

低应力振幅下非线性滞弹性内耗峰 (P'_1 峰) 的数值分析^{*}

方前锋

(中国科学院固体物理研究所内耗与固体缺陷开放研究实验室, 合肥 230031)

(1996 年 6 月 27 日收到)

通过差分方法, 对在位错弯结气团模型的基础上推导出来的溶质原子在位错芯区内的纵向扩散方程, 进行了数值求解, 由此计算出了与 P'_1 峰相应的内耗和横量亏损随温度和振幅的变化曲线. 数值计算得到的内耗曲线与以前的实验曲线, 无论在外观形态上, 还是在移动规律上, 都完全一样. 这样就从定量上解释了 P'_1 峰.

PACC: 6240; 6630J; 0260

1 引 言

非线性滞弹性是葛庭燧在总结了大量实验结果的基础上提出来的一个概念, 用来表征固体材料的这样一种性质, 即在很低的应力振幅下(小于 $10^{-5} G$, G 是切变模量), 弛豫型内耗也表现出振幅效应. 它所反映的实际上是在低应力振幅下, 动态应力与应变的非线性关系. 非线性滞弹性内耗的特点是既出现温度内耗峰(当内耗作为温度的函数时), 同时又在温度内耗峰出现的温度区间内出现振幅内耗峰(当内耗作为振幅的函数时), 且温度内耗峰随着频率的降低而向低温移动, 表现弛豫的性质. 经过几十年来我国科学工作者在 Al-Mg, Al-Cu 固溶体中的大量工作, 基本上奠定了非线性滞弹性这门新学科的实验基础, 发现了与溶质原子和位错(弯结)的交互作用有关的从低温到高温的 7 个温度内耗峰^[1,2]. 特别是对位于室温附近的三个内耗峰(P_0 , P'_1 , P''_1)研究得更加详细, 已经证实了它们牵涉到溶质原子沿着位错芯的管道扩散, 因此使得从实验上直接测定溶质原子沿着位错管道的扩散系数成为可能.

最近, 关于 P_0 和 P'_1 峰的理论工作取得了新的进展^[3-5]. 应用位错弯结气团模型, 并引入溶质原子在弯结链上某一位置出现的概率密度或分布函数的概念, 讨论了溶质原子的扩散情况. 从弯结链在外力作用下的重新分布算出所导致的能量变化. 进而求出施加于溶质原子上的横向力和纵向力, 从而列出了溶质原子的横向漂移和纵向漂移的扩散方程. 通过求解在准静态外力作用下溶质原子的扩散方程, 得出了这种扩散过程所对应的滞弹

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

性蠕变的弛豫强度和弛豫时间的表达式,它们和外力的关系是非线性的,并可和微蠕变的实验进行直接比较.但所求出的交变应力下的内耗和模量亏损的近似解析式,只能在内耗峰表观形式上(包括温度内耗峰和振幅内耗峰及其移动规律)与实验结果比较,一些实验细节还不能定量比较^[5].本文针对 P_1' 峰的情况,通过差分方法,直接对溶质原子沿着位错管道的扩散方程进行了数值求解,从而求出内耗和模量亏损的值.由此算出的温度内耗峰和振幅内耗峰不仅在移动规律上,而且在曲线形状上与实验曲线完全一致.

2 理论计算公式

2.1 扩散方程与差分格式

根据我们以前的工作^[4,5], P_1' 峰对应于坐落在位错弯结上的溶质原子沿着位错管道的扩散过程,它的扩散方程可写成如下形式:

$$\frac{\partial \rho_L}{\partial t'} = \frac{D_L}{\omega L^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial \rho_L}{\partial \xi} - \alpha^2 \xi \rho_L \right), \quad (1)$$

$$\text{边界条件为} \quad \left[\frac{\partial \rho_L}{\partial \xi} - \alpha^2 \rho_L \right]_{\xi=+1} = \left[\frac{\partial \rho_L}{\partial \xi} + \alpha^2 \rho_L \right]_{\xi=-1} = 0, \quad (2)$$

$$\text{归一化条件为} \quad \int_{-1}^{+1} L \rho_L(\xi, t') d\xi = 1, \quad (3)$$

$$\text{初始条件为} \quad \rho_L(\xi, 0) = \frac{1}{2L}, \quad (4)$$

$$\text{其中} \quad \alpha^2 = \frac{3(\sigma b h)^2 L^3}{4 P k T}, \quad P = \frac{G(b h)^2}{4 \pi}, \quad \xi = \frac{x}{L}, \quad (5)$$

G 是切变模量, b 是位错的 Burgers 矢量, $2L$ 是位错段的长度, h 是弯结的高度, k 是 Boltzmann 常数, T 是绝对温度, $t' = \omega t$ 是约化时间, ω 是外加交变应力的圆频率, D_L 是溶质原子沿位错芯的纵向扩散系数, $\rho_L(\xi, t') d\xi$ 是 t' 时刻溶质原子在位错线上处于位置 $\xi \rightarrow \xi + d\xi$ 间的概率. 而 $\sigma = \sigma_0 \sin t'$ 是外加的交变应力.

弯结链在外力作用下侧向运动所产生的应变与弹性应变之和为^[4,5]

$$\epsilon(t') = \frac{\sigma}{G} + \frac{3 \Delta \sigma (b h)^2 L^2}{4 P} \left[\frac{7}{9} + \int_{-1}^{+1} \rho_L(\xi, t') \xi^2 d\xi \right]. \quad (6)$$

为了精确地考查溶质原子在交变应力下沿位错芯的管道扩散所引起的内耗和模量亏损的变化细节,我们对交变应力下的扩散方程(1)利用差分方法进行了数值求解,具体做法简述如下^[6]:首先对 ξ 和 t' 坐标进行网格划分,把区间 $[-1, 1]$ 分成 N 个小区间(宽为 w , $w = 2/N$),在 t' 方向选择时间步长 τ . 为了便于对边界条件(2)式进行差分近似,我们将网格向左平移 $w/2$, 再在右边加上一组节点(如图 1), 所以有: $\xi = (i + 0.5)h - 1$, $t = j\tau$, $i = -1, 0, 1, \dots, N$; $j = 0, 1, \dots$. 我们的目的是要从 $t' = 0$ 的底层(初始条件)出发,在满足边界条件的情况下,逐层求出 ρ_L 在节点 (i, j) 上的值. 当 w 和 τ 足够小时,通过内插值方法便可得到函数 ρ_L 在任一 (ξ, t) 处的值. 为此,用差商代替导数:

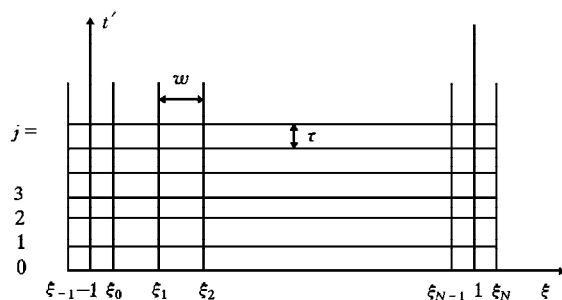


图1 网格划分示意图 w 和 τ 分别是空间和时间步长

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_L}{\partial \xi} &= \frac{\rho_L(i+1, j) - \rho_L(i-1, j)}{2w}, \\ \frac{\partial \rho_L}{\partial t'} &= \frac{\rho_L(i, j+1) - \rho_L(i, j)}{\tau}, \\ \frac{\partial^2 \rho_L}{\partial \xi^2} &= \frac{\rho_L(i+1, j) - \rho_L(i, j) + \rho_L(i-1, j)}{w^2}.\end{aligned}\quad (7)$$

将(7)式代入(1)和(2)式,则可把偏微分方程(1)和边界条件(2)式变成如下的差分方程[其中 $u(i, j) = L\rho_L(i, j)$, 截断误差为 $(w^2 + \tau^2)$ 的高阶无穷小]:

$$(1 + S_{ij})u(i, j+1) = \frac{r}{2}P_{ij}[u(i+1, j+1) + u(i+1, j)] + (1 - S_{ij})u(i, j) + \frac{r}{2}Q_{ij}[u(i-1, j+1) + u(i-1, j)],$$

$$(-1 + \lambda_j)u(-1, j) + (1 + \lambda_j)u(0, j) = 0,$$

$$(1 + \lambda_j)u(N-1, j) + (-1, \lambda_j)u(N, j) = 0, \quad (8)$$

$$\text{其中 } P_{ij} = \frac{D_L}{\omega L^2} \left\{ 1 - \lambda_{j+1/2} \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) w - 1 \right] \right\}, \quad Q_{ij} = \frac{D_L}{\omega L^2} \left\{ 1 + \lambda_{j+1/2} \left[\left(i + \frac{1}{2} \right) w - 1 \right] \right\},$$

$$S_{ij} = \frac{rD_L}{\omega L^2} (1 + \lambda_{j+1/2} w), \quad \lambda_j = \frac{w}{2} \frac{3(\sigma_0 bh)^2 L^3}{4 PkT} \sin^2(j\tau), \quad r = \frac{\tau}{w^2},$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, N-1, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

这是一个关于 $u(i, j)$ 的线性迭代代数方程组(共有 $N+2$ 个方程). 我们可根据初始条件 $u(i, 0)$, 通过求解此代数方程组, 依次求出 $u(i, 1), u(i, 2), \dots, i = -1, 0, 1, \dots, N$. 而对任一 j , 有 $\sum_{i=0}^{N-1} u(i, j) w = 1$.

为了保证数值计算的收敛性以及差分方程(8)收敛于偏微分方程(1)和边界条件(2)式, 必须适当选择空间和时间步长, 使数值计算满足收敛性条件^[6]:

$$w \leq \frac{2}{\beta}, \quad \tau \leq \frac{4\omega L^2}{\beta D_L} \frac{1}{2 + \beta}, \quad (9)$$

其中 $\beta = \frac{3(\sigma_0 bh)^2 L^3}{4 PkT}$. 但当 σ_0 和 T 变化使 w, τ 较大时, 为了保证精度, 限制 $w, \tau \leq$

10^{-2} .

总的应变(6)式可写为

$$\epsilon(j) = \frac{\sigma_0 \sin(j\tau)}{G} \left\{ 1 + \frac{\pi \Delta L^2}{3} \left[7 + 9 \sum_{i=0}^N \left(i\omega - \frac{\omega}{2} - 1 \right)^2 u(i, j) \omega \right] \right\}. \quad (10)$$

2.2 内耗与模量亏损的计算公式

内耗为

$$Q^{-1} = \frac{\Delta W}{2\pi W} = \frac{G\Delta W}{\pi\sigma_0^2} = \frac{G}{\pi\sigma_0^2} \oint \epsilon d\sigma = \frac{G}{\pi\sigma_0} \sum_{j=0}^{2\pi/\tau} \cos(j\tau) \epsilon(j) \tau, \quad (11)$$

储能为

$$W = \int_0^{\pi/2} \sigma d\epsilon = \sigma_0 \epsilon \left(\frac{\pi}{2\tau} \right) = \sigma_0 \sum_{j=0}^{\pi/2\tau} \cos(j\tau) \epsilon(j) \tau, \quad (12)$$

模量亏损为

$$\frac{\Delta M}{M} = \frac{2GW}{\sigma_0^2} = 1. \quad (13)$$

计算时, $D_L = D_{L0} \exp\left(-\frac{H}{kT}\right)$ 中 D_{L0} , H 以及其他参数的选取同文献[5], 即: $L = 10^3 b$, $\Delta L^2 = 0.01$ (相当于 $\Lambda \sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$); $Gb^3 = 5 \text{ eV}$, $f = 1 \text{ Hz}$, $h \approx b$, $H = 0.5 \text{ eV}$, D_{L0} 的选择是使 $\sigma_0 = 0$ 和 $f = 1 \text{ Hz}$ 时的峰温为 340 K , 即: $D_{L0} = \frac{2L^2}{\pi} \exp(H/kT_p)$, $T_p = 340 \text{ K}$ 是 P_1' 峰的峰温. 因此, 在给定 (T, σ_0) 的条件下, 所有参量都是已知, 即可由此步骤通过数值计算求出内耗和模量亏损. 保持 σ_0 不变, 改变 T , 可得温度内耗曲线(Q^{-1} - T 曲线); 保持 T 不变, 改变 σ_0 , 可得振幅内耗曲线(Q^{-1} - σ_0 曲线).

在线性情况下, 总应变(10)式应该是 σ_0 的线性函数, 并且当其时间作傅里叶展开后, 它应具有形式 $b \sin t' + a \cos t'$, 其中 a, b 为常数, 且与 σ_0 成正比, 即它只含有和外力频率相同的频率项. 在非线性的情况下, (10)式给出的应变不仅是 σ_0 的非线性函数, 而且其傅里叶展开工或还应含有更高频率的频率项. 如果将 $\epsilon(t')$ 展开为傅里叶级数, 数值计算表明偶数倍频分量等于零, 而奇数倍频分量不等于零, 所以傅里叶级数可写为

$$\epsilon(t') = \sum_{n=0}^{\infty} [a_{2n+1} \cos(2n+1)t' + b_{2n+1} \sin(2n+1)t'], \quad (14)$$

其中

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(t') \cos nt' dt', \quad b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(t') \sin nt' dt',$$

且 a_n 和 b_n 都是 σ_0 的非线性函数.

3 计算结果

图2给出当 $T = 340 \text{ K}$ 和 $\sigma_0 = 3 \times 10^{-6} \text{ G}$ 时位错弯结运动产生的应变 ϵ_d (即(10)式花括号中的第二项)与时间的变化关系曲线(实线), 虚线是作为比较的弹性应变, 均以弹

性应变幅 σ_0/G 为单位. 可见, ϵ_d 基本上随时间呈正弦规律变化. 它与正弦曲线的位相落后及其与正弦曲线的偏离(分别表现内耗的大小和非线性效应)在图 2 中几乎不能得到反映.

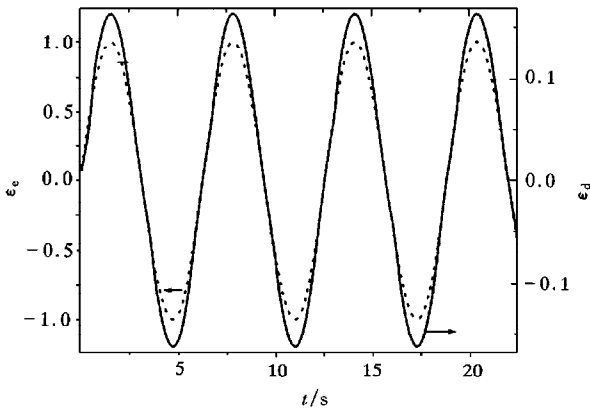


图 2 位错弯结运动产生的应变 ϵ_d (实线)和弹性应变 ϵ_e (虚线)与时间 t 的变化关系曲线(均以弹性应变幅 σ_0/G 为单位)

表 1 给出 $T=340\text{ K}$ 时 a_{2N-1} 和 b_{2N-1} 随应变振幅的变化 ($N=1,2,3,4$, 略去了更高频的项). 可见, b_1 是主要的分量, 其它分量都较小, 比 b_1 小 2 至 3 个数量级. 这么小的非线性现象在应力-应变曲线或应变-时间曲线(如图 2)上很难表现出来, 通过内耗测量手段却能非常明显地反映出来(在内耗和模量亏损-应变振幅曲线上出现明显的变化). 由表 1 可见, 当应变振幅增加时, b_1 (主要反映模量亏损)单调增加, a_1 的绝对值(主要反映内耗)先增加, 经过一个峰值后又下降, 与振幅内耗峰的峰位对应. 当应变振幅较小时, 高频分量较小; 当应变振幅处于 $(1.5-3)\times 10^{-6}$ 时, 即处于振幅内耗峰的峰位附近时, 高频分量最大, 说明此时的非线性效应最强烈. 当应变振幅更大时, 尽管内耗较小, 但高频分量也较大.

表 1 $T=340\text{ K}$ 时不同应变振幅下 P_1' 峰的 ϵ_d 的傅里叶展开系数

ϵ_0 / 10^{-6}	b_1 / 10^{-1}	a_1 / 10^{-3}	b_3 / 10^{-3}	a_3 / 10^{-3}	b_5 / 10^{-3}	a_5 / 10^{-4}	b_7 / 10^{-4}	a_7 / 10^{-4}
0.5	1.07	-0.39	-0.22	0.37	~0	-0.10	~0	~0
1.5	1.35	-4.84	-5.96	4.88	1.04	1.00	-2.29	-2.30
3	1.57	-2.45	-6.46	-0.05	-2.53	15.83	0.60	11.93
7	1.65	-0.44	-1.63	-0.69	-1.48	0.50	-11.42	0.50

图 3 给出通过数值计算得到的内耗和模量亏损在不同应变振幅下与温度的关系(a)以及在不同温度下与应变振幅的关系(b). 由图 3(a)可见, 温度内耗峰随振幅的增加先向低温方向移动, 然后再向高温方向移动. 模量亏损随温度的升高而增加, 为正常变化, 与实验相符. 仔细分析表明, 当振幅很小时, 温度内耗峰是标准的 Debye 峰, 随着振幅的增加, 峰宽增加, 经过一个极大值后又下降, 并且峰形左右不对称. 由图 3(b)可见, 振幅内耗峰随温度升高向低振幅端移动, 且峰高上升, 与准静态力下的近似结果类似. 但当温度超过

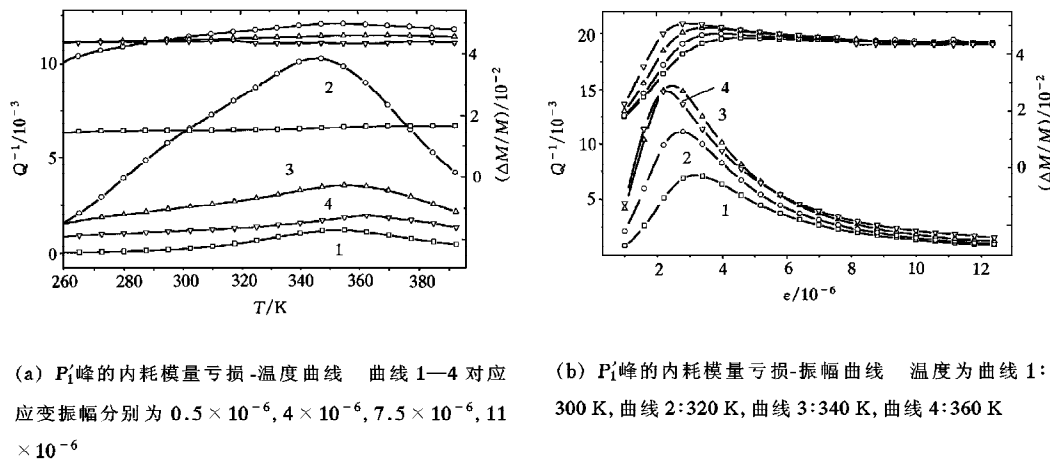


图3 数值计算得到的 P_1' 峰的内耗和模量亏损在4个不同应变振幅下与温度的关系以及在4个不同温度下与应变振幅的关系

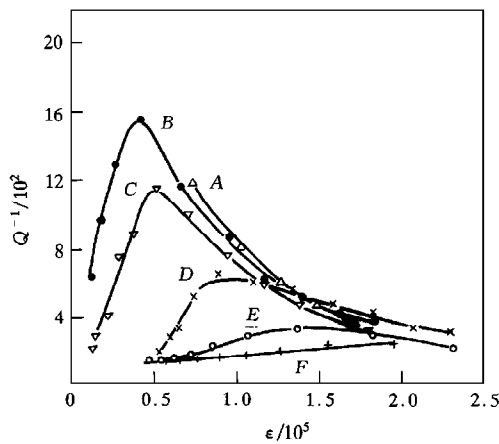


图4 实验测量的 P_1' 峰的内耗在6个不同温度下与应变振幅的关系 曲线A—F分别对应347, 334, 324, 314, 302, 293 K

温度内耗峰的峰温后,振幅内耗峰随温度升高仍向低振幅端移动,但峰高下降.模量亏损随振幅的增加而增加,也为正常变化.

作为比较,图4给出实验测出的 P_1' 的振幅内耗曲线^[7].可见,通过数值计算得到的振幅内耗曲线(图3(b))与以前的实验曲线(图4)无论在外观形态上还是在移动规律上都完全一致.只是在振幅内耗峰的高度和峰位上有差异.可以通过调整有效位错密度 Δ (主要影响振幅内耗峰的峰高)和位错段长度 $2L$ (主要影响振幅内耗峰的峰位)这两个参数来消除这些差异,使理论曲线与实验结果完全符合.亦即可通过理论曲线与实验结果比较来得到 Δ 和 $2L$.

4 讨 论

通过差分方法,对溶质原子在位错芯区内的纵向扩散方程,进行了数值求解,并由此计算出了相应的内耗和模量亏损随温度和振幅的变化曲线.此计算结果与实验结果符合得相当好,说明了位错弯结气团模型的正确性,也说明了通过准静态力作用下得到的弛豫强度和弛豫时间来计算内耗和模量亏损的近似方法可得到正确的内耗曲线移动的规律,因此是合理的.这样,就从定量上解释了 P_1' 峰.对 P_0 峰也可作类似的处理,因为它对应于位于弯结端部的溶质原子沿位错芯的纵向扩散,并且它所牵涉到的扩散方程与 P_1' 峰的类似.而对 P_1'' 峰的理论处理,由于它们牵涉到溶质原子沿位错芯的横向扩散,以及溶质原子从一个弯结跳到另一个弯结的过程,因此要复杂得多,将另文讨论.

由于非线性内耗的特殊性,对与它有关的微分方程和偏微分方程很难得到精确的解析解,因此数值计算方法就显得格外重要.在数值计算中要注意的主要问题是收敛性问题.本文在计算时,根据差分方程的收敛性条件^[6]来求空间和时间步长(w 和 τ),这就保证了数值计算的收敛性.另外,数值计算中内耗和模量亏损的计算方法也应加以注意.本文从内耗的基本定义出发,推导出了一种内耗和模量亏损的数值计算方法(11—13 式).

非线性滞弹性内耗出现的应变振幅范围是非常低的(小于 10^{-5}).在这么低的应变振幅下,材料在力学上被认为处于弹性变形状态,而且位错从溶质原子脱钉也只是在较高应力下才有可能.但从上面的讨论可看出,材料除了经受弹性形变外,还经受了一个与时间有关的滞弹性形变.而且由于它受溶质原子沿位错芯的纵向扩散所控制,这种滞弹性形变可出现在室温附近,且与外加力的关系是非线性的,具体表现为内耗振幅曲线上出现明显的峰值.所以内耗方法研究低应力振幅下的非线性效应是非常有效的.

本文对一个弯结链 V 只有一个溶质原子的情形进行了处理.这种情形只有在溶质原子浓度较低时适用.在溶质原子浓度较高时,必须考虑一个弯结链上有多个溶质原子的情形,即浓度效应.这是今后进一步的工作.

[1] T. S. Kê, *J. Alloys and Compounds*, **211/212**(1994), 90.

[2] 葛庭燧, 自然科学进展, **3**(1993), 289; 395; 489.

[3] 葛庭燧, 物理学报, **45**(1996), 1016.

[4] 葛庭燧、方前锋, 自然科学进展, 待发表.

[5] 方前锋、葛庭燧, 自然科学进展, 待发表.

[6] 南京大学数学系计算数学专业, 偏微分方程的差分方法(科学出版社, 北京, 1979), 第 18, 83—85 页.

[7] T. S. Kê, Q. Tan and Q. F. Fang, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **103**(1987), 421.

NUMERICAL ANALYSIS OF THE NONLINEAR ANELASTIC INTERNAL FRICTION PEAK (P_1' PEAK) UNDER LOW STRESS AMPLITUDE

FANG QIAN-FENG

(*National Laboratory of Internal Friction and Defects in Solids,
Institute of Solid State Physics, Academia Sinica, Hefei 230031*)

(Received 27 June 1996)

ABSTRACT

The longitudinal diffusion equation of the solute atom along dislocation core for P_1' peak is numerically solved and the P_1' peak is derived on the base of dislocation kink atmosphere model. The variation of internal friction and modulus defects with temperature and strain amplitude is calculated. The theoretical and experimental results are compared and found to be in consistence with each other. Therefore, the P_1' peak can be quantitatively explained.

PACC: 6240; 6630J; 0260