Вестник научно-технического развития
Bulletin of Science and Technical Development

Номер 171, 2023г.

DOI: 10.18411/vntr2023-171



Издается с 2007 года

Издание зарегистрировано в Министерстве РФ по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.
Свидетельство о регистрации Эл. № ФС77-29768.

ISSN 2070-6847

Журнал выпускается под научным руководством Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН

DOI: 10.18411/vntr2023-171

ОГЛАВЛЕНИЕ № 171, 2023

Игорь Сергеевич Павлов, Владимир Иванович Ерофеев, Анна Викторовна Муравьева, Анна Викторовна Леонтьева. Экстремальные значения коэффициентов Пуассона простой кубической решетки из сферических частиц…….……**стр. 3 - 18**

Юлия Вячеславовна Свирина, Александр Сергеевич Пупынин, Владимир Николаевич Перевезенцев. Анализ возможностей диффузионного зарождения пор в окрестности дислокационной границы, формирующейся в поле клиновой дисклинации……..**стр. 19 – 27**

Издание зарегистрировано в Министерстве РФ по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций. Свидетельство о регистрации Эл. № ФС77-29768.



ISSN 2070-6847

DOI: 10.18411/vntr2023-171-1

УДК 539.3

ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПУАССОНА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ИЗ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

© Игорь Сергеевич Павлов, Владимир Иванович Ерофеев, Анна Викторовна Муравьева, Анна Викторовна Леонтьева
Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук» (ИПМ РАН), Нижний Новгород, Россия
ispavlov@mail.ru

Аннотация. *В рамках построенной трехмерной модели анизотропной кристаллической среды с простой кубической решетки из сферических частиц получены аналитические соотношения между коэффициентами Пуассона вдоль основных кристаллографических направлений данной среды и параметрами ее микроструктуры. Показано, что при размерах частиц, близких к нулю, некоторые из рассмотренных коэффициентов Пуассона при определенных значениях параметров силовых и моментных взаимодействий между частицами могут принимать значения, превосходящие 0.5, а в случае частиц с большими размерами один из коэффициентов Пуассона может достигать значений, меньших -1.*
Ключевые слова: *простая кубическая решетка, параметры микроструктуры, экстремальные значения коэффициентов Пуассона.*

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПФ РАН на выполнение фундаментальных научных исследований по теме № 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).

EXTREME VALUES OF POISSON'S RATIOS OF THE SIMPLE CUBIC LATTICE CONSISTING OF SPHERICAL PARTICLES

© I.S. Pavlov, V.I. Erofeev, A.V. Muravieva, A.V. Leontyeva
Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Science – Branch of Federal Research Center «A.V. Gaponov-Grekhov Institute of Applied Physics of the Russian Academy of Sciences», Nizhny Novgorod, Russian Federation
ispavlov@mail.ru

Abstract. *In the framework of the elaborated 3D model for an anisotropic crystalline medium with a simple cubic lattice consisting of spherical particles, analytical relationships between Poisson's ratios along the main crystallographic directions of this medium and the parameters of its microstructure have been obtained. When particle sizes are close to zero, it has been shown that some of the considered Poisson's ratios can exceed 0.5 for certain values of the parameters of force and couple interactions between particles, whereas in the case of particles with large sizes, one of the Poisson's ratios can reach values less than -1.*
Keywords: *a simple cubic lattice, microstructure parameters, extreme values of Poisson's ratios.*

Acknowledgements. *The work was carried out within the state assignment for fundamental scientific research on the topic no. 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).*

1. Введение. Среди всех модулей упругости материала особую роль играет коэффициент Пуассона, характеризующий отношение поперечной деформации к продольной. Изотропный материал обладает единственным коэффициентом Пуассона и его теоретически обоснованные значения лежат в интервале $-1 \le \nu \le 0,5$ [1]. Верхний предел соответствует несжимаемым материалам (например, резине), сохраняющим в процессе деформации свой объем при значительном изменении формы. Нижний предел соответствует материалам, сохраняющим геометрические пропорции, но изменяющим объем при деформации. Для обычных упругих материалов, увеличивающих свой объем при растяжении и уменьшающих при сжатии, величина коэффициента Пуассона может лежать только в пределах от 0 до 0,5 [2]. Практически для большинства материалов коэффициент Пуассона находится еще в более узком интервале: от 0,2 до 0,4 [3].

Анизотропный материал имеет несколько коэффициентов Пуассона, поскольку растяжение или сжатие вдоль одной оси может сильно отличаться от растяжения или сжатия вдоль другой. Для анизотропных материалов нередко возникает ситуация, когда один или несколько коэффициентов Пуассона принимают отрицательные значения. Такие материалы получили название “ауксетики” от греческого *auxetos* — «разбухающий» [4]. Ауксетические материалы обладают уникальными геометрическими и механическими характеристиками, такими как повышенное сопротивление сдвигу [5, 6] и вдавливанию [5, 7], высокое сопротивление хрупкому разрушению [8, 9], улучшенное демпфирование и звукопоглощение [10, 11] и др. Благодаря таким характеристикам, ауксетики отличаются высокой потребительской ценностью (низкая плотность, высокая прочность, хорошие изоляционные свойства) и находят широчайшее применение, например, в медицинском и спортивном оборудовании, в защитном снаряжении (например, подушках безопасности в автомобилях). Они прекрасно проявляют себя при использовании в качестве крепежа, демонстрируя увеличенное, в сравнении с обычными материалами, сопротивление извлечению, в частности, из них делают заклепки и гвозди.

Более того, значения всех коэффициентов Пуассона анизотропных материалов, кроме $\nu_{<100,\ 001>}$, могут выходить за пределы известного интервала $-1 \le \nu \le 0,5$ (см., например, [12, 13]). Наиболее часто такая ситуация наблюдается, если растяжение/сжатие материала происходит вдоль каких-то специфических направлений. Например, в работе [14] найдено направление, вдоль которого коэффициент Пуассона дентина зубов достигает значения 0,53. Тем не менее, среднее значение коэффициентов Пуассона обязательно будет содержаться в интервале $-1 \le \nu \le 0,5$ [1, 15].

В данной работе предложена трехмерная модель анизотропного материала в виде кубической решетки из сферических частиц, при определенных значениях параметров микроструктуры которого некоторые из основных коэффициентов Пуассона могут принимать значения меньшее -1 или больше 0,5. Последнее означает, что при сжатии локальных областей такого материала вдоль соответствующего направления их объем будет увеличиваться, а при растяжении – наоборот, уменьшаться [14].

2. Коэффициенты Пуассона анизотропной кристаллической среды с кубической симметрией. Различные коэффициенты Пуассона анизотропного материала обозначаются индексами, содержащими наименование двух осей: той, вдоль которой происходит

первоначальное растяжение или сжатие, и той, вдоль которой наблюдается ответная реакция. В анизотропном монокристаллическом материале с кубической решеткой коэффициенты Пуассона в особых кристаллографических направлениях <100>, <110> и <111> находятся по известным соотношениям [16-18]:

$$\nu_{<100,\ 001>} = \frac{C_{12}}{C_{11}+C_{12}}, \tag{1}$$

$$\nu_{<110,\ 001>} = \frac{4C_{12}C_{44}}{2C_{11}C_{44}+(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}, \tag{2}$$

$$\nu_{<110,\ 1\bar{1}0>} = \frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})-2C_{11}C_{44}}{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})+2C_{11}C_{44}}, \tag{3}$$

$$\nu_{<111,\ 111>} = \frac{C_{11}+2C_{12}-2C_{44}}{2(C_{11}+2C_{12}+C_{44})}. \tag{4}$$

Выражения (1)-(4) содержат константы упругости второго порядка C_{11}, C_{12} и C_{44}, которые являются также и коэффициентами уравнений Ламе для трехмерной “классической” среды, состоящей из материальных точек:

$$\begin{gathered}\rho u_{tt} - C_{11}u_{xx} - C_{44}\left(u_{yy}+u_{zz}\right) - \left(C_{12}+C_{44}\right)\left(v_{xy}+w_{xz}\right) = 0,\\ \rho v_{tt} - C_{11}v_{yy} - C_{44}\left(v_{xx}+v_{zz}\right) - \left(C_{12}+C_{44}\right)\left(u_{xy}+w_{yz}\right) = 0,\\ \rho w_{tt} - C_{11}w_{zz} - C_{44}\left(w_{xx}+w_{yy}\right) - \left(C_{12}+C_{44}\right)\left(u_{xz}+v_{yz}\right) = 0\end{gathered} \tag{5}$$

Здесь ρ - плотность среды, *u*, *v*, *w* – перемещения частиц среды вдоль, соответственно, осей координат *x*, *y*, *z*.

Для краткости коэффициенты Пуассона (1)-(4) обозначим ν_1, ν_2, ν_3 и ν_4, соответственно. В изотропной среде, как известно, $C_{11}-C_{12}=2C_{44}$. В этом случае среда имеет единственный коэффициент Пуассона $\nu=\nu_1=\nu_2=\nu_3=\nu_4$, определяемый формулой (1).

Для того чтобы кристаллическая решетка была стабильной, её упругие постоянные C_{11}, C_{12} и C_{44} должны удовлетворять следующим соотношениям:

$$C_{11}+2C_{12}>0, \tag{6}$$

$$C_{11}-C_{12}>0, \tag{7}$$

$$C_{44}>0. \tag{8}$$

Из условий (6)-(8) следует положительность констант C_{11} и C_{44}. Постоянная C_{12} иногда, хотя и очень редко, может быть отрицательной [19]. Из 1100 кубических кристаллов, приведенных в [20], таким свойством обладают менее 20. Если при этом и все остальные коэффициенты Пуассона отрицательны, то такой материал называют полным ауксетиком [21], но таких меньше 8 [19]. Если же лишь некоторые из коэффициентов Пуассона

принимают отрицательные значения, то такой материал называют частичным ауксетиком [21]. Их значительно больше, чем полных ауксетиков - примерно 25% от всех кубических кристаллов [19]. В основном, ауксетические свойства они приобретают за счет отрицательности ν_3 (см., например, [22]). Однако имеется один частичный ауксетик, у которого $\nu_4<0$. Это $Mn_{85.3}Ni_{8.8}C_{5.9}$, у него ν_4=-0.01 [20].

Далее постараемся выяснить, какие из коэффициентов Пуассона (1)-(4) при положительных константах упругости C_{11}, C_{12} и C_{44} могут принимать значения, выходящие за пределы интервала $-1 \le \nu \le 0,5$.

Очевидно, что в этом случае коэффициенты Пуассона ν_1 и ν_2 положительны, причем $\nu_1 > 0.5$ лишь при $C_{11} < C_{12}$, но это неравенство противоречит условию (7). $\nu_2 > 0.5$ при $C_{44} > \frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}{2(4C_{12}-C_{11})}$, что, в принципе, возможно, например, при $C_{11} = 2C_{12}$, если $C_{44} > C_{12}$.

Анализ выражений (3) и (4) показывает, что коэффициенты Пуассона ν_3 и ν_4 могут быть отрицательными даже при положительных константах упругости C_{11}, C_{12} и C_{44}. $\nu_3 > 0.5$ при $C_{44} < \frac{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})}{6C_{11}}$. ν_4 мог бы принимать значения, превосходящие 0.5 лишь при отрицательных C_{44}.

Далее рассмотрим модель, в рамках которой коэффициенты Пуассона (2)-(4) могут принимать значения, выходящие за пределы интервала $-1 \le \nu \le 0,5$.

3. Дискретная модель кристалла из сферических частиц. Пусть недеформируемые сферические частицы (зерна), обладающие массой M, образуют простую кубическую решетку с периодом a. В исходном состоянии сферы диаметром d сосредоточены в узлах этой решетки (рис. 1). Каждая частица имеет шесть степеней свободы: центр масс частицы с номером $N=N(i, j, k)$ может смещаться вдоль осей x, y и z (трансляционные степени свободы $u_{i,j,k}$, $v_{i,j,k}$ и $w_{i,j,k}$), а сама частица способна поворачиваться вокруг каждой из этих осей (ротационные степени свободы $\theta_{i,j,k}$, $\psi_{i,j,k}$ и $\varphi_{i,j,k}$) (рис. 2). В таком случае кинетическая энергия частицы N задается следующей формулой:

$$T = \frac{M}{2}\left(u_t^2 + v_t^2 + w_t^2\right) + \frac{J}{2}(\varphi_t^2 + \theta_t^2 + \psi_t^2), \qquad (9)$$

где $J = \frac{2}{5}M\left(\frac{d}{2}\right)^2 = \frac{1}{10}Md^2$ - момент инерции частицы относительно каждой оси, проходящей через ее центр масс. Здесь и далее в формулах, если не указано иное, нижние буквенные символы обозначают производные по соответствующим переменным.

Считается, что частица $N=N(i, j, k)$ взаимодействует лишь с ближайшими соседями, удаленными от нее на расстояние a (6 частиц 1-й координационной сферы: $(i\pm1, j, k)$, $(i, j\pm1, k)$, $(i, j, k\pm1)$), на расстояние $a\sqrt{2}$ (12 частиц 2-й координационной сферы:

(*i*, *j*±1, *k*±1), (*i*±1, *j*, *k*±1), (*i*±1, *j*±1, *k*)) и на расстояние $a\sqrt{3}$ (8 частиц 3-й сферы: (*i*±1, *j*±1, *k*±1)) (см. рис. 1). Между частицами расположена безмассовая упругая среда, через которую передаются силовые и моментные воздействия, моделируемые линейными упругими пружинами пяти типов: центральными с жесткостью K_0, соединяющими центры масс соседних частиц, нецентральными с жесткостью K_1, диагональными K_2 (рис. 3), а также пружинами с жесткостями K_3 и K_4, соединяющими центральную частицу с зернами, соответственно, второй и третьей координационных сфер. На рисунке 3 синим и зеленым цветом обозначены пружины с жесткостью K_1, коричневым – пружины K_2.

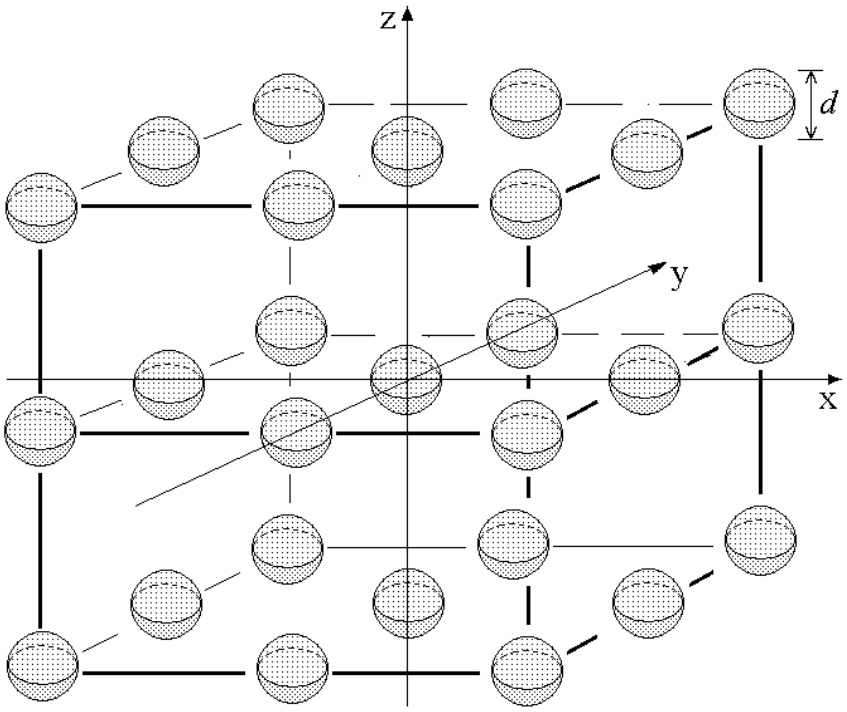


Рис.1. Простая кубическая решетка из сферических частиц.

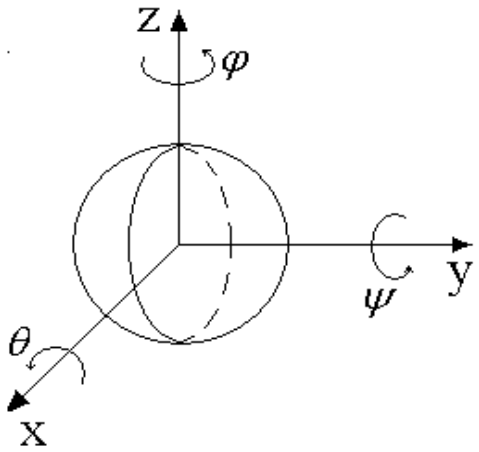


Рис. 2. Ротационные степени свободы частицы.

Для удобства дальнейших вычислений предполагается, что в каждую сферу диаметром d вписан куб со стороной $b = d/\sqrt{3}$. Точки соединения с частицами пружин вида K_1 и K_2 лежат в вершинах куба (на рис. 3 $A_2B'_1$, $B_2A'_1$, $E_2C'_1$, $C_2E'_1$ – пружины с жесткостью K_1, $A_2C'_1$, $E_2B'_1$, $B_2E'_1$, $C_2A'_1$ – пружины вида K_2), а пружины с жесткостями K_3 и K_4 прикреплены к серединам ближайших друг к другу ребер кубов, геометрические центры которых в исходном состоянии расположены на расстояниях $a\sqrt{2}$ и $a\sqrt{3}$.

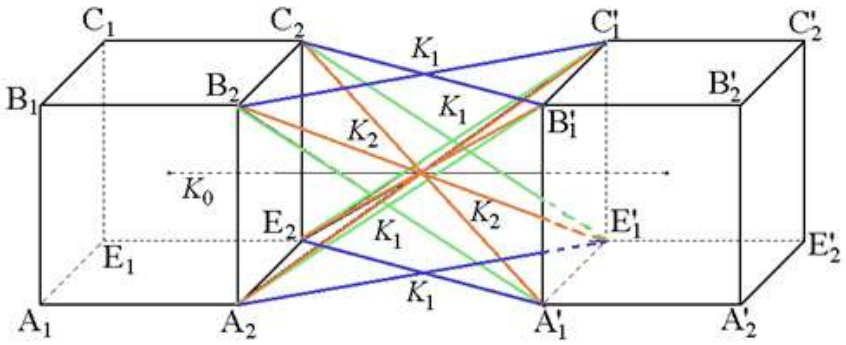


Рис. 3. Схема силовых взаимодействий между ближайшими соседями по решетке (частицами первой координационной сферы). Синим и зеленым обозначены пружины с жесткостью K_1, коричневым – пружины K_2.

Пружины с жесткостями K_0, K_1, K_2 и K_3 описывают взаимодействия частиц внутри одного слоя. Так, центральные K_0 и нецентральные K_1 пружины характеризуют взаимодействия при растяжении-сжатии материала. Через пружины K_1 передаются также моменты при поворотах частиц. Пружины с жесткостью K_1 и K_2 характеризуют силовые взаимодействия частиц при сдвиговых деформациях в материале.

Предполагается, что смещения зерен малы по сравнению с размерами элементарной ячейки рассматриваемой решетки. Взаимодействие частиц при отклонениях от положения равновесия определяется относительными удлинениями пружин. Потенциальная энергия, обусловленная взаимодействием частицы N с 26 ближайшими соседями по решетке, описывается формулой

$$U_N = \frac{1}{2}\left(\sum_{n=1}^{6}\frac{K_0}{2}D_{0n}^2 + \sum_{n=1}^{48}\frac{K_1}{2}D_{1n}^2 + \sum_{n=1}^{24}\frac{K_2}{2}D_{2n}^2 + \sum_{n=1}^{12}\frac{K_3}{2}D_{3n}^2 + \sum_{n=1}^{8}\frac{K_4}{2}D_{4n}^2\right), \quad (10)$$

где D_{ln} (l=0, 1, 2, 3, 4) – удлинения пронумерованных в произвольном порядке пружин пяти типов, соединяющих частицу с ее соседями. Эти удлинения определяются изменениями расстояний между точками соединения соответствующих пружин (см. рис. 3). Далее от полученной дискретной модели перейдем в континуальное приближение. Для этого выразим удлинения пружин через смещения и углы поворотов частиц и разложим последние в выражении для потенциальной энергии в ряд Тейлора до квадратичных членов включительно.

4. Длинноволновая континуальная модель кристаллической среды. В случае длинноволновых возмущений, когда $\lambda >> a$ функция Лагранжа L рассматриваемой среды из сферических частиц с точностью до квадратичных слагаемых примет вид:

$$L = \frac{M}{2}\left(u_t^2 + v_t^2 + w_t^2\right) + \frac{J}{2}(\varphi_t^2 + \theta_t^2 + \psi_t^2) -$$
$$-\frac{M}{2}[c_1^2(u_x^2 + v_y^2 + w_z^2) + c_2^2(v_x^2 + v_z^2 + u_y^2 + u_z^2 + w_x^2 + w_y^2) +$$
$$+s^2(v_y w_z + v_z w_y + u_x w_z + u_z w_x + u_x v_y + u_y v_x) + \beta_1^2(\varphi^2 + \theta^2 + \psi^2) + \quad (11)$$
$$\beta_2^2(v_x\varphi - w_x\psi + w_y\theta - u_y\varphi + u_z\psi - v_z\theta) +$$
$$+b^2c_3^2(\varphi_z^2 + \theta_x^2 + \psi_y^2) + b^2c_4^2(\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \theta_y^2 + \theta_z^2 + \psi_x^2 + \psi_z^2)].$$

Здесь введены обозначения: c_i $(i = 1 \div 4)$ — скорости распространения соответственно продольной, поперечной и ротационных волн, s — коэффициент связи между продольными и сдвиговыми деформациями, β_1 и β_2 — параметры связи микроповоротов с поперечной и продольной волнами.

Из функции Лагранжа (11) с помощью вариационного принципа Гамильтона-Остроградского получена система дифференциальных уравнений, описывающая распространение акустических и ротационных волн в кубической решетке из сферических частиц:

$$u_{tt} - c_1^2 u_{xx} - c_2^2\left(u_{yy} + u_{zz}\right) - s^2\left(v_{xy} + w_{xz}\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(\varphi_y - \psi_z\right) = 0,$$
$$v_{tt} - c_1^2 v_{yy} - c_2^2\left(v_{xx} + v_{zz}\right) - s^2\left(u_{xy} + w_{yz}\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(\theta_z - \varphi_x\right) = 0,$$
$$w_{tt} - c_1^2 w_{zz} - c_2^2\left(w_{xx} + w_{yy}\right) - s^2(u_{xz} + v_{yz}) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(\psi_x - \theta_y\right) = 0, \quad (12)$$
$$d^2\left(\frac{1}{10}\theta_{tt} - \frac{1}{3}c_3^2\theta_{xx} - \frac{1}{3}c_4^2\left(\theta_{yy} + \theta_{zz}\right)\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(w_y - v_z\right) + \beta_1^2\theta = 0,$$
$$d^2\left(\frac{1}{10}\psi_{tt} - \frac{1}{3}c_3^2\psi_{yy} - \frac{1}{3}c_4^2\left(\psi_{xx} + \psi_{zz}\right)\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(u_z - w_x\right) + \beta_1^2\psi = 0,$$
$$d^2\left(\frac{1}{10}\varphi_{tt} - \frac{1}{3}c_3^2\varphi_{zz} - \frac{1}{3}c_4^2\left(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}\right)\right) + \frac{\beta_2^2}{2}\left(v_x - u_y\right) + \beta_1^2\varphi = 0.$$

Коэффициенты уравнений системы (12), являющиеся, по сути, макропараметрами среды, выражаются через силовые постоянные K_0, K_1, K_2, K_3, K_4, период решетки a и размер частицы $b = d/\sqrt{3}$ следующим образом:

$$c_1^2 = \frac{1}{a\rho}\left(K_0 + \frac{8(a-b)^2}{(a-b)^2 + b^2}K_1 + \frac{4(a-b)^2}{(a-b)^2 + 2b^2}K_2 + \frac{K_3}{\sqrt{2}} + \frac{2K_4}{3}\right),$$
$$c_2^2 = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{4b^2}{(a-b)^2 + b^2}K_1 + \frac{4b^2}{(a-b)^2 + 2b^2}K_2 + \frac{K_3}{2\sqrt{2}} + \frac{2K_4}{3}\right),$$

$$s^2 = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{K_3}{\sqrt{2}} + \frac{4K_4}{3}\right),$$

$$\beta_1^2 = \frac{8b^2}{a\rho}\left(\frac{K_1}{(a-b)^2+b^2} + \frac{K_2}{(a-b)^2+2b^2}\right), \quad (13)$$

$$\beta_2^2 = \frac{8b^2}{a\rho}\left(\frac{K_2}{(a-b)^2+2b^2}\right), \quad c_3^2 = \frac{2b^2}{a\rho}\left(\frac{K_1}{(a-b)^2+b^2}\right),$$

$$c_4^2 = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{K_1(a^2+(a-b)^2)}{(a-b)^2+b^2} + \frac{K_2 a^2}{(a-b)^2+2b^2}\right).$$

Здесь $\rho = M / a^3$ – плотность рассматриваемой среды. Из (13) следует

$$\beta_1^2 + s^2 = 2c_2^2, \quad \beta_2^2 + 4c_3^2 = \beta_1^2. \quad (14)$$

Таким образом, в данной анизотропной среде имеется лишь 5 независимых макроконстант, причем при переходе к изотропной среде (в этом случае $c_1^2 = c_2^2 + s^2$) останется лишь 4 константы. Данная среда становится изотропной при выполнении следующего соотношения:

$$K_0 = \frac{4b^2 - 8(a-b)^2}{(a-b)^2+b^2}K_1 + \frac{4a(2b-a)}{(a-b)^2+2b^2}K_2 - \frac{K_3}{4\sqrt{2}} + \frac{4}{3}K_4. \quad (15)$$

Пружины пяти типов были введены в модель по следующим причинам. Благодаря наличию центральных пружин с жесткостью K_0, достигается превосходство скорости продольных волн над скоростями остальных волн. В отсутствии пружин K_1 $\beta_1 = \beta_2$ и $c_3 = 0$, в то время как в среде Коссера, представляющей собой континуум твердых недеформируемых тел-частиц [23], этот коэффициент является ненулевым. Если же K_2=0, то $\beta_2 = 0$ и, как следствие, исчезает связь между трансляционными и ротационными степенями свободы частиц в линейном приближении, присутствующая в континууме Коссера. Дублирующими друг друга кажутся, на первый взгляд, пружины K_3 и K_4. Но, как следует из соотношения (15), пружины этих двух типов в количественном отношении по-разному влияют на параметры c_1, c_2 и s. Кроме того, равенство (15) показывает их разное качественное влияние на выполнение условия изотропии среды, поскольку K_3 и K_4 входят в (14) с противоположными знаками.

5. Градиентная модель. Для сопоставления полученной модели (12) с уравнениями Ламе классической теории упругости (5) рассмотрим случай, когда повороты частиц среды связаны с продольными и поперечными деформациями. Иными словами, рассмотрим приближение, когда $d \to 0$ и, следовательно, в уравнениях (12) слагаемые со вторыми производными существенно меньше остальных. В этом случае

$$\theta(x,y,z,t) \approx \frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\left(v_z - w_y\right) = -\frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\,\mathrm{rot}_x\,\mathbf{U},$$

$$\psi(x,y,z,t) \approx \frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}(w_x - u_z) = -\frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\,\mathrm{rot}_y\,\mathbf{U}, \tag{16}$$

$$\varphi(x,y,z,t) \approx \frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}(u_y - v_x) = -\frac{\beta_2^2}{2\beta_1^2}\,\mathrm{rot}_z\,\mathbf{U}.$$

В результате учета соотношений (16) в функции Лагранжа (11) происходит “замораживание” ротационных степеней свободы, и формула (11) принимает следующий вид:

$$L = \frac{M}{2}\left(u_t^2 + v_t^2 + w_t^2\right) + \frac{J}{8}\frac{\beta_2^4}{\beta_1^4}\left(\left(v_{xt} - u_{yt}\right)^2 + \left(u_{zt} - w_{xt}\right)^2 + \left(w_{yt} - v_{zt}\right)^2\right) -$$

$$-\frac{M}{2}\left[c_1^2(u_x^2 + v_y^2 + w_z^2) + c_2^2(v_x^2 + v_z^2 + u_y^2 + u_z^2 + w_x^2 + w_y^2) + \right.$$

$$+s^2(v_y w_z + v_z w_y + u_x w_z + u_z w_x + u_x v_y + u_y v_x) - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\left(\left(v_x - u_y\right)^2 + \left(w_y - v_z\right)^2 + \left(u_z - w_x\right)^2\right) + \tag{17}$$

$$+\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^4}b^2c_3^2\left(\left(v_{xz} - u_{yz}\right)^2 + \left(w_{yx} - v_{xz}\right)^2 + \left(u_{yz} - w_{xy}\right)^2\right) +$$

$$\left. +\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^4}b^2c_4^2(\left(v_{xx} - u_{xy}\right)^2 + \left(v_{xy} - u_{yy}\right)^2 + \left(w_{yy} - v_{yz}\right)^2 + \left(w_{yz} - v_{zz}\right)^2 + \left(u_{xz} - w_{xx}\right)^2 + \left(u_{zz} - w_{xz}\right)^2)\right].$$

Следует отметить, что часть функции Лагранжа (17), соответствующая потенциальной энергии, положительна даже несмотря на наличие отрицательной составляющей – слагаемого $-\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\left(\left(v_x - u_y\right)^2 + \left(w_y - v_z\right)^2 + \left(u_z - w_x\right)^2\right)$, поскольку это слагаемое компенсируется положительным слагаемым $c_2^2(v_x^2 + v_z^2 + u_y^2 + u_z^2 + w_x^2 + w_y^2)$. При разложении квадратов в слагаемом $-\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\left(\left(v_x - u_y\right)^2 + \left(w_y - v_z\right)^2 + \left(u_z - w_x\right)^2\right)$ удвоенные произведения положительны. Остаются квадраты различных деформаций с коэффициентом $c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}$, пропорциональным упругой постоянной C_{44}>0: $C_{44} = \rho\left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)$. Более того, этот коэффициент в явном виде выражается через параметры микроструктуры с помощью соотношений (13):

$$c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2} = \frac{1}{a\rho}\left(\frac{4(K'_1 + K'_2)^2 - 2(K'_2)^2}{K'_1 + K'_2} + \frac{K_3}{2\sqrt{2}} + \frac{2K_4}{3}\right), \tag{18}$$

где $K'_1 = \frac{b^2}{r_1^2}K_1$ и $K'_2 = \frac{b^2}{r_2^2}K_2$. Очевидно, что выражение (18) положительно при любых положительных жесткостях пружин.

Функции Лагранжа (17) соответствуют следующие уравнения динамики:

$$u_{tt} - c_1^2 u_{xx} - \left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(u_{yy} + u_{zz}\right) - \left(s^2 + \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(v_{xy} + w_{xz}\right) =$$
$$= \frac{\beta_2^4}{2\beta_1^4}\left\{\frac{d^2}{20}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(u_y - v_x\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(u_z - w_x\right)\right) - b^2 c_4^2 \Delta\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(u_y - v_x\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(u_z - w_x\right)\right) + \right.$$
$$\left. + b^2\left(c_4^2 - c_3^2\right)\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}\left(2u_{yz} - v_{xz} - w_{xy}\right)\right\},$$

$$v_{tt} - c_1^2 v_{yy} - \left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(v_{xx} + v_{zz}\right) - \left(s^2 + \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(u_{xy} + w_{yz}\right) = \qquad (19)$$
$$= \frac{\beta_2^4}{2\beta_1^4}\left\{\frac{d^2}{20}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(v_x - u_y\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_z - w_y\right)\right) - b^2 c_4^2 \Delta\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(v_x - u_y\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_z - w_y\right)\right) + \right.$$
$$\left. + b^2\left(c_4^2 - c_3^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial z}\left(2v_{xz} - u_{yz} - w_{xy}\right)\right\},$$

$$w_{tt} - c_1^2 w_{zz} - \left(c_2^2 - \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(w_{xx} + w_{yy}\right) - \left(s^2 + \frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right)\left(u_{xz} + v_{yz}\right) =$$
$$= \frac{\beta_2^4}{2\beta_1^4}\left\{\frac{d^2}{20}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(w_x - u_z\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(w_y - v_z\right)\right) - b^2 c_4^2 \Delta\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(w_x - u_z\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(w_y - v_z\right)\right) + \right.$$
$$\left. + b^2\left(c_4^2 - c_3^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}\left(2w_{xy} - v_{xz} - u_{yz}\right)\right\},$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

Такие уравнения принято называть уравнениями градиентной теории упругости, поскольку они содержат слагаемые высокого порядка (в данном случае - четвертого) [25]. Уравнения (19) показывают, что в данном низкочастотном приближении вызванные микровращениями возмущения не распространяются, однако микроповороты оказывают влияние на распространение продольных и поперечных волн: квадрат скорости поперечной волны c_2^2 уменьшается на величину $\beta_2^4 / 4\beta_1^2$, а параметр связи между продольными и поперечными деформациями s^2 увеличивается на эту же величину.

Далее с помощью уравнений (19) попытаемся выяснить, при каких значениях параметров микроструктуры коэффициент Пуассона ν_2 принимает значения, большие 0.5, ν_4 достигает значений, меньше -1, а коэффициент ν_3 обладает обоими этими свойствами.

6. Влияние микроструктуры среды на ее коэффициенты Пуассона. В уравнениях (19) пренебрежем производными четвертого порядка и сравним левые части этих уравнений с уравнениями (5) классической теории упругости для сред с кубической симметрией. Благодаря такому сравнению, выразим упругие постоянные второго порядка через коэффициенты (13) уравнений (12):

$$C_{11}=\rho c_1^2,\ C_{44}=\rho\left(c_2^2-\frac{\beta_2^4}{4\beta_1^2}\right),\ C_{12}=\rho\left(s^2-c_2^2+\frac{\beta_2^4}{2\beta_1^2}\right). \tag{20}$$

Далее подставим в формулы (2)-(4) выражения (20) и (13). В результате получим зависимости коэффициентов Пуассона ν_2, ν_3 и ν_4 от параметров микроструктуры среды, к каковым относятся геометрические характеристики среды (период решетки a и диаметр сферической частицы d) и параметры силовых и моментных взаимодействий K_i (i=0, 1, 2, 3, 4). Анализ данной модели показывает, что при фиксированных значениях параметров $K_{i0}=K_i/K_0$ (i=1, 2, 3, 4) коэффициенты Пуассона ν_2, ν_3 и ν_4 монотонно убывают с ростом относительного размера частиц d/a [24]. Следовательно, самые большие значения коэффициенты Пуассона достигают при $d/a\to 0$, а самые маленькие (отрицательные) – при $d/a\to 1$.

Если $d/a=0$, то

$$c_1^2=\frac{1}{a\rho}\left(K_0+8K_1+4K_2+\frac{K_3}{\sqrt{2}}+\frac{2K_4}{3}\right),$$

$$c_2^2=\frac{1}{a\rho}\left(\frac{K_3}{2\sqrt{2}}+\frac{2K_4}{3}\right)=\frac{s^2}{2},$$

$$\beta_1^2=\beta_2^2=c_3^2=0, \tag{21}$$

$$c_4^2=\frac{1}{a\rho}\left(2K_1+K_2\right).$$

Из (21) следует, что $\nu_2>0.5$ при

$$\frac{K_{40}}{3}\left(8K_{40}+\frac{7K_{30}}{\sqrt{2}}\right)>\left(1+8K_{10}+4K_{20}\right)\left(1+8K_{10}+4K_{20}+\frac{7K_{30}}{2\sqrt{2}}+\frac{10K_{40}}{3}\right). \tag{22}$$

Очевидно, что неравенство (22) может выполняться лишь при малых значениях параметров K_{10} и K_{20}. Так, если $K_{10}=K_{20}=0$, то неравенство (22) примет вид:

$$K_{30}>\frac{2\sqrt{2}(3-8K_{40}^2+10K_{40})}{7(2K_{40}-3)2\sqrt{2}}. \tag{23}$$

Очевидно, что при любом положительном K_{40} правая часть неравенства (23) будет отрицательной. Значит, в случае, когда d=0 и $K_{10}=K_{20}=0$, $\nu_2>0.5$ при любых положительных значениях K_{30} и K_{40}. Если же взять хоть и малые, но ненулевые значения

параметров K_{10} и K_{20}, то ν_2 будет превышать 0.5 уже не при всех значениях K_{40}, что подтверждается численными исследованиями, представленными на рисунке 4.

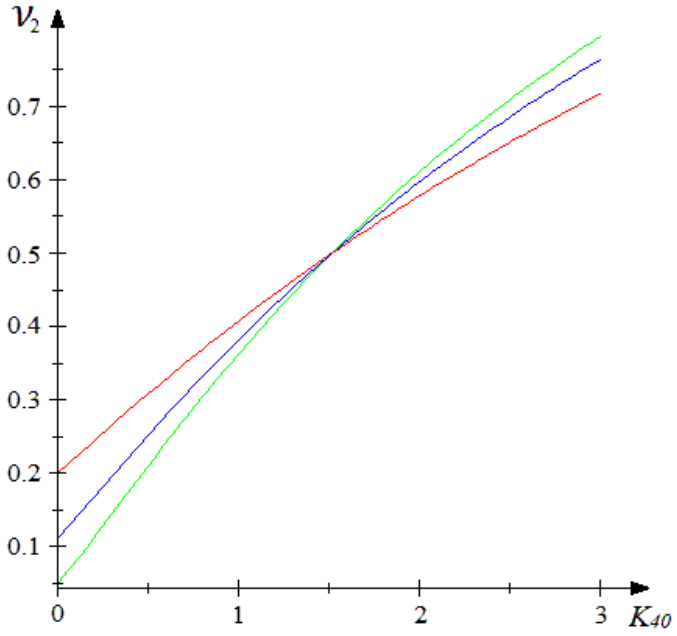


Рис. 4. Зависимость коэффициента Пуассона ν_2 от силового параметра K_{40} при d/a=0.01, K_{10}=K_{20} =0.001,
где зеленая кривая соответствует K_{30}=0.5, синяя – K_{30}=1, красная – K_{30}=2.

Аналогично (при $d/a=0$), $\nu_3>0.5$ при $C_{11}^2>2C_{44}^2+5C_{11}C_{44}$ или, в терминах силовых и моментных параметров взаимодействий между частицами, при

$$\left(1+8K_{10}+4K_{20}\right)^2>\left(1+8K_{10}+4K_{20}\right)\left(\frac{K_{30}}{2\sqrt{2}}+2K_{40}\right)+K_{30}^2+\frac{8}{3}K_{40}^2+\frac{5}{\sqrt{2}}K_{30}K_{40}\,. \quad (24)$$

Анализ неравенства (24) показывает, что по сравнению с ν_2 коэффициент Пуассона ν_3 ведет себя по-другому - он увеличивается с ростом K_{10} и K_{20}, причем, как следует из рисунка 5, наибольшие значения ν_3 принимает при малых значениях K_{30} и K_{40}.

Далее выясним, могут ли коэффициенты Пуассона (3) и (4) принимать очень большие по модулю отрицательные значения. Так, $\nu_4<-0.5$ при $C_{44}>2C_{11}+4C_{12}$. Но такое соотношение при всех положительных константах упругости второго порядка практически недостижимое.

В свою очередь, $\nu_3<-0.5$ при

$$2C_{11}C_{44}>3\left(C_{11}-C_{12}\right)\left(C_{11}+2C_{12}\right). \quad (25)$$

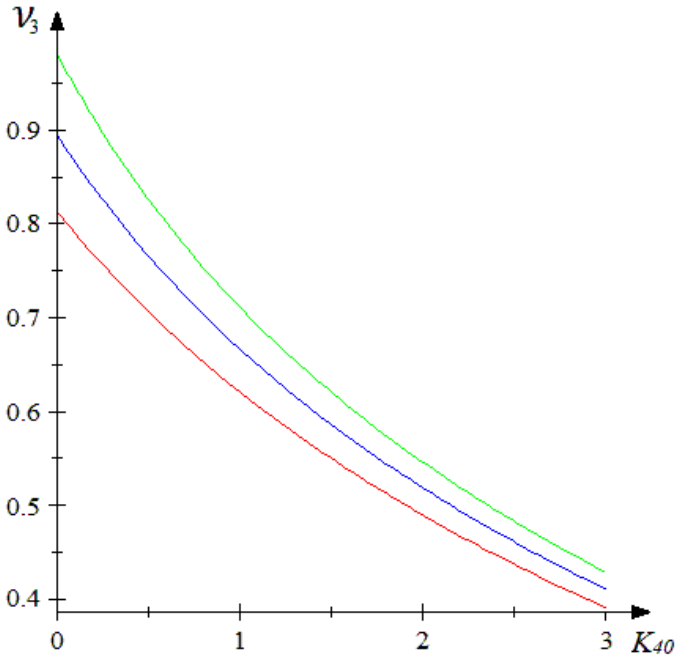


Рис. 5. Зависимость коэффициента Пуассона ν_3 от силового параметра K_{40} при d/a=0.01, K_{10}=K_{20} =0.5,
где зеленая кривая соответствует K_{30}=0.1, синяя – K_{30}=0.6, красная – K_{30}=1.2.

Неравенство (25) вполне может выполняться для некоторых кубических кристаллов. Подставив в (3) выражения (20) и (13), получим зависимости коэффициента Пуассона ν_3 от параметров микроструктуры. Нас интересует случай, когда $d/a \to 1$. На рисунке 6 представлены зависимости ν_3 от параметра межчастичных взаимодействий K_{40} при d/a=0.99. Из данного рисунка видно, что наименьшие значения ν_3 принимает при малых значениях K_{30} и K_{40}. Возникает вопрос: существуют ли значения параметров микроструктуры, при которых ν_3 может стать меньше -1? Анализ показал, что ответ на этот вопрос утвердительный: $\nu_3 < -1$, например, если K_{30}=0.1, K_{40}<0.2, а все остальные параметры такие же, как при построении рисунка 6.

С другой стороны, неравенство $\nu_3 < -1$ может выполняться лишь при $(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12}) < 0$. Однако оба множителя здесь положительны: первый – согласно условию (7), второй – из-за выполнения (6). Почему же при некоторых значениях параметров микроструктуры коэффициента Пуассона ν_3 принимает значения, меньшие -1? Дело в том, что в случае, когда $d/a \to 1$, параметры K_{30} и K_{40} малы, а параметры K_{10} и K_{20} большие (больше 0.4), не только становится отрицательной упругая постоянная C_{12}, но и нарушается условие (6).

Таким образом, рассмотренная в данной работе модель допускает как положительные, так и отрицательные аномальные значения коэффициентов Пуассона вдоль основных кристаллографических осей.

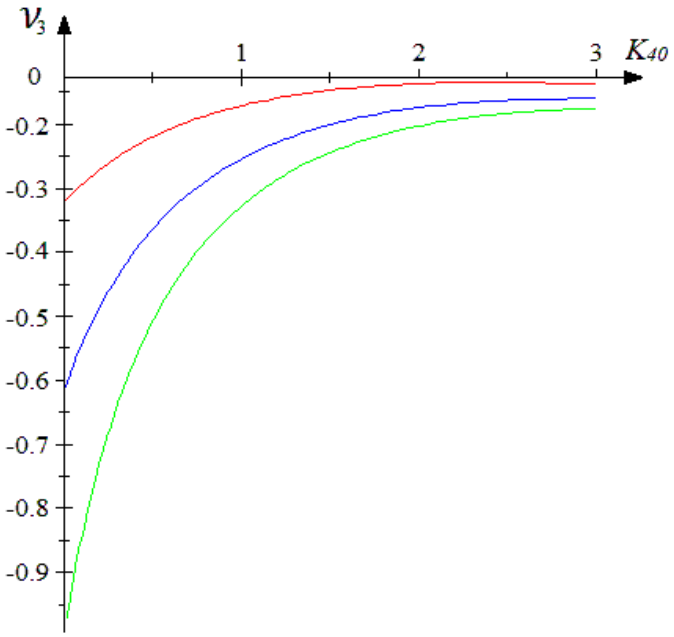


Рис. 6. Зависимость коэффициента Пуассона ν_3 от силового параметра K_{40} при d/a=0.99, K_{10}=0.4, K_{20} =0.5, где зеленая кривая соответствует K_{30}=0.25, синяя – K_{30}=0.7, красная – K_{30}=1.5.

7. Заключение. В рамках построенной трехмерной модели анизотропной кристаллической среды с простой кубической решетки из сферических частиц получены аналитические зависимости коэффициентов уравнений динамики такой среды от параметров ее микроструктуры.

Рассмотрено низкочастотное приближение шестимодовой модели кристаллической среды, соответствующее уравнениям градиентной теории упругости. В этом приближении можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц, но память о них остается в виде корректировки скоростей поперечных и изгибных волн по сравнению с исходной моделью.

Сопоставление уравнений градиентной теории упругости с уравнениями Ламе классической теории упругости для сред с кубической симметрией дало возможность установить связь между упругими постоянными второго порядка и параметрами микроструктуры рассматриваемой среды. В результате, были найдены соотношения между коэффициентами Пуассона вдоль основных кристаллографических направлений анизотропной среды и параметрами ее микроструктуры.

Показано, что нулевой размер частиц среды (d=0) и наличие лишь центральных сил взаимодействия между частицами первой координационной сферы ($K_{10} = K_{20} = 0$) являются достаточными условиями для того, чтобы коэффициент Пуассона $\nu_{<110,\ 001>} = \nu_2$ был больше 0.5. Коэффициент Пуассона $\nu_{<110,\ 1\bar{1}0>} = \nu_3$ становится больше 0.5 при d=0, больших значениях K_{10} и K_{20} и малых значениях K_{30} и K_{40}. Кроме того, ν_3 может принять и аномально малые значения (меньшие -1) при больших значениях относительных размеров частиц ($d/a \to 1$) и малых значениях K_{30} и K_{40}, однако в этом случае становится отрицательной константа упругости C_{12}, в то время как $-1 < \nu_3 < -0.5$ при C_{12}>0.

Список литературы

1. Конек Д.А., Войцеховский К.В., Плескачевский Ю.М., Шилько С.В. Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона: обзор // Механика композиционных материалов и конструкций. — 2004. — Т. 10, № 1. — С. 35—69.
2. Беломестных В.Н., Теслева Е.П. Коэффициент Пуассона и параметр Грюнайзена твердых тел // Известия Томского политехнического университета. – 2003. – Т. 306. – № 5. – С. 8-12.
3. Иванов Г.П., Лебедев Т.А. О физическом смысле коэффициента Пуассона // Труды Ленингр. политехн. ин-та им. М.И. Калинина. – 1964. – № 236. – С. 38-46.
4. Evans K.E. Auxetic polymers: a new range of materials // Endeavour. — 1991. — Vol. 15, iss. 4. — P. 170—174.
5. Evans K.E., Alderson A. Auxetic materials: functional materials and structures from lateral thinking // Adv. Mater. 2000. – V. 12. – P. 617–628.
6. Underhill R.S. Defense applications of auxetic materials // Defense Syst. Inf. Anal. Center J. 2014. – V. 1. – P. 7–13.
7. Liu Q. Literature review materials with negative Poisson’s ratios and potential applications to aerospace and defense // Aust. Gov. Dep. Def. 2006.
8. Choi J.B. Lakes R.S. Fracture toughness of re-entrant foam materials with a negative Poisson’s ratio: experiment and analysis // Int. J. Fract. 1996. – V. 80. – P. 73–83.
9. Donoghue J.P., Alderson, K.L., Evans, K.E. The fracture toughness of composite laminates with a negative Poisson’s ratio // Phys. Status Solidi B. 2009. – V. 246. – P. 2011–2017.
10. Alderson K.L., Webber R.S., Mohammed U.F., Murphy E., Evans K.E. An experimental study of ultrasonic attenuation in microporous polyethylene // Appl. Acoust. 1997. – V. 50. – P. 23–33.
11. Howell B., Prendergast P., Hansen L. Examination of acoustic behavior of negative Poisson’s ratio materials // Appl. Acoust. 1994. – V. 43. – P. 141–148.
12. Епишин А.И., Лисовенко Д.С. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов// Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – № 10. С. 74–82.
13. Волков М.А. Экстремальные значения коэффициента Пуассона триклинных и моноклинных кристаллов // Письма о материалах. – 2014. – Т.4. – №3. – С.167-170. https://doi.org/10.22226/2410-3535-2014-3-167-170
14. Муслов С.А., Лисовенко Д.С. Коэффициент Пуассона дентина как анизотропной среды с гексагональной симметрией // Междунар. науч.-исслед. журн. – 2018. – № 7 (73). – С. 18–24.
15. Lethbridge Z.A.D., Walton R.I., Marmier A., Smith C.W., Evans K.E. Elastic anisotropy and extreme Poisson’s ratios in single crystals // Acta Mater. 2010. – V. 58. – P. 6444–6451.
16. Turley J., Sines G. The anisotropy of Young’s modulus, shear modulus and Poisson’s ratio in cubic materials // J. Phys. D : Appl. Phys. — 1971. — Vol. 4. — P. 264—271.
17. Беломестных В.Н., Соболева Е.Г. Коэффициенты Пуассона щелочно-галоидных кристаллов. Ч. I: Галогениды лития // Известия Томского политехнического университета. — 2012. — Т. 320, № 2. — С. 137—139.
18. Ерофеев В.И., Павлов И.С. Параметрическая идентификация кристаллов, имеющих кубическую решетку, с отрицательными коэффициентами Пуассона // Прикладная механика и техническая физика. — 2015, № 6. — С. 94-101.

19. Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Ауксетики среди материалов с кубической анизотропией // Известия РАН: Механика твердого тела. - 2020. - № 4. - С. 7-24.
20. Second and Higher Order Elastic Constants // In: Nelson, D.F. (ed.). V. 29a of Landolt-Bornstein—Group III Condensed Matter. Springer. 1992.
21. Branka A.C., Heyes D.M., Wojciechowski K.W. Auxeticity of cubic materials // Phys. Status Solidi B. – 2009. – V. 246. – P. 2063–2071.
22. Беломестных В.Н., Соболева Э.Г. Нетрадиционный подход к определению анизотропных коэффициентов Пуассона кубических кристаллов. // Письма о материалах. — 2012. — Т.2, №1. — С.13-16.
23. Новацкий В. Теория упругости. — М.: Мир, 1975. — 872 с.
24. Pavlov I.S., Dmitriev S.V., Vasiliev A.A., Muravieva A.V. Models and Auxetic Characteristics of a Simple Cubic Lattice of Spherical Particles // Continuum Mechanics and Thermodynamics. —2022. —V. 34. — P. 1669–1685. https://doi.org/10.1007/s00161-022-01157-w
25. Ванин Г.А. Градиентная теория упругости // Известия РАН. Механика твердого тела. — 1999. — № 1. — С. 46—53.

Дата поступления: 29 ноября 2023 г.

DOI: 10.18411/vntr2023-171-2

УДК 548.4, 539.372

АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ДИФФУЗИОННОГО ЗАРОЖДЕНИЯ ПОР В ОКРЕСТНОСТИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ГРАНИЦЫ, ФОРМИРУЮЩЕЙСЯ В ПОЛЕ КЛИНОВОЙ ДИСКЛИНАЦИИ

© Юлия Вячеславовна Свирина, Александр Сергеевич Пупынин, Владимир Николаевич Перевезенцев

Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук» (ИПМ РАН), Нижний Новгород, Россия

j.svirina@mail.ru

Аннотация. *Исследованы условия зарождения пор вблизи оборванных дислокационных границ, формирующихся при пластической деформации в упругом поле стыковых дисклинаций. Показано, что в границах, сформированных в поле отрицательных дисклинаций переползание дислокаций под действием осмотических сил, обусловленных избытком деформационных вакансий, приводит к сжатию границы и росту локальных растягивающих напряжений в ее окрестности. Проанализировано влияние полей напряжений, возникающих вблизи оборванных дислокационных границ и степени пересыщения материала неравновесными вакансиями деформационного происхождения на частоту диффузионного зарождения пор. Показано, что наиболее выражен эффект зарождения пор в интервале температур 0.4-0.5 температуры плавления.*

Ключевые слова: *поры, оборванные дислокационные границы, стыковые дисклинации, неравновесные вакансии.*

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПФ РАН на выполнение фундаментальных научных исследований по теме № 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).

ANALYSIS OF THE POSSIBILITIES FOR DIFFUSION CAVITIES NUCLEATION IN THE VICINITY OF A DISLOCATION BOUNDARY FORMED IN THE FIELD OF A WEDGE DISCLINATION

© J.V. Svirina, A.S. Pupynin, V.N. Perevezentsev

Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Science – Branch of Federal Research Center « A.V. Gaponov-Grekhov Institute of Applied Physics of the Russian Academy of Sciences», Nizhny Novgorod, Russian Federation

j.svirina@mail.ru

Abstract. *The conditions for cavities nucleation near broken dislocation boundaries formed during plastic deformation in the elastic field of junction disclinations have been investigated. It is shown that in boundaries formed in the field of negative disclinations, the climb of dislocations under the influence of osmotic forces caused by an excess of deformation vacancies leads to contraction of the*

boundary and an increase in local tensile stresses in its vicinity. The influence of stress fields arising near broken dislocation boundaries and the degree of supersaturation of the material with nonequilibrium vacancies of deformation origin on the rate of cavities nucleation is analyzed. It has been shown that the effect of pore nucleation is most pronounced in the temperature range 0.4-0.5 melting point.

Keywords: *cavities, broken dislocation boundaries, junction disclinations, nonequilibrium vacancies.*

Acknowledgements. *The work was carried out within the state task for fundamental scientific research on the topic no. 0030-2021-0025 (FFUF-2021-0025).*

Вязкому разрушению материала предшествует процесс зарождения микротрещин и пор с последующим их ростом и слиянием в макротрещины. В последние годы появилось значительное число исследований, указывающих, что местами зарождения субмикронных пор могут служить оборванные дислокационные границы деформационного происхождения, формирующиеся на стадии фрагментации материала [1-7]. Такие границы образуются преимущественно вблизи стыков и изломов межзеренных границ, содержащих линейные мезодефекты ротационного типа - стыковые дисклинации, появление которых связано с неравномерным протеканием пластической деформации по ансамблю зерен поликристалла [8-11]. По мере увеличения деформации оборванные дислокационные границы распространяются в тело зерен, постепенно разбивая их на взаимно разориентированные области (фрагменты). Теоретические исследования механизмов и закономерностей формирования оборванных границ вблизи ротационных мезодефектов показали, что при достаточно низких температурах, когда неконсервативным движением (переползанием) краевых дислокаций в процессе формирования оборванных границ можно пренебречь, средняя разориентировка границы оказывается близка к половине мощности породившей её дисклинации [12,13]. Однако при повышенных температурах переползание дислокаций приводит к перераспределению плотности вектора Бюргерса дислокаций в оборванной границе, а, следовательно, и изменению упругого поля напряжений в ее окрестности. При определенных условиях этот процесс может приводить к увеличению полей растягивающих напряжений вблизи границы [14]. Это обстоятельство в совокупности с высокой концентрацией деформационных вакансий, характерной для материалов на стадии фрагментации, может создавать благоприятные условия для зарождения пор. В литературе имеется множество экспериментальных данных о том, что на поздних стадиях фрагментации материала субмикронные поры располагаются преимущественно вблизи места обрыва одной или нескольких дислокационных границ со средними углами разориентировки порядка трёх-пяти градусов [2,3,6]. В работе [2] сделано предположение о диффузионной природе образования этих пор в результате стока в них неравновесных деформационных вакансий [15], однако механизм их зарождения до конца не ясен. Целью настоящей работы является анализ условий зарождения пор вблизи оборванных границ деформационного происхождения путем объединения неравновесных деформационных вакансий.

Рассмотрим оборванную дислокационную границу, сформированную в упругом поле клиновой дисклинации мощности ω (рис. 1). Согласно результатам компьютерного моделирования [13] такую границу можно в первом приближении представить в виде стенки дислокаций, которая зависимости от знака стыковой дисклинации может состоять либо из положительных либо из отрицательных дислокаций. В общем случае распределение

дислокаций в таких границах неоднородно, а их линейная плотность уменьшается с расстоянием от дисклинации. Особый интерес представляет случай, когда граница сформирована в упругом поле отрицательной дисклинации и, следовательно, состоит из дислокаций с отрицательным вектором Бюргерса, так как при этом в ее окрестности возникают поля растягивающих напряжений, которые могут стимулировать зарождение трещин или пор. Рассмотрим этот случай подробно. Проанализируем распределение дислокаций в оборванной границе с учетом возможности их переползания при стоке на них неравновесных вакансий.

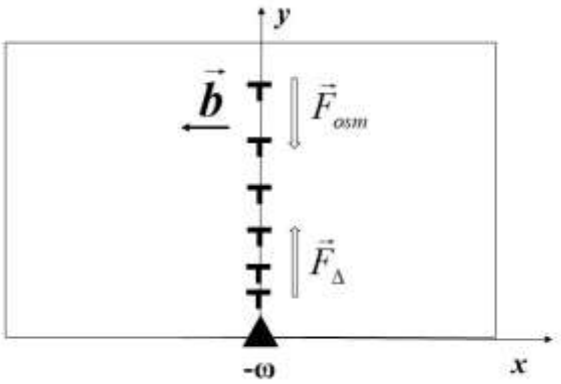


Рис.1. Схематическое изображение оборванной дислокационной границы, сформированной в упругом поле клиновой дисклинации.

Сила, приходящаяся на единицу длины iй дислокации, расположенной в окрестности дисклинации в точке с координатами $(0,y)$, способная вызвать ее переползание, в системе координат, показанной на Рис.1, имеет вид:

$$F_y = \sigma_{xx}^{\Sigma} b = \left(\sigma_{xx}^{\Delta} + \sigma_{xx}^{disl} + \sigma_{xx}^{osm} + \sigma_{xx}^{ext}\right) b\,, \tag{1}$$

где: σ_{xx}^{Δ} - напряжение от дисклинации, σ_{xx}^{disl} - суммарное напряжение, создаваемое остальными дислокациями границы, σ_{xx}^{osm} - осмотическая сила, σ_{xx}^{ext} - внешнее напряжение, b – величина проекции вектора Бюргерса дислокации на ось Ох. Величина σ_{xx}^{Δ} имеет вид [16]:

$$\sigma_{xx}^{\Delta} = D\omega\left(\ln\frac{y}{R} + 1\right), \tag{2}$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, R - радиус экранирования упругого поля дисклинации, $D = \dfrac{G}{2\pi(1-\nu)}$, G - модуль сдвига, ν - коэффициент Пуассона. Напряжение от системы дислокаций $\sigma_{xx}^{disl} = \sum_{j\neq i}\sigma_{xx}^{j}\left(0,y_j\right)$, где σ_{xx}^{j} - поле от дислокации с координатами $\left(0,y_j\right)$, создаваемое в точке с координатами (x,y) [17]. Величина σ_{xx}^{osm} имеет вид [17]:

$$\sigma_{xx}^{osm} = \frac{kT}{\Omega}\ln(1+S) \tag{3}$$

Здесь k - постоянная Больцмана, T - температура, Ω - атомный объем, $S = \frac{C_{vd}}{C_0}$ - пересыщение, C_0 - термодинамически равновесная концентрация вакансий, C_{vd} - концентрация деформационных вакансий. Со стороны дисклинации на каждую из дислокаций границы действуют силы отталкивания, в то время как осмотическая сила действует в противоположную сторону (Рис.1). При достаточно большой величине осмотической силы переползание дислокаций, будет приводить к сжатию оборванной границы и увеличению в ней плотности вектора Бюргерса и величины ее средней разориентировки. Величина осмотической силы является функцией температуры и пересыщения. В свою очередь величина пересыщения S зависит от температуры, скорости деформации и величины внешнего напряжения и, согласно моделям [18,19] имеет вид:

$$S = \chi\left(\frac{\dot{\varepsilon}b^2}{D_s}\right)\left(\frac{G}{\sigma^{ext}}\right), \tag{4}$$

где $\dot{\varepsilon}$ - скорость деформации, D_s - коэффициент объемной самодиффузии, χ - численный коэффициент. Из выражений (3) и (4) следует, что с понижением температуры концентрация деформационных вакансий растёт, а вместе с ней увеличивается и осмотическая сила. Однако при температурах, меньших $0.4T_m$ (T_m - температура плавления), влияние осмотической силы несущественно из-за низкой подвижности вакансий, вследствие чего переползанием дислокаций можно пренебречь. С другой стороны, повышение температуры приводит к уменьшению концентрации неравновесных вакансий и уменьшению осмотической силы. При $T > 0.5T_m$ ею можно пренебречь по сравнению с остальными слагаемыми в формуле (1). Таким образом, сжатие границы под действием осмотической силы проявляется лишь в узком интервале температур $T \approx (0.4 \div 0.5)T_m$. Для нахождения равновесной конфигурации оборванной дислокационной границы применялся метод динамики дискретных дислокаций [20,14]. Для рассматриваемого случая уравнение движения дислокаций имеет вид

$$V_c = M_c F_y, \tag{5}$$

где V_c - скорость переползания, M_c - подвижность дислокаций. Исходная конфигурация границы задавалась в виде равномерного распределения краевых дислокаций с плотностью вектора Бюргерса $\rho_0(y) = \omega/2$. Равновесная конфигурации оборванной границы определялась в соответствии со следующей итерационной процедурой. На каждой итерации выполнялись: расчет сил, действующих на каждую дислокацию границы; определение скорости дислокаций; перемещение дислокаций, для которых путь, пройденный дислокацией за итерацию больше или равен межплоскостному расстоянию a, на новые позиции. Дислокации, не отвечающие этому условию, считались неподвижными. Равновесие достигалось, когда все дислокации становились неподвижными. Для рассчитанной таким образом равновесной конфигурации границы определялись поля упругих напряжений. Далее рассчитывались суммарные поля напряжений и области отрицательных давлений P, создаваемые границей и дисклинацией. Для оценки возможности зарождения пор в зонах

максимальных растягивающих напряжений проводился анализ изменения энергии системы при объединении n неравновесных вакансий в кластер.

Энергия образования кластера из n вакансий с радиусом $r_c = \left(3n\Omega/4\pi\right)^{1/3}$, нормированная на величину энергии тепловых колебаний при температуре плавления kT_m при заданном пересыщении материала деформационными вакансиями S имеет вид:

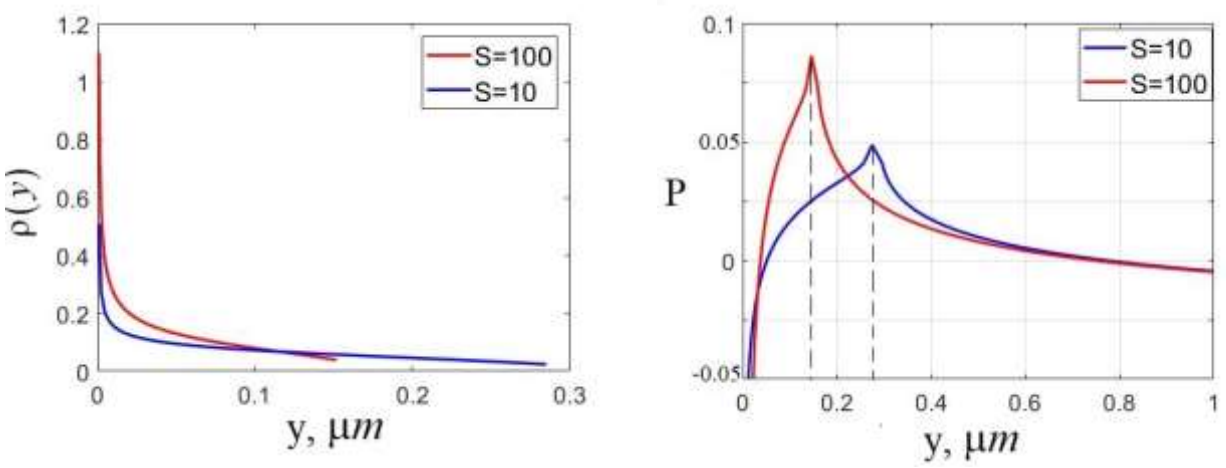
$$\Delta\tilde{F} = -n\tilde{\mu}_v + 4\pi\alpha_S\left(\frac{3n}{4\pi}\right)^{\frac{2}{3}}\xi\left(n\right) \tag{6}$$

Здесь $\tilde{\mu}_v = \frac{T}{T_m}ln\left(S+1\right)+\alpha_G P$ – химический потенциал вакансии, нормированный на kT_m, $\alpha_G = G\Omega/kT_m$, P – приведённая величина давления в единицах модуля сдвига G, $\alpha_S = \gamma_{S0}b^2/kT_m = \alpha_G/16$, $\gamma_{S0} \approx Gb/16$ – удельная энергия плоской свободной поверхности, $\xi\left(n\right) = 1-0.8/\left(n+2\right)$ – функция, учитывающая зависимость удельной поверхностной энергии кластера от числа содержащихся в нем вакансий. Число вакансий n_c в зародыше критического размера определялось из условия $\left.\frac{d\Delta\tilde{F}}{dn}\right|_{n=n_c} = 0$:

$$4\pi\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3}\alpha_s\left[0.8\left(\frac{n_c^{1/3}}{n_c+2}\right)^2+\frac{2}{3}\frac{\xi\left(n_c\right)}{n_c^{1/3}}\right] = \tilde{\mu}_v. \tag{7}$$

Численные расчеты проводились при следующих значениях параметров: размер расчетной области $1\mu m \times 1\mu m$, длина исходной дислокационной границы $0.5\mu m$, $\omega = 0.04$, $T = 0.4T_m$, $\sigma^{ext} = 10^{-3}G$, $b = 2.5\cdot10^{-8}\ cm$, $M_c = 10^{-6}Pa^{-1}s^{-1}$ при двух значениях скоростей пластической деформации: $\dot{\varepsilon} = 2\cdot10^{-2}s^{-1}$ и $\dot{\varepsilon} = 2\cdot10^{-3}s^{-1}$. Величины пересыщений $S=100$ и $S=10$, соответствующие приведенным выше скоростям деформации, рассчитывались из соотношения (4) при $D_s = D_0e^{-\frac{Q}{kT}}$, где $Q = 18kT_m$, $D_0 = 10^{-2}\ cm^2s^{-1}$, $\chi = 10^{-4}$. Распределение плотности вектора Бюргерса дислокационной границы $\rho\left(y\right)$ определялось с использованием выражения $\rho\left(y\right) = \frac{b}{y_{i+1}-y_i}$, где $y = \frac{y_{i+1}-y_i}{2}$, y_i и y_{i+1} - координаты соседних дислокаций. На Рис. 2. представлены интерполяционные кривые распределений плотности вектора Бюргерса, полученные для пересыщений $S=100$ и $S=10$. Как видно из Рис.2а, осмотическая сила вызывает перераспределение дислокаций и уменьшение длины границы с исходного значения $0.5\mu m$ до значений $0.15\mu m$ при $S=100$ и $\approx 0.28\mu m$ при $S=10$. Это приводит к существенному росту средних значений плотности вектора Бюргерса и разориентировки границы.

На Рис.2б приведены распределения суммарного поля отрицательного давления, создаваемого отрицательной дисклинацией и дислокациями оборванной границы в плоскости залегания оборванной границы. Максимальные отрицательные давления возникают на конце оборванной дислокационной границы (Рис. 2б).



а) б)

Рис. 2. Распределение плотности вектора Бюргерса вдоль оборванной границы (а) и суммарного поля гидростатического давления, создаваемого дисклинацией и дислокациями оборванной границы (б).

Оценим величину энергии образования зародыша поры $\Delta\tilde{F}_c$ в окрестности вершины оборванной границы. Проведем данную оценку при следующих характерных значениях параметров, входящих в выражения (6) и (7): $\alpha_G \approx 50$, $\gamma_{s0} \approx Gb/16$, $T_1 = 0.4T_m$, $T_2 = 0.5T_m$, $S_1 = 10$, $S_2 = 10^2$, $P = 8 \cdot 10^{-2}$. На Рис. 3 представлены зависимости энергии образования вакансионного кластера $\Delta\tilde{F}$ от числа вакансий n при различных значениях величин T и S. Нетрудно видеть, что величины энергии образования зародышевых пор критического размера, и число содержащихся в них вакансий n_c, соответствующие максимумам на кривых $\Delta\tilde{F}(n)$, при выбранных значениях параметров лежат в диапазонах $10 \div 15kT_m$, и $5 \div 10$ вакансий, соответственно.Скорость образования зародышей пор J_n с учетом исчерпания количества центров зарождения, согласно [21], имеет вид:

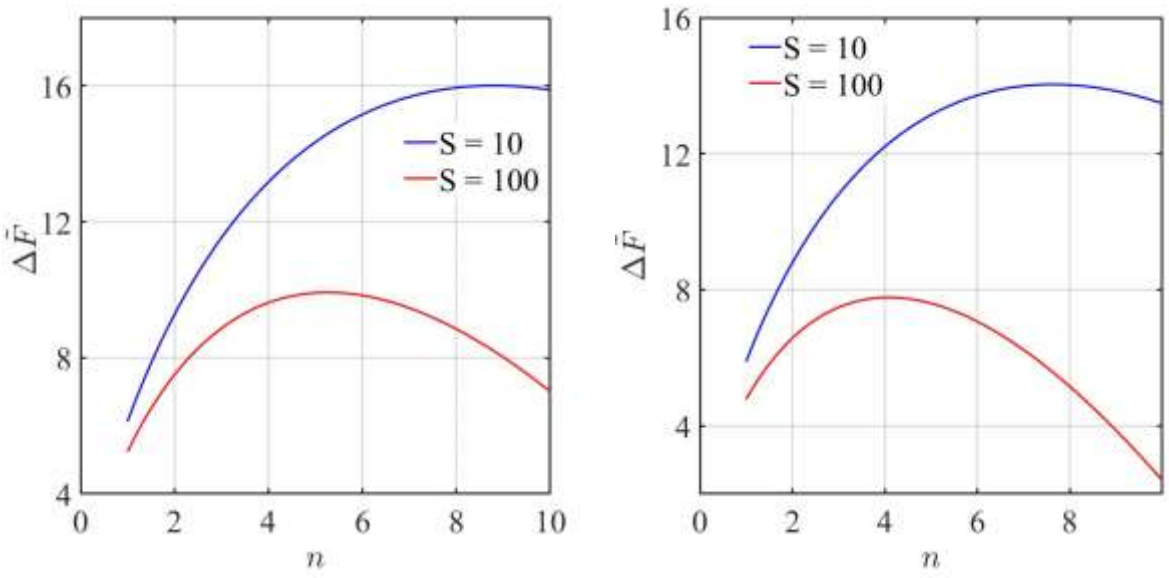
$$J_n = Z(N_c - N)\exp\left(-\frac{\Delta\tilde{F}(n_c)}{kT}\right), \quad (9)$$

где $Z = \sqrt{-\frac{1}{2\pi kT}\frac{\partial^2\Delta\tilde{F}}{\partial n^2}\Big|_{n=n_c}}$ – множитель Зельдовича [22], N_c – концентрация центров зарождения, N – текущее значение концентрации пор. Величину N_c можно оценить, исходя из известной из эксперимента величины доли малоугловых границ зерен f_l в поликристалле с размером зерна d [23,24]:

$$N_c = \frac{9}{8}\frac{f_l}{1-f_l}\frac{1}{r_c d^2}. \quad (10)$$

Зависимость $J_0 = J_n(N = 0, S)$ при различных значениях температуры представлен на рис. 4 (кривая 1 - $T = T_1$, кривая 2 - $T = T_2$). Число пор N, возникающих в объеме фрагмента $0.3\mu m \times 0.3\mu m \times 0.3\mu m$ при деформации ε, можно оценить как произведение скорости

зарождения J_0 на время $\Delta t = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\dot{\varepsilon}}$, где $\varepsilon_0 \sim 0.2$ – характерная величина деформации при которой начинается образование оборванных границ и фрагментация материала [8]. Оценка N при $\varepsilon \sim 1 \div 1.5$, $T = 0.5T_m$, $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}\ s^{-1}$ дает величину порядка 10 пор.



а) б)

Рис. 3. Зависимость энергии образования вакансионного кластера $\Delta\tilde{F}$ от n при различных значениях температуры и степени пересыщения вакансиями деформационного происхождения: а) $T_1 = 0.4T_m$, б) $T_2 = 0.5T_m$.

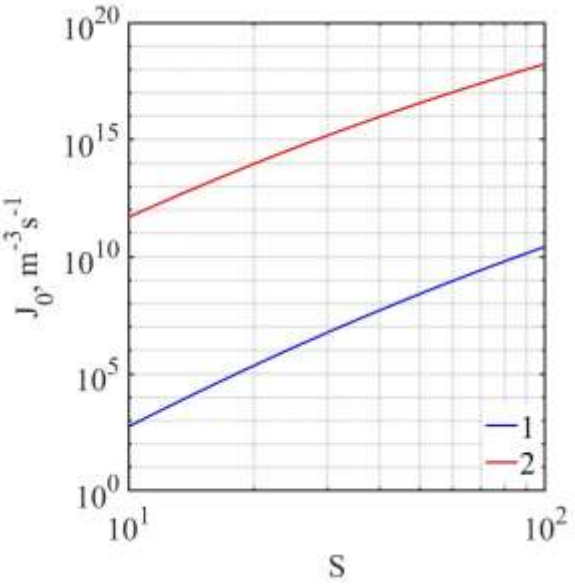


Рис. 4. Зависимость скорости зарождения в начальный момент времени $J_0 = J_n(N = 0, S)$ от степени пересыщения вакансиями деформационного происхождения при различных температурах: кривая 1 - $T = 0.4T_m$, кривая 2 - $T = 0.5T_m$.

Полученные результаты показывают, что неравновесные деформационные вакансии могут существенно влиять на характеристики оборванных дислокационных границ, формирующихся при пластической деформации вблизи отрицательных стыковых дисклинаций. Сток неравновесных вакансий на дислокации приводит к сжатию таких границ и, как следствие, к росту растягивающих напряжений в объеме зерна. Этот эффект наиболее ярко выражен в интервале температур $0.4-0.5T_m$. Рост отрицательных давлений в месте обрыва границы создает благоприятные условия для диффузионного зарождения нанопор.

Список литературы

26. Noell, P.J., Sills, R.B., Benzerga, A.A., Boyce, B.L., Void Nucleation During Ductile Rupture of Metals: A Review, Progress in Materials Science (2023), 101085
27. Philip J. Noell, Julian E.C. Sabisch, Douglas L. Medlin, Brad L. Boyce, Nanoscale conditions for ductile void nucleation in copper: Vacancy condensation and the growth-limited microstructural state, Acta Materialia, Volume 184, 2020, P. 211-224
28. Philip Noell, Jay Carroll, Khalid Hattar, Blythe Clark, Brad Boyce, Do voids nucleate at grain boundaries during ductile rupture?, Acta Materialia, Volume 137 (2017), P. 103-114
29. Marc A Meyers, Sirirat Traiviratana, VA Lubarda, David J Benson, and Eduardo M Bringa. The role of dislocations in the growth of nanosized voids in ductile failure of metals. Jom, 61(2), 2009. 35-41
30. Hojun Lim, Philip J. Noell, Jay D. Carroll, Crystallographic orientation dependent fracture behavior in tantalum single crystals, Scripta Materialia, Volume 191, 2021, P. 76-80
31. Philip J Noell, Ryan B Sills, and Brad L. Boyce. Suppression of ductile rupture in aluminum via dynamic recrystallization. Metallurgical and Materials Transactions A, 2019.
32. Osamu Furukimi, Chatcharit Kiattisaksri, Yuji Takeda, Masatoshi Aramaki, Satoshi Oue, Shinji Munetoh, Masaki Tanaka, Void nucleation behavior of single-crystal high-purity iron specimens subjected to tensile deformation, Materials Science and Engineering: A, Volume 701, 2017, P. 221-225.
33. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. - М.: Металлургия, 1986. - 224с.
34. Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotorevsky N.Yu.. Junction disclinations in plastically deformed crystals. Acta Met.Mater.. 41 (7), 2211 (1993)
35. Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Application of disclination concept to solid structures. Progress in Materials Science. 2009. Vol. 54. P. 740−769.
36. Rybin V.V. Regularities of mesostructures development in metals in the course of plastic deformation, Problems of material science. 2003. V. 33. N 1. P. 9-28.
37. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F. The screening of mesodefects stress fields by dislocation ensemble and misorientation structure formation during plastic deformation // Rev. Adv. Mater. Sci. 2012. V. 30. P. 14-34.
38. Perevezentsev V.N., Sarafanov G.F., Svirina J.V. Computer simulation of the dislocation ensemble kinetics in the elastic fields of mesodefects and fragmentation processes during plastic deformation. Mater.Phys. and Mech. 2014. V. 21. P. 78-98.
39. Свирина Ю.В. Перевезенцев В.Н. Анализ влияния переползания дислокаций на формирование оборванной субграницы в упругом поле клиновой дисклинации// Деформация и разрушение материалов. –2015. – № 10. – С. 10-13.

40. Schafler E., Steiner G., Korznikova E., Kerber M., Zehetbauer M.J. Mater. Sci. Eng. A. 2005. V. 410-411. P. 169–173.
41. Romanov A.E. and Vladimirov V.I., Disclinations in crystalline solids, in F.R.N. Nabarro ed. "Dislocations in solids", North-Holland, Amsterdam, (1992), vol. 9, pp. 191-402.
42. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. - М.: Атомиздат, 1972. – 599 с.
43. K. Detemple, O. Kanert, J. Th. M. De Hosson, and K. L. Murty, In situ nuclear magnetic resonance investigation of deformation-generated vacancies in aluminum, Phys. Rev. B 52, 125 (1995)
44. H. Mecking and Y.Estrin, The effect of vacancy generation on plastic deformation, Scr. Metall. Vol. 14, pp. 815-819, 1980
45. Van der Giessen E and Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model Modelling Simul.Mater. Sci. Eng. 3 (1995) 689–735
46. Raj R., Ashby M.F. Intergranular fracture at elevated temperature. Acta Metall. 1975. Vol. 23. Iss. 6. P. 653–666.
47. Slezov V. V. Kinetics of first order phase transitions. – John Wiley & Sons, 2009. – 415 pp.
48. Kaiser H. F. Estimation of inter-granular surfaces and volumes in metals. Metals and Alloys. – 1938. – Т. 9. – С. 23-26.
49. Классен-Неклюдова М. В., Конторова Т. А. Природа межкристаллических прослоек// УФН. – 1939. - Т. 22, № 4. - С. 395–426.

Дата поступления: 29 ноября 2023 г.