

УДК 539.32:539.374

©1994

О МЕХАНИЗМЕ АНОМАЛЬНОГО РОСТА МОДУЛЯ ЮНГА ПРИ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛОВ

К. Е. Никитин

Проведено исследование влияния решеточного и дислокационного ангармонизма на изменение модуля Юнга при изгибе монокристаллов. Показано, что вклад решеточного ангармонизма пренебрежимо мал, а наблюдаемое изменение модуля обусловлено дислокационным вкладом в модули упругости четвертого порядка. Получены количественные соотношения взаимосвязи параметров дислокационной структуры с изменением модуля Юнга и связанным с ним изменением резонансной частоты продольных колебаний составного вибратора «образец-пьезокристалл». Наблюдаемое экспериментально в ряде работ аномальное изменение модуля в упругой области диаграммы нагружения объяснено преимущественным влиянием краевых дислокаций, дающих положительный вклад в модули упругости высших порядков, в противоположность винтовым дислокациям и «струнной модели», где вклад отрицателен.

В последнее время появился ряд работ, в которых наблюдался положительный рост модуля Юнга в упругой области диаграммы нагружения при статической деформации изгибом для монокристаллов алюминия и хлористого натрия [1], цинка [2], а также поликристаллической бронзы [3]. Здесь малые изменения модуля измерялись по изменению резонансной частоты продольных колебаний составного вибратора, колеблющегося на третьей гармонике основной частоты образца, при трехточечном изгибе его центральной части. Наблюдаемый эффект является аномальным, поскольку большинство из известных механизмов приводит к уменьшению модуля. Авторы [1], анализируя различные механизмы аномального эффекта, называют одной из наиболее вероятных причин решеточный или дислокационный ангармонизм. Однако детальный анализ этого механизма отсутствует.

В данной работе приведены количественные соотношения взаимосвязи решеточного и дислокационного ангармонизма с изменением модуля Юнга при деформации изгибом и соответствующим изменением резонансной частоты продольных колебаний составного вибратора. Полученные соотношения позволяют количественно объяснить аномальное изменение модуля в работах [1-3].

1. Учет ангармонизма

Рассмотрим стержень длиной L , шириной b и высотой h , упруго изгибаемый трехточечным изгибом в соответствии с рис. 1. Здесь изгиб осуществляется сосредоточенной силой F при расстоянии между опорами p . Полную деформацию стержня будем характеризовать стрелой

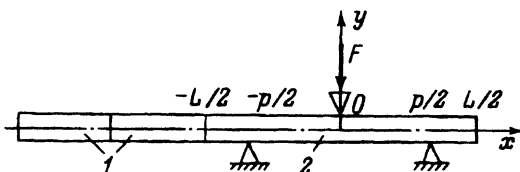


Рис. 1. Схема нагружения образца. 1 — пьезокварцы; 2 — образец. $p = 2L/3$.

прогиба d . При этом деформация отдельных слоев описывается нелинейным законом Гука, который удобно записать в виде

$$\sigma = E_0 \varepsilon + \alpha \varepsilon^2 + \beta \varepsilon^3, \quad (1)$$

где σ — напряжение; ε — одноосная деформация; E_0 — модуль Юнга для линейного закона Гука; α и β — известные линейные комбинации соответственно модулей упругости третьего и четвертого порядков, которые для краткости будем называть продольными модулями упругости третьего и четвертого порядков.

Если в таком стержне возбудить продольные колебания, то полная деформация слоя будет складываться из колебательной деформации ε_k и статической деформации ε_0 , обусловленной прогибом

$$\varepsilon_0 = \frac{y - y_0}{r(x)}, \quad (2)$$

где $r(x)$ — радиус кривизны профиля стержня в точке с абсциссой x ; y — ордината рассматриваемого слоя; y_0 — ордината нейтрального слоя, определяемая условием

$$\int_0^h \sigma(y) dy = 0. \quad (3)$$

Параметры таких колебаний будут характеризоваться динамическим модулем

$$E_d = d\sigma / d\varepsilon_k |_{\varepsilon = \varepsilon_0},$$

который является двумерной функцией

$$E(x, y) = E_0 + 2\alpha \frac{y - y_0}{r(x)} + 3\beta \frac{(y - y_0)^2}{r^2(x)}. \quad (4)$$

Резонансную частоту продольных колебаний составного вибратора, составленного из такого стержня, определим из условия равенства амплитудных значений кинетической W_K и потенциальной W_P энергий колебаний

$$\max\{W_K\} = \max\{W_P\}, \quad (5)$$

которые имеют вид

$$W_K = \frac{1}{2} \int_V \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 dV, \quad W_P = \frac{1}{2} \int_V E_d \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 dV, \quad (6)$$

где ρ — плотность материала, V — объем вибратора, $u(t, x)$ — колебательное смещение.

Поскольку рассматривается третья гармоника основной частоты колебаний стержня, то колебательное смещение описывается функцией

$$u(t, x) = A \sin(\omega t) \sin(3\pi x/L)$$

с амплитудой A и частотой ω . В этом случае, как нетрудно показать из уравнения (5), выражение для частоты колебаний имеет вид

$$\omega^2 = \frac{\int_{-L/2}^{L/2} dx b(3\pi/L)^2 \cos^2(3\pi x/L) \int_0^h E_d(x, y) dy + \omega_0^2 M_p}{\int_{-L/2}^{L/2} \frac{M}{L} \sin^2(3\pi x/L) dx + M_p}, \quad (7)$$

где M и M_p — соответственно массы образца и пьезокварцев, ω_0 — резонансная частота вибратора с недеформированным образцом.

Как следует из данного выражения, составной вибратор измеряет усредненный по сечению модуль Юнга

$$E = \frac{1}{h} \int_0^h E_d(x, y) dy. \quad (8)$$

Подставляя сюда выражение (4) с учетом условия (3) и отбрасывая малые члены, после несложных преобразований получим значение измеряемого модуля

$$E = E_0 \left[1 + \left(\frac{3\beta}{2E_0} - \frac{\alpha^2}{E_0^2} \right) \frac{h^2}{6r^2} \right]. \quad (9)$$

Здесь радиус кривизны при малом прогибе определяется второй производной от профиля стержня, который для используемой схемы нагружения, как нетрудно показать, описывается четной функцией при $|x| \leq p/2$, имеющей вид

$$y = d(\mp 4x^3/p^3 + 6x^2/p^2 - 1),$$

знаки « $-$ » и « $+$ » берутся соответственно для положительных и отрицательных x .

В результате, производя необходимые вычисления в выражении (7) с учетом $p = 2L/3$, получим искомое выражение для резонансной частоты составного вибратора с прогнутым стержнем, описывающее изменение усредненного по объему модуля Юнга

$$\omega^2 = \omega_0^2 \left[1 + \frac{M}{M + M_p} \frac{27(2\pi^2 + 3)h^2 d^2}{2\pi^2 L^4} \left(\frac{3\beta}{2E_0} - \frac{\alpha^2}{E_0^2} \right) \right]. \quad (10)$$

Проведем числовую оценку величины изменения частоты, обусловленную решеточным ангармонизмом. Согласно Хантингтону [4], отношение α/E_0 находится в пределах от 3 до 10 для различных кристаллов. Что касается модуля β , подобные исследования неизвестны, однако порядок величины можно получить, рассматривая деформацию кристалла с известной формой упругого потенциала, например для ионных кристаллов [5]. Для этих кристаллов нетрудно получить порядок отношения модулей

$$\alpha/E_0 \approx -6, \quad \beta/E_0 \approx 200. \quad (11)$$

Следует ожидать, что эти отношения не будут сильно отличаться от других типов кристаллов. Подставляя эти значения в выражение (10), получим изменение частоты при прогибе образца 0.1 mm на два порядка меньше наблюдаемого в [1]. Следовательно, решеточный ангармонизм оказывается пренебрежимо малым. Что касается дислокационного ангармонизма, то здесь следует ожидать гораздо большего влияния, поскольку при рассмотрении кубических по деформации членов в законе Гука, как показано в работах [6,7], дислокационный ангармонизм более чем на порядок величины превышает решеточный вклад.

2. Взаимосвязь с дислокационным ангармонизмом

С целью определения вклада дислокаций в модули упругости высших порядков в выражении (1) представим полную деформацию в виде суммы решеточной деформации $\varepsilon_p = \sigma/E$ и упругой дислокационной ε_d , определяемой суммарным интегральным смещением подвижных дислокаций, усредненным по всем действующим системам скольжения

$$\varepsilon_d = \frac{\Omega \Lambda B}{l} \int_{-l/2}^{l/2} y(x) dx, \quad (12)$$

где Ω — ориентационный фактор, усредненный по всем действующим системам скольжения; Λ, B, l — соответственно плотность дислокаций, вектор Бюргерса, средняя длина дислокационного сегмента; $y(x)$ — профиль описывающий упругое смещение дислокационного сегмента, закрепленного на концах в точках $x = \pm l/2$.

Выражение (12) можно разложить в ряд по малому параметру σ/E и записать в виде

$$\varepsilon_d = a_1 \varepsilon_p + a_2 \varepsilon_p^2 + a_3 \varepsilon_p^3. \quad (13)$$

При этом, согласно [7], для коэффициентов выполняется соотношение $a_1 \ll a_2 \ll a_3$. Тогда, сравнивая члены с одинаковыми степенями в законе Гука (1) с соответствующими членами в отсутствии дислокаций, получим дислокационный вклад в модули упругости с точностью до малых поправок

$$E = E_p(1 - a_1), \quad \alpha = \alpha_p - E_p a_2, \quad \beta = \beta_p - E_p a_3, \quad (14)$$

где E_p, α_p, β_p — решеточные модули упругости.

Равновесный дислокационный профиль определим из условия стационарности энергетического функционала при прогибе дислокации с линейным натяжением T в поле сдвигового напряжения, действующего в рассматриваемой системе скольжения

$$\delta \left\{ \int_{-l/2}^{l/2} (-BR\sigma y + T\sqrt{1 + \dot{y}^2}) dx \right\} = 0, \quad \dot{y} = \frac{dy}{dx}, \quad (15)$$

где R — усредненный ориентационный фактор, связанный с приведенным сдвиговым напряжением в системе скольжения для σ . Условию (15) отвечает уравнение Эйлера

$$\frac{d}{dx} \frac{\partial}{\partial \dot{y}} (T\sqrt{1 + \dot{y}^2}) + BR\sigma = 0. \quad (16)$$

Для проведения оценочных расчетов далее воспользуемся известным выражением линейного натяжения в приближении Вольтера

$$T = \mu B^2 m (1 - \nu \cos^2 \varphi). \quad (17)$$

Здесь μ и ν — соответственно модуль сдвига и коэффициент Пуассона; $m = \ln(d_2/d_1)/4\pi(1 - \nu)$ — коэффициент, определяемый минимальным d_1 и максимальным d_2 размерами области интегрирования упругого поля; φ — угол между направлением вектора Бюргерса и касательной к дислокационной линии в рассматриваемой точке. Для изогнутого профиля угол φ изменяется в соответствии с выражением

$$\varphi(x) = \theta - \text{arctg } \dot{y}, \quad (18)$$

где θ — угол между вектором Бюргерса и осью x .

Подставляя (17) в (16), выразим линейное натяжение как функцию \dot{y} . При этом члены с нечетными степенями по \dot{y} несущественны, так как из условия четности энергетического функционала (15) относительно y эти члены при интегрировании пропадают. Тогда уравнение (16) примет вид

$$\ddot{y} \left(1 + \frac{1 - 2\nu + 3\nu \sin^2 \theta}{1 + \nu - 3\nu \sin^2 \theta} \dot{y}^2 \right) + \frac{R\sigma (1 + \dot{y}^2)^{5/2}}{\mu m B (1 + \nu - 3\nu \sin^2 \theta)} = 0. \quad (19)$$

Это уравнение решается в квадратурах с помощью замены переменных $\dot{y} = f/\sqrt{1 - f^2}$. В результате после несложных вычислений получим окончательное решение уравнения (16) в явном виде

$$y(x) = \int_{-l/2}^x \frac{f(z)}{\sqrt{1 - f^2(z)}} dz, \quad (20)$$

где

$$f(z) = \sqrt[3]{\frac{qz}{2S} + \sqrt{\left(\frac{qz}{2S}\right)^2 - \left(\frac{1}{3S}\right)^3}} + \sqrt[3]{\frac{qz}{2S} - \sqrt{\left(\frac{qz}{2S}\right)^2 - \left(\frac{1}{3S}\right)^3}},$$

$$S = \frac{\nu - 2\nu \sin^2 \theta}{1 + \nu - 3\nu \sin^2 \theta}, \quad q = \frac{R\sigma}{\mu m B (1 + \nu - 3\nu \sin^2 \theta)}.$$

Выражение (20) позволяет процедурой численного интегрирования вычислить дислокационную деформацию (12) и получить коэффициенты a_1 , a_2 и a_3 , описывающие вклад дислокаций в модули упругости при любом их прогибе для произвольной ориентации вектора Бюргерса. В этом суть новизны данной работы по сравнению с работами [7,8], где рассмотрение ограничено струнной дислокационной моделью [7] либо случаем малого прогиба дислокации [8].

Общие закономерности влияния дислокаций можно понять, используя струнную дислокационную модель, для которой $\nu = 0$. В этом случае решением уравнения (19) является дуга окружности постоянного радиуса и выражения для коэффициентов получаются в явном виде. Эти выражения приведены нами в [7]. Показано, что дислокационные составляющие модулей упругости с увеличением прогиба резко растут, в наибольшей степени этот рост имеет место для модуля упругости четвертого порядка. Причем если вклад дислокаций в модуль третьего порядка сравним с решеточным, то вклад в модуль четвертого порядка даже для случая сильного закрепления дислокаций как минимум на порядок величин превышает вклад решетки. Таким образом, изменение модуля Юнга в выражении (9) определяется только дислокационным ангармонизмом, описываемым модулем упругости четвертого порядка, и не зависит от вклада решетки и модуля третьего порядка. В этом отношении составной вибратор, по-видимому, является уникальным инструментом для исследования дислокационной структуры, аналогичным методу генерации третьей гармоники [6], но существенно более простым в методическом плане.

Необходимо отметить, что струнная дислокационная модель не может объяснить эффект аномального изменения модуля Юнга, поскольку для нее значение коэффициента a_3 положительно и, следовательно, знак изменения модуля Юнга в выражении (9) отрицателен. Для объяснения аномального эффекта необходимо рассмотреть раздельное влияние винтовой и краевой составляющих дислокационного смещения. Как показано в [6], эти составляющие оказывают противоположные по знаку вклады в ангармонизм. Данный факт экспериментально подтвержден нами в работе [8].

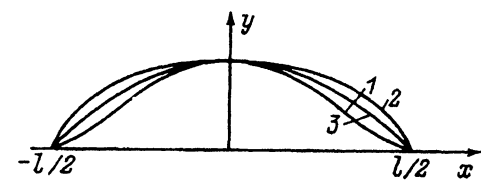


Рис. 2. Зависимость формы профиля от типа дислокации при прогибе первоначально прямолинейного дислокационного сегмента длиной l .

1 — краевая дислокация, 2 — винтовая дислокация, 3 — изгиб по параболе для линейного случая в струнном приближении.

Указанное различие знаков физически объясняется различной величиной энергии линейного натяжения для краевой и винтовой дислокаций. Поскольку в процессе прогиба исходная чисто винтовая или краевая дислокация приобретает смешанный характер, а энергия краевой больше, чем винтовой, то реальная дислокация изгибается так, чтобы максимально увеличить винтовую компоненту и уменьшить краевую. В результате профиль дислокационного сегмента примет форму, отличную от параболической, являющейся решением уравнения (16) для линейного струнного приближения (рис. 2). Для такой дислокации даже в линейном случае в условиях малого прогиба кривизна $\ddot{y} = d^2y/dx^2$ изменяется от точки к точке относительно кривизны центральной части \ddot{y}_0 по мере увеличения абсолютной величины наклона профиля $\dot{y} = dy/dx$. В первом приближении, очевидно, она может быть описана функцией $\ddot{y} = \ddot{y}_0(1 + K\dot{y}^2)$ с положительным значением коэффициента K для винтовой дислокации и отрицательным для краевой дислокации, что соответствует различиям форм профиля 1 и 2 на рис. 2. Поскольку, согласно (16), y_0 является решением линейного уравнения $\ddot{y}_0 = -BR\sigma/T$, то смещение рассматриваемой дислокации будет описываться нелинейным уравнением $\ddot{y} = -BR\sigma(1 + K\dot{y}^2)/T$, которое можно рассматривать как нелинейный закон Гука для дислокационного смещения со знаком нелинейности, определяемым знаком коэффициента K . Следовательно, краевая и винтовая дислокации будут давать различные по знаку вклады в измеряемые модули упругости высших порядков. При этом очевидно, что краевая дислокация обеспечивает положительный вклад, так как ее жесткость увеличивается с ростом смещения.

Данный вывод справедлив лишь для достаточно малого прогиба, когда можно пренебречь взаимодействием отдельных участков сегмента. При большом прогибе необходимо ввести в энергетический функционал (15) энергию взаимодействия. В результате из-за взаимного отталкивания противоположных отрезков сегмента профиль на рис. 2 будет уширяться, вызывая дополнительную нелинейность дислокационной деформации. Очевидно, эта нелинейность будет иметь одинаковый знак для обоих типов дислокаций. В то же время взаимодействие смежных участков соседних сегментов, наоборот, будет способствовать сужению профиля и противоположной по знаку нелинейности. Поэтому и в кристаллах с короткими закрепленными дислокационными сегментами, когда прогиб не является малым, можно также ожидать различного по знаку вклада дислокаций в измеряемые модули упругости высших порядков.

Оценку дислокационного вклада в модули упругости высших порядков с учетом ориентации вектора Бюргера можно получить для случая малого прогиба дислокаций, раскладывая выражение (20) в ряд по малому параметру q вплоть до членов третьего порядка включительно. В результате несложных преобразований значение профиля дислокационной линии примет вид

$$y = \frac{q}{2} \left(\frac{l^2}{4} - x^2 \right) + \frac{(1 + 2S)q^3}{8} \left(\frac{l^4}{16} - x^4 \right). \quad (21)$$

Далее, вычисляя дислокационную деформацию (12) и раскладывая ее в ряд (13) процедурой, описанной в [8], получим выражения для мо-

дулей упругости третьего и четвертого порядков кристалла с учетом дислокационного вклада

$$\alpha = \alpha_p - \frac{3(1 + 3\nu - 7\nu \sin^2 \theta)\Lambda l^4 \Omega R^2 R_0 E^3 \sigma_0}{160(1 + \nu - 3\nu \sin^2 \theta)^4 B^2 m^3 \mu^3},$$

$$\beta = -\frac{(1 + 3\nu - 7\nu \sin^2 \theta)\Lambda l^4 \Omega R^3 E^4}{160(1 + \nu - 3\nu \sin^2 \theta)^4 B^2 m^3 \mu^3}, \quad (22)$$

где σ_0 — величина внутреннего напряжения, обуславливающего начальный прогиб дислокации [8]; R_0 — ориентационный фактор для σ_0 . Здесь учтен тот факт, что $\beta_p \ll \beta$.

Отсюда следует, что для краевой дислокации знак модуля β положителен и, кроме того, его значение более чем в 40 раз превышает значение для винтовой дислокации. Однако из-за большей энергии образования краевых дислокаций результирующий дислокационный вклад в модули высших порядков в общем случае может быть как положительным, так и отрицательным. При деформации изгибом, как известно [9], активизируется преимущественное движение краевых дислокаций, поэтому здесь модуль β положителен.

Сделаем численную оценку полученных результатов применительно к изгибу образца из поликристаллической бронзы [3] с размерами $2 \times 2 \times 50$ мм. Принимая $\Lambda l^2 = 0.1$, $l = 0.7 \mu\text{м}$, $B = 0.36 \text{ нм}$, $\nu = 1/3$, $m = 1$, а также значения Ω и R , равные, согласно расчетам Тейлора для ГЦК поликристаллов, 0.32, получим значение $\beta/E = 13 \cdot 10^3$. Соответствующее этому значению изменение частоты в выражении (10) при $(M + M_p)/M = 1.5$ составляет $\Delta\omega/\omega_0 = 1.2 \cdot 10^{-3}$, что согласуется с величиной экспериментально наблюдаемого роста частоты в работах [1-3].

Проведенные исследования позволяют заключить, что аномальное изменение модуля Юнга при изгибе обусловлено ангармонизмом краевых дислокаций.

В заключение отметим, что положительный вклад дислокаций в модули упругости высших порядков позволяет объяснить известный эксперимент Алерса [10] по облучению высокочистого кристалла меди γ -лучами. В результате такого облучения наклон зависимости скорости звука по деформации, описываемый модулями упругости третьего порядка, уменьшался почти до нуля. Аналогичный эффект наблюдался нами при пластической деформации поликристаллической меди, где даже наблюдали изменение знака данного наклона сразу после деформации, свидетельствующее о соответствующем изменении знака модуля упругости третьего порядка. Указанные эффекты объясняются появлением внутренних напряжений σ_0 в результате упрочнения, искривляющих начальный профиль дислокационной линии. При этом из-за преимущественного влияния краевых дислокаций в меди (в других металлах не всегда так) абсолютная величина модуля α в выражении (22) уменьшится, поскольку $\alpha_p < 0$ и при $\sigma_0 = 10 \text{ МПа}$ оба слагаемых сравнимы по величине.

Автор выражает благодарность Б.И.Смирнову, Е.А.Мамонтову и А.А.Викарчуку за интерес и поддержку в работе.

Список литературы

- [1] Лебедев А.Б., Кустов С.Б., Кардашев Б.Л. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 9. С. 2915–2921.
- [2] Лебедев А.Б., Буренков Ю.А., Голубенков Т.И. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 2. С. 420–430.
- [3] Сапожников К.В., Кустов С.Б., Капаня П., Пилецки Ш. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 1. С. 83–90.
- [4] Хантингтон Г. // УФН. 1961. Т. 74. № 3. С. 461–520.
- [5] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., 1978. 729 с.
- [6] Hikata A., Elbaum C. // Phys. Rev. 1966. V. 144. N 2. P. 469–477.
- [7] Никитин К.Е. // Металлофизика. 1983. Т. 5. № 3. С. 82–88.
- [8] Никитин К.Е. // Металлофизика. 1985. Т. 7. № 4. С. 98–103.
- [9] Фридель Ж. Дислокации. М., 1967.
- [10] Алерс Дж. Физическая акустика. Т. 4. Ч.А. / Под ред. У.Мэзона. М., 1969. С. 322–344.

Тольяттинский
политехнический институт

Поступило в Редакцию
9 февраля 1994 г.
В окончательной редакции
8 июня 1994 г.