ABOUT THE QUANTUM NATURE OF LOCALIZED PLASTIC DEFORMATION AUTOWAVES

Nikita A. Ploskov, Lev B. Zuev, Vladimir I. Danilov
Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS,
2/4, pr. Akademicheskii, Tomsk, 634021, Russia

Abstract

It is found that the deformation will exhibit a nonhomogeneous localization behavior at all the plastic flow stages. This process involves propagation of localized plasticity autowaves, which are regarded as a manifestation of the self-organization of micro- and meso-scale deformation processes. The evolution of autowaves is governed by the work hardening law, i.e. the stages on the loading diagram obtained for the deforming solid. A hypothesis for the quantum nature of deformation processes is presented. It is found that the effective mass, m_{eff}, which was calculated from the experimental values λ and V_{aw} using the de Broglie equation, is commensurate with the atomic mass unit. The normalized dimensionless masses are found to vary in conformity to the increasing number of valence electrons (N) in crystal lattice unit cell. With increasing n, the dimensional masses of elements, which differ in the order of electron shell filling, would vary linearly, although in a different way. Due to the scarcity of data, however, the type of this dependence cannot be defined consistently enough.

Key words: *localization of plastic deformation, autowaves, associated mass, valence electron, the de Broglie equation*

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение природы пластической деформации твердых тел в течение последних двадцати пяти лет привело к важному заключению о том, что пластическое течение протекает неоднородно. Универсальность этого положения прослеживается на микроскопическом (Kuhlmann-Wilsdorf, 2002), мезоскопическом (Panin, 2001) и макроскопическом (Зуев с соавторами, 2008, Zuev and co-workers, 2009) масштабных уровнях. Можно утверждать, что деформация при пластическом течении локализована на всех этапах – от предела текучести до разрушения, а микро-, мезо- и макромасштабные явления локализации становятся существенными для процессов пластического течения практически одновременно. В монографии Зуева с соавторами (2008) подчеркивается, что явление макролокализации характерно для любых материалов и любых условий нагружения и не зависит от типа кристаллической решетки, фазового состава и зеренной структуры объекта исследования. Оно развивается в виде автоволн локализации пластической деформации.

Типы автоволн локализованной пластической деформации определены законом пластического течения, то есть, стадийностью кривой нагружения материала. Это позволило сформулировать правило соответствия (Zuev, 2007), согласно которому каждая смена стадий деформационного упрочнения – это процесс преобразования автоволн локализованной пластической деформации. Названные авторы выделяли стадии упрочнения по величине показателя деформационного упрочнения в уравнении Людвика – Холомана (1), которое в общем случае применимо к деформационным кривым любого вида.

$$\sigma = \sigma_0 + K\varepsilon^n . \quad (1)$$

В этом случае правило соответствия формулируется следующим образом:

- площадке текучести или легкому скольжению, где n = 0 соответствует одиночный движущийся с постоянной скоростью V_{aw} фронт локализованной деформации (полоса Чернова – Людерса), и который можно охарактеризовать как автоволну возбуждения (рис. 1 а);
- стадии линейного упрочнения (n = 1) отвечает система эквидистантных очагов локализации деформации, движущихся синхронно в одном направлении с постоянной скоростью, что можно трактовать как фазовую автоволну локализованной деформации с постоянными длиной λ и скоростью V_{aw} (рис. 1 б);
- на стадии параболического упрочнения по Тейлору при n = ½ (см. Хоникомб, 1972) автоволновая картина стационарна и также эквидистантна с пространственным периодом λ (рис. 1 в).
- стадия предразрушения (n < ½) характеризуется тем, что выделяется одна неподвижная зона локализации с постоянно возрастающей амплитудой деформации. Остальные же очаги подвижны, и сходятся к неподвижной зоне с тем большей скоростью, чем дальше они находится от этой зоны. В дальнейшем в области неподвижной зоны локализации формируется шейка и происходит разрушение. Данный процесс в монографии Зуева и соавторов (2008) определяется как коллапс автоволны локализованной деформации (рис. 1 г).

В последние годы возникла идея о том, что автоволны локализации деформации являются квантовыми объектами. Рассмотрению этого вопроса и посвящена настоящая работа.

2. ОСНОВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Идея о возможности квантового подхода при описании автоволн локализованной деформации появилась в начале 2000-х годов в работах Billingsly (2001), Зуев (2004) и Zuev (2005). Она состоит в том, чтобы применить к параметрам автоволны локализованной пластической деформации λ и V_{aw} уравнение де Бройля в виде

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad (2)$$

где $p = mV_{aw}$, h – постоянная Планка. Видно, что для расчетов по уравнению (2) необходимо одновременно из экспериментов определять и скорость автоволны, и ее длину. По этой причине можно воспользоваться только данными, полученными для стадии линейного упрочнения. Действительно, на площадке текучести происходит движение одиночного очага локализации и поэтому нельзя определить λ длину автоволны, как пространственный период. На стадии Тейлора очаги неподвижны, следовательно, V_{aw} = 0. Когда автоволна коллапсирует на стадии предразрушения, и длина ее, и скорость являются переменными. С другой стороны на стадии линейного упрочнения для всех исследованных материалов $V_{aw} \sim 10^{-2}$ мм/с, $\lambda \approx 3\ldots10$ мм, то есть, являются макроскопическими величинами. В тоже время, вычисленная с использованием (2) эффективная масса как,

$$m_{eff} = \frac{h}{\lambda V_{aw}} \quad (3)$$

коррелирует с атомными массами металлов.

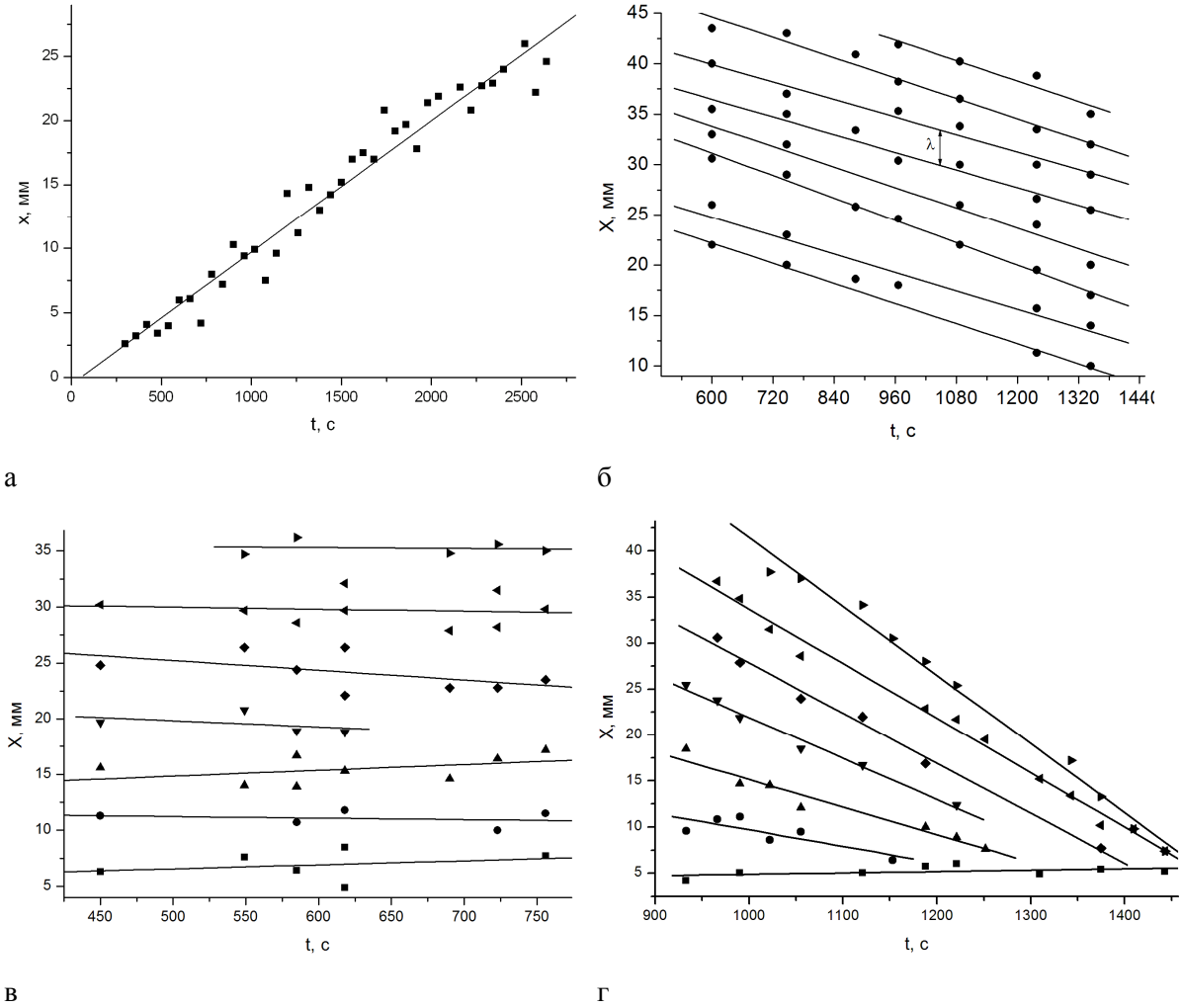

Рис. 1. Типичные картины локализации пластической деформации на площадке текучести в высокомарганцовистой стали (монокристалл) (а), на стадии линейного упрочнения в ванадиевом сплаве (б), на стадии параболического упрочнения по Тейлору в магниевом сплаве (в) и на стадии предразрушения в циркониевом сплаве (г). На графиках показаны положения очагов локализации в зависимости от времени

Результаты расчетов m_{eff} представлены в Таблице. В ней же приведены для каждого металла значения λ, V_{aw}, атомные массы, плотности ρ, ионные радиусы по Бокию и Белову r_{ion} (Рябин с соавторами, 1977), число электронов в элементарной ячейке N.

Таблица. Параметры исследованных материалов и характеристики автоволн локализации деформации в них

Металл	$\lambda\times10^3$	$V_{aw}\times10^5$	$\rho\times10^{-3}$	Атом. масса	r_{ion}	N	$m_{eff}\times10^{27}$	d_Ω	d_Ω/r_{ion}	$s\times10^2$
	м	м/с	кг/м^3	а.е.м.	нм		кг (а.е.м.)	нм		
Cu (B)	4.5	8.0	8.9	63	0.072	1	1.84 (1.1)	0.059	0.82	1.74
Zn (B)	7.6	4.85	7.1	65	0.071	2	1.8 (1.08)	0.063	0.89	1.67
Al (A)	7.2	11	2.7	27	0.051	3	0.84 (0.50)	0.068	1.33	1.87
In (A)	4.2	6.1	7.3	115	0.081	3	2.6 (1.6)	0.071	0.88	1.4
Zr (B)	5.5	3.5	6.5	91	0.079	4	3.44 (2.05)	0.081	1.02	2.24
Ti (B)	7	5	4.5	48	0.076	4	1.9 (1.1)	0.075	0.99	2.3
Pb (A)	5.3	6.6	11.3	207	0.084	4	1.89 (1.14)	0.055	0.65	0.55
V (B)	4.0	7.0	6.1	51	0.059	5	2.37 (1.42)	0.069	1.08	2.81
Nb (B)	4.0	4.5	8.6	93	0.069	5	3,68 (2.22)	0.075	1.09	2.39
Sn (A)	4.27	7.3	7.3	118	0.071	4	2.1 (1.28)	0.066	0,93	1.1
γ-Fe (B)	5.0	5.1	7.9	56	0.064	8	2.6 (1.76)	0.069	1.08	2.81
α-Fe (B)	4,3	5,2	7.9	56	0.064	8	2,96 (1.77)	0.072	1.12	3,0
Ni (B)	3.5	6.0	8.9	59	0.069	10	3.16 (1.89)	0.068	0.99	3.24

Видно, что эффективные массы всех исследованных материалов лежит в интервале $m_e << m_{eff} \leq$ 2 а.е.м., где $m_e = 5{,}5\times10^{-4}$ а.е.м. – масса электрона. Эффективные массы для различных металлов должны зависеть от их атомных масс M_{at}, поэтому была проведена нормировка и получены безразмерные массы

$$s = \frac{m_{eff}}{M_{at}}. \qquad (4)$$

Их значения также приведены в таблице. Наконец, были рассчитаны объемы, соответствующие эффективным массам $\Omega = m_{eff}/\rho$ и характерные расстояния $d_\Omega = \sqrt[3]{\Omega}$. Можно видеть, что они отличаются от ионных радиусов соответствующих металлов менее чем на 20%. Исключения составляют данные для свинца и алюминия, где отличия более 30%.

Для установления физической природы автоволн локализации пластической деформации предложена двухкомпонентная модель (см., например, Zuev (2001); Зуев с соавторами (2002). Суть ее состоит в том, что деформируемая среда разбивается на две подсистемы: динамическую и информационную. Динамическая подсистема включает в себя процессы движения дислокаций и их ансамблей, которые ответственны собственно за формоизменение. Роль информационной подсистемы играют сигналы акустической эмиссии, излучаемые при элементарных релаксационных актах пластичности. Взаимодействие этих подсистем вызывает согласно Кадомцеву (1997), самоорганизацию, в том числе и в виде автоволн различных типов.

В монографии Зуева с соавторами (2008) для математической реализации этой модели применительно к автоволнам локализации пластической деформации была использована система двух реакционно-диффузионных дифференциальных параболических уравнений.

$$\dot{\varepsilon} = f(\varepsilon,\sigma) + D_\varepsilon \varepsilon'', \qquad (5)$$

$$\dot{\sigma} = g(\sigma,\varepsilon) + D_\sigma \sigma''. \qquad (6)$$

Первое уравнение записано для скорости изменений в динамической подсистеме, а второе – в информационной. Нелинейные функции $f(\varepsilon,\sigma)$ и $g(\varepsilon,\sigma)$ описывают точечную кинетику и имеют смысл скоростей изменения деформации и напряжения на микроскопическом уровне. В частности $f(\varepsilon,\sigma)$ в (5) эквивалентна уравнению дислокационной кинетики Тейлора – Орована и может быть представлена как $\dot{\varepsilon} = b\rho_d V_d$ (b – вектор Бюргерса, ρ_d – плотность подвижных дислокаций, V_d – скорость их движения между стопорами). Как установлено еще в работе Альшица и Инденбома (1975), движения дислокаций между стопорами осуществляется вязким, надбарьерным образом и полностью контролируется сопротивлением фононного и электронного газов. При одинаковых температурах плотности фононного газа у различных металлов мало отличаются, зато плотности электронного газа могут быть весьма разными. Поэтому, хотя вклад электронного торможения дислокаций существенно ниже фононного, именно оно способно оказать влияние на изменение точечной кинетики в динамической подсистеме, описываемой функцией $f(\varepsilon,\sigma)$ в уравнении (5). Исходя из вышеприведенных соображений, эффективная масса автоволны локализации пластической деформации, как инерциальная характеристика, может зависеть от плотности электронного газа.

На рисунке 2 показано изменение безразмерной массы автоволны локализованной деформации в зависимости от количества валентных электронов у исследованных металлов. Видно, что для большинства из них она может быть интерполирована линейной функцией (1)

$$s = s_0 + \kappa N. \qquad (7)$$

Здесь s_0 = 1,5·10^{-2}, а κ = 0,18·10^{-2}, коэффициент корреляции составляет 0,94. Свободный член s_0 соответствует состоянию с $N = 0$ и, может трактоваться как вклад в эффективную массу автоволн фононного торможения, а второе слагаемое κN, очевидно связано с электронным газом. С увеличением электронной плотности этот член закономерно возрастает.

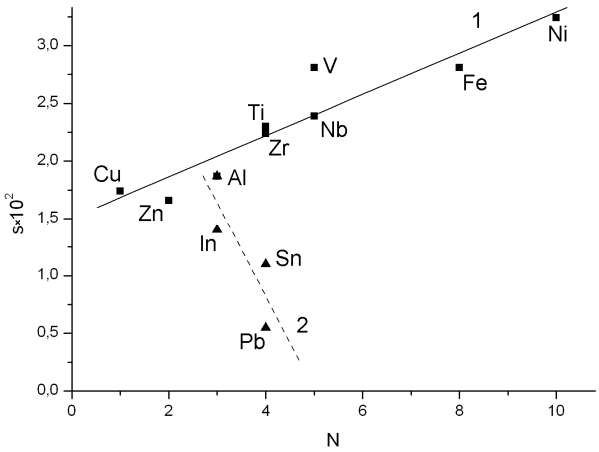

Рис. 2. Зависимость безразмерной массы автоволны локализованной деформации от числа валентных электронов

На рисунке 2 показано изменение безразмерной массы автоволны локализованной деформации в зависимости от количества валентных электронов у исследованных металлов. Видно, что для большинства из них она может быть интерполирована линейной функцией (1)

$$s = s_0 + qN \,. \tag{7}$$

Здесь s_0 = 1,5·10^{-2}, а q = 0,18·10^{-2}, коэффициент корреляции составляет 0,94. Свободный член s_0 соответствует состоянию с $N = 0$ и, может трактоваться как вклад в эффективную массу автоволн фононного торможения, а второе слагаемое qN, очевидно связано с электронным газом. С увеличением электронной плотности этот член закономерно возрастает.

В тоже время для трех металлов индия, олова и свинца эта закономерность не выполняется. Во-первых, у них безразмерные массы автоволн локализации деформации значительно меньше. Наименьшее значение s = 0,55·10^{-2} зафиксировано у свинца, что в четыре раза меньше чем у титана и циркония, имеющих одинаковое со свинцом число валентных электронов. Во-вторых, с ростом числа валентных электронов безразмерные массы автоволн локализации деформации в отмеченных металлах не увеличиваются, а падают (линия 2). Неслучайным, по-видимому, в этом ряду является и большое отличие у свинца характерного размера d_Ω от ионного радиуса r_{ion} (см. Таблицу).

В тоже время для трех металлов In, Sn и Pb эта закономерность не выполняется. Во-первых, у них безразмерные массы автоволн локализации деформации значительно меньше (разница достигает пятикратного размера). Во-вторых, с ростом числа валентных электронов масса не увеличивается, а падает (линия 2).

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В монографии Скотта (2007) указывается, что описание автоволновых процессов в активных следах требует учета автокаталитического и ингибирующего факторов, взаимодействующих друг с другом. При пластическом течении в качестве катализатора выступает деформация ε, а в качестве демпфера – напряжение σ, как это представлено в (5) и (6). В данных уравнениях члены со вторыми пространственными производными описывают диффузионное перераспределение деформаций и напряжений, то есть автокаталитического и ингибирующего фактора, поэтому их коэффициенты D_ε и D_σ должны иметь размерность коэффициента диффузии $м^2с^{-1}$. В работах Зуева с соавторами (2002, 2011) указано, что $D_\varepsilon \approx \lambda V_{aw}$ определяется процессами, протекающими на макроуровне, а $D_\sigma \approx dV_\perp$ – процессами микроуровня (здесь d – расстояние между наиболее плотно упакованными кристаллографическими плоскостями, $V_\perp$ – скорость поперечных звуковых волн). Но коэффициент D_σ определяет эффективную массу фонона как $m_{ph} = h/dV_\perp$, следовательно, эффективная масса $m_{eff} = h/\lambda V_{aw}$ может быть приписана другой квазичастице – автолокализону (Zuev and Barannikova, 2010). Параметрами автоволны определяются и другие характеристики автолокализона квазиимпульс $p = h/\lambda$ и энергия $E = hV_{aw}/\lambda$. Такой шаг соответствует стандартной концепции использования квазичастиц в теории твердого тела (Брандт и Кульбачинский, 2005). Дисперсионное соотношение квадратичного типа установленное, Зуевым с соавторами (2010) для автоволн локализации пластической деформации является дополнительным аргументом в пользу квантового подхода к описанию пластического течения. В настоящее время известны, по крайней мере, два макроскопических явления, которые могут быть описаны только рамках квантовых представлений, сверхтекучесть и сверхпроводимость. Оба они, также как и локализованное пластическое течение, имеют квадратичный спектр элементарных возбуждений, представляемых соответствующими квазичастицами. В монографии Зуева с сотрудниками (2008) весь процесс деформирования от упругости до разрушения представлен как результат конденсации соответствующих квазичастиц. Конденсация длинноволновых фононов порождает кванты пластического сдвига (дислокации), конденсация элементарных носителей пластического сдвига приводит к формированию различных самоорганизованных ансамблей разной степени сложности. На макроскопическом уровне конденсация квантов пластического сдвига приводит к образованию автоволн локализации пластической деформации, а, следовательно, к появлению автолокализонов. В свою очередь конденсация автолокализонов проявляется как коллапс автоволн локализованной деформации, приводящий к разрушению. Это может быть рассмотрено, как образование кванта разрушения – крекона, который был введен Фридманом с соавторами (1964).

В статье Зуева и Данилова (2011) утверждается, что эффективная масса автолокализона соответствует приблизительно двум эффективным массам фонона. Однако в таком случае нормированная (безразмерная) масса s должна быть одинакова для всех исследованных металлов. Результаты настоящей работы показывают, что этот справедливо только при усреднении данных по всем исследованным металлам. Следовательно, необходим учет электронной составляющей в кинетику деформационных дефектов.

Наконец, существенность вклада электронной подсистемы в описание природы атоволн локализации пластической деформации проявляется в том, что зависимость (7) не выполняется для свинца, олова и индия. По-видимому, это связано с тем, что эти металлы относятся к А-подгруппам периодической системы элементов Менделеева (см. Таблицу). Кроме них из исследованных материалов к А-подгруппе принадлежит еще алюминий. Выше отмечалось, что у алюминия, также как и у свинца, характерное квантовое расстояние d_Ω намного отличается ионного радиуса (см. Таблицу). Эти четыре металла образуют группу, где безразмерная масса

автолокализона уменьшается с ростом числа валентных электронов (рисунок 2). На настоящий момент времени объяснения данному явлению нет. Можно лишь указать, что у названных металлов валентные электроны относятся к p-слою, а у остальных – к d-слою. При заполнении p-слоя усиливаются металлоидные свойства, и в большей степени проявляется ковалентная составляющая межатомных связей, чем это происходит у d-металлов.

4. ВЫВОДЫ

1. Пластическое течение твердых тел представляет собой эволюцию закономерно сменяющих друг друга типов автоволн локализации пластической деформации. Тип автоволны определяется законом упрочнения, действующим на соответствующей стадии деформационной диаграммы.

2. Автоволны локализации пластической деформации являются квантовыми объектами, которым в соответствие может быть поставлены квазичастицы – автолокализоны. Характеристики автолокализонов эффективная масса, квазиимпульс и энергия определяются параметрами автоволн.

3. Эффективная масса автолокализонов зависит от фононной и электронной плотности. Она возрастает с увеличением количества свободных электронов в элементарной ячейке, то есть, числа валентных электронов у металлов с заполняемым d-слоем и уменьшается у металлов с заполняемым p-слоем.

4. Процесс деформирования твердого тела от упругости до разрушения можно представить как последовательную конденсацию соответствующих квазичастиц. Конденсация длинноволновых фононы приводит к образованию дислокаций – квантов пластического сдвига, которые затем конденсируются в автолокализоны – кванты автоволн локализации пластической деформации. На последнем этапе конденсация автолокализонов (коллапс автоволн локализации пластической деформации) приводит образованию кванта разрушения – крекона, обеспечивающего движение разрушающей трещины.

БЛАГОДАРНОСТИ:

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований, при частичной финансовой поддержке которого выполнена настоящая работа, грант № 11-08-00237а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Проблемы современной кристаллографии. (Москва) Наука; 1975: 218-38.

2. Брандт Н.Б., Кульбачинский В.А. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. (Москва) Физматлит; 2005.

3. Зуев Л.Б., Данилов В.И., Семухин Б.С. Пространственно-временное упорядочение при пластическом течении твердых тел. Успехи физ. мет. 2002; 3: 237-304.

4. Зуев Л.Б. Установившиеся волны локализованной пластичности при линейном законе упрочнения и соотношение де Бройля. Металлофизика и новейшие технологии 2004; 26: 361-70.

5. Зуев Л.Б., Данилов В.И., Баранникова С.А. Физика макролокализации пластического течения. (Новосибирск) Наука; 2008.

6. Зуев Л.Б., Хон Ю.А., Баранникова С.А. Дисперсия автоволн локализованного пластического течения. Журнал технической физики 2010; 80: 53-9.

7. Зуев Л.Б., Данилов В.И. Новая модель деформации и разрушения кристаллических твердых тел в диапазоне от нано- до монокристаллов. Химическая физика и мезоскопия 2011; 13: 544-53.

8. Кадомцев Б.Б. Динамика и информация. (Москва) Ред. УФН; 1997.

9. Морозов Е.М., Полак Л.С., Фридман Я.Б. О вариационных принципах развития трещин в твердых телах. Доклады АН СССР 1964; 146: 537-40.

10. Рябин В.А., Остроумов М.А., Свит Т.Ф. Термодинамические свойства веществ. Справочник. (Ленинград) Химия; 1977.

11. Скотт Э. Нелинейная наука. Рождение и развитие когерентных структур. (Москва) Физматлит; 2007.

12. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. (Москва) Мир; 1972. Honeycombe R.W.K. The Plastic Deformation of Metals. (New York) Edward Arnold (Publishers) Ltd.: 1968.

13. Billingsley J.P. The possible influence of the de Broglie momentum-wavelength relation on plastic strain “autowave” phenomena in “active materials” Int. J. Solids Structures 2001; 38: 4221-34.

14. Kuhlmann-Wilsdorf D. The low energetic structures theory of solid plasticity. In: Dislocations in Solids. Ed. by Nabarro F.R.N. and Duesbery M.S. (Amsterdam, Boston) Elsevier; 2002: 213-338.

15. Panin V.E. Plastic deformation and fracture of solids at the mesoscale level. Mat. Sci. Eng. A 2001; 319-321: 197-200.

16. Zuev L.B. Wave phenomena in low-rate plastic flow in solids. Ann. Phys. 2001; 10: 956-84.

17. Zuev L.B. The linear work hardening stage and de Broglie equation for autowaves of localized plasticity. Int. J. Solids Structures 2005; 42: 943-9.

18. Zuev L.B. On the waves of plastic flow localization in pure metals and alloys. Ann. Phys. 2007; 16: 286-310.

19. Zuev L.B., Danilov V.I., Barannikova S.A., Gorbatenko V.V. Autowave model of localized plastic flow of solids. Phys. Wave Phenom. 2009; 17: 66-75.

20. Zuev L.B., Barannikova S.A. Plastic flow macrolocalization: autowave and quasi-particle. J. Mod. Phys. 2010; 1: 1-8.