

01:05:08

©1994 г.

## ДЕФЕКТ МОДУЛЯ ЮНГА ЩЕЛОЧНОГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ, НАХОДЯЩИХСЯ В УЛЬТРАЗВУКОВОМ ПОЛЕ

*В.В.Благовещенский, Д.Л.Леготин, Н.А.Тяпунина*

Определяется вклад в дефект модуля Юнга дислокационной деформации щелочногалоидных кристаллов, подвергающихся действию ультразвука в килогерцевом диапазоне частот, методом ЭВМ моделирования. Предложенные модели, несмотря на принятые упрощения, отражают особенности эволюции дислокационной структуры под действием ультразвука. Дается интерпретация экспериментально наблюдаемых особенностей зависимости дефекта модуля Юнга щелочногалоидных кристаллов от амплитуды ультразвука. Установлены механизмы дислокационной неупругости, являющиеся определяющими при различных амплитудах ультразвука.

### Введение

Дефект модуля Юнга, наблюдаемый в кристаллах при ультразвуковой вибрации, определяется вкладом дислокационной деформации и нагревом образцов вследствие диссипации механической энергии. Выделить вклад дислокационной деформации в дефект Модуля Юнга экспериментальными методами достаточно трудно. Теоретических расчетов для больших амплитуд ультразвука не существует. Получившее в настоящее время широкое развитие моделирование на ЭВМ дислокационных процессов оказывается наиболее результативным и удобным способом решения подобных задач.

Данная работа посвящена определению вклада в дефект модуля Юнга дислокационной деформации щелочногалоидных кристаллов, подвергающихся действию ультразвука в килогерцевом диапазоне частот методом ЭВМ моделирования. В основу расчетов были положены компьютерные модели, предложенные в [1,2], а также оригинальные.

### Модель для расчета дефекта модуля Юнга

Связь дефекта модуля Юнга с дислокационной деформацией в случае знакопеременной нагрузки выражается соотношением [3]

$$\frac{\Delta E_d}{E} = \frac{\langle \varepsilon_d \rangle}{\langle \varepsilon \rangle},$$

где  $\langle \varepsilon_d \rangle$  — средняя дислокационная деформация за период внешнего знакопеременного напряжения,  $\langle \varepsilon_e \rangle$  — средняя за период упругая деформация.

Дислокационная деформация, обусловленная смещением  $u$  элемента прямолинейной дислокации длиной  $l$ , находящегося в объеме  $V$ ,

$$\varepsilon_d = \frac{blu}{V},$$

где  $b$  — вектор Бюргерса.

В случае когда отрезок дислокации закреплен на концах, под воздействием внешнего напряжения он будет выгибаться и каждый элемент этого сегмента будет иметь свое смещение  $u(\lambda)$  ( $\lambda$  — безразмерный параметр вдоль линии дислокации). Тогда для одного сегмента будем иметь

$$\varepsilon_d = \frac{bl\langle u \rangle}{V} = \frac{bl}{V} \frac{1}{l} \int_0^l u(\lambda) d\lambda. \quad (1)$$

Здесь среднее смещение сегмента

$$\langle u \rangle = \frac{1}{l} \int_0^l u(\lambda) d\lambda,$$

которое может быть выражено через площадь, заматаемую сегментом при своем движении  $\langle u \rangle = S/l$ .

Для нескольких петель одинаковой длины выражение (1) будет иметь вид

$$\varepsilon_d = \frac{bL}{V} \frac{1}{l} \int_0^l u(\lambda) d\lambda = \frac{b\rho}{l} \int_0^l u(\lambda) d\lambda,$$

где  $\rho = L/V$  — суммарная длина дислокаций  $L$  в единице объема или плотность дислокаций.

Учитывая распределение дислокационных сегментов по длинам с плотностью функции распределения  $N(l)$  и зависимость смещения  $u$  от времени, будем иметь

$$\varepsilon_d(t) = \frac{b\rho}{l_0} \int_{l_{\min}}^{l_{\max}} \int_0^l u(\lambda, t) N(l) d\lambda dl.$$

Здесь  $l_{\min}$  и  $l_{\max}$  — минимальная и максимальная длины петель в распределении,  $l_0$  — средняя длина петли. Средняя за период  $T$  дислокационная деформация  $\langle \varepsilon_d \rangle$  будет

$$\langle \varepsilon_d \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \varepsilon_d(t) dt = \frac{b\rho}{l_0 T} \int_{l_{\min}}^{l_{\max}} \int_0^T \int_0^l u(\lambda, t) N(l) d\lambda dt dl. \quad (2)$$

Формула для расчета дефекта модуля Юнга с учетом (2) принимает вид

$$\frac{\Delta E_D}{E} = \frac{\langle \varepsilon_d \rangle}{\langle \varepsilon_e \rangle} = \frac{\langle \varepsilon_d \rangle \sqrt{2}}{\varepsilon_e^0} = \frac{\sqrt{2} b \rho}{\varepsilon_e^0 l_0 T} \int_{l_{\min}}^{l_{\max}} \int_0^T \int_0^l u(\lambda, t) N(l) d\lambda dt dl, \quad (3)$$

где  $\varepsilon_e^0$  — амплитуда упругой деформации.

Расчет площади  $S(t) = \int_0^l u(\lambda, t) d\lambda$ , заматаемой дислокационным сегментом длиной  $l$ , проводился с использованием модели, описанной в [1,2].

Поведение дислокационного сегмента под действием ультразвука существенно различно в различных интервалах амплитуд напряжения. Так, в интервале амплитуд  $\sigma^0 < \sigma_*^0$  дислокационный сегмент совершает докритические колебания: его размер не превосходит критического (радиус прогиба меньше  $l/2$ ) [2,4]. В интервале  $\sigma_*^0 - \sigma_f^0$  сегмент совершает закритические колебания. В течение первого полупериода он преодолевает критическую конфигурацию, а после смены знака напряжения возвращается к исходному состоянию. Образование замкнутой дислокационной петли по механизму Франка-Рида не происходит, а генерация дислокационных петель реализуется по другому механизму [4]. Максимальная заматаемая дислокационным сегментом площадь увеличивается при этом равномерно в 15 раз, по сравнению с докритическими колебаниями.

При амплитудах ультразвука  $\sigma^0 > \sigma_f^0$  дислокационный источник генерирует дислокационные петли по механизму Франка-Рида [2] в течение первого полупериода. Максимальная заматаемая петлями площадь в таком режиме по сравнению с режимом докритических колебаний увеличивается в 1000 раз.

Дополнительные исследования показали, что при смене знака напряжения происходит аннигиляция дислокационных петель, каким бы механизмом они не были генерированы, если они остаются в своей первоначальной плоскости скольжения. Систему возникающих и исчезающих с течением времени петель будем в дальнейшем называть облаком виртуальных дислокаций. Анализ поведения дислокационных источников под действием ультразвука показал, что начиная с амплитуды  $\sigma_*^0$  каждый источник окружен облаком виртуальных дислокаций. В этом режиме интенсивного накопления дислокаций не происходит, так как генерированные источником дислокации остаются в первоначальной плоскости скольжения.

Эффективное размножение дислокаций при знакопеременной нагрузке происходит при участии поперечного скольжения, когда расширяющиеся петли на участках с винтовой ориентацией переходят в плоскость, параллельную плоскости источника [5]. Размножение дислокаций по этому механизму возможно при таких амплитудах ультразвука, при которых источник Франка-Рида генерирует несколько замкнутых концентрических петель в течение одного полупериода. В данной модели принималось, что в момент времени, когда испускается вторая петля, первая петля образует в параллельной плоскости источник, аналогичный исходному. При образовании третьей петли вторая петля образует третий источник, и т.д.

## Зависимость дефекта модуля Юнга от амплитуды деформации при различных распределениях дислокационных петель по длинам

Сначала был исследован вклад в дефект модуля Юнга от сегментов различной длины, т.е. в качестве функции распределения в формуле (3) бралась  $\delta$ -функция. Рассчитанные по формуле (3) зависимости дефекта модуля Юнга от длины сегмента при различных амплитудах внешнего напряжения представлены на рис. 1. Здесь плотность подвижных дислокаций принималась равной  $\rho = 10^6 \text{ см}^{-2}$ . Из рис. 1 видно, что при малых амплитудах ультразвука основной вклад в дефект модуля Юнга дают сегменты большой длины (4–5 мкм). При увеличении амплитуды в действие включаются более короткие сегменты и при амплитудах  $\sigma^0 = 8\text{--}14 \text{ МПа}$  вклад сегментов длиной 0.6–2 мкм превышает вклад более длинных сегментов. На первый взгляд это кажется непонятным, так как площади, замечаемые короткими сегментами во всем диапазоне исследованных амплитуд, меньше площадей, замечаемых длинными сегментами. Такой ход зависимостей

$$\frac{\Delta E_D}{E}(l)$$

объясняется тем, что при одной и той же плотности дислокаций коротких сегментов будет больше, чем длинных.

Зависимость  $(\delta E_d)/E$  от амплитуды деформации  $\varepsilon^0$  при  $\delta$ -функции распределения источников по длинам для случая  $l = 5 \text{ мкм}$  представлена на рис. 2. Из этого рисунка видно, что наклон кривой меняется

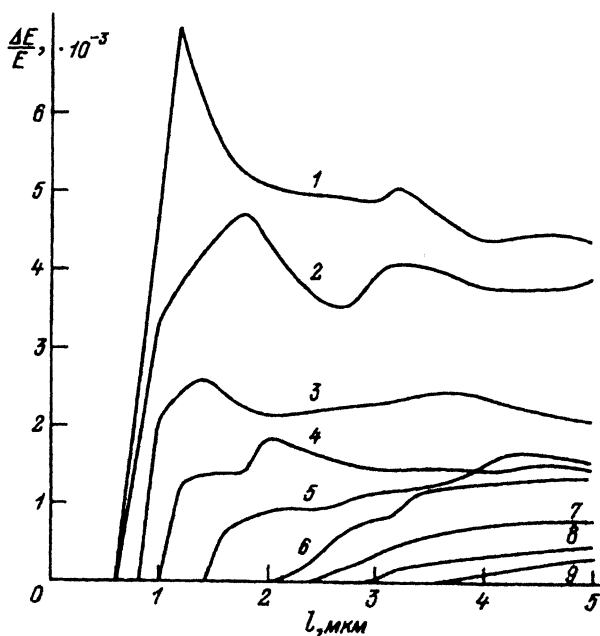


Рис. 1. Зависимости дефекта модуля Юнга от длины сегмента при различных амплитудах.

$\sigma^0$ : 1 — 14, 2 — 12, 3 — 10, 4 — 8, 5 — 6, 7 — 3.5, 8 — 3, 9 — 2.5 МПа.

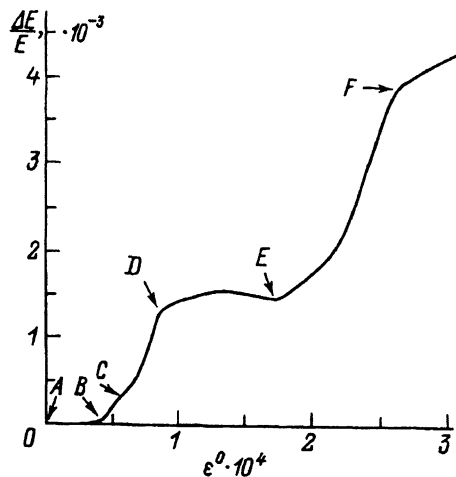


Рис. 2. Зависимость дефекта модуля Юнга от амплитуды деформации при  $\delta$ -функции распределения источников по длинам  $l = 5$  мкм.

при определенных амплитудах (точки A–F). Эти точки соответствуют амплитудам, при которых менялся характер движения и размножения дислокаций. Участок AB соответствует области амплитуд  $0 - \sigma_*^0$ . Заметаемая площадь мала и в данном масштабе не отличается от нуля. При амплитудах, соответствующих участку BC, начинаются образование виртуального облака дислокаций и испускание петель по механизму, отличному от механизма Франка–Рида. На участке CD происходит размножение дислокаций по механизму Франка–Рида. В данной области амплитуд источник генерирует одну дислокационную петлю в течение первого полупериода действующего напряжения. Во втором полупериоде она аннигилирует. Изменение наклона кривой при дальнейшем увеличении амплитуды (участок DE) определяется началом размножения дислокаций, связанным с поперечным скольжением. В этой области амплитуд за период образуется не более одного дополнительного источника. На участке EF увеличивается число дислокационных источников, образующихся при размножении за один период, поэтому суммарная заметаемая площадь резко возрастает, а значит, возрастает и дефект модуля.

Анализируя полученные зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\epsilon^0),$$

можно заключить, что дефект модуля Юнга, обусловленный дислокационной деформацией, чувствителен к поведению дислокационных сегментов и определяется их эволюцией под действием знакопеременной нагрузки.

В реальных кристаллах обычно существуют дислокационные сегменты различной длины. Распределение сегментов в виде  $\delta$ -функции позволяет рассчитать дефект модуля Юнга, обусловленный колебаниями сегментов каждой длины в отдельности, но не дает представления о зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\epsilon^0),$$

обусловленной всем набором существующих в кристалле источников.

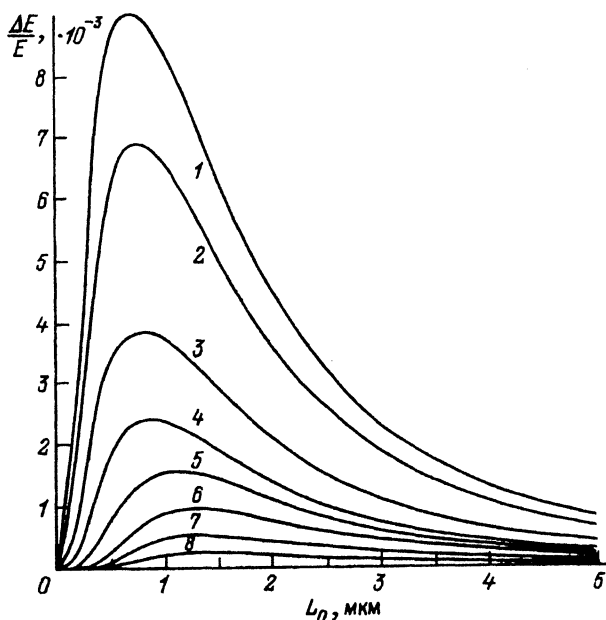


Рис. 3. Влияние выбора длины сегмента  $l_0$  на дефект модуля Юнга. 1-8 — то же, что и на рис. 1.

Поэтому на следующем этапе дефект модуля Юнга рассчитывался с более реальным распределением

$$N(l) = N_0 \frac{l}{l_0^2} \exp\left(-\frac{l}{l_0}\right), \quad (4)$$

где  $N_0$  — нормировочный множитель.

Влияние выбора длины сегмента  $l_0$  на дефект модуля Юнга показано на рис. 3, где приведены зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(l_0),$$

рассчитанные с учетом распределения (4) для разных амплитуд относительной деформации  $\varepsilon_0$ . Видно, что при каждой амплитуде существует такое значение  $l_0$ , при котором дефект модуля максимален. При увеличении амплитуды деформации максимум зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(l_0),$$

сдвигается в область меньших величин  $l_0$ . Это связано с тем, что при увеличении амплитуды деформации уменьшается длина сегментов, начиная с которой при данных условиях источники могут образовывать облака виртуальных дислокаций. Полученные зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(l_0),$$

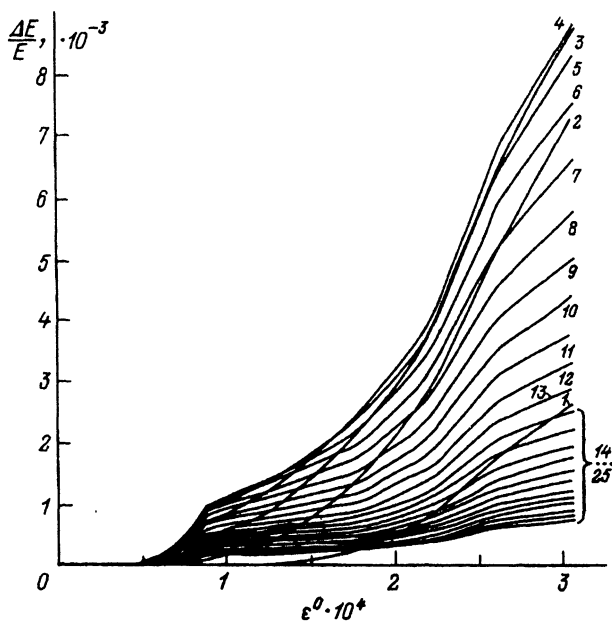


Рис. 4. Зависимости  $\Delta E/E$  от амплитуды деформации для разных значений  $l_0$ . 1-25 —  $l_0 = 0.2, 0.4, 0.6, \dots, 4.8, 5$  мкм.

показали, что основной вклад в дефект модуля Юнга при всех амплитудах дают сегменты длиной 0.6–2 мкм. Зависимости  $(\Delta E_d)/E$  от амплитуды относительной деформации для разных значений  $l_0$  приведены на рис. 4. Эти зависимости описывают вклад в дефект модуля всего ансамбля сегментов различной длины, находящихся в кристалле. Казалось бы, особые точки, связанные с появлением виртуальных дислокационных облаков вокруг источников и их эволюций, должны были в данном случае сгладиться, так как источник каждой длины имеет свои значения пороговых амплитуд. Однако на полученных зависимостях

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\varepsilon^0),$$

эти точки можно различить. На этом же рисунке хорошо видно влияние выбора значения наиболее вероятной длины сегмента на ход зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\varepsilon^0),$$

и величину максимального дефекта модуля. Так, при  $l_0 = 0.6-0.8$  мкм зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\varepsilon^0),$$

очень крутые и значения дефекта модуля здесь самые большие. При увеличении  $l_0$  зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\varepsilon^0)$$

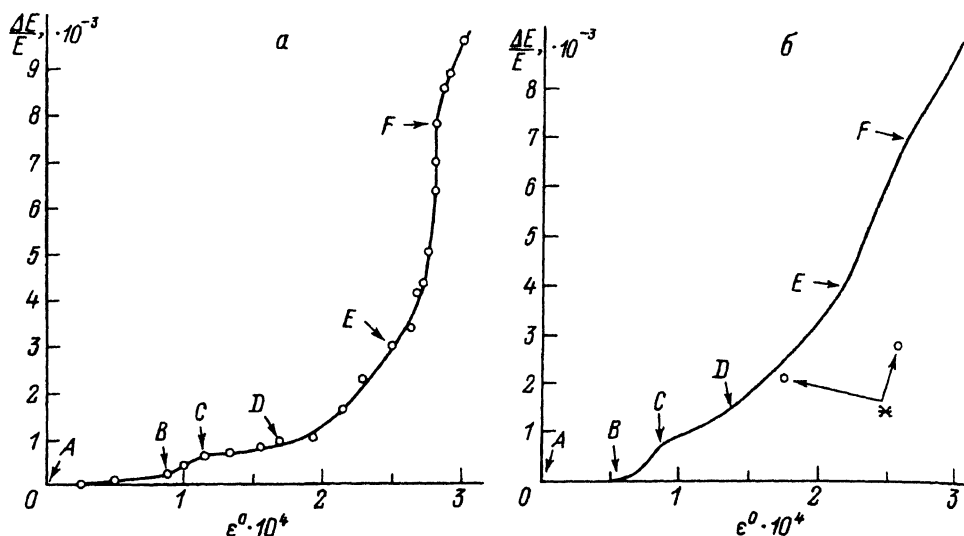


Рис. 5. Зависимости дефекта модуля Юнга от амплитуды деформации.  
*a* — экспериментальная кривая, полученная при деформировании ультразвуком образца, не подвергавшегося предварительной деформации; *б* — построенная по данным ЭВМ экспериментов.

становятся более пологими и значения максимального дефекта модуля уменьшаются.

Полученные результаты качественно согласуются с данными эксперимента. Эксперименты, проведенные на кристаллах NaCl, предварительно деформированных ультразвуком, в которых достигнуто предельное состояние системы дислокации — точечные дефекты (большая плотность дислокаций и малая длина сегментов), показали, что в этом случае дефект модуля Юнга, обусловленный дислокационной деформацией, незначителен по сравнению с температурным эффектом.

Продолжая сравнение ЭВМ и натуральных экспериментов сопоставим зависимость

$$\frac{\Delta E}{E}(\varepsilon^0),$$

полученную при нагружении ультразвуком предварительно не деформированного образца и зависимость

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\varepsilon^0),$$

рассчитанную на ЭВМ при  $l_0 = 0.8$  мкм (рис. 5, *a* и *б*). Такое значение  $l_0$  выбрано потому, что по оценкам [6] наиболее вероятная длина сегментов в кристаллах NaCl, не подвергавшихся предварительной деформации, лежит в пределах 0.8–1 мкм. Из сравнения расчетной и экспериментальной зависимостей

$$\frac{\Delta E}{E}(\varepsilon^0)$$

видно, что особые точки, полученные при расчете и связанные с эволюцией виртуальных дислокаций, присутствуют на экспериментальной



кривой (отмечены буквами  $A-D$  на рис. 5,  $a$  и  $b$ ). Эти результаты дают основание полагать, что предложенный механизм влияния эволюции дислокационной структуры на дефект модуля Юнга, правильно описывает реальные процессы. Более крутой ход расчетной зависимости

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\varepsilon^0)$$

на начальном участке ( $\varepsilon^0 = 0.5-2.0 \cdot 10^{-4}$ ) можно объяснить влиянием выбора коэффициента динамической вязкости (в данном случае  $B = 0.21$  мП). Увеличение коэффициента динамической вязкости приводит к тому, что ход кривых

$$\frac{\Delta E_D}{E}(\varepsilon^0)$$

становится более пологим. Более крутой ход экспериментальной кривой в области больших амплитуд относительной деформации ( $\varepsilon^0 = 2.5-3.0 \cdot 10^{-4}$ ) связан, по-видимому, с уменьшением наиболее вероятной длины сегментов  $l_0$  при увеличении плотности дислокаций. Реальная зависимость  $l_0(\varepsilon^0)$  неизвестна, но расчеты показывают (рис. 4), что при уменьшении  $l_0$  с 0.8 до 0.4 мкм дефект модуля Юнга возрастает.

В заключение отметим, что рассмотренная выше модель, несмотря на принятые упрощения, отражает изменения дефекта модуля Юнга, обусловленные эволюцией дислокационной структуры под действием ультразвука. Полученные данные позволяют интерпретировать особенности экспериментально наблюдаемых зависимостей

$$\frac{\Delta E}{E}(\varepsilon^0),$$

дают возможность выяснить, какие механизмы дислокационной неупругости являются определяющими при различных амплитудах ультразвука.

#### Список литературы

- [1] Нацик В.Д., Чижко К.А. // ФТТ. 1975. Т. 17. Вып. 1. С. 342.
- [2] Благовещенский В.В., Тяпунина Н.А. // ДАН СССР. 1980. Т. 254. № 4. С. 869-872.
- [3] Мэзон У. Физическая акустика. Т. 3. Ч. А. М.: Мир, 1969.
- [4] Благовещенский В.В., Леготин Д.Л., Тяпунина Н.А. // ФММ. 1993. Т. 75. № 5.
- [5] Тяпунина Н.А., Благовещенский В.В., Зиненкова Г.М., Ивашкин Ю.А. // Изв. вузов. Физика. 1982. № 6. С. 118-128.
- [6] Игонин С.И. Автореф. конд. дис. М., 1978.

Московский университет  
им. М.В.Ломоносова

Поступило в Редакцию  
26 мая 1993 г.