

В.С. Бахрушин, О.Ю. Чиріков

Аналіз релаксаційних властивостей ОЦК сплавів впровадження в області релаксації Снука

Гуманітарний університет «Запорізький інститут державного та муніципального управління»,
вул. Жуковського, 70-б, Запоріжжя, Україна, 69002, E-mail: Vladimir.Bakhrushin@zhu.edu.ua

Показано, що математичні моделі температурних залежностей внутрішнього тертя та динамічних модулів пружності сплавів впровадження в області релаксації Снука можна подати у вигляді суми внесків, що відповідають зінерівській моделі стандартного лінійного тіла. Запропоновано методику визначення параметрів таких моделей (температур та висот парціальних релаксаційних піків, або зв'язаних з ними енергій активації та степенів релаксації елементарних процесів) за експериментальними даними.

Ключові слова: релаксаційні процеси, внутрішнє тертя, динамічні модулі пружності, температурна залежність, математична модель, нелінійна оптимізація.

Стаття постуила до редакції 05.12.2005; прийнята до друку 15.09.2006

Вступ

Релаксація Снука зумовлена дифузійними перескоками атомів домішок впровадження в ОЦК металах при накладанні знакозмінних напружень [1, 2]. Введення додаткових домішок і структурних дефектів змінює локальне оточення впроваджених атомів, що призводить до виникнення додаткових релаксаційних процесів, які відбуваються паралельно з релаксацією Снука і мають близькі параметри [3]. Одним з найбільш чутливих до виявлення таких процесів є метод внутрішнього тертя, який широко застосовується для їх дослідження. Температурні залежності динамічних модулів нормальної пружності та зсуву є менш чутливими до них. Але основні методики вивчення внутрішнього тертя передбачають вимірювання резонансної частоти коливань зразка [2], за якою, залежно від типу деформації, можна розрахувати значення відповідного динамічного модуля. Тому дослідження температурних залежностей внутрішнього тертя і одного з динамічних модулів у багатьох випадках здійснюють одночасно [1]. Це дає змогу отримати додаткову цінну інформацію про механізми й особливості релаксації і уникнути помилкових висновків, пов'язаних з похибками вимірювань. Однією з проблем, що виникають при дослідженні складних релаксаційних процесів є недосконалість існуючих методик аналізу релаксаційних спектрів і практична відсутність методик аналізу температурних залежностей динамічних модулів пружності.

Метою даної роботи була розробка методики

визначення параметрів складних релаксаційних процесів за експериментальними даними про температурні залежності внутрішнього тертя та динамічних модулів пружності.

I. Аналіз складних релаксаційних спектрів

Релаксаційний спектр внутрішнього тертя в області релаксації Снука описується [2] математичною моделлю:

$$Q^{-1} = Q_f^{-1} \exp\left[-\frac{E_f}{RT}\right] + \sum_{i=1}^n Q_{oi}^{-1} \cosh^{-1}\left[\frac{E_i}{RT}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{oi}}\right)\right], \quad (1)$$

де Q_f^{-1} – передекспоненціальний множник фону, E_f – його енергія активації, R – універсальна газова стала, T – температура, n – кількість елементарних піків, Q_{oi}^{-1} , E_i , T_{oi} – відповідно, висота, енергія активації й температура i -го релаксаційного піку. Для твердих розчинів впровадження на основі ніобію й танталу фоновою складовою релаксаційного спектра в області релаксації Снука зазвичай можна знехтувати, оскільки висоти основних піків істотно перевищують рівень фону. У разі, коли піки, що накладаються зумовлені релаксацією домішок впровадження за механізмом Снука або подібними до нього механізмами, енергія активації процесу пов'язана з температурою максимуму внутрішнього тертя формулою Верта-Маркса [2]:

$$E_i = RT_{oi} \ln \frac{kT_{oi}}{hf}, \quad (2)$$

де k – стала Больцмана, h – стала Планка, f – частота коливань зразка.

Зазвичай аналіз складних спектрів внутрішнього тертя ґрунтується на математичній моделі (1, 2), параметри якої визначають за критерієм

$$S = \sum_{j=1}^m (Q_j^{-1} - Q^{-1}(T_j))^2 \rightarrow \min, \quad (3)$$

де Q_j^{-1} – експериментальне значення внутрішнього тертя при температурі T_j , $Q^{-1}(T_j)$ – значення, що розраховано для тієї самої температури на основі моделі (1, 2), m – кількість експериментальних точок. Параметри, що задовольняють умові (3), визначають за допомогою лінійного або нелінійного методу найменших квадратів, а також різноманітних ітераційних процедур [2,4,5]. При цьому основною проблемою є визначення кількості елементарних піків, яке здійснюється суб'єктивно. У роботах [1,6-8] нами запропоновано методику аналізу складних спектрів, яка ґрунтується на застосуванні квазіньютонівських методів мінімізації функціоналу (3) і критерію його квазіунімодальності на області, що відповідає експериментально дослідженому інтервалу температур, для визначення кількості

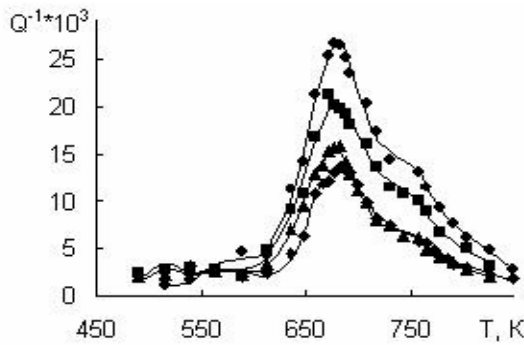


Рис. 1. Температурна залежність внутрішнього тертя сплавів Nb – 12 ат. % W – N: суцільні лінії – модель, маркери – експеримент. Концентрація азоту (ат. %): ● – 0,11; ■ – 0,16; ▲ – 0,22; ◆ – 0,31.

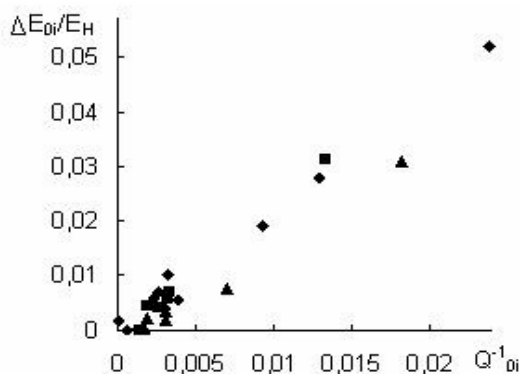


Рис. 2. Кореляція між парціальними дефектами динамічних модулів нормальної пружності елементарних релаксаційних процесів та висотами парціальних піків внутрішнього тертя.

Позначення відповідають рис. 1.

елементарних піків. Приклад розкладання спектра на

парціальні піки наведено на рис. 1.

II. Аналіз складних температурних залежностей динамічних модулів пружності

За наявними теоретичними даними у разі, коли релаксація підпорядковується зінерівській моделі стандартного лінійного тіла, температурну залежність модуля пружності при можна описати виразом [1]:

$$M = M_H - \frac{M_H - M_P}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad (4)$$

де M_H та M_P – відповідно, нерелаксований і релаксований (низькотемпературний та високотемпературний) модулі, $\omega = 2\pi f$, $\tau = \tau_0 \exp(E/RT)$ – час релаксації. Параметр τ_0 визначається з умови $\omega\tau = 1$ при $T = T_0$. Реальні релаксаційні процеси можуть відхилитися від такої моделі. У [9] нами було показано, що для дегазованих ніобію та сплавів ніобій-вольфрам поведінка динамічних модулів пружності якісно відповідає моделі Зінера, але є істотна різниця між експериментальним і теоретичним значеннями відношень висот релаксаційних піків до відповідних дефектів модуля. Її причиною може бути накладення кількох релаксаційних процесів з близькими параметрами. У такому разі дефект модуля буде адитивною сумою внесків, зумовлених кожним з процесів. У той же час висота загального релаксаційного максимуму буде меншою за суму висот парціальних піків, оскільки їх температури розрізняються.

Математичну модель температурної залежності динамічного модуля пружності за таких припущень можна подати у вигляді:

$$\begin{cases} M(T) = E_H - \sum_{i=1}^n \Delta M_i(T); \\ \Delta M_i(T) = \frac{\Delta M_{0i}}{1 + 4\pi^2 \tau_i^2 f^2}; \\ \tau_i = \frac{\exp\left[\frac{E_i}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{0i}}\right)\right]}{2\pi f}. \end{cases} \quad (5)$$

Параметрами, які необхідно визначити є парціальні дефекти модуля ΔM_{0i} і температури релаксаційних піків T_{0i} . Їх можна обрати рівними значенням, що мінімізують функціонал

$$S_1 = \sum_{j=1}^m [M_{\text{exp}}(T_j) - M(T_j)]^2, \quad (6)$$

де $M_{\text{exp}}(T_j)$ – експериментально визначене значення модуля при температурі T_j .

Функціонал (6) не є квазіунімодальним і має велику кількість екстремумів. Тому одержувані

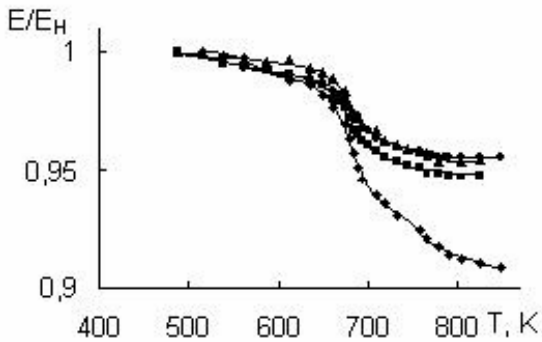


Рис. 3. Температурна залежність динамічних модулів нормальної пружності сплавів Nb – 12 ат. % W – N: суцільні лінії – модель, маркери – експеримент. Позначення відповідають рис. 1.

значення параметрів ΔM_{0i} , T_{0i} істотно залежать від початкового наближення. Для отримання фізично адекватних значень цих параметрів доцільно здійснювати послідовний аналіз релаксаційних спектрів і температурних залежностей динамічних модулів пружності. У цьому разі спочатку за даними про спектри внутрішнього тертя визначаються температури елементарних піків, які потім використовують як початкові значення при аналізі температурних залежностей модулів. Як початкові значення парціальних дефектів модуля можна взяти величини $\Delta M_{0i} = \frac{M_n Q_{0i}^{-1}}{2}$, що за умови малості

сумарної величини дефекту модуля, яка зазвичай завжди виконується, означає відповідність кожного з парціальних релаксаційних процесів моделі стандартного лінійного тіла. У цьому разі значення температур піків у процесі мінімізації функціоналу практично не змінюються. Зміна значень парціальних

дефектів модуля є помітною, що пов'язано з меншою точністю їх обчислення. Незважаючи на це, існує (рис. 2) добра кореляція (коефіцієнт Пірсона для різних зразків знаходиться у межах 0,90-0,97) між розрахованими висотами парціальних піків внутрішнього тертя та відповідних дефектів модуля.

При цьому відношення $\frac{Q_{0i}^{-1}}{\Delta M_{0i} / M_n} = 2,00 \pm 0,15$, що у

межах похибки відповідає моделі стандартного лінійного тіла. Порівняння експериментальних та модельних температурних залежностей динамічних модулів нормальної пружності наведено на рис. 3.

Висновки

1. Запропоновано методику аналізу складних релаксаційних процесів в ОЦК сплавах впровадження в області релаксації Снука за експериментальними даними про температурні залежності внутрішнього тертя та динамічних модулів пружності, яка базується на застосуванні квазіньютонівських алгоритмів мінімізації функціоналів, що визначають суми квадратів відхилень відповідних моделей від експериментальних точок.
2. Показано, що модель складного релаксаційного процесу в області релаксації Снука може бути подана як сума кількох незалежних релаксаційних процесів, кожен з яких відповідає зінерівській моделі стандартного лінійного тіла.

Бахрушин В.Є. – д.ф.-м.н., професор, зав. кафедри системного аналізу та вищої математики, директор НДЦ системного аналізу;
Чиріков О.Ю. – здобувач.

- [1] В.Є. Бахрушин, О.Ю. Чиріков. *Моделі та механізми механічної релаксації, пов'язаної з перебудовою домішково-дефектної підсистеми кристалів*. ГУ "ЗІДМУ", Запоріжжя. 140 с. (2004).
- [2] М.С. Блантер, Ю.В. Пигузов, Г.М. Ашмарин и др. *Метод внутреннего трения в металлургических исследованиях*. Металлургия, М. 248 с. (1991).
- [3] А.С. Новик. *Атомная релаксация в металлах*. Атомиздат, М. 410 с. (1985).
- [4] M.S. Ahmad, D.E. Barrow, E.A. Little, Z.S. Szkopiak. Computer Analyses of Complex Relaxation Spectra // *J. Physics*, **D4**(10), pp. 1460-1469 (1971).
- [5] А.И. Ефимов, О.Н. Разумов, А.Л. Созинов, П.Г. Яковенко. Анализ сложных спектров внутреннего трения на ЭВМ // *Внутреннее трение в металлах и неорганических материалах*. Наука, М. сс. 31-35 (1982).
- [6] В.Є. Бахрушин, О.Ю. Чиріков. Математичне моделювання складних спектрів внутрішнього тертя // *Складні системи і процеси*, **2**, сс. 27-35 (2002).
- [7] В.Є. Бахрушин, А.Ю. Чиріков. Анализ сложных релаксационных спектров внутреннего трения твердых растворов на основе ниобия // *Высокочистые металлические и полупроводниковые материалы*. Сборник докладов 9 Международного симпозиума / Под ред. В.М. Ажажи, В.И. Лапшина, И.М. Неклюдова, В.М. Шулаева. ННЦ ХФТИ, Харьков. сс. 77-82 (2003).
- [8] В.Є. Бахрушин, Ю.В. Гончаренко, А.Ю. Чиріков. Использование методов нелинейной оптимизации для анализа сложных релаксационных спектров // *Системні технології*. **2**. сс. 99-108 (2004).
- [9] В.Є. Бахрушин, А.Ю. Чиріков. Влияние термических обработок на процессы механической релаксации в твердых растворах внедрения на основе ниобия // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники*. **1**. сс. 112-117 (2002).

V.E. Bakhrushin, A.Yu. Tchirikov

Analyses of BCC Interstitial Alloys Relaxation Properties in Snoek Relaxation Area

University of Humanities "ZISMG", 70-b Zhukovsky Str., Zaporizhzhia, Ukraine, 69002.

It is shown, that the mathematical models of interstitial alloys internal friction and dynamical elastic modulus temperature dependence in Snoek relaxation area may be presented as a sum of items, which conform to Zener model of standard linear body. Methodic of such model parameters (temperatures and heights of partial relaxation peaks or connected with this activation energies and relaxation strengths for elementary processes) determination from experimental data is proposed.