

7. Single screw extruder range Helibar U [Electronic resource] / The official website company Komax, 2015. – Available at: <http://www.komax.pro/en/extrusion/extruder-long-helical-grooves>
8. HELIBAR®- single-screw extruders [Electronic resource] / The official website company EXTRUDEX GmbH, 2015. – Available at: <http://extrudex.de/en/helibar>
9. HELIBAR® Plastification Unit [Electronic resource] / Official site of company HELIX GmbH, 2015. – Available at: <http://www.helixgmbh.com/index.php?id=7&lang=en>
10. EXTRUDEX introduces economic single-screw HELIBAR® extruder at K 2010 [Electronic resource] / The official website company Messe Düsseldorf GmbH, 2010. – Available at: <http://www.k-online.com/>
11. Леваничев, В. Анализ полной реологической модели течения расплава полимера [Текст] / В. Леваничев // Восточно-европейский журнал передовых технологий. – 2015. – Т. 2, № 6 (74). – С. 11–16. – Режим доступа: <http://journals.urau.ru/eejet/article/view/38951/37879>

В роботі показано, що в інтервалі температур 0–600 К Ве володіє різним типом ауксетичності, який змінюється в наступному порядку: неаксіальний ауксетик → не ауксетик → аксіальний ауксетик → повний ауксетик. Проаналізовано вплив величини і знаку коефіцієнтів Пуассона на енергію Пайерлса для крайових і гвинтових компонент дислокацій в Ве. Пояснено аномальну поведінку його амплітудних залежностей внутрішнього тертя від температури

Ключові слова: аксіальна, неаксіальна ауксетичність, енергія Пайерлса, крайові, гвинтові дислокації, внутрішнє тертя

В работе показано, что в интервале температур 0–600 К Ве обладает разным типом ауксетичности, который изменяется в следующем порядке: неаксиальный ауксетик → не ауксетик → аксиальный ауксетик → полный ауксетик. Проанализировано влияние величины и знака коэффициентов Пуассона на энергию Пайерлса для краевых и винтовых компонент дислокаций в Ве. Объяснено аномальное поведение его амплитудных зависимостей внутреннего трения от температуры

Ключевые слова: аксиальная, неаксиальная ауксетичность, энергия Пайерлса, краевые, винтовые дислокации, внутреннее трение

УДК 539.22: 539.32: 669.539.67

DOI: 10.15587/1729-4061.2015.51339

АНАЛИЗ ОСОБЕННОСТЕЙ ДЕФОРМАЦИИ АУКСЕТИЧЕСКОГО БЕРИЛЛИЯ

М. Н. Гунько

Аспирант*

E-mail: gunko125@mail.ru

А. В. Олейнич-Лисюк

Кандидат физико-математических наук, доцент*

E-mail: a_oliynich@ukr.net

Н. Д. Раранский

Доктор физико-математических наук, профессор*

E-mail: ftt2010@bigmir.net

А. Ю. Ташук

Аспирант*

E-mail: sashatashuk@gmail.com

*Кафедра физики твердого тела

Черновицкий национальный

университет им. Ю. Федьковича

ул. Коцюбинского, 2, г. Черновцы, Украина, 58012

1. Введение

Первые сведения о веществах, в которых коэффициент Пуассона принимает отрицательные значения (теперь за ними закрепилось название ауксетики), появились около 70 лет назад, однако экспериментальные исследования их свойств в основном проведены в последнее десятилетие [1].

Ауксетические свойства имеют композиционные, гранулированные и пористые материалы со специфическим строением, а также довольно большой класс кристаллов, в частности с кубическими и гексагональными типами решеток. Среди ГПУ-кристаллов ауксетические свойства обнаружены в Zn, Cd, Be, Ti и др. [1, 2], среди которых только бериллий используют в

качестве конструкционного материала в аэрокосмической и атомной отраслях промышленности. Известно, что при комнатных температурах бериллий достаточно хрупкий материал, поэтому достоверные знания о характере его поведения во время деформации имеют не только познавательное значение.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

Сведения о ауксетических свойствах Ве в современной научной литературе недостаточны и неоднозначны, несмотря на их немалую практическую значимость. Так, в обзоре [1] указано, что Ве является

ауксетиком, со ссылкой на работу [3], в которой эти данные также отсутствуют. Авторы работы [2] указывая на то, что Ве является ауксетиком, приводят только оценки минимального $v_{\min} = -0.005$ и максимального $v_{\max} = 0.08$ значений коэффициента Пуассона для Ве при комнатной температуре, не указывая направлений, в которых они наблюдаются. Имеющиеся к настоящему времени данные о микропластической деформации Ве также недостаточны и противоречивы [4]. В работе [5] изучали развитие двойниковых прослоек в бериллии при пульсации напряжения при комнатных температурах, однако информация об этих процессах при других температурах, а также об особенностях поведения дислокаций при микропластичности отсутствует. В работе [6] исследовались модуль Юнга и внутреннее трение поликристаллического бериллия от 100 до 873 К и были экспериментально зафиксированы аномалии амплитуднозависимого внутреннего трения δ_h в районе 300 и 400 К, не получившие объяснения, однако авторами не рассматривалась возможность влияния величины и знака коэффициентов Пуассона на пластическую деформацию Ве в исследованном температурном интервале. Таким образом, данные о влиянии ауксетичности на особенности поведения дефектных подсистем в процессе микропластической деформации в Ве в литературе просто отсутствуют.

Поэтому в настоящем исследовании было проанализировано поведение упругих (модули упругой жесткости, упругой податливости), неупругих (низкочастотное внутреннее трение) свойств и коэффициентов Пуассона v_{ij} Ве в интервале 0–600 К с целью установления характера его ауксетичности и направлений в кристалле, в которых коэффициенты Пуассона принимают отрицательные значения, а также выяснения возможного влияния типа ауксетичности на микропластическую деформацию Ве, в частности на поведение дислокаций.

3. Цель и задача исследования

Целью работы является исследование характера ауксетичности и направлений, в которых v_{ij} принимает отрицательные значения, а также изучение влияния ауксетичности на поведение дислокаций в Ве.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- расчет компонентов тензора коэффициентов Пуассона v_{ij} в Ве в широком интервале температур и направлений в кристалле;

- исследование влияния величины и знака v_{ij} на энергетические характеристики дислокаций, в частности на энергию Пайерлса, и на характер поведения амплитудных зависимостей внутреннего трения в Ве.

4. Исследования ауксетичности бериллия в интервале температур 0–600 К

Для достижения поставленной цели были рассчитаны температурные зависимости коэффициентов упругой податливости для Ве, а также компоненты тензора коэффициентов Пуассона v_{ij} при различных температурах в интервале температур от 0–573 К с помощью

соотношений А. Ройса (1) [7] и данных о температурных зависимостях модулей упругой жесткости, полученных в работах [7, 8].

$$v_{ij} = -S_{ijj}/S_{jjj} \tag{1}$$

или в обозначениях Фойгта.

$$v_{ij} = S_{ij}/S_{jj} \tag{2}$$

Полученные результаты представлены на рис. 1. Как видно из рис. 1, от 0 до 100 К кривые $v_{12}(T)$ и $v_{13}(T)$ практически не зависят от температуры. Выше 100 К коэффициент v_{12} , пройдя через незначительный максимум, начинает уменьшаться, а $v_{13}(T)$ – увеличиваться с ростом Т. Полученные значения v_{ij} достаточно малы по абсолютным величинам, изменяются от 0,02 до 0,09, однако ни нулевых, ни тем более отрицательных значений в этом направлении в кристалле не достигают. И только повышение температуры выше 423 К переводит v_{13} в отрицательную область значений.

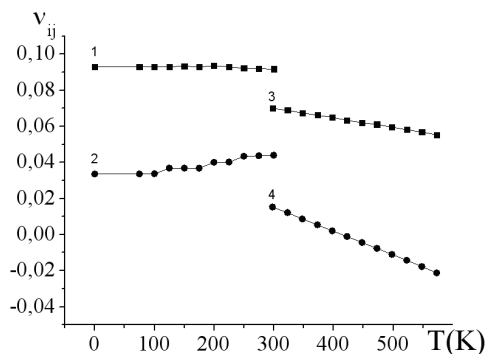


Рис. 1. Зависимости компонент тензора коэффициентов Пуассона v_{ij} от температуры Т для Ве. Кр. 1 – 2 рассчитаны по данным, полученным в работе [7], а кр. 3 – 4 – в работе [8]. Кривые 1, 3 – компонента v_{12} , кривые 2, 4 – компонента v_{13} тензора коэффициентов Пуассона

Для того чтобы выяснить, является ли Ве ауксетиком при температурах, ниже комнатной, Воспользовались критерием, предложенным в работе [9], и проанализировали его значение при различных температурах. Напомним, что в соответствии с этим критерием для полных гексагональных ауксетиков, то есть гексагональных кристаллов с отрицательным коэффициентом Пуассона для всех ориентаций кристаллов, необходимо выполнение следующих условий:

$$S_{13} > 0, S_{12} > 0, Q > 0, \tag{3}$$

$$Q = S_{11} + S_{33} + 2 \cdot S_{13} - S_{44}, \tag{4}$$

в трех конкретных направлениях.

$$\psi = \theta = 0, \psi = 0, \theta = \pi / 2, \psi = 2\theta = \pi / 2, \tag{5}$$

где θ, ψ , углы Эйлера. Эти условия являются достаточными для того, чтобы кристалл назвать ауксетиком. Противоположные неравенства

$$S_{13} < 0, S_{12} < 0, Q < 0, \tag{6}$$

обеспечивают необходимые и достаточные условия для неауксетиков, кристаллов с положительными коэффициентами Пуассона для всех их ориентаций. Если не все из этих неравенств выполнены, то это случай частичных гексагональных ауксетиков, то есть, кристаллов с отрицательным коэффициентом Пуассона в некоторых направлениях, и положительных для других. Полученные результаты представлены в табл. 1.

Таблица 1
Температурные зависимости S_{12} , S_{13} и Q для Ве, рассчитанные по (3, 4)

T, K	S_{12} , Pa	S_{13} , Pa	Q
0	-0,0312705	-0,0098341	0,007583
75	-0,0312705	-0,0098341	0,007583
100	-0,0313132	-0,0098429	0,007878
125	-0,0313357	-0,0107504	0,00611
150	-0,0315173	-0,0107632	0,005525
175	-0,0314114	-0,0108024	0,005352
200	-0,0317506	-0,0117411	0,002997
225	-0,0316335	-0,011806	0,002966
250	-0,031479	-0,012827	0,001288
275	-0,0315432	-0,012937	0,00112
300	-0,0316514	-0,0130644	0,000955
298	-0,0243505	-0,0042948	-0,0241
323	-0,024211	-0,0034448	-0,02052
348	-0,0239079	-0,0024683	-0,01658
373	-0,0237305	-0,0015492	-0,01253
398	-0,023534	-0,0005925	-0,0084
423	-0,023171	0,0003021	-0,00411
448	-0,0229142	0,0013342	-4,2E-05
473	-0,0227808	0,0022999	0,003891
498	-0,0224717	0,0033009	0,008182
523	-0,0221395	0,0043393	0,012635
548	-0,021913	0,0054177	0,016942
573	-0,0215161	0,0065478	0,022274

Как видим, критерий (3) во всей температурной области выполняется частично, то есть Ве не является полным ауксетиком. Боле того, от 300 до 400 К выполняется условие (6), которое свидетельствует о положительности коэффициентов Пуассона при данных температурах в указанных в условии (5) направлениях. Кроме того, при 300 К и выше 423 К условия ауксетичности принципиально разные: при 300 К выполняется условие $S_{13} < 0, S_{12} < 0, Q > 0$, а при 423 К и выше $S_{13} > 0, S_{12} < 0, Q > 0$.

Для того чтобы выявить направления, в которых коэффициенты Пуассона в Ве в интервале 0–300 К становятся отрицательными, воспользовались упрощением, предложенным Ли в работе [3]. Учитывая то, что гексагональные кристаллы изотропные в направлении OX и OY, он предложил объединить углы Эйлера ϕ и ψ в угол β , что позволило «визуализировать» компоненты тензора коэффициентов Пуассона v_{12} в пространстве углов Эйлера β, Θ в широком интервале температур. По формуле (7) для Ве были построены сечения характеристических поверхностей $v'_{12}(\beta, \Theta)$ плоскостью (001) в интервале 0–300 К (рис. 2) и 300–573 К (рис. 3).

$$v'_{12} = -\frac{[H^2C^2(S_{11} + S_{33} - 2S_{13} - S_{44}) + H^2S_{12}]\sin^2\theta + H^2S_{12}\cos^2\theta + C^2S_{13}}{H^4S_{11} + C^4S_{33} + C^2H^2(2S_{13} + S_{44})}, \quad (7)$$

где $H = \cos\beta, C = \sin\beta$.

Данные рис. 2, 3 неплохо коррелируют с критериями [9] во всей температурной области (табл. 1). Характер сечений $v'_{12}(\beta, \Theta)$ при $\Theta=0$ от 0 до 300 К, от 300 до 400 К и от 423 до 573 К принципиально различен. Однако сложность интерпретации значений коэффициентов Пуассона в пространстве углов Эйлера заставила перейти в трехмерное пространство.

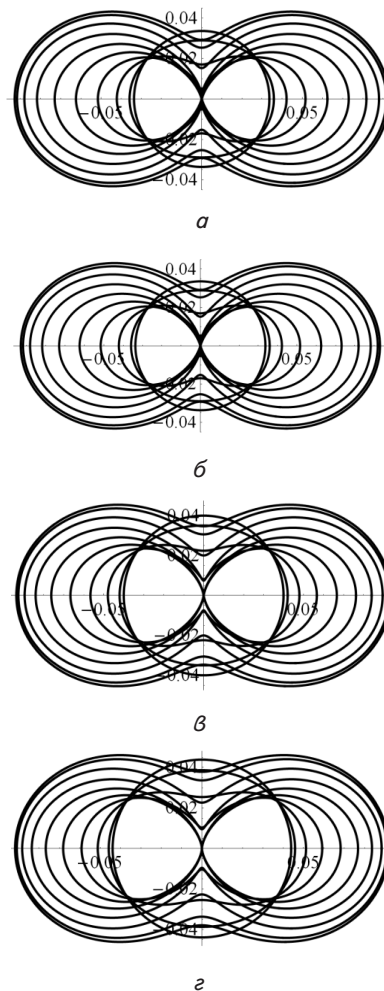


Рис. 2. Температурные зависимости сечений характеристических поверхностей $v'_{12}(\beta, \Theta)$ плоскостью (001) в Ве в интервале 0 – 300 К: (а – 0, б – 100, в – 200, з – 300 К)

Для перехода в декартово пространство была создана программа, которая позволяет по соотношению (1) рассчитать значения коэффициентов Пуассона во всех возможных направлениях [10], выбрать направления, соответствующие отрицательным значениям v_{ij} , и построить указательные поверхности ауксетичности монокристаллов [11] (рис. 4).

Как видно из рис. 4, при температурах ниже комнатной Ве является неаксиально-ауксетичным монокристаллом. Отрицательные значения коэффициента Пуассона наблюдаются в двух поясах направлений, сформированных поворотами направлений [101] вокруг оси Z, причем с увеличением температуры ширина поясов уменьшается. При увеличении температуры выше комнатной Ве перестает быть неаксиальным ауксетиком, а при достижении температуры 423 К ауксетические свойства в Ве

наблюдаются в поясах, сформированных основными кристаллографическими направлениями. Ве становится аксиально-ауксетичным монокристаллом. При дальнейшем повышении температуры ширина поясов увеличивается и при достижении температурой значений 473 К и выше они сливаются, а бериллий становится полным ауксетиком.

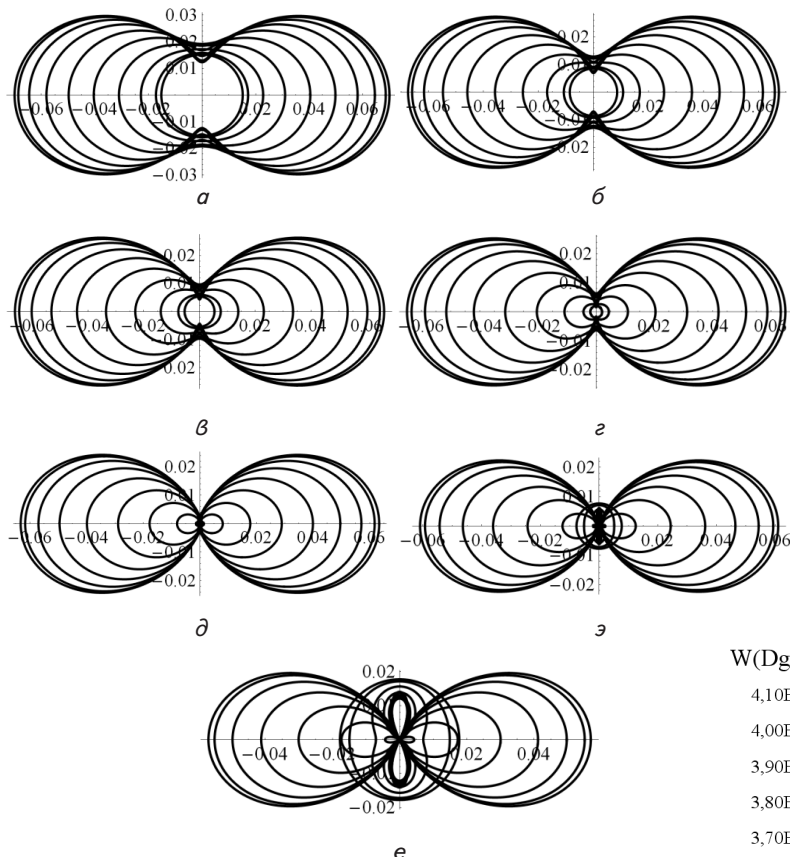


Рис. 3. Температурные зависимости сечений характеристических поверхностей v^{12} (b, Θ) плоскостью (001) в Ве в интервале 298–573 К: (а – 298, б – 348, в – 373, г – 398, д – 423, э – 473, е – 548 К)

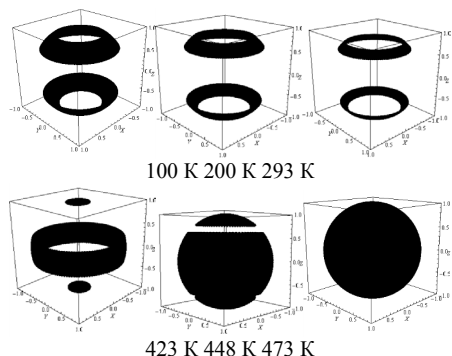


Рис. 4. Температурные зависимости указательных поверхностей ауксетичности монокристалла Ве

5. Влияние величины и знака коэффициентов Пуассона на свойства дислокаций в Ве

Разный тип ауксетичности при различных температурах должен проявляться в изменении характера

деформации реальных кристаллов, а, следовательно, не может не влиять на поведение дислокаций в Ве, основных участников деформации. Так, приближение к нулю коэффициентов ν_{ij} в районе 423 К должно приводить к тому, что энергетические характеристики краевых и винтовых дислокаций должны совпадать, так как W_{ij} – энергия Пайерлса для краевой дислокации и W – энергия Пайерлса для винтовой дислокации станут одинаковыми [12] (рис. 4):

$$W_{ij} = \mu b^2 / 4\pi(1 - \nu_{ij}), \tag{8}$$

$$W = \mu b^2 / 4\pi. \tag{9}$$

Это, в свою очередь, изменит характер полей напряжений вокруг краевых и винтовых дислокаций, что сделает невозможным образование дислокационных атмосфер по типу атмосферы Коттрелла в Ве в этом интервале температур.

При одинаковых энергетических характеристиках для краевых и винтовых компонент дислокации в Ве должны вести себя как квазисвободные, незакрепленные дефекты. Такое поведение дефектов в этом металле не может не отразиться на его структурно-чувствительных свойствах, в частности на внутреннем трении (ВТ).

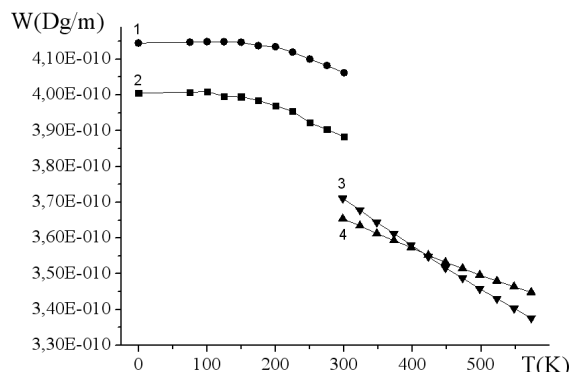


Рис. 5. Зависимость энергии Пайерлса W , рассчитанной на единицу длины дислокации по формулам (8) и (9), от температуры T . Кривые 1, 3 – для краевой, 2, 4 – для винтовой дислокаций в Ве. 1, 2 – получены на основе данных работы [7], а кривые 3, 4 – работы [8]

На рис. 6 представлены результаты исследования амплитудных зависимостей ВТ от температуры в бериллии в интервале 298–523 К, которые показали, что с ростом температуры уровень поглощения упругой энергии в этом материале аномально падет, а интервал значений амплитудно-независимого внутреннего трения увеличивается, что можно трактовать как закрепление дислокаций. В большинстве других материалов нагрев, как правило, приводит к испарению дислокационных атмосфер, освобождению дислокаций и росту уровня ВТ. Такую аномалию можно объяснить, если учесть влияние коэффициентов Пуассона на энергию взаимодействия дислокаций с точечными дефектами. Действительно, низкие значения коэф-

коэффициентов Пуассона, их переход через 0 в интервале от 298 до 423 К, как уже отметили, можно трактовать как невозможность образования атмосфер на дислокациях в Ве. Однако выше 423 К коэффициенты Пуассона приобретают отрицательные значения, что снова делает упругие поля вокруг дислокаций разными по характеру и величине. Дислокационные атмосферы начинают тормозить и закреплять дислокации. При этом характер зависимостей внутреннего трения от амплитуды деформации становится классическим, таким, что его можно описать в рамках модели Келлера-Гранато-Люкке [13].

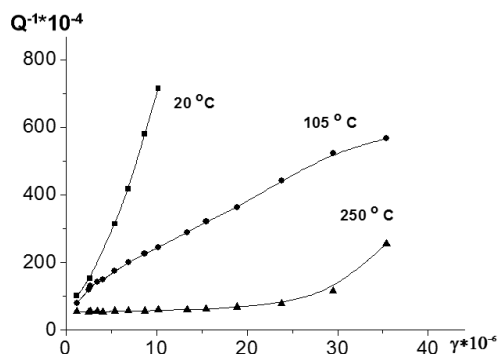


Рис. 6. Зависимости Q^{-1} от амплитуды относительной деформации γ бериллия при различных температурах

Таким образом, учет величины и знака коэффициентов Пуассона в Ве при различных температурах позволяет объяснить экспериментально наблюдаемое anomalous поведение поглощения упругой энергии в Ве выше 290 К.

6. Выводы

Рассчитаны компоненты тензора коэффициентов Пуассона в Ве в широком интервале температур и показано, что при температурах ниже комнатной Ве является неаксиальным ауксетиком, при комнатных температурах (300–400 К) он перестает быть ауксетиком, от 400 до 423 К он становится аксиальным ауксетиком и при температурах выше 473 К ауксетические свойства наблюдаются во всех кристаллографических направлениях (полный ауксетик).

Оценка энергетических характеристик краевых и винтовых дислокаций в Ве в интервале 300–423 К показала совпадение их энергий Пайерлса в точке инверсии коэффициента Пуассона, в результате чего дислокации становятся квазисвободными незакрепленными дефектами. Это приводит к anomalous изменению амплитудных зависимостей внутреннего трения с ростом температуры: понижению фона и увеличению амплитудно-независимой области поглощения упругой энергии.

Литература

1. Конёк, Д. Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона [Текст] / Д. Конёк, К. Войцеховски, Ю. Плескачевский, С. Шилько. // Механика композитных материалов и конструкций. – 2004. – № 1. – С. 35–69.
2. Гольдштейн, Р. Ауксетическая механика кристаллических материалов [Текст] / Р. Гольдштейн, В. Городцов, Д. Лисовенко // Изв. РАН. Механика Твёрдого Тела. – 2010. – № 4. – С. 42–62.
3. Li, Y. The anisotropic of Poisson Ratio, Yang's Modulus, and Shear Modulus in Hexagonal Materials [Text] / Y. Li // Physica Status Solidi (a). – 1976. – Vol. 38, Issue 1. – P. 171–175. doi: 10.1002/pssa.2210380119
4. Папиров, И. Исследование микропластической деформации бериллия [Текст] / И. Папиров, В. Иванцов, А. Николаенко, В. Шокуров, Ю. Тузов // ВАНТ. – 2015. – Т. 96, № 2. – С. 158–165.
5. Башмаков, В. Пластификация и упрочнение металлических кристаллов при механическом двойниковании [Текст] / В. Башмаков, Т. Чикова. – Минск: УП «Технопринт», 2001. – 218 с.
6. Кардашев, Б. Упругие, микро- и макропластические свойства поликристаллического бериллия [Текст] / Б. Кардашев, И. Куприянов // Физика твёрдого тела. – 2011. – Т. 53, № 12. – С. 2356–2361.
7. Папиров, И. И. Физическое металловедение бериллия [Текст] / И. И. Папиров, Г. Ф. Тихинский. – М.: Атомиздат, 1968. – 452 с.
8. Rowland, W. D. The determination of the elastic constants of beryllium in the temperature range 25 to 300 °C [Text] / W. D. Rowland, J. S. White // Journal of Physics F: Metal Physics. – 1972. – Vol. 2, Issue 2. – P. 231–236. doi: 10.1088/0305-4608/2/2/011
9. Гольдштейн, Р. Средний коэффициент Пуассона для кристаллов. Гексагональные ауксетики [Текст] / Р. Гольдштейн, В. Городцов, Д. Лисовенко // Письма о материалах. – 2013. – № 3. – С. 7–11.
10. Сиротин, Н. Н. Основы кристаллофизики [Текст] / Н. Н. Сиротин, М. П. Шаскольская. – М.: Наука, 1979. – 639 с.
11. Раранський, М. Ауксетичні властивості кристалів гексагональної сингонії [Текст] / М. Раранський, В. Балазюк, М. Гунько // Физика и химия твёрдого тела. – 2015. – Т. 16, № 1. – С. 34–43.
12. Хирт, Дж. Теория дислокаций [Текст] / Дж. Хирт, Дж. Лоте; пер. с англ. Э. Надгорного, Ю. Осипьяна. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
13. Постников, В. С. Внутреннее трение в металлах [Текст] / В. С. Постников. – М.: Металлургия, 1974. – 352 с.