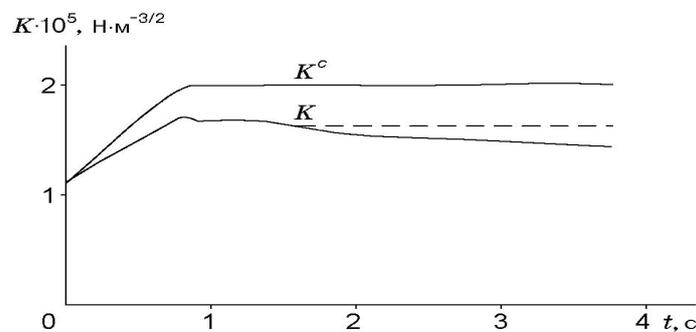


Рис. 1. Зависимость КИНа от времени для трещины растяжения в ОЦК-решетке кристалла:

K^c — для хрупкой трещины, K — для трещины с зоной пластичности (штриховая кривая — в отсутствие электрического тока; сплошная — с учетом обтекания постоянным электрическим током, плотность которого на достаточном удалении $j_0 = 5 \cdot 10^8$ А/м 2)

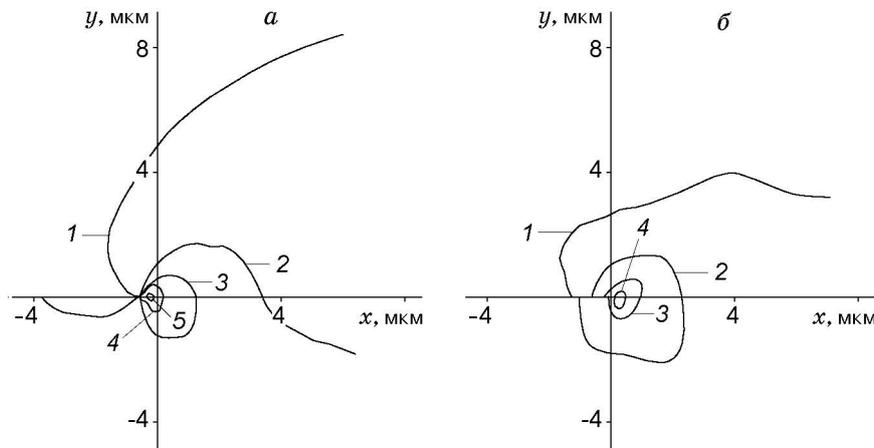


Рис. 2. Распределение концентрации $c(\mathbf{r}, t)/c_0$ межзельных примесных атомов водорода у вершины трещины при $j_0 = 10^8 \text{ А/М}^2$:
 а — $t = 0,268 \text{ с}$ (1 — 0,997; 2 — 1,01; 3 — 1,03; 4 — 1,04; 5 — 1,05); б — $t = 5,715 \text{ с}$ (1 — 1,02; 2 — 1,04; 3 — 1,07; 4 — 1,10)

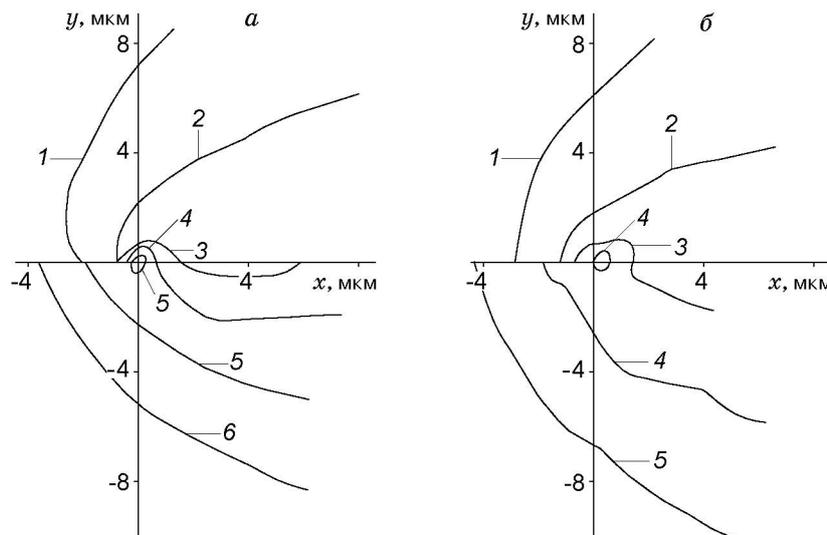


Рис. 3. Распределение концентрации $c(\mathbf{r}, t)/c_0$ межзельных примесных атомов водорода у вершины трещины при $j_0 = 5 \cdot 10^8 \text{ А/М}^2$:
 а — $t = 0,143 \text{ с}$ (1 — 0,932; 2 — 0,957; 3 — 0,983; 4 — 1,01; 5 — 1,03; 6 — 1,06); б — $t = 4,1 \text{ с}$ (1 — 0,936; 2 — 0,967; 3 — 0,999; 4 — 1,03; 5 — 1,06)

“сброса” водорода в полость трещины и переноса его в вершину за счет дислокационного механизма (решеточной диффузии). Последнее обстоятельство может являться причиной увеличения КИНа при “распирании” берегов трещины. На рис. 2, 3 показаны распределения концентрации межзельных атомов водорода у вершины трещины для двух значений плотности электрического тока. На рис. 2, 3 видна асимметрия распределения концентрации водорода относительно линии продолжения трещины. Следует отметить, что сток атомов водорода в полость трещины через контур, охватывающий вершину, почти не меняется. Другими словами, расчет показал, что при доступных плотностях электрического тока в эксперименте не удастся “сбить” поток атомов водорода, заполняющих полость трещины.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Спицын В. И., Троицкий О. А.** Электропластическая деформация металлов. М.: Наука, 1985.
2. **Громов В. Е., Зуев Л. Б., Козлов Э. В.** Электростимулированная пластичность металлов и сплавов. М.: Недра, 1997.
3. **Карпинский Д. Н., Санников С. В.** Миграция точечных дефектов у вершины газонаполненной трещины // Физика металлов и металловедение. 1998. Т. 85, № 2. С. 121–126.
4. **Белоглазов С. М.** Наводораживание стали при электрохимических процессах. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1975.
5. **Угодчиков Н. А., Берендеева А. Г.** Численное моделирование низкотемпературной нестационарной направленной диффузии водорода // Прикладные проблемы прочности и пластичности: Методы решения. М.: Тов-во науч. издательств КМК, 1997. С. 69–74.
6. **Герцрикен С. Д., Дехтяр И. Я.** Диффузия в металлах и сплавах в твердой фазе. М.: Физматгиз, 1960.
7. **Карпинский Д. Н., Санников С. В.** Расчет эволюции пластической деформации у вершины трещины и связанные с ней явления // ПМТФ. 1993. Т. 34, № 3. С. 154–160.
8. **Карпинский Д. Н., Санников С. В.** Влияние электрического тока на эволюцию пластической деформации у вершины трещины // ПМТФ. 2001. Т. 42, № 5. С. 176–182.
9. **Карпинский Д. Н., Санников С. В.** Эволюция концентрации точечных дефектов у вершины трещины // Физика твердого тела. 1997. Т. 39, № 9. С. 1580–1585.
10. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Электродинамика сплошной среды. М.: Наука, 1995.
11. **Карпинский Д. Н., Санников С. В.** Расчет пластифицирующего влияния растворенного в кристалле водорода на эволюцию пластической деформации у вершины трещины // Физика твердого тела. 2000. Т. 42, № 12. С. 2171–2174.
12. **Будак Б. М., Самарский А. А., Тихонов А. Н.** Сборник задач по математической физике. М.: Наука, 1972.

*Поступила в редакцию 22/II 2000 г.,
в окончательном варианте — 16/V 2001 г.*
