

УДК 669.3:539.89: 537.322.11 : 536.424.1

## ДИСКРЕТНІ МОДЕЛІ ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ ТВЕРДИХ ТІЛ ПІД ВПЛИВОМ ВИСОКОГО ГІДРОСТАТИЧНОГО ТИСКУ

Л. Ю. КОЗАК

*Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу*

З допомогою двовимірної дискретної моделі виявлено, що під впливом високого гідростатичного тиску кристалічна ґратка переходить зі стану стійкої рівноваги у стан нестійкої рівноваги, через що інтенсифікується пластична деформація.

**Ключові слова:** кристалічна ґратка, міжатомна відстань, гідростатичний тиск, нестійкість, пластична деформація.

Відомо, що тверді тіла, навіть особливо крихкі, під дією високого гідростатичного тиску (ВГТ) стають пластичними, а пластичні – ще пластичнішими [1–3]. Наприклад [3], за тисків 15000...25000 даН/мм<sup>2</sup> (~1500...2500 МПа) сталь 20 стає настільки пластичною, що її відносне звуження досягає 99%, броньованої сталі (НВ 234) – 58%, сірого чавуну – ~30%, кам'яної солі – 20%, мармуру – ~25%.

Вплив ВГТ пояснюють послабленням напружень розтягу, що перешкоджає утворенню розривів і збільшує пластичну деформацію [2, 4]. Металографічні та електронно-мікроскопічні дослідження, а також рентгеноструктурний аналіз виявили, що ВГТ поліпшує механічні властивості матеріалів. Пластичність крихких металів під тиском підвищується через усунення дефектності. У будь-якому реальному металі і сплаві завжди є дефекти, мікротріщини, пори тощо. Метал додатково ущільнюється внаслідок “заліковування” мікро- і макродефектів та макропор. ВГТ, зменшуючи напруження розтягу в тілі, гальмує зародження тріщин і їх поширення. Під час пластичної деформації промислових металів і сплавів ВГТ утруднює міжкристалічну деформацію, яка сприяє крихкості. В результаті може виникнути парадоксальне для звичайних умов явище – одночасне зростання пластичності і міцності матеріалу (збільшуються границі міцності і текучості, а також пластичне видовження) [4–7].

Особливу увагу за цих умов приділяють поведінці дислокацій. Вважають, що підвищення пластичності твердих тіл пов'язано з пришвидшенням розмноження дислокацій та процесів їх переповзання і анігіляції. ВГТ, посилюючи дислокаційну взаємодію, суттєво впливає на динаміку дислокацій [3, 8, 9]. Водночас вплив ВГТ не обмежується тільки структурними змінами. У більшості твердих тіл змінюються фазові діаграми і відбуваються поліморфні перетворення, а також міняється тип хімічного зв'язку [10, 11]. Наприклад, класичні напівпровідники германій і кремній під тиском 900 та 1200 МПа, відповідно, за кімнатної температури перетворюються у метал, у результаті чого підвищуються їх пластичність і електропровідність. У твердих тілах з низькою пластичністю та електропровідністю ВГТ обумовлює високі електропровідність та пластичність. А це означає, що в них виникає металічний тип хімічного зв'язку.

Слід зауважити, що дія ВГТ аналогічна впливу температури. Зі їх зміною пластичність твердих тіл міняється: поступово в деякому діапазоні і стрибкоподібно – за певних значень, при цьому непластичні тверді тіла стають пластичними,

---

*Контактна особа:* Л. Ю. КОЗАК, e-mail: lub53@ukr.net

що пов'язано з поліморфними перетвореннями. Під впливом тиску міняється структура, а за дії температури формуються нова кристалічна ґратка і тип хімічного зв'язку.

Раніше [12], використовуючи дискретну двовимірну модель кристалічної ґратки зі симетричним потенціалом міжатомної взаємодії, встановили, що зі зміною температури пластична деформація інтенсифікується через втрату стійкості ґратки, що обумовлено зміщенням атомів. Нижче, застосовуючи цю модель з асиметричним потенціалом, виявили, що перетворення непластичних твердих тіл у пластичні під впливом ВГТ також викликано втратою стійкості кристалічної ґратки і зменшенням міжатомної відстані.

**Методи і результати.** Використовували дискретну модель твердого тіла. Розглядали двовимірну кристалічну ґратку з квадратною коміркою (рис. 1), як і в праці [12], але сили міжатомної взаємодії описували асиметричним потенціалом (рис. 2). Рівноважну відстань до найближчих сусідів атома приймали  $r_{01}$ , а до других сусідів – близькою до  $r_{02} = r_{01}\sqrt{2}$  (рис. 2b). Така конфігурація кристала проти сферично-симетричної забезпечує високу стійкість ґратки. Вважали, що потенціал міжатомної взаємодії впливає на перших та других сусідів і обмежується відстанню  $r = 2r_{10}$ . Енергія зв'язку між двома атомами

$$U = \frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}, \quad (1)$$

де  $A, B$  – константи;  $r$  – відстань між атомами;  $m$  і  $n$  – показники степеня для енергії сил притягання і відштовхування.

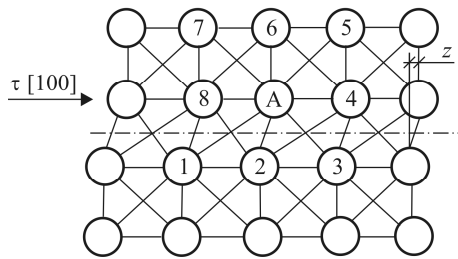


Рис. 1. Fig. 1.

Рис. 1. Зсув атомної площини у двовимірній моделі кристала.

Fig. 1. Shear of atomic plane in the two-dimension model of a crystal.

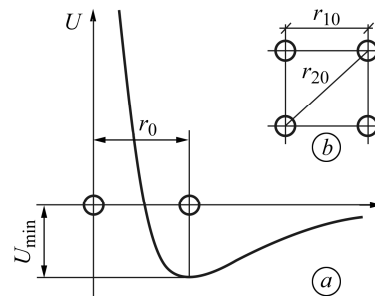


Рис. 2. Fig. 2.

Рис. 2. Залежність енергії взаємодії  $U$  між атомами від відстані  $r$  (a) і рівноважна відстань між атомом та його першими і другими сусідами (b).

Fig. 2. Dependence of energy of atomic interaction  $U$  between atoms at distance  $r$  (a) and equilibrium distance between an atom and its first and second neighbours (b).

Для встановлення якісних характеристик моделі величини у рівнянні (1) вибрали довільно, але з близькими значеннями, характерними для реальних кристалів. Вважали константу  $A$  і показник степеня  $m$  рівними одиниці, а показник степеня  $n = 8$ . Рівноважна відстань між атомом і його першим сусідом  $r_{10} = 2,5 \text{ \AA}$ , а між ним і його другим сусідом  $r_{20} = 3,4 \text{ \AA}$ .

Потенціальну енергію кристала обчислювали, сумуючи енергії  $N$  атомів, з яких він складається:

$$E_k = (1/2) \sum_{i,j=1}^N U(\bar{r}_i - \bar{r}_j), \quad (2)$$

де  $U(\bar{r}_i - \bar{r}_j)$  – енергія взаємодії пари атомів з координатами  $r_i$  і  $r_j$ .

Міжатомну відстань визначали з умови мінімальної потенціальної енергії кристала  $r_{10} = r_0 = 2,5 \text{ \AA}$ , тобто такої, що є рівноважною відстанню для парної взаємодії атомів. Вплив високого гідростатичного тиску для двовимірної моделі кристала імітували, зменшуючи міжатомну відстань до  $r = 2,42 \text{ \AA}$ .

Використовуючи модель двовимірного кристала (рис. 1), досліджували зсув атомних площин. При цьому розраховували зміну потенціальної енергії атома А. Вважали, що він рухається в напрямі [100] одночасно зі сусідами 4, 5, 6, 7, 8, а також, що зі зміщенням його відстань змінюється тільки відносно атомів 1,2,3, тому зміна його потенціальної енергії обумовлена взаємодією тільки з цими трьома атомами. Зміну енергії зсуву атома А за малих деформацій розраховували (рис. 3) для трьох випадків: за відсутності ВГТ (крива 1), відстань між атомами  $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$ ; під його дією, що викликає стискання кристалічної ґратки зі зменшенням відстані між атомами до  $r = 2,45 \text{ \AA}$  (крива 2) та  $r = 2,42 \text{ \AA}$  (крива 3).

Потенціальна енергія за зміщення атома А разом з атомами площини в кристалографічному напрямі [100] (крива 1) підвищується за відсутності гідростатичного тиску. За дії ВГТ потенціальна енергія атома А з його зміщенням знижується (криві 2 і 3), що свідчить про втрату стійкості до зсувних деформацій. Зі зростанням тиску дестабілізація кристалічної ґратки посилюється, що проявляється у збільшенні “горба” на дні кривої 3.

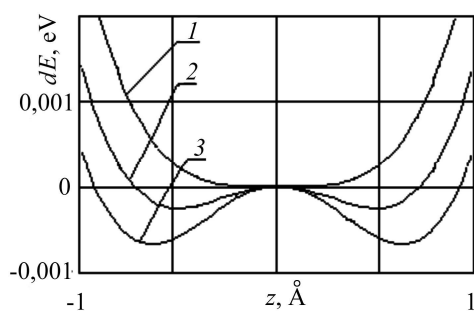


Рис. 3. Зміна потенціальної енергії  $dE$  атома А за зсуву  $z$  у напрямі [100] за нормальних умов (крива 1) та під гідростатичним тиском (криві 2 і 3).

Fig. 3. Variation of the potential energy  $dE$  of atom A under shear  $z$  in the direction [100] in normal conditions (curve 1) and under hydrostatic pressure (curves 2 and 3).

Отже, стійкість двовимірної ґратки з квадратною коміркою залежить від гідростатичного тиску. Для нашої моделі з підвищенням тиску стійка до зсувної деформації кристалічна ґратка (рис. 3, крива 1) переходить у стан нестійкої рівноваги (криві 2 і 3).

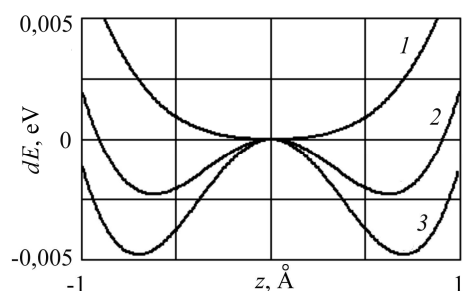


Рис. 4. Зміна потенціальної енергії  $dE$  за зсуву  $z$  атома А у напрямі [100] за різних температур: 1 –  $T_1$ ; 2 –  $T_2$ ; 3 –  $T_3$ ;  $T_3 > T_2 > T_1$  [12].

Fig. 4. Variation of potential energy  $dE$  of atom A under shear  $z$  in the direction [100] for different temperatures: 1 –  $T_1$ ; 2 –  $T_2$ ; 3 –  $T_3$ ;  $T_3 > T_2 > T_1$  [12].

Раніше [12] встановили, що пластична деформація за низьких температур є наслідком втрати стійкості двовимірної кристалічної ґратки зі сферично-симетричним потенціалом міжатомної взаємодії. Цей висновок стосувався лише ґраток з таким або близьким до нього потенціалом міжатомної взаємодії. Гідростатичний тиск впливає на стійкість кристалічної ґратки з асиметричним потенціалом так само, як і температура на стійкість ґратки зі сферично-симетричним потенціалом міжатомної взаємодії (рис. 4), змінюючи положення їх атомів. Внаслідок зміщення атомів з положення з мінімальною енергією ґратка переходить у стан нестійкої рівноваги.

Незначні зовнішні зусилля викликають зсуви атомних площин (атоми переміщуються в положення з мінімальною енергією), в результаті чого відбувається пластична деформація за механізмами ковзання чи двійникування.

Слід зауважити, що вплив температури і тиску на пластичність обумовлений зміщенням атомів у кристалічній ґратці. В обох випадках при зменшенні відстані між атомами пластичність підвищується. У двовимірній моделі кристалічної ґратки це проявляється у збільшенні “горба” на дні потенціальної ями як за підвищення гідростатичного тиску (рис. 3), так і з падінням температури (рис. 4).

## ВИСНОВКИ

Причиною перетворення твердих тіл у пластичні під високим гідростатичним тиском є перехід кристалічної ґратки у стан нестійкої рівноваги внаслідок зменшення міжатомної відстані.

*РЕЗЮМЕ.* С помощью двухмерной дискретной модели выявлено, что при воздействии высокого гидростатического давления устойчивая кристаллическая решетка переходит из состояния устойчивого равновесия в неустойчивое, вследствие чего интенсифицируется пластическая деформация.

*SUMMARY.* Using the two-dimensional model of crystal it was shown that the crystal lattice transformed from the stable to unstable equilibrium state under high pressure influence. As a result of such transformation the intensity of the processes of plastic deformation increased.

1. *Пью Х.* Механические свойства материалов под высоким давлением. – М.: Мир, 1973. – 296 с.
2. *Випробування* малопластичних матеріалів в умовах гідростатичних тисків / В. Л. Калюжний, О. В. Калюжний, В. В. Піманов, С. М. Паляничко // Вісник Нац. техн. ун-ту “Київський політехнічний інститут”. Сер. Машинобудування. – 2009. – № 57. – С. 88–91.
3. *Карпенко Г. В.* Про фізико-хімічну механіку металів. – К.: Наук. думка, 1973. – 176 с.
4. *Белошенко В. А., Варюхин В. Н., Спусканюк В. З.* Теория и практика гидроэкструзии. – К.: Наук. думка, 2007. – 248 с.
5. *Kenneth N. O., Shekarau Y. A., and Danjuma S. Y.* Effects of pressure on the mechanical properties and microstructure of die cast aluminum A380 alloy // J. Minerals and Mat. Characterization and Eng. – 2014. – 2, № 3. – P. 248–258.
6. *Obiekea K., Aku S. Y., and Yawas D. S.* Influence of pressure on the mechanical properties and grain refinement of die cast aluminum A1350 alloy // Pelagia Research Library. Інтернет джерело: [www.pelagiaresearchlibrary.com](http://www.pelagiaresearchlibrary.com)
7. *Effects of high pressure heat treatment on microstructure and micro-mechanical properties of Cu<sub>77.96</sub>Al<sub>22.04</sub> alloy / Wu Lailei, Liu Lin, Liu Jianhua, and Zhang Ruijun // Mat. Transact. – 2012. – 53, № 3. – P. 504–507.*
8. *Малыгин Г. А.* Влияние гидростатического давления на аннигиляцию винтовых дислокаций поперечным скольжением в щелочно-галлоидных кристаллах // Физика твердого тела. – 1992. – 34, № 10. – С. 3002–3010.
9. *Малашенко В. В., Перетолчина Г. Б., Улицкая Н. Ю.* Динамика дислокаций в гидростатически сжатых кристаллах, содержащих дислокационные диполи // XX Петербургские чтения по проблемам прочности, 2012, 10–12 апреля. – Ч. 2. – С. 223–225.
10. *Тонков Е. Ю.* Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. – М.: Наука, 1979. – 192 с.
11. *Болдырев В. В.* Механохимия и механическая активация твердых веществ // Успехи химии. – 2006. – 75, № 3. – С. 203–216.
12. *Козак Л. Ю.* Дискретні моделі мартенситного перетворення та двійникування в металах // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2012. – 48, № 5. – С. 83–87.  
(*Kozak L. Yu.* Discrete models of martensitic transformation and twinning in metals // Materials Science. – 2013. – 48, № 5. – P. 647–652.)

Одержано 01.10.2014