

Tworzenie się pustek i mikropęknięcie w odkształconych metalach

Jerzy Krzemiński

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, Warszawa

1. Wstęp

Nukleacja heterogeniczna agregatów wakansji na granicach ziaren przebiega w każdym obszarze zetknięcia się kilku ziaren stosownie do tych samych sprzężonych mechanizmów. Jednakże agregaty mogą mieć różne kształty, zależnie od tego czy są utworzone w otoczeniu punktów zetknięcia się dwóch, trzech lub czterech ziaren, względnie na inkluzjach zawartych w granicach ziaren. W związku z tym charakterystyki nukleacyjne zależą od rodzaju skrzyżowania granic. W przypadku pojedynczej granicy ziarna (złącze dwu-ziarnowe) dwa kształty agregatów są możliwe: odcinek kuli i symetryczny agregat dwusoczekowy. Oba kształty były badane w pracach [1-3]. Wydaje się jednak, że pierwszy może się utworzyć na granicy ziarna tylko jako konfiguracja niestabilna, z uwagi na brak równowagi pionowej napięć powierzchniowych. Celem niniejszej pracy jest rozważenie zarówno mikropustek (mikroszczelin) dwusoczekowych, generowanych na pojedynczych granicach ziaren, jak również takich, które tworzą się w miejscach zetknięcia się trzech ziaren.

2. System i relacje wyjściowe

Rozważymy pewien wewnętrzny obszar próbki metalu, poddanej rozciąganiu i utrzymywanej w jednoosiowym stanie odkształcenia. Obszar ten zacięra przynajmniej jedno ziarno, wraz z jego otoczeniem, które razem ze wszystkimi pojedynczymi wakansjami oraz wszystkimi ich agregatami - stanowi nasz system. Zawiera on sferyczne agregaty homogeniczne, utworzone wewnątrz ziarna, oraz agregaty heterogeniczne dwusoczewkowe lub w kształcie trójkątnego sferycznego, uformowane na granicy ziarna. Wszystkie założenia dotyczące przyjętego modelu ciała oraz rozważanego procesu podane są w pracach [1-4].

Podstawowe wzory zastosowanej tu teorii wakansyjnej [1] pozostają niezmienione i są podane później. Nie zależą od kształtów i wymiarów agregatów i będą użyte w dalszych rozważaniach.

Obniżenie energii aktywacji przestrzennego ruchu wakansji w kierunku wydłużenia próbki, spowodowane liniowym odkształceniem jednostkowym metalu ϵ

$$\Delta U(\epsilon) = aR_0^{-m} \left\{ 1 - (1+\epsilon)^{-m} - \frac{m}{n} [1 - (1+\epsilon)^{-n}] \right\}, \quad (2.1)$$

gdzie a, m, n - dodatnie stałe materiałowe, R_0 - stała sieci.

Przesycenie wakansji wewnątrz ziarna

$$S_{ho} = \frac{c}{c_0} = \frac{N \exp\left[-\frac{(U_f - \Delta U)}{kT}\right]}{N \exp\left[-\frac{U_f}{kT}\right]} = \exp\left[\frac{\Delta U}{kT}\right], \quad (2.2)$$

gdzie c i c_0 - bieżące ($c > 0$) i początkowe ($c = 0$) stężenia objętościowe wakansji, N - sumaryczna liczba miejsc atomowych w jednostce objętości, U_f - energia aktywacji tworzenia się wakansji, k - stała Boltzmanna, T - temperatura bezwzględna.

Prędkość kondensacji wakansji na jednostce powierzchni

$$P_c = p_g \nu R_0 c_0 \exp \left[- \frac{(U_m - 2\Delta U)}{kT} \right], \quad (2.3)$$

gdzie p_g - prawdopodobieństwo, że wakansja przeskoczy w kierunku agregatu, ν - częstość drgań atomu sieci krystalicznej, U_m - energia aktywacji ruchu wakansji.

Powierzchniowe przesylenie adwakansji (zaadsorbowanych na granicy ziarna wakansji)

$$S_{he} = S_{ho}(\epsilon) H(\epsilon), \quad (2.4)$$

gdzie

$$H(\epsilon) = \frac{\exp \left[- \frac{E_a}{kT} \right] (N - c_0) + \frac{p_g N R_0}{N_0} c_0}{\exp \left[- \frac{E_a}{kT} \right] (N - c) + \frac{p_g N R_0}{N_0}}, \quad (2.5)$$

E_a - ciepło adsorpcji, N_0 - liczba dyskretnych miejsc adsorpcji na jednostce pola powierzchni granicy ziarna ($N_0 \approx 1/R_0^2 \approx 10^{15} \text{ cm}^{-2}$).

Prędkość padania adwakansji na linię o jednostkowej długości, położoną na powierzchni granicy ziarna

$$\omega_c = \frac{p_b p_g \nu R_o^2 N c_o}{\exp\left[-\frac{E_a}{kT}\right] (N - c) + \frac{p_g N R_o}{N_o} c} \exp\left[-\frac{U_{sd} - \Delta U}{kT}\right], \quad (2.6)$$

gdzie p_b - prawdopodobieństwo, że adwankansja przeskoczy w kierunku linii obwodu agregacji, U_{sd} - energia aktywacji dla powierzchniowej dyfuzji adwankansji.

3. Zależności parametryczne

Z uwagi na minimum energii powierzchniowej i równowagę napięć powierzchniowych wszystkie agregaty heterogeniczne muszą być ograniczone powierzchniami sferycznymi i posiadać taki sam kąt dwuścienny θ , utworzony w każdym punkcie zetknięcia się agregatu z powierzchnią ziarna. Stąd kształt agregatów heterogenicznych, choć zależny od rodzaju skrzyżowania granic, jest całkowicie opisany przez promień powierzchni danego agregatu, r , oraz kąt zwilżenia θ . Większość relacji geometrycznych dla różnych typów agregatów podają prace [5,6]. Rozważymy tu mikropustki utworzone w miejscach zetknięcia się dwóch i trzech ziaren.

Na pojedynczej granicy, rozdzielającej dwa ziarna, powstaje symetryczny agregat dwusoczewkowy. Równowaga między siłami napięć powierzchniowych na jego obwodzie - podobnie jak w przypadku każdego innego

kształtu - wymaga aby

$$\alpha_{bg} = 2\alpha \cos\theta, \quad (3.1)$$

gdzie α_{bg} - napięcie powierzchniowe między granicą i kryształem wewnątrzziarnowym (w czystych metalach $\alpha_{bg} \cong \alpha/2$ i $\theta \cong 75^\circ$ [6]), α - napięcie powierzchniowe metalu.

Trzy wielkości geometryczne agregatu (mikropustki) wyrażają się wspólnymi wzorami ogólnymi dla wszystkich rodzajów agregatów, w których jednakże poszczególne współczynniki, będące funkcjami kąta θ , zależą, od kształtu. Są to: pole powierzchni granicy ziarna B wyeliminowane przez agregat, pole powierzchni zewnętrznej agregatu S oraz objętość V:

$$B = a(\theta) r^2 \quad (3.2)$$

$$S = b(\theta) r^2 \quad (3.3)$$

$$V = c(\theta) r^3 \quad (3.4)$$

Dla podwójnej soczewki odpowiednie współczynniki oraz długość obwodu agregatu wynoszą

$$a(\theta) = \pi \sin^2\theta \quad (3.5)$$

$$b(\theta) = 4\pi (1 - \cos\theta) \quad (3.6)$$

$$c(\theta) = \frac{8\pi}{3} \Phi(\theta) \quad (3.7)$$

$$\Phi(\theta) = \frac{1}{4} (2 - 3\cos\theta + \cos^3\theta) \quad (3.8)$$

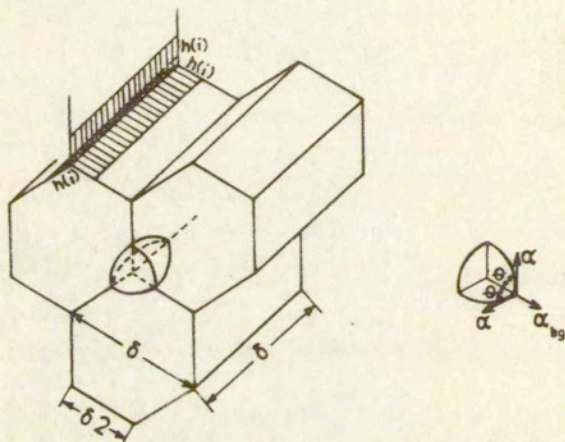
$$i = 2\pi r \sin\theta \quad (3.9)$$

Wykorzystując zależność

$$i = \frac{V}{V_v} = \frac{c(\theta)}{V_v} r^3 \Rightarrow r = \left[\frac{V_v}{c(\theta)} \right]^{1/3} i^{1/3}, \quad (3.10a, b)$$

gdzie V_v - objętość jednej wakansji, i - liczba wakansji w agregacie, możemy wyrazić promień powierzchni agregatu w funkcji zmiennej i .

Aby spełnić warunki równowagi (3.1), zarodkująca się mikropustka w otoczeniu punktów styku trzech ziaren musi być ograniczona trzema identycznymi powierzchniami sferycznymi, tworząc regularny trójscian sferyczny (Rys.1).



Rys.1.

Agregat w kształcie foremnego trójscianu sferycznego, utworzony w otoczeniu linii zetknięcia się trzech ziaren ośmiościennych. Pokazano strefę nukleacji w narożu jednego z ziaren.

Dla trójkątnego sferycznego relacje (3.1)-(3.4) oraz (3.10a,b) pozostają bez zmian. Natomiast stosowanie współczynników oraz długości obwodu agregatu przedstawiają się jak niżej:

$$K = \cos\theta = \frac{\alpha_{bg}}{2\alpha}, \quad 30^\circ < \theta < 90^\circ, \quad (3.11)$$

$$a(\theta) = 3\beta(1 - k^2) - k\sqrt{3 - 4k^2}, \quad (3.12)$$

$$b(\theta) = 12\left(\frac{\pi}{2} - \gamma - k\beta\right), \quad (3.13)$$

$$c(\theta) = 2\left[\pi - 2\gamma + \frac{k^2}{3}\sqrt{3 - 4k^2} - \beta k(3 - k^2)\right], \quad (3.14)$$

$$f(\theta) = (b - 2ak)c^{-2/3}, \quad (3.15)$$

$$\beta = \arccos \frac{k}{\sqrt{3(1 - k^2)}}, \quad (3.16)$$

$$\gamma = \arcsin \frac{1}{2\sqrt{1 - k^2}}, \quad (3.17)$$

$$l = 6\beta \sin\theta r = 6\beta \sqrt{1 - k^2} \left[\frac{v_v}{c(\theta)} \right]^{1/3} i^{1/3}. \quad (3.18)$$

W pracy [3] pokazano, że kształt ziaren nie ma zasadniczego wpływu na charakterystyki nukleacyjne. W związku z tym wybrano dla ziaren kształt ośmiościenny w postaci graniastosiępa prawidłowego mającego za

podstawę sześciokąt foremny o długości boku $\delta/2$ i długości krawędzi bocznych δ (Rys.1). Kąty wewnętrzne między krawędziami sześciokąta wynoszą 120° , tak że dla tego kształtu ziaren spełniona jest zależność Smitha [7] o równowadze napięć powierzchniowych trzech ziaren stykających się wzdłuż wspólnej linii przecięcia. Nukleacja mikropustek w kształcie trójscianu sferycznego zachodzi wyłącznie w najbliższym otoczeniu tej linii, zwanym strefą nukleacji. Zależy ona od wymiarów i kształtów stykających się ziaren oraz rozmiaru agregatu krytycznego (zarodka mikroszczeliny). Dla przyjętego kształtu ziarna i agregatu w postaci regularnego trójscianu sferycznego strefa nukleacji $z(i)$ jest iloczynem zasięgu strefy $h(i)$, (por.Rys.1),

$$h(i) = \frac{2r \cos\left(\frac{2}{3}\pi - \theta\right)}{\sqrt{3}} = \frac{2}{\sqrt{3}} \left[\frac{V_v}{c(\theta)} \right]^{1/3} \cos\left(\frac{2}{3}\pi - \theta\right) i^{1/3} \quad (3.19)$$

oraz długości wspólnej krawędzi bocznej ziaren δ i liczby stykające się ziaren

$$z(i) = 3\delta h(i). \quad (3.20)$$

4. Homogeniczna nukleacja mikroszczelin wewnątrz ziaren

Ponieważ wprowadzone rozszerzenie modelu fizycznego ciała oraz samego procesu dotyczą wyłącznie granic ziaren, wszystkie podstawowe charakterystyki nukleacyjne wewnątrz ziaren nie ulegają zmianie. W szczególności ekstremalne wartości trzech najważniejszych wielkości podane są poniżej [1,2].

Maksimum energii swobodnej utworzenia sferycznego agregatu homogenicznego zawierającego i wakansji (przy pominięciu entropii konfiguracyjnej), osiągnięte przy agregacie krytycznym ($i = i_g^*$) o równym prawdopodobieństwie wzrostu i rozpadu

$$\Delta F_g^* = \Delta F_g(i_g^*) = \frac{4\pi\alpha^3 V_v^2}{3[\Delta U(\epsilon)]^2} \quad (4.1)$$

Liczba wakansji w agregacie krytycznym

$$i_g^* = \frac{4\pi\alpha^3 V_v^2}{3[\Delta U(\epsilon)]^3} \quad (4.2)$$

Liczba agregatów krytycznych utworzonych w jednostce objętości i jednostce czasu w stacjonarnym procesie homogenicznym przy ustalonej temperaturze T i odkształceniu ϵ (prędkość nukleacji homogenicznej)

$$J_g = 2N_{ho} N_c V_v \left(\frac{\alpha}{kT} \right)^{1/2} \exp \left[- \frac{\Delta F_g^*}{kT} \right] \quad (4.3)$$

5. Nukleacja heterogeniczna spowodowana powierzchniowym dołączaniem się wakansji z ziaren

Rozważmy wycinek powierzchni granicy ziaren prostopadły do kierunku rozciągania metalu i zakładamy, że jedynym mechanizmem wzrostu agregatów jest proces dochodzenia wakansji z ziaren do powierzchni agregatów.

Równowagowy rozkład powierzchniowy agregatów zawierających i wakansji, $N^0(i)$, dany jest wzorem słusznym dla wszystkich rodzajów agregatów heterogenicznych

$$N^0(i) = N^0(1) \exp \left[- \frac{\Delta F_{bg}(i) - kT \ln \frac{N_0}{N^0(1)}}{kT} \right] =$$
$$= N_0 \exp \left[- \frac{\Delta F_{bg}(i)}{kT} \right], \quad (5.1)$$

gdzie $-kT \ln(N_0/N^0(1))$ - poprawka uwzględniająca energię swobodną rozłożenia agregatów na N_0 dostępnych miejscach adsorpcji (entropia mieszania), $\Delta F_{bg}(i)$ - zależna od wymiaru agregatu część energii swobodnej utworzenia i -elementowego agregatu.

Energia $\Delta F_{bg}(i)$ jest postulowana w postaci

$$\Delta F_{bg}(i) = W(i) - \frac{V(i)}{v} \left[kT \ln \frac{c}{c_0} + \Delta U(\epsilon) \right], \quad i > 1, \quad (5.2)$$

gdzie $W(i) = S(i)\alpha - B(i)\alpha_{bg}$ - praca zużyta na utworzenie powierzchni agregatu, a drugi człon przedstawia pracę zyskaną przy powstaniu nowej objętości w obecności odkształcenia.

Wykorzystując własności geometryczne mikropustek (Rozdz.3) otrzymujemy następujące charakterystyki nukleacyjne.

Dla podwójnej soczewki:

maksimum funkcji $\Delta F_{bg}(i)$

$$\Delta F_{bg}^* = \Delta F_{bg}(i_{bg}^*) = \frac{8\pi\alpha^3 v^2}{3[\Delta U(\epsilon)]^2} \Phi \quad (5.3)$$

dla agregatu krytycznego o i_{bg}^* wakansjach

$$i_{bg}^* = \frac{8\pi\alpha^3 v^2}{3(\Delta U)^3} \Phi \quad (5.4)$$

Dla sferycznego trójkątanu:

maksimum $\Delta F_{bg}(i)$

$$\Delta F_{bg}^* = \Delta F_{bg}(i_{bg}^*) = \frac{\alpha^3 v^2}{27[\Delta U(\epsilon)]^2} r^3 \quad (5.5)$$

dla agregatu krytycznego

$$i_{bg}^* = \frac{\alpha^3 v^2}{27(\Delta U)^3} r^3 \quad (5.6)$$

Rozpatrzmy teraz prędkość nukleacji $J_{bg}(i,t)$ agregatów heterogenicznych każdego rodzaju

$$J_{bg}(i,t) = N(i-1,t)P_c S(i-1) - N(i,t)P_e(i)S(i), \quad i > 1, \quad (5.7)$$

gdzie $N(i,t)$ - nierównowagowa gęstość powierzchniowa heterogenicznych agregatów o wielkości i w czasie t , $P_e(i)$ - prędkość emisji wakansji z jednostki pola powierzchni $S(i)$ agregatu i -elementowego.

Stosując przekształcenia pokazane w pracach [1,2] otrzymujemy strumień (5.7) w postaci

$$J_{bg}(i,t) = P_c S(i) \left[\frac{N(i,t)}{kT} \frac{\partial \Delta F_{bg}(i)}{\partial i} + \frac{\partial N(i,t)}{\partial i} \right], \quad (5.8)$$

Podstawienie strumienia (5.8) do równania zachowania masy oraz rozwiązanie wynikłego stąd równania różniczkowego, przy założeniu warunku stacjonarności, prowadzi do końcowej postaci prędkości nukleacji mikroszczelin na granicach ziaren w izolowanym powierzchniowym procesie heterogenicznym.

Dla podwójnej soczewki

$$J_{bg} = \sqrt{2} N_o S_{he} P_c v (kT\Phi)^{-1/2} \alpha^{1/2} (1-\cos\theta) \exp\left[-\frac{\Delta F_{bg}^*}{kT}\right] \quad (5.9)$$

oraz dla sferycznego trójscianu

$$J_{bg} = \frac{1}{3 \sqrt{\pi}} N_o S_{he} P_c V_v (kT)^{-1/2} (\alpha f)^{1/2} b(\theta) [c(\theta)]^{-2/3} \exp \left[- \frac{\Delta F_{bg}^*}{kT} \right] \quad (5.10)$$

Tutaj, $S_{he} = N(1)/N^o(1) = S_{ho}(\epsilon)H(\epsilon)$ - powierzchniowe przesycenie na granicy ziarna, dane wcześniej wzorem (2.4).

6. Nukleacja heterogeniczna spowodowana obwodowym przyłączeniem się adwakansji

Rozważmy ponownie wycinek granicy ziarna prostopadły do kierunku rozciągania polikryształu i zakładamy teraz, że nukleacja wakansyjnych mikroszczelin na granicy zależy wyłącznie od powierzchniowej dyfuzji adwakansji po granicy.

Równowagowy rozkład powierzchniowy i -tych agregatów oraz zależna od wymiaru energia swobodna tworzenia agregatu mają tu analogiczne postaci do (5.1) i (5.2) z tym, że na miejscu $\Delta F_{bg}(i)$ występuje $\Delta F_{bs}(i)$ oraz przesycenie S_{ho} jest zastąpione przez S_{he} .

Energia tworzenia $\Delta F_{bs}(i)$ osiąga ponownie maximum przy agregacie krytycznym o i_{bs}^* wakansjach.

Dla podwójnej soczewki

$$\Delta F_{bs}^* = \Delta F_{bs}(i_{bs}^*) = \frac{32\pi\alpha^3 V_v^2}{3(kT \ln S_{he} + \Delta U)^2} \Phi, \quad (6.1)$$

$$i_{bs}^* = \frac{64\pi\alpha^3 V_v^2}{3(kT \ln S_{he} + \Delta U)^3} \Phi. \quad (6.2)$$

Dla trójkątanu sferycznego

$$\Delta F_{bs}^* = \Delta F_{bs}(i_{bs}^*) = \frac{4\alpha^3 V_v^2}{27(kT \ln S_{he} + \Delta U)^2} f^3 \quad (6.3)$$

$$i_{bs}^* = \frac{8\alpha^3 V_v^2}{27(kT \ln S_{he} + \Delta U)^3} f^3 \quad (6.4)$$

Przechodząc do kinetyki powtarzamy operacje zastosowane przy mechanizmie powierzchniowym, pamiętając, że zamiast $S(i)$, P_c i $\Delta F_{bg}(i)$ musimy to użyć odpowiednio $l(i)$, ω_c oraz $\Delta F_{bs}(i)$.

Izolowany strumień agregatów ma teraz postać

$$J_{bs}(i,t) = N(i-1,t)\omega_c l(i-1) - N(i,t)\omega_e(i)l(i), \quad i > 1, \quad (6.5)$$

gdzie $\omega_e(i)$ - prędkość emisji adwansji z jednostki długości linii obwodu $l(i)$ agregatu i -elementowego.

Po rozwinięciach, linearyzacjach i transformacjach [1,2]

$$J_{bs}(i,t) = -\omega_c I(i) \left[\frac{N(i,t)}{kT} \frac{\partial \Delta F_{bs}^*(i)}{\partial i} + \frac{\partial N(i,t)}{\partial i} \right] \quad (6.6)$$

Wprowadzenie równania ciągłości pozwala w końcu wyznaczyć prędkość izolowanej nukleacji mikroszczelin w obwodowym procesie heterogenicznym.

Dla podwójnej soczewki:

$$J_{bs} = \frac{1}{2\sqrt{2}} N_o S_{he} (2\Delta U + kT \ln H) \omega_c (\alpha k T \Phi)^{-1/2} \sin \theta \exp \left[- \frac{\Delta F_{bs}^*}{kT} \right] \quad (6.7)$$

dla trójścianu sferycznego:

$$J_{bs} = \frac{3}{\sqrt{\pi}} N_o S_{he} (2\Delta U + kT \ln H) \omega_c (\alpha k T f)^{-1/2} \beta [c(\theta)]^{-1/3} \sin \theta \cdot \exp \left[- \frac{\Delta F_{bs}^*}{kT} \right] \quad (6.8)$$

7. Sprzężenie powierzchniowego i obwodowego mechanizmu w nukleacji heterogenicznej

Podobnie jak w każdym rzeczywistym procesie heterogenicznej nukleacji na obcym substracie przyjmujemy tu, że oba mechanizmy wzrostu agregatów, powierzchniowy i obwodowy, badane oddzielnie w rozdziałach 5 i 6, są teraz sprzężone. Niestety w przypadku równoczesnego działania dwóch różnych mechanizmów nukleacyjnych nie znamy a priori sprzężonej energii tworzenia agregatów i nie możemy postulować funkcji równowagowego rozkładu wielkości agregatów $N^0(i)$. Zaczynamy zatem od razu od kinetyki i równania bilansu. Oznaczając prędkość sprzężonej heterogenicznej nukleacji mikroszczelin na granicy ziarna przez $J_{gs}(i,t)$ możemy napisać

$$\begin{aligned}
 J_{gs}(i,t) &= J_{bg}(i,t) + J_{bs}(i,t) = N(i-1,t)P_c S(i-1) - \\
 &+ N(i,t)P_e(i)S(i) + N(i-1,t)\omega_c l(i-1) - \\
 &+ N(i,t)\omega_e(i)l(i), \quad i > 1.
 \end{aligned}$$

(7.1)

Stosując podobną procedurę jak w ostatnich dwóch rozdziałach i wykorzystując izolowane strumienie (5.8) i (6.6), otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 J_{gs}(i,t) &= - \left\{ [P_c S(i) + \omega_c l(i)] \frac{\partial N(i,t)}{\partial i} + \right. \\
 &+ \left. \left[\frac{P_c S(i)}{kT} \frac{\partial \Delta F_{bg}(i)}{\partial i} + \frac{\omega_c l(i)}{kT} \frac{\partial \Delta F_{bs}(i)}{\partial i} \right] N(i,t) \right\}.
 \end{aligned}$$

(7.2)

Podstawienie sprzężonego strumienia (7.2) do równania ciągłości

$$\frac{\partial N(i,t)}{\partial t} + \frac{\partial J_{gs}(i,t)}{\partial i} = 0, \quad (7.3)$$

przy warunku stacjonarności procesu $\partial N(i,t)/\partial t = 0$, prowadzi do równania różniczkowego na funkcję nierównowagowego rozkładu agregatów $N(i)$

$$J_{gs}(i,t) = C \quad (7.4)$$

ze stałą C .

Rozwiązanie ogólne równania (7.4) dane jest wzorem

$$N(i) = \exp\left[-\frac{1}{kT} \int_1^i I(i)di\right] \left[N(1) + C \int_1^i \frac{1}{P_c S + \omega_c l} \cdot \exp\left[\frac{1}{kT} \int_1^i I(i)di\right] \right], \quad (7.5)$$

gdzie całka w wykładniku daje się wyznaczyć w postaci zamkniętej

$$\int_1^i I(i)di = \tilde{\Delta F}_{gs}(i) = \int_1^i \frac{P_c S \frac{\partial \Delta F_{bg}}{\partial i} + \omega_c l \frac{\partial \Delta F_{bs}}{\partial i}}{P_c S + \omega_c l} di = \left[\Delta F_{bg}(i) - L(i) \right]_1^i, \quad (7.6)$$

przy czym

$$L(i) = \frac{3kT \ln H}{D^3} \left[\frac{D^2}{2} i^{2/3} - Di^{1/3} + \ln(Di^{1/3} + 1) \right]. \quad (7.7)$$

Powyżej wprowadzono pomocniczy parametr, $D = [P_c S(i)/\omega_c l(i)] i^{-1/3}$, zależny od kształtu agregatu.

Dla podwójnej soczewki

$$D = \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \frac{P_c}{\omega_c} \left[\frac{V_v}{\Phi} \right]^{1/3} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta}, \quad (7.8)$$

dla trójkątnego sferycznego

$$D = \frac{b(\theta)}{6\beta(\theta)\sin\theta} \frac{P_c}{\omega_c} \left[\frac{V_v}{c(\theta)} \right]^{1/3}. \quad (7.9)$$

W równowadze termodynamicznej nukleacja znika, $J_{gs}(i, t) = 0$, $N(i) = N^0(i)$ i równanie (7.4) staje się jednorodnym ($C = 0$). Jego rozwiązanie daje poszukiwany równowagowy rozkład agregatów

$$N^0(i) = N^0(1) \exp \left[- \frac{\tilde{\Delta F}_{gs}(i)}{kT} \right], \quad (7.10)$$

gdzie $\tilde{\Delta F}_{gs}(i)$, dane wyrażeniem (7.6), przedstawia sumaryczną sprzężoną energię utworzenia i -elementowego agregatu. $\tilde{\Delta F}_{gs}$ jest sumą dwóch składników

$$\tilde{\Delta F}_{gs}(i) = \Delta F_{gs}(i) - \Delta F_{gs}(1), \quad (7.11)$$

z których pierwszy $\Delta F'_{gs}(i) = \Delta F_{bg}(i) - L(i)$ - zależy od wymiaru agregatu, a drugi $\Delta F_{gs}(1) = \Delta F_{bg}(1) - L(1)$ jest wkładem entropii mieszania, $\Delta F_{bg}(1) = kT \ln(N_o/N^0(1))$, i efektem sprzężenia; oczywiście $\tilde{\Delta F}_{gs}(1) = 0$.

Można pokazać [1,2], że $[\partial \Delta F_{gs}(i)/\partial i]_{i=i_{gs}^*} = 0$ oraz $[\partial^2 \Delta F_{gs}(i)/\partial i^2]_{i=i_{gs}^*} < 0$. Funkcja $\Delta F_{gs}(i)$ osiąga więc maksimum

$$\Delta F_{gs}^* = \Delta F_{gs}(i_{gs}^*) = \Delta F_{bg}(i_{gs}^*) - L(i_{gs}^*) \quad (7.12)$$

dla agregatu krytycznego zawierającego i_{gs}^* wakansji

$$i_{gs}^* = (2D)^{-3} i_{bg}^* \left\{ D - i_{bs}^{*-1/3} + \left[\left(D - i_{bs}^{*-1/3} \right)^2 + 4i_{bg}^{*-1/3} D \right]^{1/2} \right\}^3. \quad (7.13)$$

Nakładając warunek brzegowy $N(\infty) = 0$ na rozwiązanie ogólne (7.5) i uwzględniając całkę (7.6) oraz wzory (7.7), (7.11), otrzymujemy rozwiązanie szczególne dla nierównowagowego rozkładu agregatów $N(i)$ [4]. Rozwiązanie to podstawione następnie do strumienia (7.2) prowadzi do ostatecznej postaci prędkości nukleacji mikroszczelin na granicach ziaren w sprzężonym procesie heterogenicznym.

Dla mikroszczelin w kształcie podwójnej soczewki

$$J_{gs}^{II} = \left[\frac{\pi}{24} \right]^{1/6} N_o S_{he} \omega_c (kT)^{-1/2} \left[\frac{V_v}{\Phi} \right]^{1/3} \sin\theta \cdot$$

$$\cdot \left[2i_{bg}^{*1/3} \Delta U \left(D + i_{gs}^{*-1/3} \right)^2 - kTD \ln H \right]^{1/2} \exp \left[- \frac{L(1) + \Delta F_{gs}^*}{kT} \right].$$

(7.14)

Dla mikroszczelin trójściennych

$$J_{gs}^{III} = \left[\frac{6}{\pi} \right]^{1/2} N_o S_{he} \omega_c (kT)^{-1/2} \left[\frac{V_v}{c(\theta)} \right]^{1/3} \beta \sin\theta \cdot$$

$$\cdot \left[2i_{bg}^{*1/3} \Delta U \left(D + i_{gs}^{*-1/3} \right)^2 - kTD \ln H \right]^{1/2} \exp \left[- \frac{L(1) + \Delta F_{gs}^*}{kT} \right].$$

(7.15)

Zauważmy, że gdy $H(c) = 1$ proces heterogeniczny jest niesprężony i strumień J_{gs} przedstawia prostą sumę obu mechanizmów izolowanych

$$J'_{gs} = J_{gs}(H=1) = J_{gs}(H=1) + J_{bs}(H=1). \quad (7.16)$$

Gdy $H \in (0,1)$ prosta suma J'_{gs} stanowi tylko przybliżenie strumienia sprężonego J_{gs} , tym lepsze, im H jest bliższe jedności.

8. Prędkość stacjonarnej nukleacji globalnej

Wszystkie indywidualne strumienie nukleacyjne-homogeniczny, oba heterogeniczne oraz sprzężony - zostały zbadane oddzielnie w poprzednich rozdziałach. Stąd też, poszczególne izolowane procesy były traktowane lokalnie (wewnętrzny podobszar ziarna lub wycinek granicy ziarna). Rozważymy obecnie całe ziarno zawarte, wraz z jego otoczeniem, w obserwowanym obszarze wewnętrznym rozciąganej próbki metalu. Gdy wszystkie strumienie działają równocześnie w ziarnie w tworzeniu zarówno homo jak i różnych typów heterogenicznych mikropustek wakansyjnych, równanie bilansu [8,1,2] dla stacjonarnej prędkości globalnej wszystkich mikroszczelin J_o musi być przeformułowane. Zmodyfikowana forma tego równania ma postać

$$J_o = J_g + \frac{S_g}{V_g} J_{gs}^{II} + \frac{6z \left[i_{gs}^{III} \right]}{V_g} J_{gs}^{III}, \quad (8.1)$$

gdzie S_g - pole powierzchni granicy granicy ziarna, V_g - objętość ziarna, strefa nukleacji z jest pomnożona przez liczbę naroży w ziarnie, i_{gs}^* - liczba wakansji w agregacie krytycznym o kształcie trójscianu sferycznego (wzór (7.13) z odpowiednimi wartościami i_{bg}^* , i_{bs}^* oraz D).

9. Umowne kryterium mikropęknięcia metali

Teoria wakansyjna pozwala wyznaczyć szereg charakterystyk nukleacyjnych występujących w początkowym stadium procesu pęknięcia metali, zwanym mikropękaniem. Nie wystarczają one jednak do odpowiedzi na pytanie kiedy powstaje pierwszy stabilny i gotowy do dalszego samorzutnego wzrostu mikrodefekt (zarodek mikroszczeliny). A więc kiedy kończy się pierwszy, wstępny etap procesu pęknięcia (mikropęknięcia) i rozpoczyna się jednocześnie etap drugi, w którym mikroszczelina może rosnąć dalej do wymiarów makroskopowych - prowadząc w efekcie końcowym (etap trzeci) do rzeczywistego pęknięcia materiału. Potrzeba tu więc jeszcze jakiegoś warunku umożliwiającego wyznaczenie odpowiedniego odkształcenia, przy którym powyższe okoliczności zachodzą. Nasuwa ą się tu dwie możliwości. Pierwsza, to wyznaczenie funkcji nierównomiernego rozkładu agregatów heterogenicznych $N(i)$ dla $i = i_{gs}^*$ i nałożenie na nią stosowanego ograniczenia, pozwalającego znaleźć korespondujące odkształcenie. Druga, to odpowiedni warunek nałożony na prędkość nukleacji globalnej J_0 określający krytyczną wartość prędkości J_0^* i pozwalający wyznaczyć odpowiadające jej odkształcenie krytyczne ϵ_0^* , przy którym tworzy się pierwsza stabilna mikroszczelina o równym prawdopodobieństwie wzrostu i rozpadu. Ponieważ koncepcja druga jest ogólniejsza (uwzględnia również nukleację homogeniczną), prostsza matematycznie i stosowane przybliżenia przy wyznaczaniu J_0 wydają się lepsze - przyjęto ją do sformułowania odpowiedniego kryterium.

W parach i cieczech przyjęto na ogół, że dane o prędkości nukleacji są publikowane dla $J \approx 1$ zarodka na cm^3 i s. Dla metali prędkość nukleacji globalnej musi być związana z rozmiarami ziaren. Jednakże, z uwagi na dowolność przyjęcia jednostki czasu w prędkości nukleacji oraz kształtu i wymiaru ziaren wydaje się, że każde kryterium mikropęknięcia metali może być również ustalone tylko umownie. W związku z tym, proponuje się następujące formalne kryterium mikropęknięcia dla jednoosiowo odkształconych metali:

Prędkość nukleacji globalnej J_o^* , generująca jeden dowolny zarodek mikroszczeliny w średnim ziarnie w ciągu sekundy, jest prędkością krytyczną. Mamy zatem

$$J_o^* = \frac{1}{V_{g(av)}} \frac{\text{zarodków}}{\text{cm}^3 \text{ s}} \quad (9.1)$$

gdzie $V_{g(av)}$ - objętość ziarna średniego.

Dla tej liczby zarodków mikroszczelin należy wyznaczyć krytyczne odkształcenie ϵ_o^* .

10. Wnioski i uwagi końcowe

Jak wiadomo, zbiorowiska wakansji tworzą się znacznie łatwiej na granicach ziaren niż w przestrzeniach wewnątrzziarnowych. Wynika to z faktu znikania tej części powierzchni granicy, która jest zawarta wewnątrz utworzonej mikropustki. Zmniejszona w ten sposób energia po-

wierzchniowa granicy ziarna obniża tym samym konieczną do nukleacji mikroszczeliny krytyczną energię tworzenia. Im więcej granicy ziarna zostaje wyeliminowane przez formującą się mikropustkę tym mniejsza jest energia jej tworzenia. Stąd też mikroszczeliny powstające w miejscach zetknięcia się dwóch, trzech lub czterech ziaren mają coraz mniejsze energie tworzenia powodując, iż te punkty czystego i pozbawionego inkluzji metalu stanowią najbardziej energetycznie uprzywilejowane miejsca do nukleacji mikropustek. Należy w tym miejscu podkreślić, że sugestia zarodkowania mikroszczelin przez proces przecinania granic ziaren przez pasma poślizgu [9] nie może być tu potwierdzona, ponieważ teoria wakan-
syjna nie przewiduje wyróżnionych miejsc nukleacji na granicach ziaren.

Literatura

1. J.Krzemiński, Arch.Mech., 35, 5-6, 639, 1983.
2. Z.Dziarnowski, J.Krzemiński, Prace IPPT 16/1988.
3. Z.Dziarnowski, J.Krzemiński, Prace IPPT 42/1989.
4. J.Krzemiński, Arch.Mech., w druku.
5. P.J.Clemm, J.C.Fisher, Acta Met., 3, 70, 1955.
6. R.Raj, M.F.Ashby, Acta Met., 23, 653, 1975.
7. C.S.Smith, Metal Interfaces ASM, 65, 1952.
8. A.Ziabicki, Prace IPPT 4/1977.
9. T.G.Nieh, W.D.Nix, Scripta Met., 14, 365, 1980.