

О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН С ДЕФЕКТАМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Соболь В. Р., Логвинович П. Н.

*Белорусский государственный аграрный технический университет,
Минск, Республика Беларусь*

При исследовании физических свойств твердых тел широко применяются акустические методы, охватывающие диапазон частот от инфра- до гиперзвуковых колебаний, отвечающих, соответственно, долям герца и десяткам, сотням гигагерц. Колебания низких частот позволяют изучать эффекты упорядочения и перестройки атомной структуры материалов, связанные с диффузией примесей и вакансий в кристаллической решетке. Колебания частот звукового и ультразвукового диапазона позволяют изучать различные аспекты пластичности и прочности материалов, определяемые, в том числе, и дефектной структурой. В целом, высокая чувствительность и точность акустических методов дают возможность проводить измерения при уровнях локальных деформаций от 10^{-10} – 10^{-9} , когда выполняется закон Гука и всякие искажения структуры отсутствуют, до 10^{-3} – 10^{-2} , которые отвечают пределам прочности. В дополнение к этому акустические методы, основанные на измерении скорости, фазы и поглощения акустических волн, позволяют вести непрерывные наблюдения за различными физико-химическими превращениями, происходящими в средах, включая кинетику фазовых переходов, изучать характер внутрикристаллических сил, действующих между атомами и ионами [1–4].

Как известно, прочностные свойства материалов определяются не только межатомным взаимодействием, но и типом дефектности кристаллической структуры. По результатам измерения скорости звука упругие модули металлов возрастают с понижением температуры и в области температуры жидкого водорода выходят на насыщение. Это, по сути, означает, что уменьшается вклад ангармонических составляющих в спектре колебаний атомов или ионов. Кроме этого, с понижением температуры естественно ожидать уменьшения эффективности действия механизмов микропластичности, когда твердое тело при малых деформациях приближается к идеально упругой среде. При использовании акустических методов изучения материалов возникает проблема корректной оценки воздействия на скорость звука и фазу зондирующей волны различных факторов. Непосредственно изучаемые процессы могут быть искажены эффектами, связанными с присутствующими дефектами структуры, которые, в зависимости от их количества, могут существенно изменить реализуемые на опыте упругие постоянные по сравнению с их справочными значениями.

В работе представлены результаты анализа комплексного воздействия дислокаций и точечных дефектов на распространение низкочастотных акустических волн. Приняты во внимание механизмы диссипации энергии механических колебаний, обусловленные взаимодействием дислокаций с примесными атомами. В рассмотрении используется струнная дислокационная модель, которая предусматривает способность изогнутой дислокации к выпрямлению под действием линейного натяжения [5–7].

Как известно, упругие поля напряжений дислокаций и примесных атомов взаимодействуют, и, в результате, примесные атомы испытывают со стороны дислокации действующие силы притяжения, что заставляет их концентрироваться у дислокаций, образуя так называемые атмосферы. Действительно, с одной стороны от плоскости скольжения

краевой дислокации расположена область всестороннего сжатия, а с другой — растяжения. Атомы элемента, растворенного по способу внедрения, притягиваются к области гидростатического растяжения и размещаются в ней над краем экстраплоскости, поскольку здесь им находиться легче, чем в области совершенной решетки, где подобные атомы создают значительные поля напряжений. Атомы элемента, растворенного по способу замещения, если они больше размеров атомов основной решетки, также будут притягиваться к области всестороннего растяжения. Атомы элемента, растворенного по способу замещения, если они меньше по размеру основных атомов, притягиваются к области сжатия и размещаются над краем экстраплоскости, что дает выигрыш в энергии.

Энергию взаимодействия положительной краевой дислокации с примесным атомом можно представить в виде

$$W = \frac{Gb\delta V(1+\nu)\sin\vartheta}{1-\nu r}, \quad (1)$$

где r и ϑ — цилиндрические координаты примесного атома относительно прямой линии дислокации и ее вектора Бюргерса, G — упругий модуль сдвига, δV — локальное изменение объема в точке нахождения примесного атома, ν — коэффициент Пуассона, b — величина вектора Бюргерса.

Из выражения (1) следует, что, чем больше фактор размерного несоответствия примесного и основного атомов, тем больше энергия упругого взаимодействия дислокации и примеси. Во избежание расходимости, расстояние r снизу ограничивают величиной вектора Бюргерса, что физически означает применение теории упругости только для области вне ядра дислокации. К примеру, для атома замещения энергия взаимодействия с краевой дислокацией может быть представлена как

$$W = \frac{4GbR_0^3\varepsilon(1+\nu)\sin\vartheta}{3(1-\nu)r}.$$

Здесь R_0 — радиус собственного атома кристаллической решетки, ε — относительная разность радиусов примесных атомов R_i и собственных атомов, то есть $\varepsilon = \frac{R_i - R_0}{R_0}$.

Максимальная энергия взаимодействия в таком рассмотрении по порядку величины будет $W = \frac{4Gb^3\varepsilon(1+\nu)}{3(1-\nu)}$, и вдоль дислокационной линии длиной L будут распола-

гаться цепочки примесных атомов с количеством в каждой из них L/λ (λ — среднее расстояние между атомами примеси, которое выражается как $\lambda = a \cdot c^{-1/3}$, a — постоянная кристаллической решетки, c — концентрация атомов примеси в области нахождения дислокационной линии). Тогда выигрыш энергии при осаждении вдоль дислокации

единичной цепочки примесей можно задать как $\frac{4Gb^3\varepsilon(1+\nu)L}{3(1-\nu)\lambda}$. Соответственно, энер-

гия, приходящаяся на единицу длины дислокации, по смыслу отвечающая дополнительной силе линейного натяжения, есть

$$W_0 \cong \frac{4Gb^2\varepsilon(1+\nu)c^{\frac{1}{3}}}{3(1-\nu)} \quad (2)$$

Подобно тому, как искривленная дислокация при отсутствии примесей, стремясь к минимуму энергии, распрямляется и обретает минимальную длину, так и искривленная дислокация при наличии примесей будет получать дополнительный выигрыш в

энергии, если, распрямляясь, она будет приближаться к прямолинейной цепочке атомов примеси. Это следует из того, что отклонение дислокации от цепочки атомов примесей при искривлении – выгибании приводит к возрастанию энергии как за счет удаления от примесных атомов, так и за счет увеличения длины. По смыслу это выражение отвечает дополнительной силе линейного натяжения, поскольку именно такая величина энергии требуется, чтобы удалить единичный элемент длины дислокации от места расположения примеси на бесконечно большое расстояние. Для закрепленной в узлах дислокационной сетки дислокации удаление от цепочки примесных атомов означает и ее одновременное искривление, то есть удлинение, которое также приводит к увеличению упругой энергии. Следует заметить, что в известных моделях взаимодействия дислокаций с примесями предполагается, что притяжение дислокации к примеси исчезает при малейшем удалении участка дислокации от примеси. Это приводит к лавинообразному отрыву от примесей на всем участке дислокации, закрепленной в точках пересечения с другими протяженными дефектами. Таким механизмом пытаются обосновать наличие гистерезиса в каждой локальной точке пространства между напряжением и деформацией. Исходя из этого имеет смысл механизм взаимодействия дислокационного отрезка с примесными атомами представлять как дополнительный источник упругого натяжения.

Представим дифференциальное уравнение движения дислокационного отрезка в поле знакопеременной силы в приближении струнной модели в виде

$$A \frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} + B \frac{\partial \zeta}{\partial t} - C \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} = b\sigma \sin \omega t. \quad (3)$$

Здесь: $A = \rho b^2 / \pi$ – эффективная масса дислокации, приходящаяся на единицу ее длины; ρ – плотность вещества; ζ – величина смещения дислокационного сегмента из положения равновесия вдоль его длины y , которая минимальна в точках закрепления и достигает максимума в центре; t – время; B – коэффициент определяющий силу динамического вязкого трения сегмента, который является функцией температуры, поскольку определяется электронной и фононной составляющими воздействия на смещение атомов из положения равновесия; $C = \frac{2Gb^2}{\pi(1-\nu)} \left[1 + \frac{2}{3}(1+\nu)\epsilon c^3 \right]$ – коэффициент

определяющий силу линейного натяжения дислокации как за счет удлинения, так и за счет взаимодействия с примесями замещения; $b\sigma$ – приведенное к длине дислокации амплитудное значение знакопеременной силы внешнего источника напряжения, действующего с циклической частотой ω . Концентрация примесных атомов вблизи дислокационной линии c связана с равновесной концентрацией примесей вдали от дислокации c_0 так называемым больцмановским фактором $c = c_0 e^{W_0/kT}$.

Применяя известные приемы решения уравнения (3), которые заключаются в первоначальной трансформации указанного уравнения в частных производных с помощью операционного метода к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка от координаты вдоль длины дислокационного сегмента, его решению и обратному переходу с помощью преобразования Лапласа, было получено выражение для смещения дислокации из положения равновесия под действием внешней периодической силы. Выражение для смещения одной дислокации было использовано для определения амплитуды пластической деформации коллективом дислокаций, распределенных в объеме материала. Далее, используя положения теории о распространении акустических колебаний в неидеальной по упругости среде, микропластическая деформация в упругом поле звуковой волны была отождествлена с механизмом, ответственным за поглощение энергии упругих колебаний, который приводит к затуханию энергии упругих колебаний, наподобие того, как мнимая составляющая скорости электромагнитных

волн приводит к появлению ослабления интенсивности света, описываемому законом Бугера. Используя полученное выражение для амплитуды микропластической деформации, обусловленной колебанием дислокационных сегментов возле положения равновесия, было получено выражение для скорости распространения акустических колебаний, в котором скорость определяется как величина, которая отличается от своего значения в приближении бездислокационного и безпримесного материала

$$v = \left(\frac{G}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{\Lambda}{V} \frac{l^4 \pi^2 (1-v)^2}{4Gb^2 \left[1 + (1+v) \epsilon c_0 e^{\frac{W}{3kT}} \right]} \frac{B\omega}{1 + \frac{B^2 \omega^2 l^4 \pi^2 (1-v)^2}{16G^2 b^4 \left(1 + (1+v) \epsilon c_0 e^{\frac{W}{3kT}} \right)}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

Здесь $\frac{\Lambda}{V}$ – плотность дислокаций, l – характерная длина дислокационного сегмента.

По смыслу первый сомножитель является скоростью акустической волны бездефектного материала, а вклад протяженных и точечных дефектов кристаллической структуры определяется поправочным слагаемым к единице во втором сомножителе. Легко видеть, что присутствие дислокаций с большой плотностью вне зависимости от концентрации примесей ухудшает способность материала передавать энергию акустических колебаний. При этом наличие дислокационных отрезков большой длины приводит к уменьшению скорости звука, что физически означает сравнительную легкость реализации значительных уровней пластической микродеформации, поскольку длинные дислокации легче искривляются под действием приведенного напряжения при прочих равных условиях. Полученное выражение позволяет оценить вклад температурного механизма в эффективный упругий модуль, который возрастает с понижением температуры, поскольку концентрация примесных атомов на дислокациях, может существенно отличаться от своего равновесного значения, вплоть до выпадения новых фаз вблизи протяженных дефектов.

Аналитические результаты по взаимозависимости скорости распространения упругих колебаний и дефектности структуры были численно смоделированы для гипотетического металлического материала близкого по упругим постоянным и плотности к алюминию. На рис. 1 представлена скорость акустической волны как функция плотности дислокаций. На основании представленных данных можно сделать вывод о том, что микропластичность сильнее всего реализуется при частотах колебаний порядка десятков килогерц (кривая 2), что можно связать с комбинированным воздействием инерционных и вязких сил. Для сильно деформированных материалов целесообразно использовать субгигагерцовый диапазон частот.

Критичность в поведении упругих свойств материала по отношению к колебаниям в диапазоне частот $10^4 \div 10^5$ Гц иллюстрируется рис. 2, на котором представлена частотные зависимости скорости звука при различных плотностях дислокаций. Из этого рисунка следует, что при любой плотности дислокаций использование колебаний с частотой 1 МГц и выше предпочтительнее, если требуется избежать воздействия пластичности на фазу зондирующей волны.

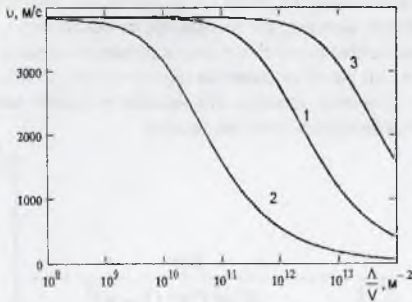


Рис. 1. Скорость акустической волны как функция плотности дислокаций.

1 – $\omega = 10^3$ рад/с; 2 – $\omega = 10^6$; 3 – $\omega = 10^9$

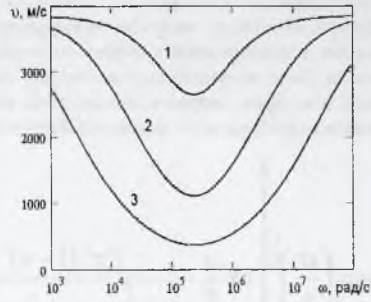


Рис. 2. Скорость акустической волны как функция частоты.

1 – $\frac{\Lambda}{V} = 10^{10}$ м⁻²; 2 – $\frac{\Lambda}{V} = 10^{11}$; 3 – $\frac{\Lambda}{V} = 10^{12}$

$$G = 4 \cdot 10^{10} \text{ Па}, \nu = 0,3, B = 5 \cdot 10^{-4} \text{ Па}\cdot\text{с}, \rho = 2,7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3, b = 4 \cdot 10^{-10} \text{ м}, l = 10^{-4} \text{ м}, \\ R_0 = 10^{-10} \text{ м}, \epsilon = 0,1, c_0 = 10^5 \text{ м}^{-3}, T = 300 \text{ К}$$

Список литературы

1. Соболев, В.Р. О воздействии деформации композиционных материалов на коэффициенты упругой жесткости и скорость акустических волн / В.Р. Соболев, П.Н. Логвинович // ПОЛИКОМТРИБ-2007: тезисы докл. междунар. науч.-техн. конф., Гомель, 16–19 июля 2007 г. / ИММС НАНБ; редкол.: В.Н. Адериха [и др.]. – Гомель, 2007. – С. 80.
2. Логвинович, П.Н. Исследование процессов полимеризации композитных экоматериалов для сельскохозяйственного машиностроения / П.Н. Логвинович // Агропанорама. – 2007. – № 2. – С. 19–25.
3. Ультразвуковой динамический метод исследования объектов и явлений / В.И. Крылович [и др.] // Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов: материалы Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 25–26 окт. 2000 г. / Белор. гос. технол. ун-т; редкол.: И.М. Жарский [и др.]. – Минск, 2000. – С. 35–37.
4. Алексеевко, В.И. Применение ультразвуковых частотно-фазовых методов для исследования ферромагнитных материалов / В.И. Алексеевко, В.И. Крылович, П.Н. Логвинович // Дефектоскопия. – 1985. – № 6. – С. 90–92.
5. Соболев, В.Р. О влиянии сил вязкости на движение дислокационного сегмента и распространение упругих колебаний в металлах / В.Р. Соболев [и др.] // Доклады НАН Беларуси. – 2007. – Т. 51, № 3. – С. 13–18.
6. Соболев, В.Р. О дислокационных механизмах поглощения акустических волн / В.Р. Соболев, П.Н. Логвинович // Современные научные проблемы и вопросы преподавания теоретической и математической физики, физики конденсированных сред и астрономии: сб. материалов респ. науч.-метод. конф., Брест, 19–20 апр. 2007 г. // Брест. гос. ун-т им. А.С. Пушкина; редкол.: В.А. Плешохов [и др.]. – Брест: Изд-во БрГУ, 2007. – С. 164–167.
7. Соболев, В.Р. Температурные механизмы взаимодействия дислокаций с примесями в процессах передачи энергии упругих колебаний / В.Р. Соболев [и др.] // ИФЖ. – 2007. – Т. 80, № 4. – С. 25–29.