

УДК 539.2 : 548.4 : 539.67 : 539.374

© 1992

**МОДЕЛЬ АМПЛИТУДНО-ЗАВИСИМОЙ НЕУПРУГОСТИ
И АМПЛИТУДНО-ЧАСТОТНЫЙ СПЕКТР ВНУТРЕННЕГО ТРЕНИЯ
ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ**

**II. РАСЧЕТЫ АМПЛИТУДНО-ЧАСТОТНЫХ СПЕКТРОВ
ВНУТРЕННЕГО ТРЕНИЯ И ДЕФЕКТА МОДУЛЯ ЮНГА
И СОПОСТАВЛЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАМИ**

С. Н. Голяндин, С. Б. Кустов

Приводятся результаты расчетов амплитудно-частотных спектров дислокационного амплитудно-зависимого внутреннего трения и дефекта модуля Юнга в диапазоне от инфра- до ультразвуковых частот. Получено хорошее согласие результатов расчета с экспериментальными данными в широком диапазоне амплитуд и частот. Обнаружено, что при малых величинах обратимой дислокационной деформации на ультразвуковых частотах расчеты дают заниженные значения дефекта модуля Юнга по сравнению с экспериментом. Анализируются возможные причины несоответствия и пути корректировки модели.

В предыдущей статье (в дальнейшем ссылаемся на нее как I) для описания обратимой неупругой деформации была предложена реологическая модель, которая представляется параллельным соединением гистерезисного элемента распределенного трения с источником возвращающей силы — элементом упругости и элементом нелинейной вязкости. Соответствующее этой модели нелинейное дифференциальное уравнение решалось численно для различных частот и амплитуд. При этом задавался закон нагружения $\sigma(t)$ и для каждого цикла нагружения определялись массивы неупругой деформации $\dot{\varepsilon}_{in}(t)$, скорости неупругой деформации $\dot{\varepsilon}_{in}(t)$, внутренних напряжений $\sigma_i(t)$ и эффективных напряжений $\sigma^*(t)$. Таким образом, можно получить все экспериментально измеряемые зависимости и, кроме того, рассчитать амплитудно-зависимое внутреннее трение (АЗВТ), дефект модуля Юнга (ДМЮ), термоактивированную и гистерезисную компоненты АЗВТ в широком диапазоне амплитуд и частот, значительно превышающем экспериментальный. Проведенные расчеты позволили построить амплитудно-частотные спектры АЗВТ и ДМЮ и сопоставить их с экспериментальными данными. Оказалось, что расчетные спектры хорошо совпадают с экспериментальными на низких частотах, однако в ультразвуковом диапазоне расчетные значения ДМЮ почти на порядок ниже.

1. Амплитудный спектр внутреннего трения и ДМЮ

В I для описания ветви нагружения гистерезисной петли (ГП) было получено следующее дифференциальное уравнение:

$$\dot{\varepsilon}_{in}(t) = K_2(\sigma(t) - K_1(\dot{\varepsilon}_{in}(t))^n)^n, \quad (1)$$

где

$$\sigma(t) = \sigma_i(t) + \sigma^*(t), \quad (2)$$

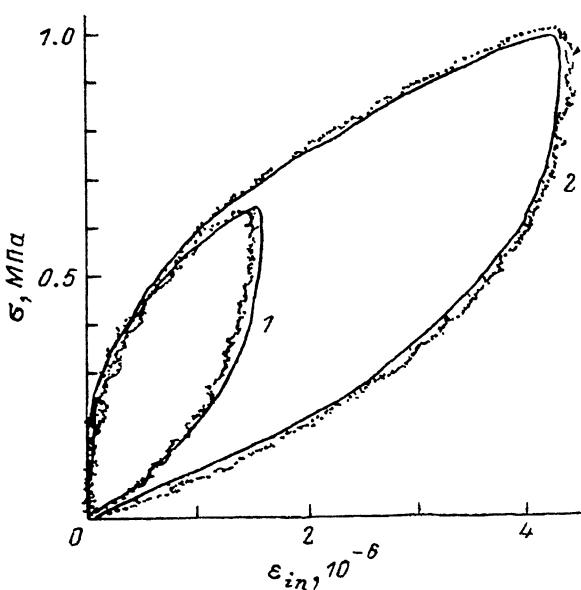


Рис. 1. ГП напряжение — неупругая деформация для кристалла NaCl на частоте 0.5 Гц при амплитудах 0.32 (1) и 0.49 МПа (2).

Сплошные линии — результаты расчетов.

$$\sigma^*(t) = K_1 (\dot{\epsilon}_{in}(t))^m, \quad (3)$$

$$\epsilon_{in}(t) = K_2 (\sigma_i(t))^n. \quad (4)$$

Здесь K_1 , K_2 , m и n — постоянные, различные для кристаллов NaCl и LiF. Численные значения этих параметров определялись по методике, изложенной в I, по одной экспериментальной ГП, измеренной на произвольной частоте и амплитуде.

На рис. 1 показаны экспериментальные и рассчитанные зависимости неупругой деформации от напряжения для кристалла NaCl при двух значениях амплитуды циклического напряжения. Значения параметров дифференциального уравнения (1) определялись для большей амплитуды напряжения. Тем не менее они хорошо качественно и количественно описывают неупругое поведение образца при меньших амплитудах. На рис. 2 сопоставлены результаты расчета АЗВТ и ДМЮ (линии 1 и 2) с экспериментальными зависимостями для кристалла NaCl (a) и LiF (б). Можно отметить неплохое совпадение расчетных и экспериментальных зависимостей в широком диапазоне амплитуд для кристаллов обоих типов. Наблюдается худшее согласие расчетов ДМЮ с экспериментом при минимальных амплитудах. Так, расчетные значения ДМЮ в кристалле NaCl при амплитуде порядка 0.1 МПа заметно ниже экспериментальных, хотя при максимальных амплитудах согласие оказывается значительно лучшим.

Общую величину декремента колебаний можно представить в виде суммы силовой δ_i и термически активируемой δ^* компонент: $\delta = \delta_i + \delta^*$. Тогда долю компоненты, обусловленной силовым рассеянием, можно характеризовать величиной

$$R = \delta_i / \delta. \quad (5)$$

Рассчитанные зависимости величины R от амплитуды колебаний показаны на рис. 2 линиями 3. Видно, что, как и предполагалось в [1, 2], доля силового

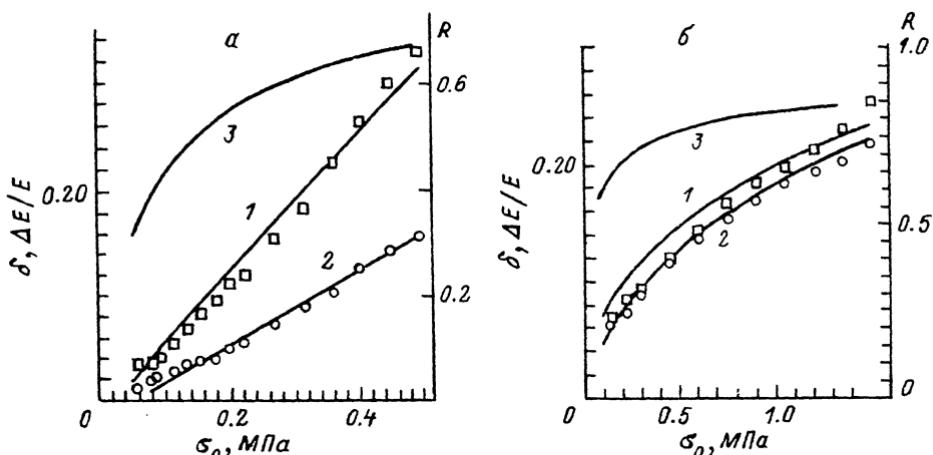


Рис. 2. Амплитудные зависимости декремента (1), ДМЮ (2) и доли квазистатического силового рассеяния (3) для кристаллов NaCl (а) и LiF (б) на частоте 0.5 Гц.

Сплошные линии — результаты расчетов.

рассеяния растет при увеличении амплитуды. Формально это объясняется тем, что зависимость эффективных напряжений от скорости деформации (3) является слабой, поэтому при постоянной частоте компонента σ^* слабо зависит и от амплитуды деформации. Таким образом, понижение амплитуды приводит к слабому уменьшению термоактивированной и более заметному уменьшению силовой компоненты. Доля гистерезисного силового поглощения R при этом падает.

2. Частотный спектр амплитудно-зависимого внутреннего трения и дефекта модуля Юнга

На рис. 3 приведены экспериментально определенные и рассчитанные ГП напряжение—обратимая дислокационная деформация для кристалла NaCl при двух частотах нагружения 1.0 (1) и 0.02 Гц (2). Параметры реологической модели определялись для частоты 0.5 Гц, отличающейся от приведенных на рисунке. Можно отметить неплохое качественное и количественное совпадение расчетных и экспериментальных кривых.

На рис. 4 показаны результаты вычисления частотных зависимостей АЗВТ и ДМЮ для образцов NaCl (а) и LiF (б) в диапазоне частот 10^{-3} — 10^5 Гц при двух амплитудах, одинаковых с использованными в наших опытах. Точками в инфразвуковой области показаны результаты наших экспериментов [1–3]. Для частоты 100 кГц приведены данные [4] для кристаллов того же происхождения и для той же амплитуды продольных ультразвуковых колебаний. Видно, что рассчитанные уровни АЗВТ неплохо согласуются с имеющимися экспериментальными данными как в инфра-, так и в ультразвуковом диапазоне частот. Для кристалла LiF имеет место худшее количественное согласие расчетов с опытами, чем в кристалле NaCl. Причина этого, как и некоторое отличие для кристалла LiF эффективных напряжений при циклическом и макроскопическом деформировании (рис. 4 в I), заключается в наличии в нем амплитудного гистерезиса или временной зависимости АЗВТ. Из-за этого изменяется во времени и математическое описание неупругой деформации, т. е. параметры уравнения (1) не остаются постоянными в процессе измерения АЗВТ. Это, естественно, не может быть учтено в рамках предложенной методики расчета по данным для одиночной ГП, в которой параметры модели считаются не зависящими от времени.

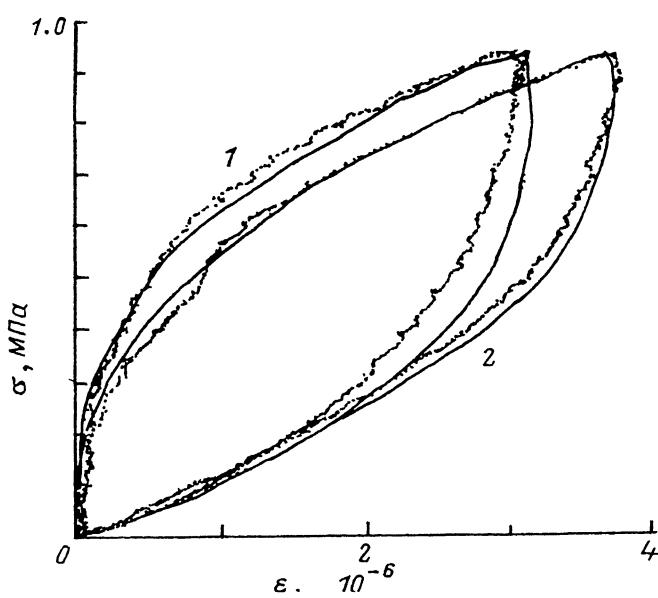


Рис. 3. ГИI напряжение—неупругая деформация для кристалла NaCl при амплитуде 0.46 МПа на частотах 1.0 (1) и 0.02 Гц (2).

Сплошные линии — результаты расчетов.

Тем не менее, поскольку амплитудный гистерезис в исследованных образцах имеет незначительную величину [3], качественное согласие расчета с экспериментом остается неплохим.

Видно также, что, как и предполагалось в [2], в частотных спектрах АЗВТ наблюдается более (кристалл LiF) или менее (кристалл NaCl) ярко выраженный

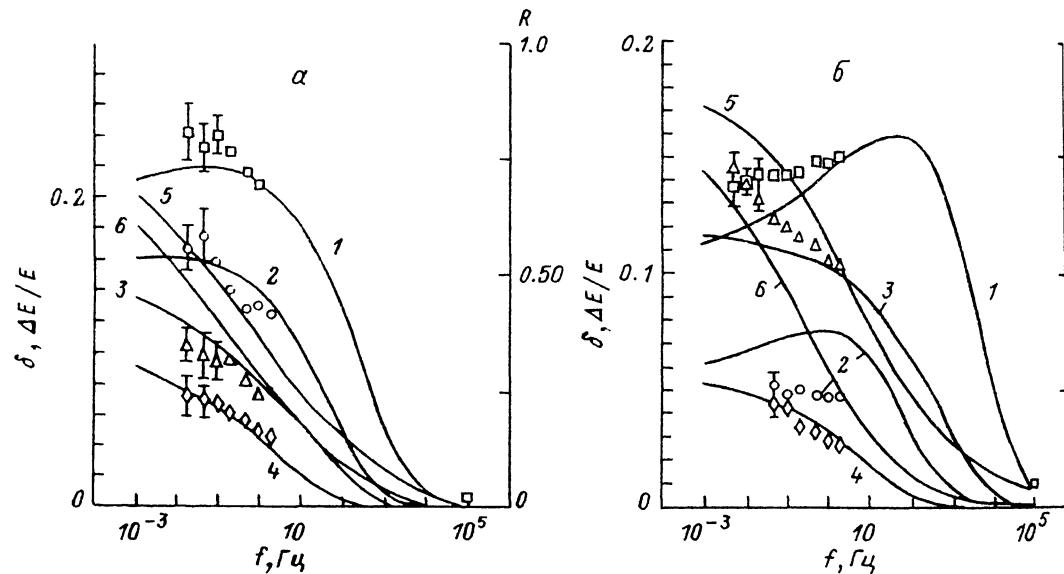
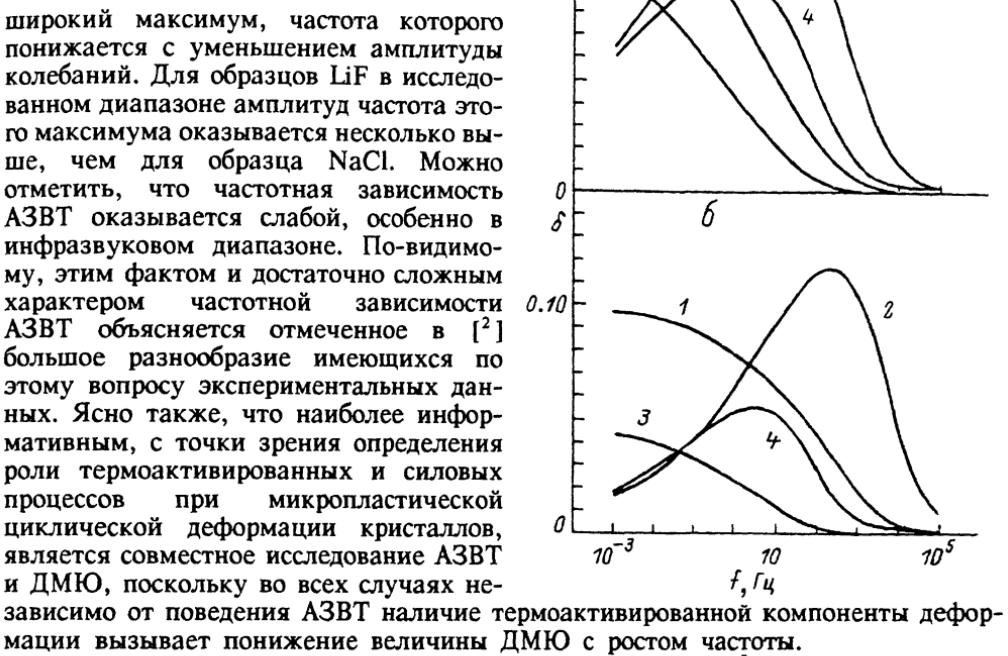


Рис. 4. Частотные зависимости АЗВТ (1, 2), ДМО (3, 4) и доли квазистатического силового поглощения (5, 6).

а — кристаллы NaCl при амплитудах 0.43 (1, 3, 5) и 0.29 МПа (2, 4, 6), б — кристалл LiF при амплитудах 1.6 (1, 3, 5) и 0.4 МПа (2, 4, 6). Сплошные линии — результаты расчетов.

Рис. 5. Расчетные частотные зависимости квазистатической силовой (1, 3) и термоактивированной (2, 4) компонент АЗВТ.

a — кристалл NaCl при амплитудах 0.43 (1, 2) и 0.29 (3, 4) МПа, *b* — кристалл LiF при амплитудах 1.6 (1, 2) и 0.4 (3, 4) МПа.



широкий максимум, частота которого понижается с уменьшением амплитуды колебаний. Для образцов LiF в исследованном диапазоне амплитуд частота этого максимума оказывается несколько выше, чем для образца NaCl. Можно отметить, что частотная зависимость АЗВТ оказывается слабой, особенно в инфразвуковом диапазоне. По-видимому, этим фактом и достаточно сложным характером частотной зависимости АЗВТ объясняется отмеченное в [2] большое разнообразие имеющихся по этому вопросу экспериментальных данных. Ясно также, что наиболее информативным, с точки зрения определения роли термоактивированных и силовых процессов при микропластической циклической деформации кристаллов, является совместное исследование АЗВТ и ДМЮ, поскольку во всех случаях независимо от поведения АЗВТ наличие термоактивированной компоненты деформации вызывает понижение величины ДМЮ с ростом частоты.

Следует отметить, что расчет ДМЮ на частотах 10^5 Гц дает величины примерно на порядок ниже, чем значения декремента. Этот факт не согласуется с известными экспериментальными данными для ультразвукового диапазона (например, [4]), в котором декремент и ДМЮ — величины одного порядка.

На рис. 5 приведены расчетные зависимости абсолютных значений силовой и термоактивированной компонент АЗВТ для кристаллов обоих типов. Видно, что термоактивированная составляющая АЗВТ имеет максимум, положение которого зависит от амплитуды колебаний. Кроме того, эта составляющая стремится к нулю при понижении частоты. На примере кристалла LiF видно также, что на низких частотах может наблюдаться падающая амплитудная зависимость термоактивированной компоненты поглощения. Такое поведение термоактивированной компоненты полностью согласуется с предсказаниями теорий [5-7].

Силовая компонента (рис. 5, кривые 1 и 3) монотонно падает с ростом частоты при всех амплитудах. На первый взгляд это противоречит представлениям о силовом механизме движения носителей пластической деформации, который не должен зависеть от частоты или скорости нагружения. Причина существования частотной зависимости силовой компоненты заключается в том, что помимо силового носители деформации участвуют и в термоактивированном преодолении барьеров. Изменение частоты колебаний в этом случае приводит к перераспределению в выражении (2) приложенного напряжения между компонентой эффективных и внутренних напряжений. Иначе говоря, силовая квазистатическая и термоактивированная компоненты АЗВТ не являются независимыми, а связаны через величину внешних приложенных напряжений. Таким образом, частотный спектр АЗВТ и ДМЮ формируется зависимостью эффективных напряжений от

скорости микропластической деформации. Учитывая обнаруженное хорошее совпадение величин эффективных напряжений для циклической обратимой микропластической и макроскопической пластической деформации, можно сказать, что частотный спектр АЗВТ и ДМЮ обусловлен теми же процессами, что и скоростная чувствительность напряжения макроскопического течения.

Таким образом, максимум в спектре суммарного АЗВТ вызывается максимумом термоактивированной компоненты. Ясно, однако, что при некоторых значениях параметров уравнения (1) максимум суммарного АЗВТ может и не наблюдаться. Для этого скорость падения термоактивированной компоненты с понижением частоты должна быть меньше, чем скорость роста силовой компоненты.

На рис. 4 приведены также расчетные зависимости доли силового рассеяния R из (5). Видно, что эта величина монотонно падает с ростом частоты. С другой стороны, рост частоты сопровождается монотонным уменьшением ДМЮ или амплитуды неупругой деформации. Учитывая тот факт, что в амплитудных спектрах внутреннего трения также наблюдалось падение R с уменьшением амплитуды неупругой деформации, можно заключить, что более общим условием увеличения вклада термоактивированной компоненты АЗВТ по сравнению с квазистатической силовой является уменьшение амплитуды неупругой деформации. С точки зрения микроскопических механизмов, уменьшение роли силовых квазистатических процессов при уменьшении величины неупругой деформации говорит об определенной последовательности включения различных механизмов АЗВТ. При малых амплитудах колебаний основную роль играет движение дислокаций в короткодействующем потенциальном рельефе. Рост величины неупругой деформации приводит к все более заметному изменению полей внутренних напряжений в кристалле, т. е. охватывает более крупномасштабные процессы взаимодействия дислокационных ансамблей.

3. Анализ и заключение

Одной из проблем, для решения которой предпринимались значительные усилия [^{4, 8–14}], было получение из данных об АЗВТ характеристик как динамики отдельных дислокаций [^{8–12}], так и макроскопической пластичности кристаллов [^{4, 13, 14}]. Поскольку акустические эксперименты позволяют исключить влияние таких факторов, как размножение дислокаций, и работают с обратимым движением дислокаций, то наиболее перспективным казался первый путь – исследование динамики дислокаций акустическими методами. Однако уже первые попытки получить количественную информацию показали [^{8, 9}], что данные ультразвуковых измерений АЗВТ не согласуются с данными по динамике дислокаций, полученными методом избирательного травления. Подвижность носителей пластической деформации в акустических экспериментах оказывалась значительно (на несколько порядков) выше, чем в квазистатических опытах.

В настоящей работе обнаружено, что АЗВТ, измеряемое в щелочно-галоидных кристаллах, хорошо описывается на низких частотах моделью, использующей основные характеристики макроскопической деформации – эффективные и внутренние напряжения, причем наблюдается хорошее количественное согласие ряда параметров модели обратимой микропластической деформации с характеристиками макроскопической пластичности. Однако расчеты в области ультразвуковых частот дали значения ДМЮ примерно на порядок меньше наблюдавшихся в акустических экспериментах (см. раздел 2). Это означает, что на ультразвуковых частотах скорость микропластической деформации в экспериментах оказывается значительно выше, чем это следует из зависимости скорости деформации от эффективных напряжений для макроскопических экспериментов и для микропластической деформации на низких частотах. Таким образом,

данных о низкочастотной микропластической деформации недостаточно, чтобы в рамках предложенной модели получить значения подвижностей дислокаций в ультразвуковом диапазоне частот.

С точки зрения формального описания пластической деформации [15], предложенная модель основана на сочетании процессов циклического деформационного упрочнения, обнаруживаемого в виде гистерезиса полей внутренних напряжений, и термически активируемого преодоления дислокациями короткодействующих потенциальных барьеров под действием компоненты эффективных напряжений. Скорость микропластической деформации при этом зависит от величины эффективных напряжений так же, как и при макроскопическом деформировании, в виде (3). Силовой характер квазистатической компоненты поглощения в рамках формального описания [15] отражает тот факт, что изменение внутренних напряжений при постоянной температуре в соответствии с выражением (4) есть функция только приращения деформации и в отличие от процесса возврата не зависит от времени.

Низкие расчетные величины ДМО в ультразвуковом диапазоне по сравнению с экспериментальными данными означают, что в килогерцевом диапазоне в отличие от инфразвуковых частот скорость микропластической деформации не подчиняется (3) и оказывается заметно выше, чем в рамках термоактивированного описания, хотя для $\varepsilon_{in} \sim 10^{-8} \div 10^{-9}$ [13] значения скоростей деформации в ультразвуковом диапазоне оказываются близкими к значениям для обычного макроскопического деформирования. В [8] был сделан вывод, что в акустических экспериментах подвижность дислокаций контролируется более слабыми барьерами, чем при макроскопическом деформировании, что и приводит к более высоким скоростям деформации в акустических экспериментах. В [3] среди вероятных причин такого различия указывалась возможность силового преодоления барьеров в акустических экспериментах при высоких значениях компоненты эффективных напряжений. Представляется, что именно это предположение объясняет различие в подвижности дислокаций в ультразвуковом диапазоне частот и при квазистатическом нагружении. Действительно, следует отметить, что при сопоставлении с макроскопической деформацией в [8–14] не учитывался динамический характер нагружения кристалла акустическими методами, когда скорость нагружения $\dot{\sigma}$ может достигать величин $10^{11} \div 10^{13}$ Па/с, которые практически не реализуемы в квазистатических и низкочастотных экспериментах. Феноменологическое описание [15] говорит о возможности силового преодоления барьеров под действием эффективных напряжений, когда приращение деформации оказывается пропорциональным приращению эффективных напряжений $d\varepsilon \sim d\sigma^*$. Ясно, что именно для ультразвукового диапазона характерны высокие значения скорости изменения как приложенных, так и эффективных напряжений в каждом цикле нагружения. Если существует силовой механизм пластической деформации, связанный с эффективными напряжениями, то именно высокочастотные измерения АЗВТ представляются наиболее удобными для его выявления. На низких частотах или при макроскопическом деформировании значения σ^* оказываются значительно ниже, и для обнаружения силовой компоненты скорости пластической деформации требуются специальные эксперименты [15, 16].

Поднятый в [8] вопрос о типе барьеров, контролирующих подвижность дислокаций в акустических и квазистатических экспериментах, когда, с нашей точки зрения, преобладающим оказывается в первом случае силовой, а во втором — термоактивированный механизм преодоления барьеров, по-видимому, остается открытым. Возможно, что, как и предполагалось в [4, 12], природа потенциальных барьеров, преодолеваемых дислокациями в статических и динамических опытах, может быть одной и той же. В этой связи весьма интересной представляется теория низкоамплитудного фонового внутреннего трения для твердых растворов, развитая в [5]. В [5] предполагается, что точечные дефекты

одной и той же природы могут преодолеваться движущимися дислокациями при помощи термической активации, если они расположены непосредственно вблизи плоскости скольжения и взаимодействуют с ядром дислокаций, либо чисто силовым способом, если они удалены от плоскости скольжения. В соответствии с этой теорией точечные дефекты с большим значением силы взаимодействия с дислокацией преодолеваются термоактивированно, а более слабые барьеры – чисто силовым способом. В этом состоит ее важное отличие от традиционного подхода к анализу движения дислокаций в двухкомпонентной системе точечных дефектов (например, [17]). Представляется возможной модификация [5] для случая амплитудно-зависимого внутреннего трения. Тогда изменение температуры или частоты колебаний будет приводить к перераспределению числа барьера, преодолеваемых силовым либо термоактивированным способом. Повышение частоты или понижение температуры должно приводить к увеличению роли слабых барьера, преодолеваемых силовым способом. Модификации предложенной в данной работе реологической модели для случая как термоактивированного, так и силового преодоления силовых полей точечных дефектов, а также возможности модификации [5] для описания АЗВТ будет посвящено следующее сообщение.

Авторы признательны С. П. Никанорову и Б. К. Кардашеву за полезное обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Кустов С. Б., Воинова О. А., Никифоров А. В. // Внутреннее трение в исследовании металлов, сплавов и неметаллических материалов. М., 1989. С. 245–248.
- [2] Кустов С. Б., Голядин С. Н., Кардашев Б. К. и др. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 260–263.
- [3] Кустов С. Б., Голядин С. Н., Кардашев Б. К. // Препринт ФТИ-1456. Л., 1990. 51 с.
- [4] Никаноров С. П., Кардашев Б. К. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. М., 1985. 254 с.
- [5] Gremaud G. // J. de Phys. 1987. V. 48. N 12. Coll. C8. P. C8–15–C8–30.
- [6] Lücke K., Granato A. V., Teutonico L. J. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. N 11. P. 5181–5191.
- [7] Schlipf J. // Internal Friction and Ultrasonic Attenuation in Solids. Tokyo, 1977. P. 91–98.
- [8] Baker G. S. // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. N 5. P. 1730–1732.
- [9] Платков В. Я., Ефименко В. П., Старцев В. И. // ФТТ. 1967. Т. 10. № 9. С. 2799–2803.
- [10] Ishii K. // J. Phys. Soc. Jap. 1978. V. 45. N 5. P. 1653–1656.
- [11] Ishii K. // J. de Phys. 1985. V. 46. N 12. Coll. C10. P. C–10–191–C–10–194.
- [12] Кардашев Б. К. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 8. С. 1490–1495.
- [13] Lebedev A. B., Kustov S. B. // Phys. Stat. Sol. (a). 1989. V. 116. N 2. P. 645–656.
- [14] Челноков В. А., Кузьмин Н. Л. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 10. С. 3166–3168.
- [15] Лихачев В. А., Швецова В. А. // Проблемы прочности. 1984. № 11. С. 57–62.
- [16] Alden T. H. // Met. Trans. A. 1985. V. 16A. N 3. P. 375–392.
- [17] Ni J., Schlipf J. // Proceedings of the 9th Int. Conf. on Internal Friction and Ultrasonic Attenuation in Solids / Ed. T. S. Kē. Beijing, 1990. P. 53–56.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
6 августа 1992 г.