

В. С. ИВАНОВА

СПЕКТРЫ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ АТОМНЫХ ПЕРЕСТРОЕК В МЕТАЛЛАХ

(Представлено академиком Н. В. Агеевым 12 VII 1974)

Движение точечных дефектов, границ блоков или зерен, движение дислокаций, трещины и т. п. — процессы, требующие перестройки атомной структуры кристалла в локальных объемах. Различные виды атомной перестройки связаны с преодолением — под действием термических флуктуаций — потенциальных барьеров. Современные представления о механизмах термофлуктуационного преодоления потенциальных барьеров изложены в (1).

Ранее К. А. Осиповым (2) высказана идея о близкой связи между активационными процессами в металлах и явлениями плавления и показано наличие тесной связи между энергией активации различных процессов с величиной q , характеризующей абсолютное изменение термодинамического потенциала (свободной энергии Гиббса) при нагреве металла от 0°K до температуры плавления T_s .

Величина q , как оказалось, близко соответствует экспериментальным значениям энергии активации движения моновакансий в чистых металлах и полупроводниках (3). К. А. Осиповым предложено (2) следующее эмпирическое соотношение между q и энергией активации Q различных процессов:

$$Q = Nq, \quad (1)$$

где N — число активируемых атомов в группе. Вероятно, более точно следует считать, что величина N характеризует, во сколько раз возрастает активационный объем данного элементарного процесса по сравнению с активационным объемом, соответствующим минимальной энергии активации q .

Вследствие дискретности кристаллической решетки активационный объем изменяется скачкообразно при изменении элементарного процесса атомной перестройки, а это, в свою очередь, должно приводить к появлению спектра энергий активаций элементарных процессов. Примем, что с учетом дискретного характера изменения N соотношение (1) может быть представлено в виде (4)

$$Q_{m-1}/Q_m = \Delta_0^{1/n}; \quad (2)$$

здесь $\Delta_0 = q/Q_{\max}$ — постоянная, характеризующая отношение экстремальных значений энергии активации, достигаемых при $N=1$ и $N=N_{\max}$ соответственно, т. е. $\Delta = 1/N_{\max}$, Q_{m-1} и Q_m — соответственно предыдущее и последующее значение энергии активации в спектре энергий активации элементарных процессов, n — целое число, изменяющееся по закону геометрической прогрессии ($n=2, 4, 8, 16$ и т. д.), характеризующее скачкообразное изменение числа активированных атомов в группе при изменении элементарного процесса атомной перестройки (в отсутствие других взаимосвязанных процессов).

Таким образом, в данном решении q принято за начальный уровень активации, а последующие уровни в соответствии с (2) определяются це-

почной:

$$Q_1 = q \rightarrow Q_I = q \Delta_0^{-1/2} \rightarrow Q_{III} = Q_{II} \Delta_0^{-1/4} \rightarrow Q_{IV} = Q_{III} \Delta_0^{-1/8} \rightarrow \dots Q_{\max} = q \Delta_0^{-1}. \quad (3)$$

Это позволяет рассчитывать дискретные уровни энергии активации различных элементарных процессов в отсутствие других взаимосвязанных процессов. Однако такой расчет требует знания величины Δ_0 .

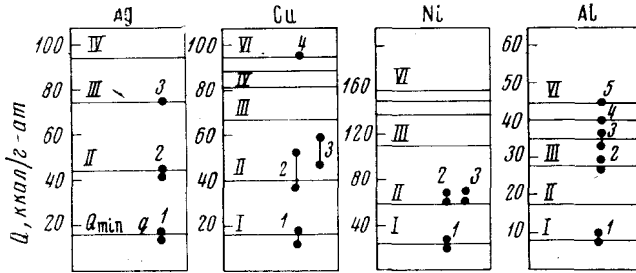


Рис. 1. Расчетный спектр энергии активации элементарных процессов атомных перестроек и экспериментальные данные (2, 8) для серебра, меди, никеля и алюминия: 1 — энергия активации движения моновакансий, 2 — объемная самодиффузия, 3, 4 — энергия активации ползучести, 5 — вязкое течение по границам зерен

Величина Δ_0 может быть рассчитана из следующих соображений. В соответствии с (5) для термофлуктуационного акта, связанного с преодолением сил связи в направлении сдвига, требуется минимальная энергия, выражаемая соотношением

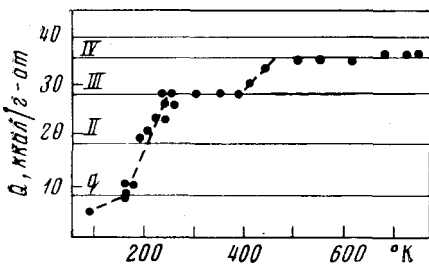


Рис. 2. Расчетный спектр энергии активации элементарных процессов атомных перестроек для алюминия и экспериментальные данные по зависимости энергии активации установившейся ползучести от температуры (9).

$$Q_{\max} = q \Delta_0^{-1} = 44,0 \frac{\text{ккал}}{\text{г-ат}}$$

где V_a^{\max} — максимальный активационный объем элементарного процесса, связанного с термофлуктуационным преодолением прочности межатомной связи на отрыв (σ_T^{\max}).

Разделив (4) на (5) и приняв, что отношение экстремальных активационных объемов пропорционально отношению G/E , получим

$$\Delta_0 = \frac{q}{Q_{\max}} = \left[\frac{\tau_T}{\sigma_T^{\max}} \right]^2. \quad (6)$$

С учетом ранее полученных соотношений для σ_T^{\max} и τ_T (6, 7) будем иметь

$$\Delta_0 = \frac{L_m G}{H_0 E}; \quad (7)$$

здесь L_m — скрытая теплота плавления; H_0 — изменение теплосодержания металла при нагреве металла от 0°K до T_s , G — модуль сдвига, E — модуль упругости.

Поскольку в соотношение (7) входят известные физические константы, то можно рассчитать постоянную Δ_0 , что позволяет рассчитать и спектр энергий активации на основе соотношения (2). Расчетные значения Δ_0 и q , необходимые для вычисления энергии активации элементарных процессов различных металлов, приведены ниже:

	Fe	Cr	Nb	Mo	W	Al	Ag	Cu	Ni	Ti	Pb	Zn
q , ккал/г-ат (2)	11,8	28,2	46,7	44,5	64,7	7,8	16,6	15,9	22,8	11,5	8,0	6,0
Δ_0	0,10	0,10	0,12	0,12	0,13	0,18	0,13	0,15	0,15	0,13	0,10	0,13

На рис. 1 и 2 проведено сопоставление расчетных спектров энергии активации с экспериментальными значениями энергии активации различных элементарных процессов. Из рис. 1 следует, что экспериментальные значения по энергии активации объемной самодиффузии соответствуют II уровню в спектре (за исключением алюминия, для которого экспериментальные данные по энергии активации объемной самодиффузии соответствуют III уровню). Характерно также, что плато на температурной зависимости энергии активации ползучести совпадают с дискретными уровнями энергии активации (рис. 2). Это означает, что энергия активации процесса ползучести перестает зависеть от температуры в том случае, когда процесс контролируется одним единственным элементарным механизмом.

Приведенные данные подтверждают наличие спектра энергии активации элементарных процессов.

Автор благодарит чл.-корр. АН СССР И. И. Новикова, проф. К. А. Осипова, К. П. Гурова за ценные замечания, сделанные при обсуждении данной работы.

Институт металлургии им. А. А. Байкова
Академии наук СССР
Москва

Поступило
4 VII 1974

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ А. Н. Орлов, В. Л. Инденбом, Сб. Термически активированные процессы в кристаллах. Новости физики твердого тела, в. 2, М., 1973. ² К. А. Осипов, Вопросы теории жаропрочности металлов и сплавов, Изд. АН СССР, 1960, стр. 281, ил. 81. ³ К. А. Осипов, ДАН, т. 208, № 5, 1065 (1973). ⁴ В. С. Иванова, Л. Р. Богвина, Изв. АН СССР, Металлы, № 6, 26 (1972). ⁵ К. А. Осипов, ДАН, т. 213, № 1, 138 (1973). ⁶ В. С. Иванова, Усталостное разрушение металлов, 1963, стр. 272, ил. 121. ⁷ В. С. Иванова, Сб. Химия металлических сплавов, «Наука», М., 1973, стр. 196. ⁸ К. А. Осипов, Сб. Химия металлических сплавов, «Наука», 1973, стр. 185. ⁹ J. E. Dorn, Creep and Recovery. Proc., A Seminar on Creep and Recovery of Metals, Cleveland, Ohio, 1957, p. 255.