Лаборатория «Физика прочности и интеллектуальные диагностические системы», 1 декабря 2011 года

Некоторые вопросы деформации твёрдого тела с точки зрения неравновесной термодинамики

докладчик: И.С.Ясников

Классификация термодинамических систем

Термодинамические системы

- **Изолированные системы**
  - **Равновесное состояние**
    - **Минимум термодинамических потенциалов, энтропия стремится к максимуму**
- **Открытые системы**
  - **Стационарные состояния (постоянные или слабопеременные воздействия на систему)**
    - **Производство энтропии стремится к минимуму**
  - **Нестационарные состояния (интенсивные внешние воздействия на систему)**
    - **Производство энтропии не стремится к минимуму, возникновение неустойчивостей**

Типы неустойчивостей

1.Возможность самоорганизации (появление дальнего порядка, возникновение диссипативных структур)
фрагментированная структура металлов на стадии больших деформаций

2.Бифуркации на фазовых траекториях системы (рост обычных флуктуаций до аномально больших размеров, переходы между фазовыми траекториями системы)
отклонения от однородного ламинарного скольжения дислокаций (образование полос скольжения, полос сброса)

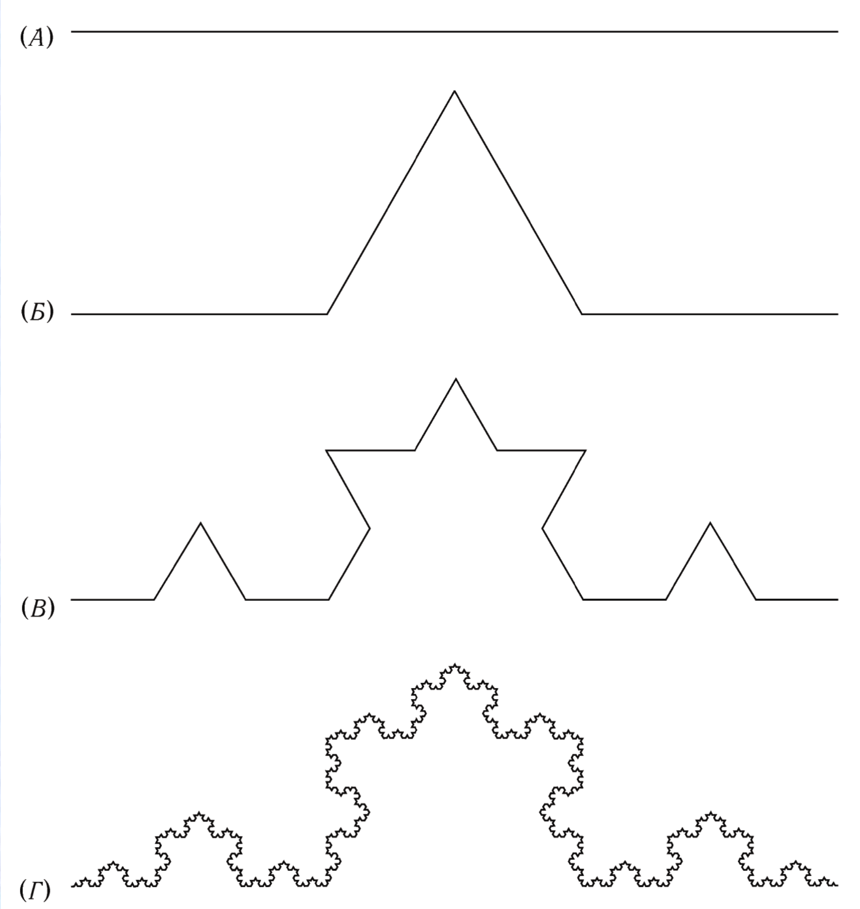
3.Фрактальные структуры (сохранение основных характеристик системы на всех уровнях)
фрактальная организация тонкой дислокационной структуры полос скольжения

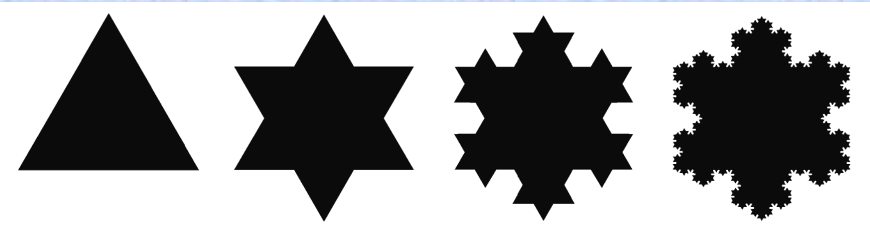
4.Ротации (переход от хаотического поведения к диссипативным структурам)
формирование ячеек, блоков, фрагментов, двойников, полос переориентации

5.Неравновесный турбулентный хаос
экстремальные условия деформирования (взрывная обработка)

6.Колебательные режимы (взаимодействие фазовых траекторий и странного аттрактора)
колебания на диаграмме нагружения на макроуровне

Понятие фрактальной размерности (по Хаусдорфу)





Длина кривой из N отрезков длиной r каждый $L(r) = N \cdot r$

Обычная кривая $r \to 0 \quad L(r) = N \cdot r \to L$

Фрактал $r \to 0 \quad L(r) = N \cdot r \to \infty$

Фрактальная размерность D $r \to 0 \quad L(r) = N \cdot r^{\alpha}$

Предельные случаи

$\alpha < D \quad L(r) = N \cdot r^{\alpha} \to \infty$

$\alpha > D \quad L(r) = N \cdot r^{\alpha} \to 0$

$\alpha = D \quad L(r) = N \cdot r^{\alpha} \to const$

Фрактальная размерность

$$D = \lim_{r \to 0} \frac{\ln N}{\ln\left(\frac{1}{r}\right)}$$

Снежинка Коха

$$r \sim \frac{1}{3^n} \quad N \sim 4^n$$

$$D = \frac{\ln 4}{\ln 3} \approx 1{,}26$$

Фрактальность ячеистой структуры

ELSEVIER

Materials Science and Engineering A272 (1999) 443–454

MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING A

www.elsevier.com/locate/msea

Dislocation dynamics and work hardening of fractal dislocation cell structures

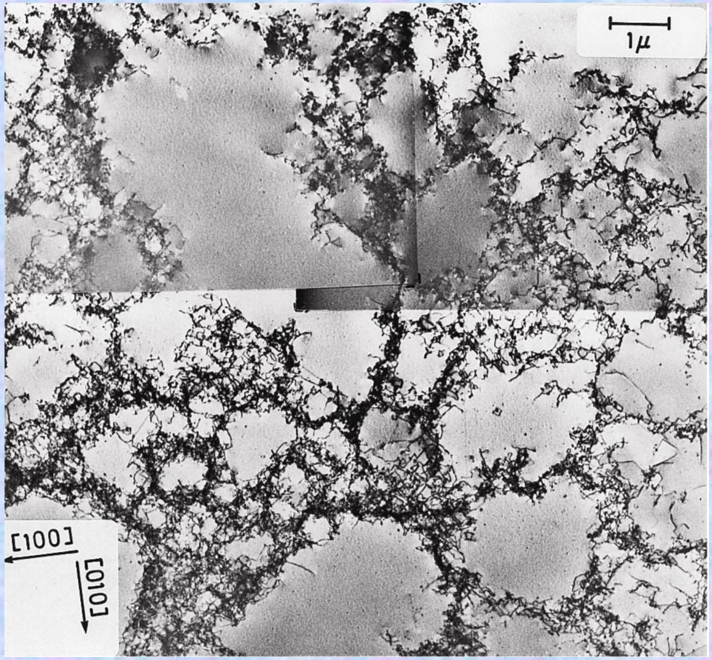
Peter Hähner [a,*], Michael Zaiser [b]

[a] TU Braunschweig, Institut für Metallphysik und Nukleare Festkörperphysik, Mendelssohnstr. 3, D-39106 Braunschweig, Germany
[b] Max-Planck-Institut für Metallforschung, Heisenbergstr. 1, D-70569 Stuttgart, Germany

Received 24 February 1999; received in revised form 21 July 1999

Распределение ячеек по размерам

$$N(\lambda > \Lambda) \sim \Lambda^{-D}$$



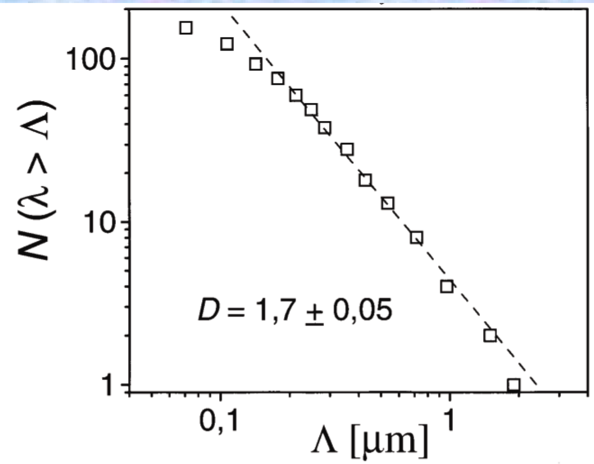


Fig. 1. (a) Transmission electron micrograph of the self-similar dislocation cell structure of a [100]-orientated Cu single crystal deformed at room temperature to a resolved shear stress of 37.3 MPa, by courtesy of U. Essmann [11]; (b) the corresponding cell size distribution reveals the fractal dimension $D = 1.7$ (gap dimension).

Фрактальность ячеистой структуры

VOLUME 81, NUMBER 12 PHYSICAL REVIEW LETTERS 21 SEPTEMBER 1998

Fractal Dislocation Patterning During Plastic Deformation

Peter Hähner,[1] Karlheinz Bay,[2] and Michael Zaiser[2]
[1]*European Commission, Joint Research Centre, I-21020 Ispra (Va), Italy*
[2]*Max-Planck-Institut für Metallforschung, Heisenbergstrasse 1, D-70569 Stuttgart, Germany*
(Received 13 May 1998)

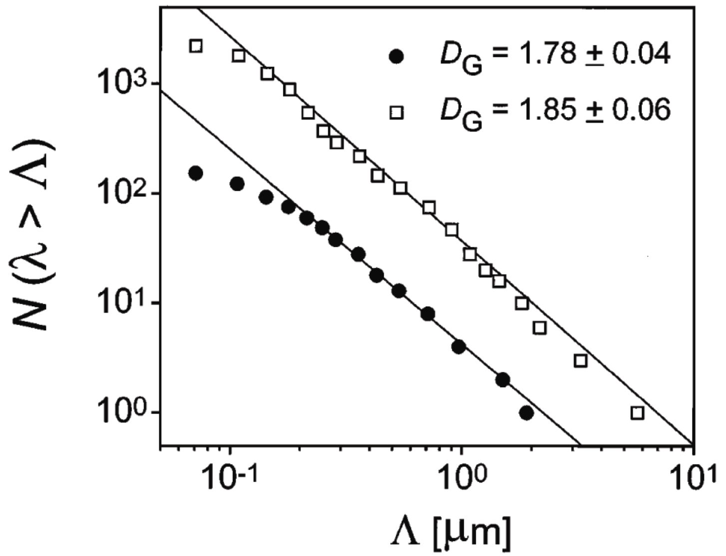


FIG. 3. Cell size distributions in Cu single crystals deformed to stresses of 68.2 MPa (□) and 75.6 MPa (●) and determination of the respective gap dimensions D_G.

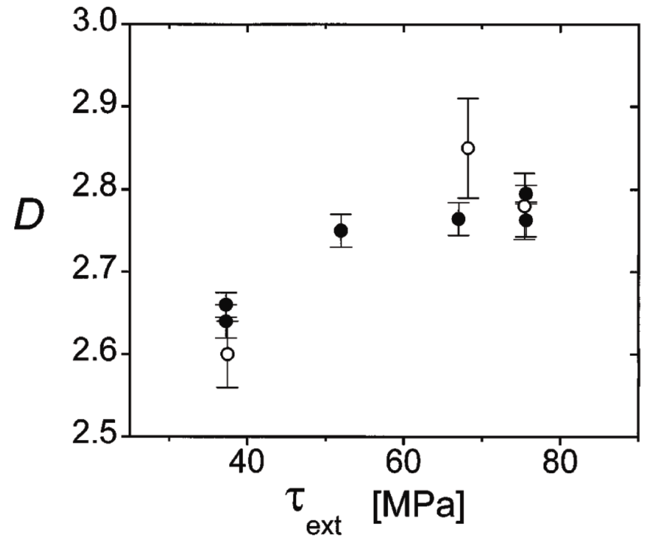


FIG. 4. Fractal dimensions D of dislocation cell structures of [100]-orientated Cu single crystals as a function of stress; filled symbols: $D = D_B + 1$ from box counting; open symbols: $D = D_G + 1$ from gap method.

Appl. Phys. A 66, S1113–S1116 (1998)

Formation of mesostructures at the surface of ferritic steel and a nickel monocrystal under increasing load – an in situ AFM experiment

O. Meißner[1], J. Schreiber[1], A. Schwab[2]

Сталь ферритного класса

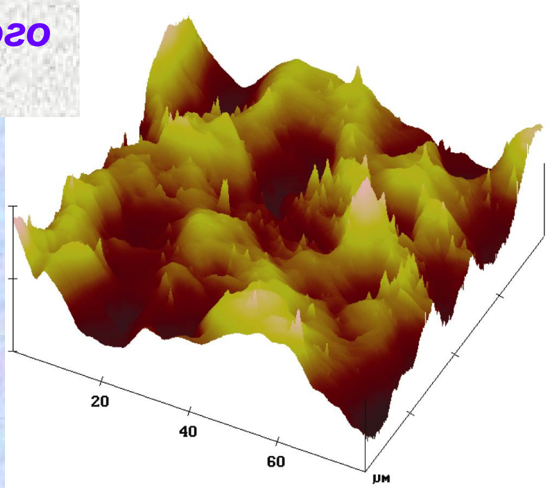
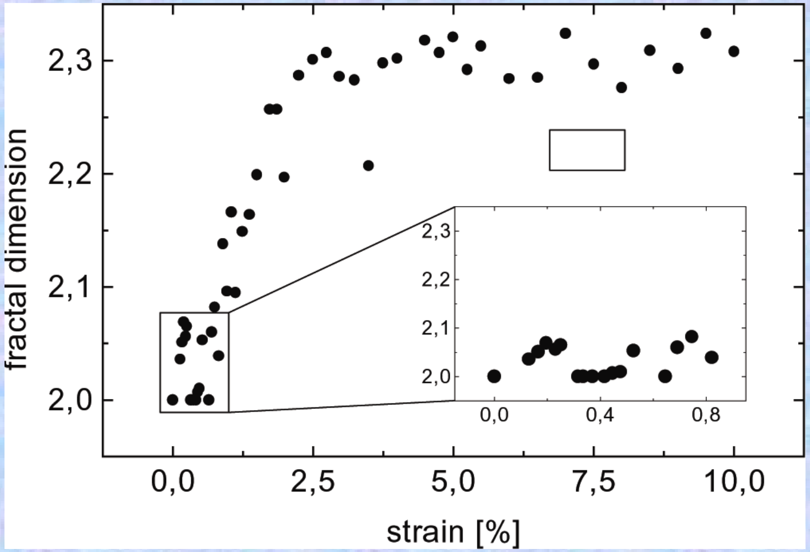


Fig. 3. AFM image of plastic deformed ferritic steel; strain about 5.5%, structures with a size of about 25 μm can be seen



Монокристалл никеля

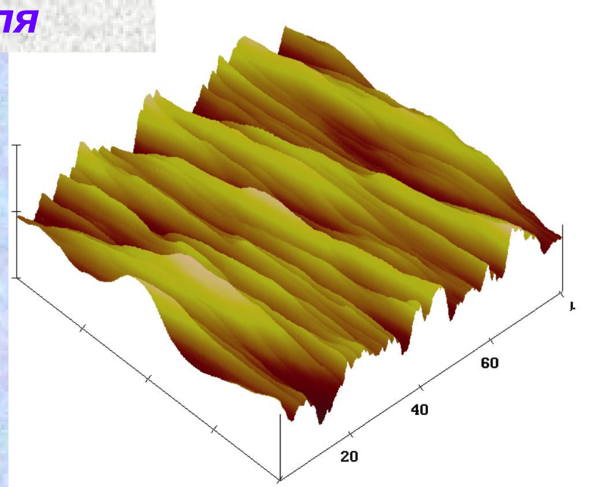
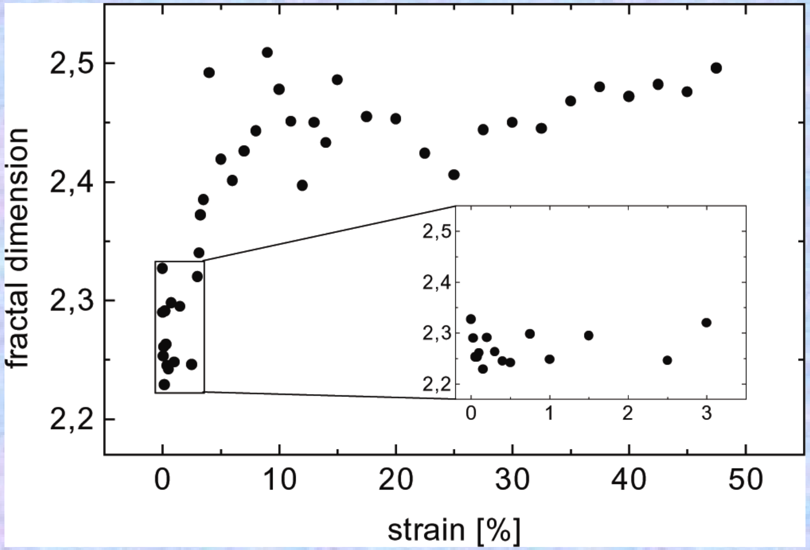
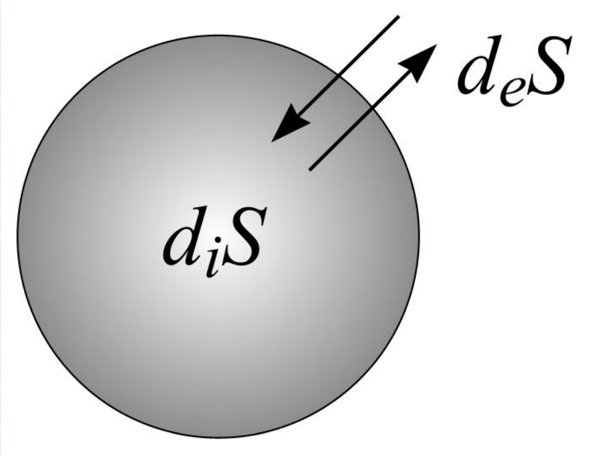


Fig. 5. AFM image of a plastically deformed nickel monocrystal; strain about 45%, slip bands superimposed on mesostructures can be seen



Деформируемый образец
как открытая термодинамическая система



Общее изменение энтропии для открытых систем

$$dS = d_i S + d_e S$$

$d_i S$ - приращение энтропии, обусловленное изменениями внутри образца, всегда положительная величина

$d_e S$ - приращение энтропии, обусловленное взаимодействием системы с окружающей средой.

Открытые системы → ***Самоорганизация*** → ***Возникновение сложных самоподобных структур (фракталов)***

Приращение энтропии, обусловленное изменениями внутри образца

Приращение энтропии, обусловленное изменениями внутри образца

$$d_i S = \frac{1}{T}\left(dW_{gen} + dW_{gl} + dW_{an}\right)$$

Полная плотность дислокаций

$$\rho = \rho^{+} - \rho^{-} \qquad d\rho = d\rho^{+} - d\rho^{-}$$

Рождение дислокаций

$$dW_{gen} = E d\rho^{+} = \frac{1}{2} G b^{2} d\rho^{+}$$

Скольжение

$$dW_{gl} = \tau b l d\rho^{+} \qquad dW_{gl} = \alpha G b \sqrt{\rho}\, \frac{b}{\sqrt{\rho}} d\rho^{+} = \alpha G b^{2} d\rho^{+}$$

Аннигиляция дислокаций

$$dW_{an} = E d\rho^{-} = \frac{1}{2} G b^{2} d\rho^{-}$$

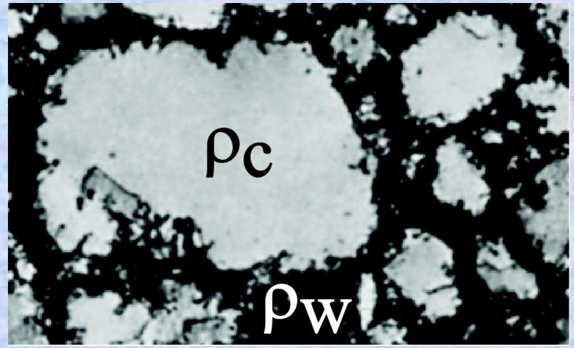
$$d_i S = \frac{(1+2\alpha) G b^{2}}{2T} d\rho^{+} + \frac{G b^{2}}{2T} d\rho^{-} \qquad d_i S = \frac{(1+2\alpha) G b^{2}}{2T} d\rho + \frac{(2+2\alpha) G b^{2}}{2T} d\rho^{-}$$

M. Huang, P. E. J. Rivera-Diaz-del-Castillo, O. Bouaziz and S. van der Zwaag *Irreversible thermodynamics modeling of plastic deformation of metals* // Materials Science and Technology. - 2008. - Vol. 24, No 4. – P. 495-500

Приращение энтропии, обусловленное взаимодействием с окружающей средой

Приращение энтропии, обусловленное взаимодействием с окружающей средой

$$d_e S = -\frac{\tau d\gamma}{T}$$



Формула Тейлора и её преобразование

$$\tau = \tau_0 + \alpha G b \sqrt{\rho}$$

$$\tau = \alpha G b \sqrt{\rho} = f_w \tau_w + f_c \tau_c = f_w \alpha G b \sqrt{\rho_w} + f_c \alpha G b \sqrt{\rho_c}$$

Условия: $f_w + f_c = 1 \quad \rho_w >> \rho_c \quad \rho_w \sim \rho \quad \langle \lambda \rangle \sim 1 / \sqrt{\rho_c}$

$$\tau = \alpha G b \left(f_w \sqrt{\rho} + \frac{f_c}{\langle \lambda \rangle} \right)$$

$$d_e S = -\left(f_w \sqrt{\rho} + \frac{f_c}{\langle \lambda \rangle} \right) \frac{\alpha G b d\gamma}{T}$$

Общее приращение энтропии

$$dS = \frac{(1+2\alpha)Gb^2}{2T}d\rho + \frac{(2+2\alpha)Gb^2}{2T}d\rho^- - \left(f_w\sqrt{\rho} + \frac{f_c}{\langle\lambda\rangle}\right)\frac{\alpha Gbd\gamma}{T}$$

$$\frac{dS}{d\gamma} = \frac{(1+2\alpha)Gb^2}{2T}\frac{d\rho}{d\gamma} + \frac{(2+2\alpha)Gb^2}{2T}\frac{d\rho^-}{d\gamma} - \left(f_w\sqrt{\rho} + \frac{f_c}{\langle\lambda\rangle}\right)\frac{\alpha Gb}{T}$$

Аннигиляция дислокаций как процесс второго порядка

$$\frac{d\rho^-}{dt} = \rho^2 b^2 \nu_0 e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}} \qquad \frac{d\rho^-}{d\gamma} = \frac{1}{\dot{\gamma}}\frac{d\rho^-}{dt} = \frac{\rho^2 b^2 \nu_0}{\dot{\gamma}} e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}}$$

$$\dot{\gamma} = \rho b\langle V\rangle \qquad \frac{d\rho^-}{d\gamma} = \frac{\rho^2 b^2 \nu_0}{\rho b\langle V\rangle} e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}} = \frac{\rho b \nu_0}{\langle V\rangle} e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}}$$

$$\frac{dS}{d\gamma} = \frac{(1+2\alpha)Gb^2}{2T}\frac{d\rho}{d\gamma} + \frac{(2+2\alpha)Gb^2}{2T}\frac{\rho b \nu_0}{\langle V\rangle} e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}} - \left(f_w\sqrt{\rho} + \frac{f_c}{\langle\lambda\rangle}\right)\frac{\alpha Gb}{T}$$

Общее приращение энтропии

Феноменологическая теория Hart (E. W. Hart: Acta Metall., 1970, 18, 599–610)
Гипотеза Nabarro (F. R. N. Nabarro: Acta Metall., 1989, 37, 1521–1546)

Параметр упрочнения и энтропия могут одновременно характеризовать степень упорядоченности деформируемого образца

$$\frac{dS}{d\gamma} = \frac{C}{T}\frac{b}{l}\frac{d\tau}{d\gamma} \qquad \frac{dS}{d\gamma} = \frac{C\alpha G b^2}{2T}\frac{d\rho}{d\gamma}$$

$$\frac{C\alpha G b^2}{2T}\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{(1+2\alpha)Gb^2}{2T}\frac{d\rho}{d\gamma} + \frac{(2+2\alpha)Gb^2}{2T}\frac{\rho b \nu_0}{\langle V\rangle} e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}} - \left(f_w\sqrt{\rho} + \frac{f_c}{\langle\lambda\rangle}\right)\frac{\alpha G b}{T}$$

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{2\alpha f_c}{1+2\alpha-C\alpha}\cdot\frac{1}{b\langle\lambda\rangle} + \frac{2\alpha f_w}{1+2\alpha-C\alpha}\cdot\frac{\sqrt{\rho}}{b} - \frac{2+2\alpha}{1+2\alpha-C\alpha}\cdot\frac{b\nu_0}{\langle V\rangle} e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}}\rho$$

Кинетическое уравнение для средней плотности дислокаций

Кинетические коэффициенты

$$k_0 = \frac{2\alpha f_c}{1+2\alpha - C\alpha} \qquad k_1 = \frac{2\alpha f_w}{1+2\alpha - C\alpha}$$

$$k_2 = \frac{2+2\alpha}{1+2\alpha - C\alpha} \cdot \frac{b\nu_0}{\langle V \rangle} e^{-\frac{\Delta G}{k_b T}}$$

Кинетическое уравнение

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{k_0}{b\langle\lambda\rangle} + \frac{k_1\sqrt{\rho}}{b} - k_2\rho$$

ρ - средняя плотность дислокаций;
γ - истинная сдвиговая деформация;
b - вектор Бюргерса;
λ - средний размер ячейки,
k_0, k_1 и k_2 – кинетические коэффициенты

Первое слагаемое в представленном уравнение отвечает за накопление дислокаций в образце вследствие наличия границ ячеистой структуры, второе – за размножение дислокаций на дислокациях леса, третье – за гибель дислокаций.

Эволюция фрактальной размерности как функция параметров деформации образца

M. Zaiser, K. Bay, P. Hähner *Fractal analysis of deformation-induced dislocation pattern* //
Acta mater. – 1999. – Vol. 47, No. 8. - P.2463 – 2476

Распределение ячеек по размерам

$$N(\lambda > \Lambda) \propto \Lambda^{-D}$$

Распределение вероятности встретить ячейку попадающую в интервал от λ до λ+dλ

$$p(\lambda) = D\lambda_{min}^{D}\,\lambda^{-D-1}$$

Средний размер ячейки

$$\langle\lambda\rangle = \int_{\lambda_{min}}^{\infty} \lambda p(\lambda)\, d\lambda = \frac{D}{D-1}\lambda_{min}$$

Минимальный размер ячейки

$$\lambda_{min} = \frac{Gb}{\tau - \tau_0} = \frac{1}{\alpha\sqrt{\rho}}$$

$$\langle\lambda\rangle = \lambda_{min}\frac{D}{D-1} = \frac{1}{\alpha\sqrt{\rho}} \cdot \frac{D}{D-1}$$

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \left(\alpha k_0 \frac{D-1}{D} + k_1\right)\frac{\sqrt{\rho}}{b} - k_2\rho$$

Эволюция фрактальной размерности как функция параметров деформации образца

Уравнение эволюции в различных переменных

$$\frac{d\rho}{d\gamma}=\left(\alpha k_0\frac{D-1}{D}+k_1\right)\frac{\sqrt{\rho}}{b}-k_2\rho$$

$$2\frac{d\tau}{d\gamma}=\alpha G\left(\alpha k_0\frac{D-1}{D}+k_1\right)-k_2\tau$$

$$\gamma=\varepsilon\cdot M \qquad \tau=\sigma/M$$

$$\frac{2}{M^2}\frac{d\sigma}{d\varepsilon}+\frac{k_2}{M}\sigma=\alpha G\left(\alpha k_0\frac{D-1}{D}+k_1\right)$$

$$\frac{2}{M^2}\frac{d\sigma}{d\varepsilon}+\frac{k_2}{M}\sigma=F(\varepsilon)$$

$$F(\varepsilon)=\alpha G\left(\alpha k_0+k_1-\frac{\alpha k_0}{D(\varepsilon)}\right)$$

Решение дифференциального уравнения методом вариации постоянных

$$\sigma(\varepsilon)=e^{-\frac{k_2M\varepsilon}{2}}\left(\int_{\varepsilon}\left(\frac{1}{2}\alpha GM^2\left(\alpha k_0+k_1-\frac{\alpha k_0}{D(\varepsilon)}\right)e^{\frac{k_2M\varepsilon}{2}}\right)d\varepsilon+C\right)$$

Эволюция фрактальной размерности как функция параметров деформации образца

$$\frac{2}{M^2}\frac{d\sigma}{d\varepsilon}+\frac{k_2}{M}\sigma=\alpha G\left(\alpha k_0\frac{D-1}{D}+k_1\right) \longrightarrow D=\frac{\alpha k_0}{\alpha k_0+k_1-\frac{1}{\alpha MG}\left(\frac{2}{M}\frac{d\sigma}{d\varepsilon}+k_2\sigma\right)}$$

Если каждой точке кривой нагружения сопоставить её производную, то можно определить фрактальную размерность

$$\sigma(\varepsilon) \longrightarrow \frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} \longrightarrow D\left(\varepsilon,\sigma(\varepsilon),\frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right)$$

Оценка значений кинетических коэффициентов

Исходное уравнение

$$\frac{2}{M^2}\frac{d\sigma}{d\varepsilon}+\frac{k_2}{M}\sigma=\alpha G\left(\alpha k_0\frac{D-1}{D}+k_1\right)$$

Решение исходного уравнения в приближении постоянной правой части

$$\sigma=\frac{\alpha GM}{k_2}\left(\alpha k_0\frac{D-1}{D}+k_1\right)\left(1-e^{-\frac{k_2 M\varepsilon}{2}}\right)$$

Оценка коэффициента k1

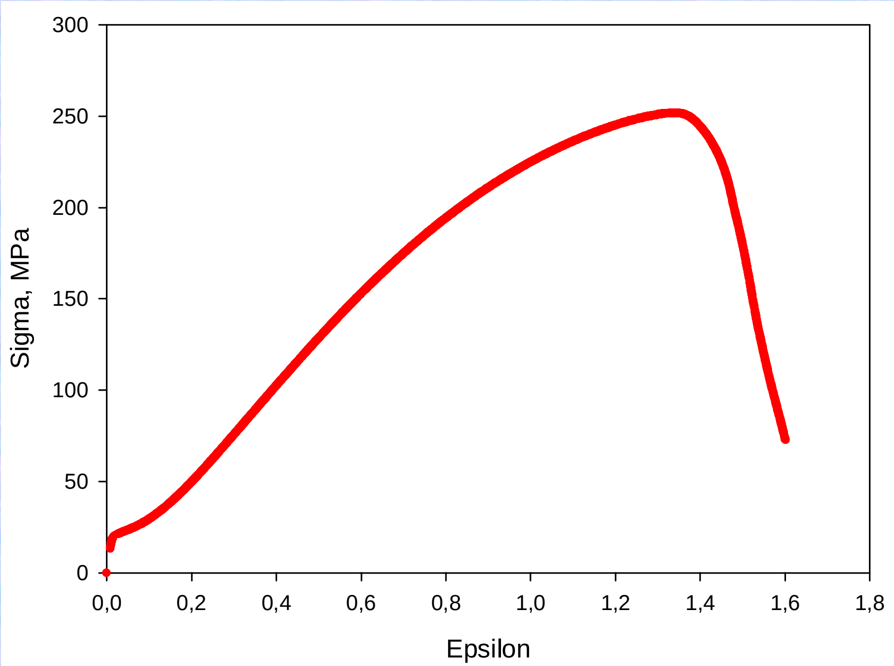
$$\frac{2}{M^2}\frac{d\sigma}{d\varepsilon}=\alpha Gk_1 \qquad k_1=\frac{2}{\alpha GM^2}\left(\frac{d\sigma}{d\varepsilon}\right)_{in}$$

G = 75000 МПа, M = 2 (никель)

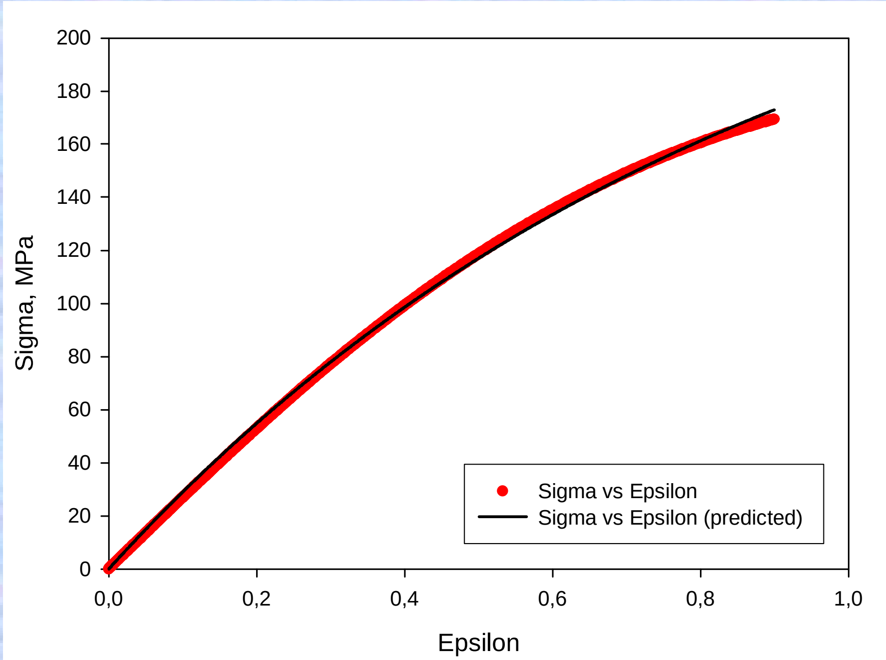
$$\left(d\sigma/d\varepsilon\right)_{in}\approx 10^{-4}G \qquad k_1\sim 10^{-4}$$

Оценка значений кинетических коэффициентов

Кривая нагружения монокристаллического никеля



То же в интервале $0,3<\varepsilon<1,2$ смещённое в начало координат



$$\sigma = \frac{\alpha G M}{k_2}\left(\alpha k_0 \frac{D-1}{D} + k_1\right)\left(1 - e^{-\frac{k_2 M \varepsilon}{2}}\right) \longrightarrow \sigma = A\left(1 - e^{-B\varepsilon}\right) \longrightarrow \begin{matrix} A \approx 346 \text{ МПа} \\ B \approx 1{,}133 \end{matrix}$$

Оценка значений кинетических коэффициентов

Оценка коэффициента k0

$$k_0 = \frac{D}{\alpha(D-1)}\left(\frac{k_2 A}{\alpha MG} - k_1\right) \approx 3{,}1 \cdot 10^{-2}$$

Оценка коэффициента k1

$$k_1 = \frac{2}{\alpha G M^2}\left(\frac{d\sigma}{d\varepsilon}\right)_{in} \approx 10^{-4}$$

Оценка коэффициента k2

$$k_2 = \frac{2B}{M} \approx 1{,}133$$

$$D = \frac{\alpha k_0}{\alpha k_0 + k_1 - \frac{1}{\alpha MG}\left(\frac{2}{M}\frac{d\sigma}{d\varepsilon} + k_2\sigma\right)}$$

Стадии пластической деформации

I стадия (стадия лёгкого скольжения)

Зависимость σ(ε) – линейна. Коэффициент упрочнения ~ 10^{-4} G. Сдвиг совершается скольжением дислокаций в одной, первичной системе скольжения из источников, которые имелись до начала деформации. Помехи движению дислокаций отсутствуют, длина свободного пробега дислокации велика. Большая часть дислокаций достигает поверхности, образуя на ней ступеньки. Это проявляется в появлении на поверхности линий скольжения.

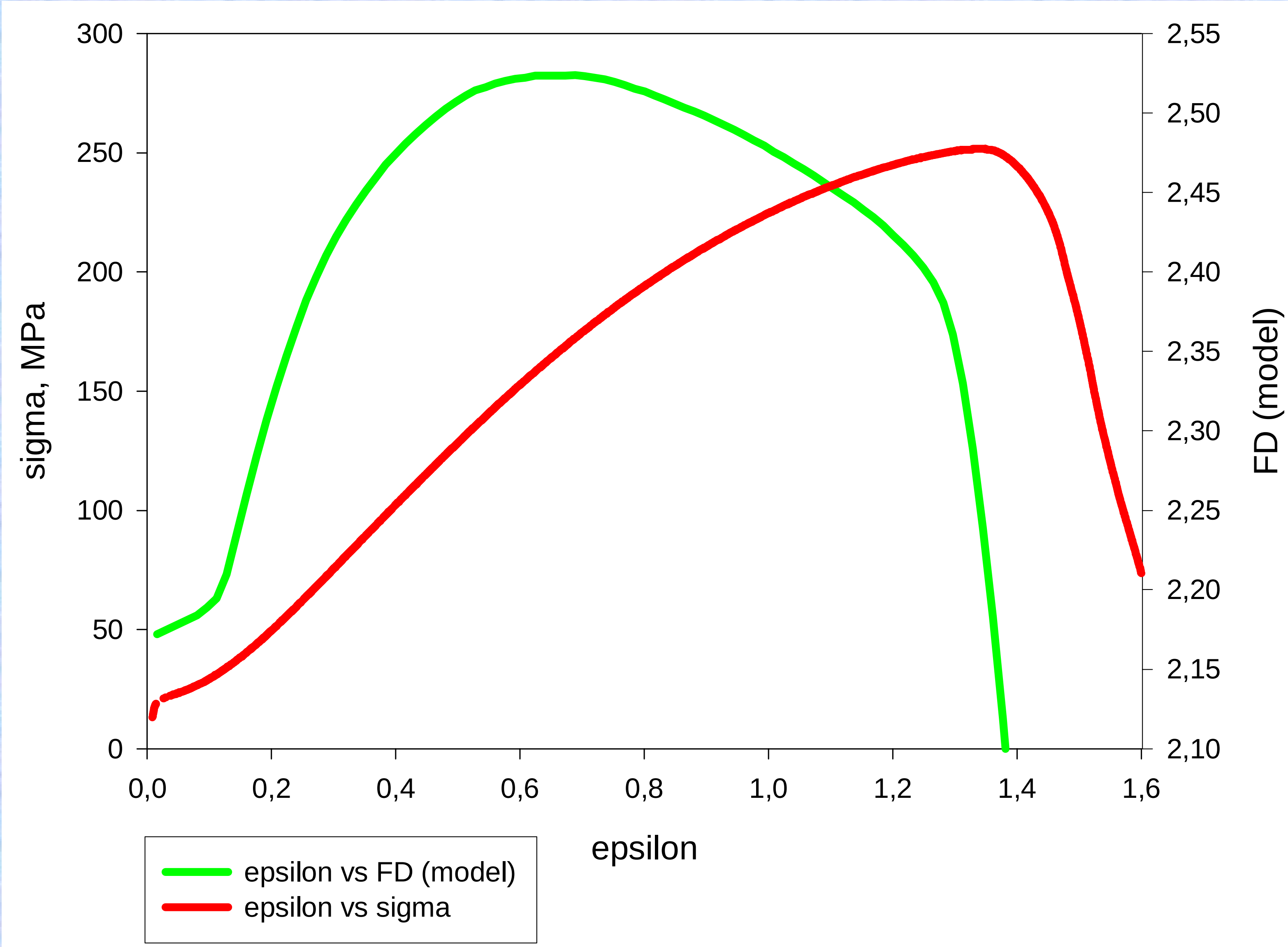
II стадия (стадия множественного скольжения)

Зависимость σ(ε) – линейна. Коэффициент упрочнения ~ G/300. Линии скольжения становятся значительно короче и образуются сложные сплетения дислокаций, которые располагаются вдоль действующих плоскостей скольжения и окружают области, свободные от дислокаций (формируется «ячеистая» структура).

III стадия (стадия поперечного скольжения)

Зависимость σ(ε) – параболическая. На поверхности начинают возникать полосы скольжения, представляющие собой группы близко расположенных линий. При дальнейшей деформации скольжение сосредоточено только в полосах скольжения. Сдвиг в промежутках между полосами отсутствует. Максимум на кривой σ(ε) соответствует образованию «шейки»

Результаты представленной модели



Данные O.Meissner et al. (1998)

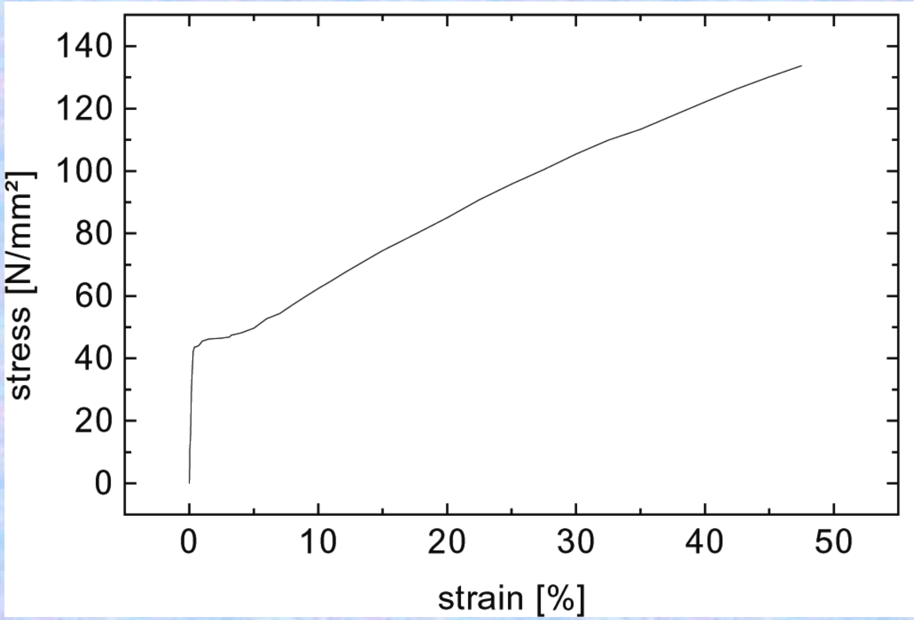
Appl. Phys. A 66, S1113–S1116 (1998)

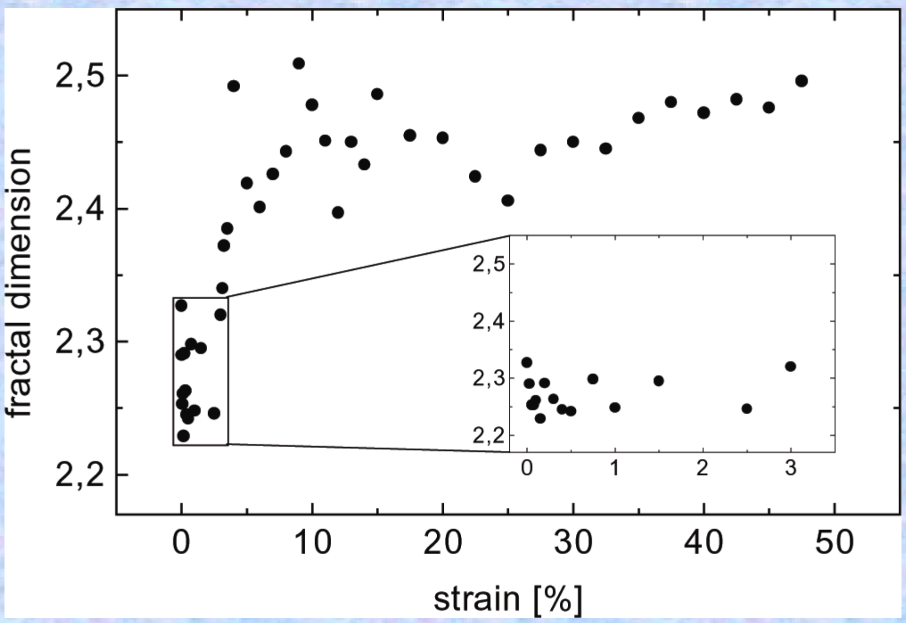
Formation of mesostructures at the surface of ferritic steel and a nickel monocrystal under increasing load – an in situ AFM experiment

Applied Physics A
Materials
Science & Processing

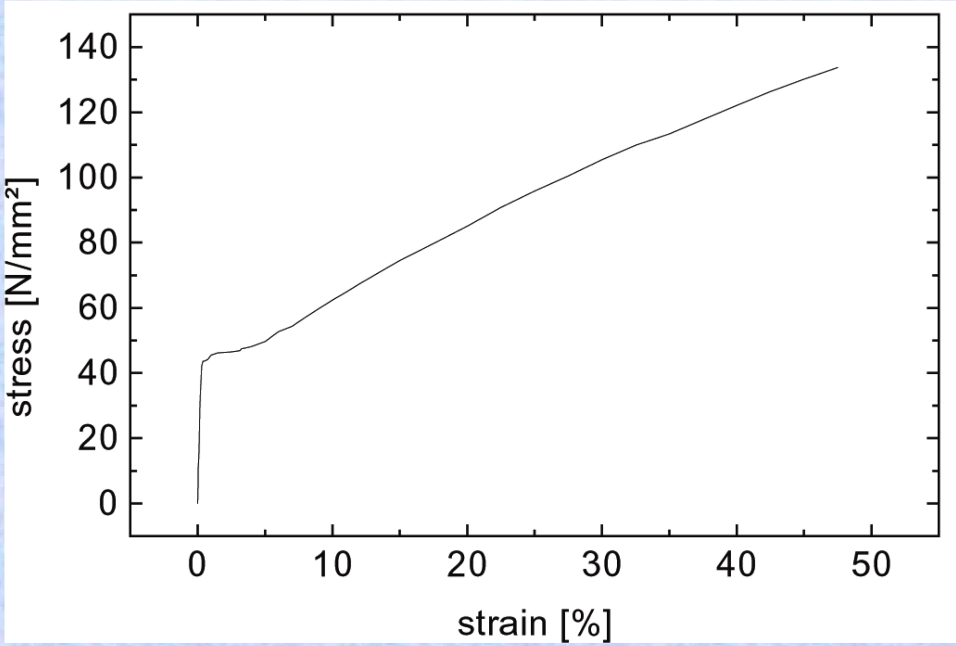
O. Meißner[1], J. Schreiber[1], A. Schwab[2]

[1] Fraunhofer Institute for Non-destructive Testing, EADQ Dresden, D-01326 Dresden, Krügerstr. 22, Germany
(E-mail: meissner@eadq.izfp.fhg.de)
[2] Dresden University of Technology, Faculty of Science, Department of Physics, Institute for Physical Metallurgy, Dresden, Germany

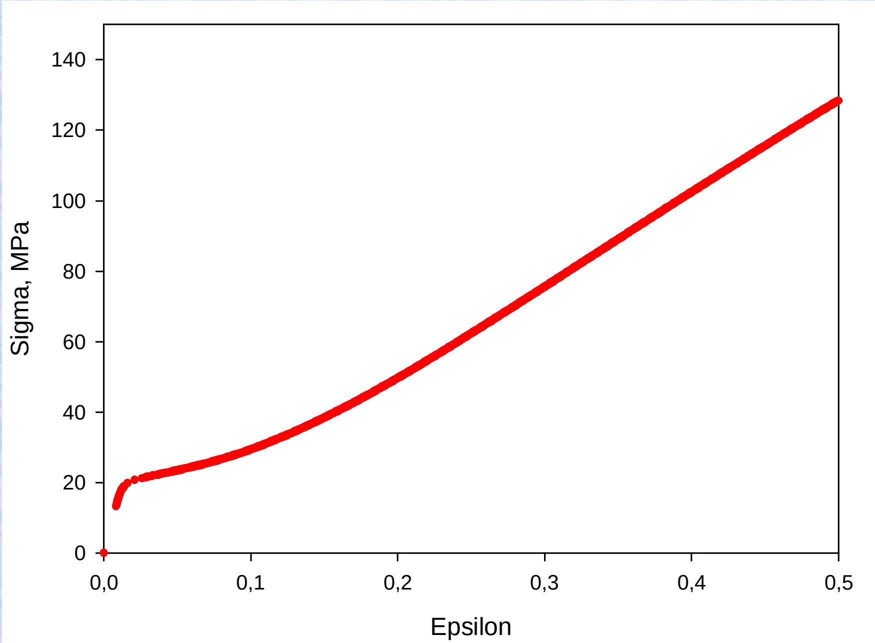




Сопоставление кривых нагружения монокристаллического никеля

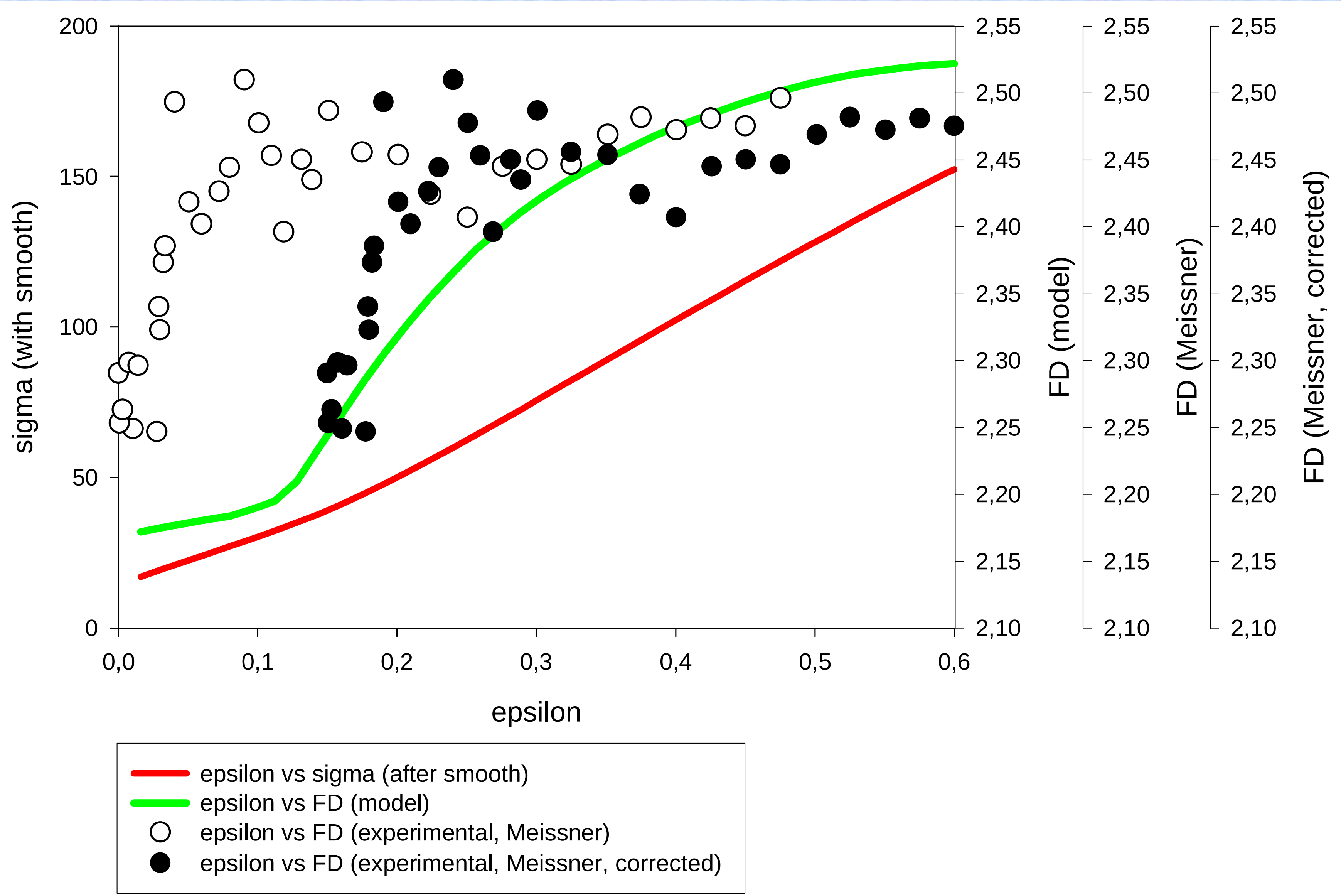


O.Meissner et al.
(короткая первая стадия)

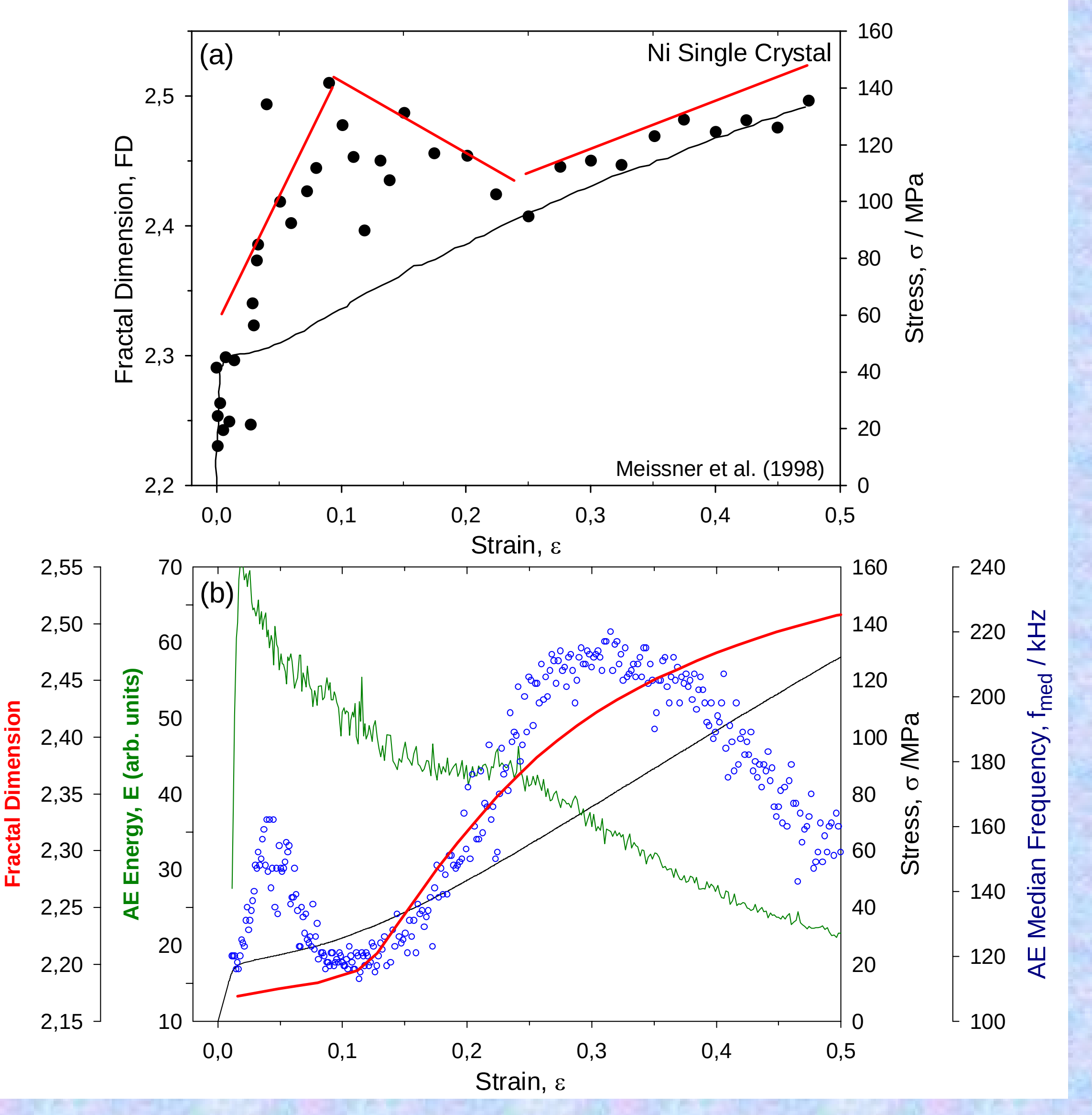


A.Vinogradov et al.
(явно выраженная первая стадия)

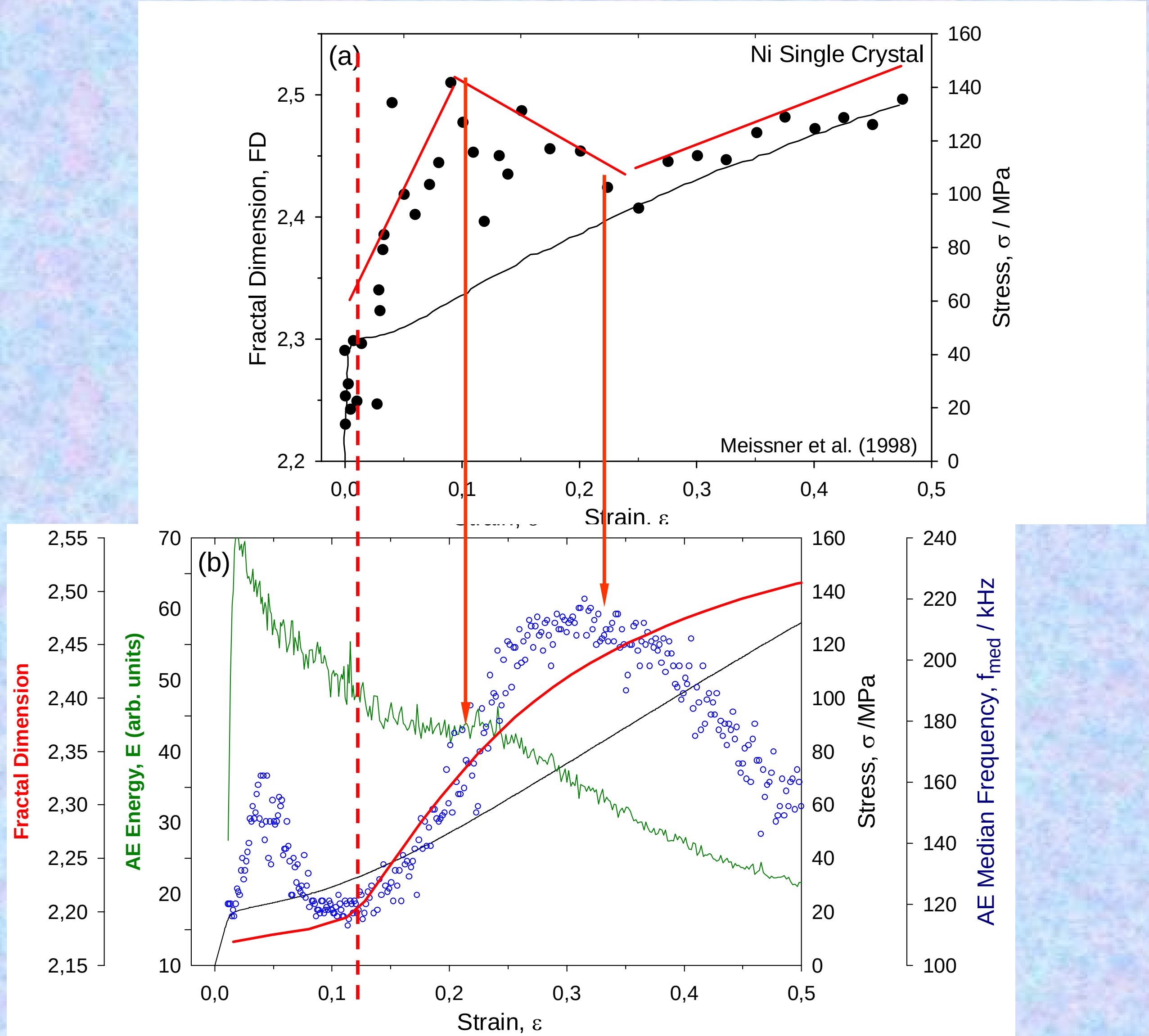
Сопоставление данных O.Meissner с результатами представленной модели



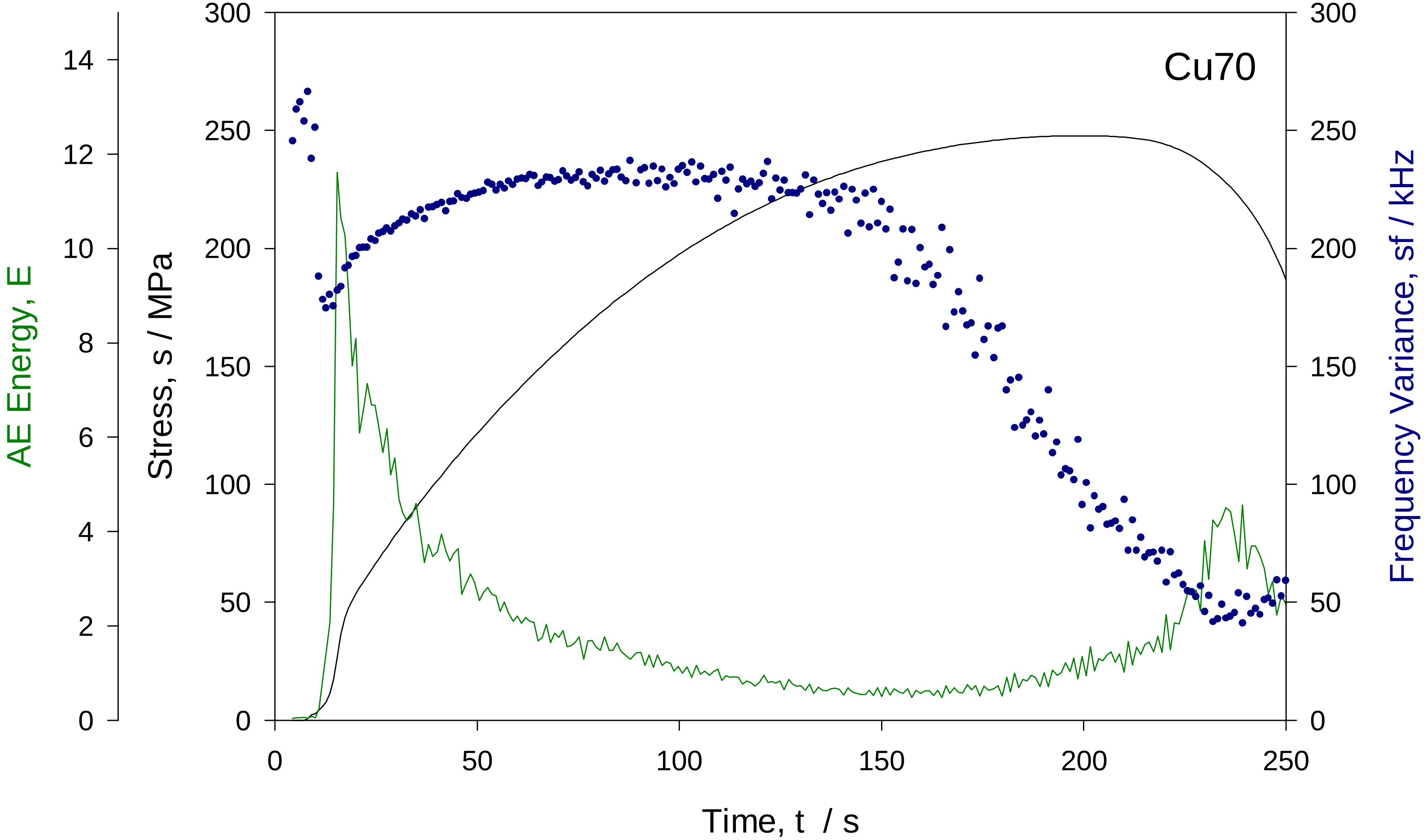
Сопоставление данных O.Meissner с результатами представленной модели



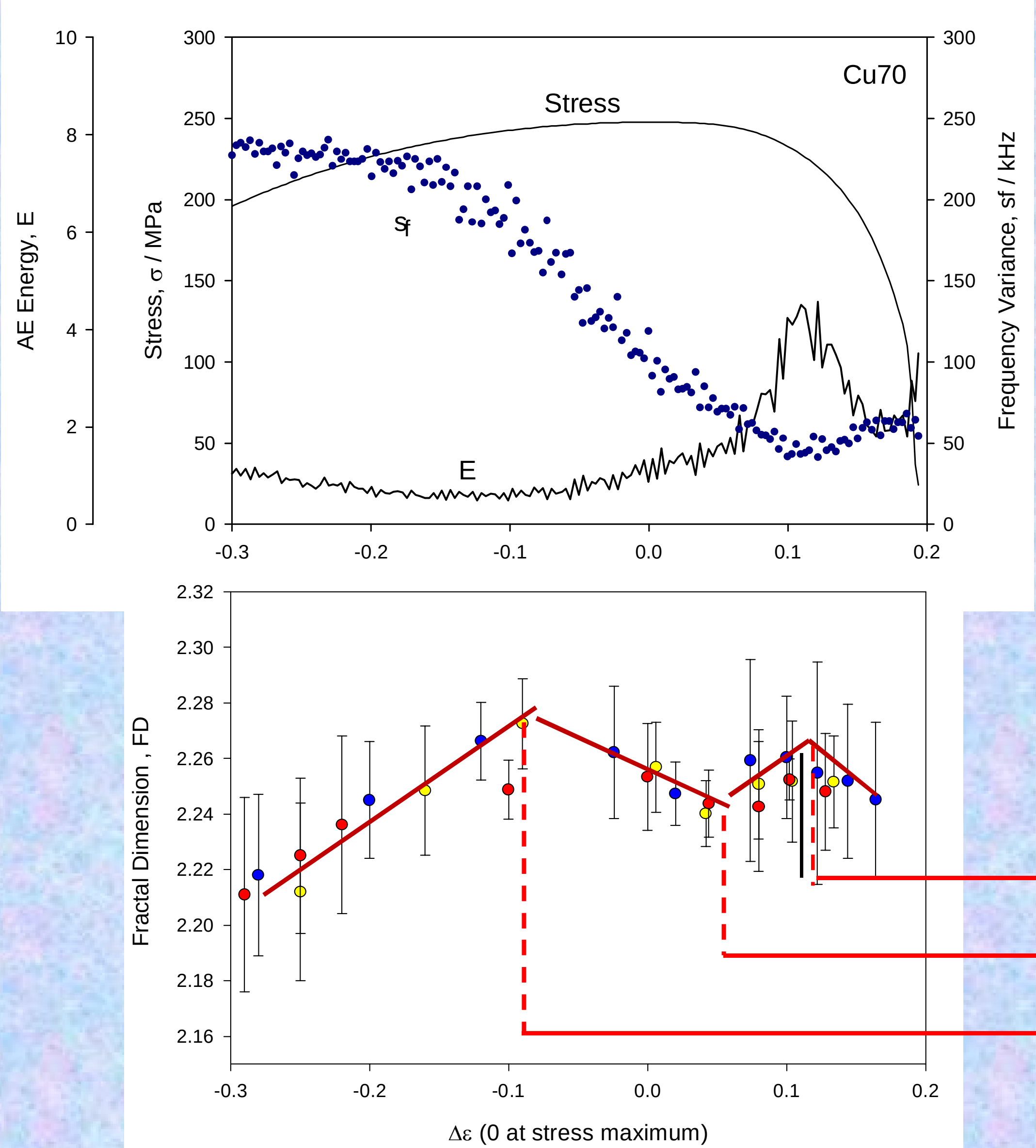
Корректировка данных O.Meissner по малой величине первой стадии упрочнения

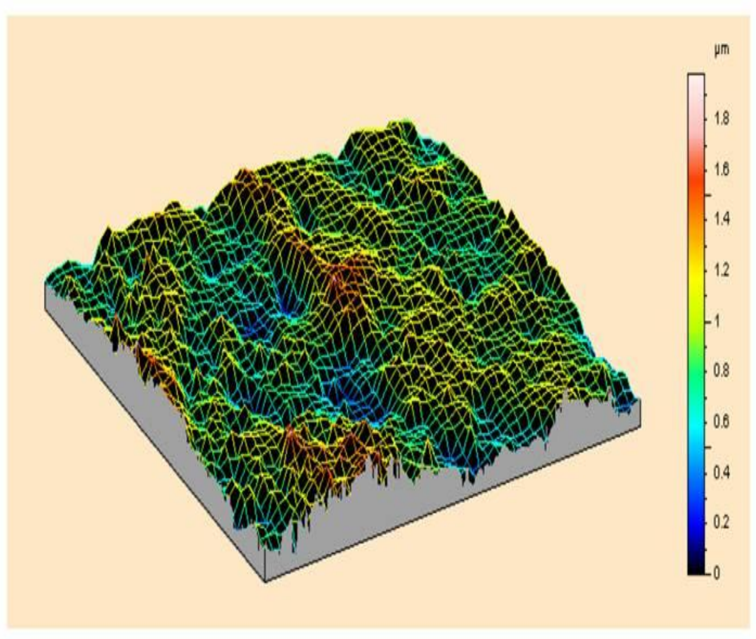


Нагружение поликристалла меди



Фрактальная размерность поверхности поликристалла меди на III стадии нагружения





Interferometric Microscope MicroMap 560

Разрушение

Образование шейки

Локализация деформации