Компьютерное моделирование амплитудно-зависимого внутреннего трения

© В.В. Благовещенский, И.Г. Панин

Костромской государственный технологический университет, Кострома, Россия

E-mail: igpanin@list.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 28 октября 2009 г.)

Исследуется внутреннее трение в кристаллических материалах в модели вязкого движения дислокаций через систему случайно расположенных дефектов. Приводятся результаты расчетов амплитудной зависимости внутреннего трения для различных частот и дефектов различной мощности. На амплитудных зависимостях внутреннего трения обнаружены три характерных участка, соответствующих различным режимам движения дислокаций.

1. Введение

Для вычисления амплитудно-зависимых потерь энергии при знакопеременных нагрузках в кристаллах с низким барьером Пайерлса обычно используются два подхода. Первому подходу соответствует струнная модель дислокации с термоактивационным отрывом дислокации от стопоров, которые по различным законам распределены вдоль линии дислокации. Учитывается взаимодействие дислокации только с одним рядом стопоров в кристалле, предполагается, что других стопоров нет [1,2].

Другой подход использует компьютерное моделирование движения дислокации в кристалле, в плоскости скольжения которого, согласно равномерному закону распределения, расположены дефекты [3,4].

В этих работах используется квазистатическая модель движения дислокации. С ее помощью строится зависимость длины безактивационного пробега дислокации через сетку стопоров от величины статического напряжения. На основании этих зависимостей вычисляются потери энергии при знакопеременном нагружении и при вязком характере движения. Возникает вопрос о правомерности вычисления одной характеристики движения дислокации в квазистатической модели, а другой — в динамической.

В работе [5] представлена динамическая модель движения единичного дислокационного сегмента и показано, что амплитудная зависимость внутренного трения может быть связана не только с отрывом дислокации от стопоров, но и с нелинейными колебаниями дислокационного сегмента, когда стрела прогиба становится соизмеримой с длиной дислокационного сегмента. Там же показано, что при нелинейных колебаниях наблюдается инверсия частотной зависимости внутреннего трения, т. е. при малых амплитудах с ростом частоты внутренне трение увеличивается, а при больших амплитадах уменьшается.

2. Модель

В настоящей работе представлены результаты компьютерного эксперимента по измерению дислокационного внутреннего трения с использованием математической модели (далее Модель) движения дислокационных линий (ДЛ) на площадке моделирования под действием приложенной к образцу нагрузки [6]. Площадка моделирования расположена в плоскости скольжения ДЛ, а на ней (и вокруг нее) случайным образом распределены дефекты (стопоры) одинакового типа и мощности. Плотность дефектов на площадке и за ее пределами одинакова, а мощность дефекта определяется углом срыва с него ДЛ. ДЛ состоит из нескольких соединенных между собой дислокацинных сегментов (ДС), опирающихся обоими концами на дефекты (рис. 1). Левый конец самого левого и правый конец самого правого ДС находятся за пределами площадки и опираются на близлежащие стопора. Первончальное положение ДЛ задается случайным образом в средней части площадки. Моделирование движения всей ДЛ основано на следующих принципах. Во-первых, при встрече с новым стопором ДС разбивается на два, каждый из которых начинает развиваться самостоятельно. Во-вторых, если угол между ДС, опирающимися на один стопор, становится меньше критического, то происходит срыв ДЛ с этого стопора и два ДС объединяются в один, который продолжает развиваться самостоятельно. В-третьих, на левой и правой границах площадки моделирования соблюдаются периодические граничные условия.

Закон движения каждого из ДС задается уравнением в частных производных параболического типа

$$p\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial \lambda^2} = S + \sigma_0 \sin(2\pi f t) - \frac{1}{R(\lambda)}, \qquad (1)$$

$$U(0, t) = U(L, t) = 0, \quad U(\lambda, t) = 0,$$

которое на каждом временном шаге решается численными методами [7].

В (1) $p = B/Gb^2$, S — величина постоянной внешней нагрузки, σ_0 — амплитуда внешнего гармонического напряжения, t — время, G — модуль сдвига, b — модуль вектора Бюргерса, B — коэффциент динамической вязкости, $R(\lambda, \tau)$ — радиус кривизны ДС, f — частота внешнего напряжения, λ — криволинейная координата



Рис. 1. Дислокации на площадке моделирования в образце. *а* — колебательное движение, *b* — колебательное движение со сменой конфигурации.

вдоль ДС, L — длина сегмента в криволинейных координатах. Для решения методом сеток каждый сегмент представлен в виде K точек, соединенных между собой прямыми линиями (элемент сегмента). Среда считается неограниченной, однородной и изотропной, силы инерции не учитываются. Уравнение (1) справедливо для таких смещений точек сегмента U, что $U \ll L$ для одного временного шага, при этом суммарное перемещение точек ДС за конечный интервал времени может быть значительным. Закон движения (1) един для всех ДС и для всего диапазона прикладываемых напряжений.

Материальные константы для расчетов были выбраны равными $G = 1.8 \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$, $b = 4 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, $B = 2.9 \cdot 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Параметрами модели также являются сторона квадратной площадки моделирвоания $a = 35 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, мощность дефектов (угол срыва со стопоров α) и количество дефектов на площадке моделирования *N*. При расчете внутреннего трения величина постоянной нагрузки *S* принимается равной нулю и движение ДЛ происходит только под действием знако-переменной нагрузки.

Вклад во внутреннее трение от одного сегмента с расстоянием *l* между точками закрепления будет определяться выражением

$$Q_S^{-1} = \frac{2Ebl^2}{\sigma_0} \int_T \sin(2\pi ft) \sum_{i=1}^{K-1} L_i(t) u_i(t) dt.$$
(2)

Здесь E — модуль Юнга, L_i — длина *i*-го элемента сегмента ДЛ, u_i — его смещение. При действии знакопеременной нагрузки ДС, "зависшие" на стопорах, совершают вынужденные колебания. Исходными данными для расчета будут период колебаний T и их амплитуда σ_0 . Произведение $L_i(t)u_i(t)$ в формуле (2) равно площади, которую "заметает" *i*-й элемент ДС на шаге t своего движения. С помощью Модели вычисляем площадь, заметаемую ДС за один шаг, и величину l, подставляем их в (2) и получаем значение внутреннего трения для одного сегмента. Находя аналогично значения внутреннего трения для всех сегментов ДЛ и суммируя их, определяем значение внутреннего трения Q^{-1} для ДЛ за период T в целом. Измерение конфигурации ДЛ

во время движения (встреча со стопором или срыв со стопора) учитывается при расчете внутреннего трения, так как удаленные из рассмотрения на каком-либо шаге движения сегменты на этом же шаге заменяются новыми, созданными из удаленных.

3. Результаты и обсуждение

Во время эксперимента были построены кривые для разного количества стопоров (N = 25, 50, 81, 100),разных углов срыва ($\alpha = 45, 60, 90, 120^{\circ}$) и разной частоты (f = 20, 100, 200, 400, 1000, 2000 kHz) при $E = 4.25 \cdot 10^{10}$. На рис. 2 дана типичная кривая зависимости внутреннего трения от амплитуды внешнего знакопеременного напряжения для одной дислокации, полученная при помощи Модели. Во всех случаях наблюдаются три участка, которые на рисунке выделены с помощью линейной аппроксимации. На первом учатске при малых амплитудах внешнего напряжения внутреннее трение Q^{-1} практически не зависит от амплитуды. Этот участок соответствует малым колебаниям дислокационных сегментов, при которых стрела прогиба значительно меньше его длины. В этом случае ДС держатся за первоначальные стопоры, сохраняя перво-



Рис. 2. Зависимость внутреннего трения от амплитуды знакопеременного напряжения при N = 50, f = 20 kHz, $\alpha = 90^{\circ}$. Выделены три линейных участка.



Рис. 3. Фрагменты работы программы. a — начальное положение ДЛ, b - f — размах колебаний ДЛ при $\sigma_0 = 1$ (b), 1.4 (c), 1.5 (d), 2.88 (e) и 4 МРа (f).



Рис. 4. Зависимость внутреннего трения от амплитуды знакопеременного напряжения при различных частотах. N = 50, $\alpha = 90^{\circ}$.



Рис. 5. Зависимость внутреннего трения от амплитуды знакопеременного напряжения при различном количестве дефектов на площадке моделирования. f = 400 kHz, $\alpha = 90^{\circ}$.

начальную конфигурацию (рис. 3, *a*, *b*) и заметаемая площадь незначительна. Амплитудно-независимый участок плавно переходит во второй участок, соответствующий линейному росту. Рост начинается при таком значении амплитуды, при котором колебания ДС становятся уже значительными (при этом существенно увеличивается и заметаемая площадь), но ДЛ еще продолжает держаться за первоначальные стопоры (рис. 3, c). В данном случае амплитудная зависимость внутреннего трения может быть объяснена нелинейностью колебаний дислокационного сегмента, когда стрела прогиба становится соизмеримой с длиной дислокационного сегмента [5]. Во второй половине второго участка угол огибания дефектов на некоторых из них достигает критического значения, ДС начинают срываться со стопоров, и конфигурация колеблющейся дислокации меняется (рис. 3, d). Чем больше амплитуда, тем легче ДС срывается со стопоров и тем большую площадь заметает ДЛ. На третьем участке дислокационная линия полностью отрывается от первоначального ряда стопоров и начинает взаимодействовать со следующим рядом (рис. 3, е). Угол наклона третьего участка по сравнению со вторым заметно уменьшается. Это связано с тем, что дислокации, оторвавшись от первоначальных стопоров, во время своего движения наталкиваются на близлежащие стопоры и начинают преодолевать их сопротивление (рис. 3, f). Линейность третьего участка объясняется тем, что, как показано в [6], скорость движения дислокаций при усилии, большем 2 МРа, практически линейно зависит от прикладываемого усилия для любого количества стопоров одинаковой мощности, т.е. при таких условиях угол наклона кривой на этом участке стремится к одной и той же величине. Это видно и по кривым, построенным при разных частотах (рис. 4) и при разном количестве дефектов на площадке моделирования (рис. 5). Видно также, что внутреннее трение уменьшается с ростом частоты (рис. 4,6). Это происходит потому, что при больших амплитудах движение дислокации не похоже на движение струны, и заметаемые площади уменьшаются с ростом частоты из-за вязкости. По той же причине Q^{-1} уменьшается и с увеличением плотности дефектов (рис. 5). При постоянных значениях плотности дефектов и частоты при амплитуде выше 3.5 МРа величина внутреннего трения становится не зависящей от приклыдваемой амплитуды, а зависит только от мощности дефектов (рис. 7), причем чем меньше мощность дефектов, тем меньше велчина внутреннего трения.



Рис. 6. Зависимость внутреннего трения от частоты знакопеременного напряжения при различных амплитудах. N = 50, $\alpha = 90^{\circ}$.



Рис. 7. Зависимость внутреннего трения от амплитуды знакопеременного напряжения при различной мощности дефектов. N = 50, f = 400 kHz.

Таким образом, с помощью Модели исследовано влияние на амплитудно-зависимое внутренне трение смены конфигураций колеблющейся дислокации при их отрыве от точек закрепления.

Список литературы

- [1] А. Гранато, К. Люкке. В кн.: Физическая акустика. Мир, М. (1969). Т. 4. Ч. А. С. 261.
- [2] M. Gabbay, A. Vincent, G. Fantozzi. Phys. Status Solidi A 100, 121 (1987).
- [3] R.B. Schwarz. Acta Mater. 29, 311 (1981).
- [4] В.И. Белан, А.И. Ландау. ФММ 65, 2, 259 (1988).
- [5] N.A. Tyapunina., V.V. Blagoveshchenskii. Phys. Status Solidi A 69, 77 (1982).
- [6] В.В. Благовещенский, И.Г. Панин. Изв. вузов. Материалы электрон. техники 2, 51 (2006).
- [7] В.В. Благовещенский, И.Г. Панин. ФММ 103, 4, 445 (2007).