

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

01;05

© 1994 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ
КРИСТАЛЛОВ ПО ДАННЫМ ВНУТРЕННЕГО ТРЕНИЯ

Ю.А.Зайкин

Изучение температурных и частотных зависимостей внутреннего трения (ВТ) в кристаллах дает разнообразную информацию о процессах, связанных с локальной перестройкой дефектов в поле внешних напряжений. Необходимость интерпретации и анализа механизмов сложных релаксационных процессов в твердых телах заставляет прибегать к их компьютерному моделированию.

Одна из трудностей моделирования релаксации неупругих деформаций в твердых телах и сравнения модельных зависимостей с экспериментальными данными заключается в необходимости учета дискретных и непрерывных спектров релаксации. Многочисленные экспериментальные данные показывают, что наблюдаемые максимумы ВТ уширены по сравнению с простыми дебаевскими на 15–20% [1]. Вопрос о выделении дискретных спектров релаксации при наложении процессов с сильно отличающимися временами релаксации рассматривался в литературе [2]. Изучались и способы выделения непрерывных спектров релаксации исходя из различных статических и динамических функций отклика [1,3]. Однако формулировка задачи в таких работах, как правило, не отвечает реальной постановке эксперимента по измерению ВТ.

Моделирование релаксационных пиков ВТ требует выбора функции распределения дефектов, участвующих в данном релаксационном процессе, по частотам релаксации. Как правило, для этой цели используется гауссовское или некоторое другое распределение, подбирая параметры которого можно обеспечить совпадение полуширин модельного и экспериментального пиков ВТ. Однако, как показывают расчеты, выполненные нами для релаксационных пиков ВТ в различных материалах, чисто формальное использование гауссовского распределения не позволяет описать усложненную форму максимумов на температурных зависимостях внутреннего трения (ТЭВТ).

Таким образом, моделирование релаксационных пиков ВТ связано с решением сложной дополнительной задачи физически обоснованного моделирования непрерывных спектров релаксации. Другой подход к

этой проблеме заключается в предварительном выделении непрерывных спектров релаксации из экспериментальных ТЗВТ. Решение этой задачи позволяет не только сравнивать полученные зависимости с модельными, но и дает важную информацию о колебательных спектрах кристаллов.

В настоящей работе рассмотрены возможности определения колебательных спектров атомов примеси (дефектов), ответственных за наблюдаемые релаксационные процессы, по данным внутреннего трения.

При наличии одного времени релаксации пики внутреннего трения на температурных и частотных зависимостях определяются соотношением [1]

$$Q^{-1} = \Delta \frac{\omega^* \tau}{1 + \omega^{*2} \tau^2}, \quad (1)$$

где Δ — степень релаксации, ω^* — частота колебаний, $\tau = \tau_0 e^{H/kT}$ — время релаксации, T — абсолютная температура.

В случае непрерывного спектра релаксации ВТ для термически активированного процесса с одной энергией активации H определяется выражением

$$\tilde{Q}^{-1}(\omega^*, T) = \int_0^{\infty} \frac{\omega^* \tau_0 e^{H/kT}}{1 + \omega^{*2} \tau_0^2 e^{2H/kT}} \varphi(\tau_0 d\tau_0), \quad (2)$$

где $\varphi(\tau_0)$ — функция распределения по времени релаксации, которая может иметь различный физический смысл в зависимости от характера конкретного релаксационного процесса.

Введем обозначение $\omega = \omega^* e^{H/kT}$ и запишем уравнение (2) в виде

$$\tilde{Q}^{-1}(\omega) = \int_0^{\infty} \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \varphi(\tau) d\tau = \int_0^{\infty} \frac{\omega^2 \nu^2}{\omega^2 + \nu^2} \frac{\psi(\nu)}{\nu^2} d\nu, \quad (3)$$

где $\psi(\nu)/\nu^2$ — функция распределения по частотам релаксации, а бесконечные верхние пределы в интегралах можно заменить на конечные.

Рассмотрим аналитическое уравнение (3), связанное с использованием “аппроксимативной единицы”. С помощью замены $\omega = e^x$, $\tau = e^y$ уравнение (3) приводится к виду

$$q(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\text{ch}(x-y)} P(y) dy, \quad (4)$$

где $q(x) = \tilde{Q}^{-1}(e^x)$, $P(y) = \varphi(e^{-y}) e^{-y}$.

Применим к уравнению (4) преобразование Фурье

$$F(q(x))(\xi) = \hat{q}(\xi) = F\left(\frac{1}{2} \frac{1}{\text{ch } x} \cdot \varphi(x)\right)(\xi) = \frac{1}{2} F\left(\frac{1}{\text{ch } x}\right)(\xi) F(\varphi(x))(\xi).$$

Фурье-образ $F(1/\text{ch } x)(\xi)$ имеет вид

$$F\left(\frac{1}{\text{ch } x}\right)(\xi) = \pi \frac{1}{\text{ch } \frac{\pi}{2} \xi},$$

тогда уравнение (4) сводится к следующему:

$$\hat{q}(\xi) = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\operatorname{ch} \frac{\pi}{2} \xi} \hat{P}(\xi).$$

Это уравнение можно было бы решить простым делением, если бы величина $\operatorname{ch}(\pi/2)\xi$ являлась мультипликатором в s' -пространстве функций медленного роста.

Рассмотрим последовательность

$$\delta_n(x) = \sqrt{\frac{n}{\pi}} e^{-nx^2}$$

(δ -образная последовательность [4]), причем

$$F \left(\sqrt{\frac{n}{\pi}} e^{-nx^2} \right) = e^{-\xi^2/n}.$$

Учитывая, что при любых $n = 1, 2, 3, \dots$ функция

$$e^{-\xi^2/n} \operatorname{ch} \frac{\pi}{2} \xi$$

является максимумом в пространстве s' , получим эквивалентное уравнение

$$\frac{2}{\pi} \operatorname{ch} \frac{\pi}{2} \xi e^{-\xi^2/n} \hat{q}(\xi) = \hat{P}(\xi) e^{-\xi^2/n}. \quad (5)$$

Поскольку

$$F^{-1} \left(\hat{\varphi}(\xi) e^{-\xi^2/n} \right) = P(x) \cdot F \left(e^{-\xi^2/n} \right) (x) = \varphi(x) \cdot \delta_n(x) \rightarrow P \cdot \delta = P,$$

то прообраз Фурье левой части (5) можно считать приближением решения. Таким образом,

$$F^{-1} \left[\frac{2}{\pi} \operatorname{ch} \frac{\pi}{2} \xi e^{-\xi^2/n} \hat{q}(\xi) \right] = F \left(\frac{2}{\pi} \operatorname{ch} \frac{\pi}{2} \xi e^{-\xi^2/n} \right) \cdot q(x),$$

откуда

$$F^{-1} \left[\frac{2}{\pi} \operatorname{ch} \frac{\pi}{2} \xi e^{-\xi^2/n} \right] (x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\xi x} \frac{2}{\pi} \operatorname{ch} \frac{\pi \xi}{2} e^{-\xi^2/n} d\xi. \quad (6)$$

Интеграл (6) найдем сдвигая контур интегрирования параллельно оси OX и используя теорему Коши. В итоге получим

$$P_n(x) = \frac{2\sqrt{\pi n}}{\pi^2} e^{\frac{x^2 n}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-n(x-y)^2} \cos \pi n(x-y) q(x) dx, \quad (7)$$

$P_n(x)$ является приближенным решением уравнения (4), а последовательность $\{\delta_n\}$ играет роль "аппроксимативной единицы".

Использование приведенного решения осложняется наличием в выражении (7) осцилляционного интеграла. Эту сложность можно обойти используя метод перевала [5] или методику, описанную в работе [6].

Приведем также два аналитических решения уравнения (3), связанных с удобной аппроксимацией $\tilde{Q}^{-1}(\omega)$, правильно описывающей асимптотическое поведение этой функции ($\tilde{Q}^{-1}(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow 0$ и $\tilde{Q}^{-1}(\omega) \sim 1/\omega$ при $\omega \rightarrow \infty$). Пусть

$$\tilde{Q}^{-1}(\omega) = A \frac{1 - e^{-\alpha\omega}}{\omega} - A\alpha e^{-\alpha\omega} + e^{-\alpha\omega} \sum_k B_k \omega^k, \quad (8)$$

где A, α, β_k — константы.

Решение уравнения (3) с учетом аппроксимации (8), полученное с использованием интегрального косинус-преобразования Фурье и обратного преобразования Лапласа, имеет вид

$$\frac{\psi(\nu)}{\nu^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_k B_k (k-1)! \alpha^k \sum_{0 \leq 2m \leq k} (-1)^m C_k^{2m} \sum_{i=0}^m (-1)^i C_m^i \alpha^{2i} \frac{1}{(k-m-i+1)} \times \\ \times \left(\frac{\nu}{2\alpha}\right)^{k-m+i-\frac{1}{2}} J_{k-m+i-\frac{1}{2}}(\alpha\nu) + \frac{2A}{\pi\nu} \left(\frac{\sin \alpha\nu}{\nu} - \alpha \cos \alpha\nu\right), \quad (9)$$

где $J_{k+\frac{1}{2}}$ — функции Бесселя

$$J_{k+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} z^{k+\frac{1}{2}} \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^k \frac{\sin z}{z}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Использование другой удобной аппроксимации $\tilde{Q}^{-1}(\omega)$

$$\tilde{Q}^{-1}(\omega) = \sum_{k=1}^N \frac{A_k}{(\omega + \nu_0)^k} \quad (10)$$

приводит к следующему решению уравнения (3):

$$\frac{\psi(z)}{z} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{k=1}^N A_k \left(\frac{\nu_0}{\nu_0^2 + z^2}\right)^k \sum_{0 \leq 2m \leq k} (-1)^m C_k^{2m} \left(\frac{z}{\nu_0}\right)^{2m}. \quad (11)$$

В данной работе для расчета спектров релаксации использовались как численные методы [7], так и аналитические выражения (7), (9), (11). Для изучения спектров релаксации и влияния на них электронного облучения были исследованы пики Сноека в альфа-железе и поликристаллическом тантале чистотой 99.99.

Измерения внутреннего трения производились на автоматизированной установке с электростатически возбуждаемыми изгибными колебаниями образцов [8]. ТЗВТ измерялись по точкам при стабилизации температуры с точностью 0.1 К. Облучение образцов производилось на линейном ускорителе электронов ЭЛУ-4 с энергией электронов 4 МэВ до флюенса $\sim 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

На рис. 1,2 приведены ТЗВТ в тантале и альфа-железе. Сравнение с литературными данными [1,3] позволяет интерпретировать наблюдаемые на этих зависимостях максимумы как пики Сноека, связанные с

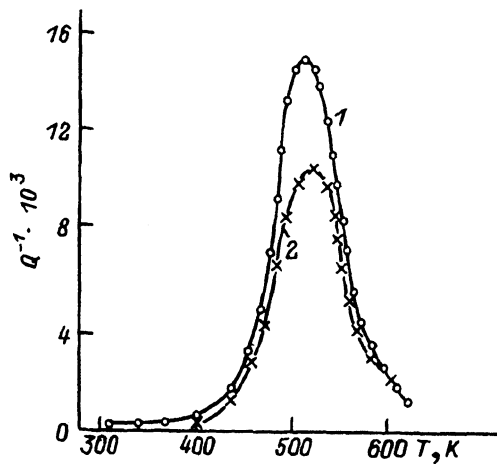


Рис. 1. Температурная зависимость внутреннего трения в тантале.

1 — необлученный образец,
2 — облученный.

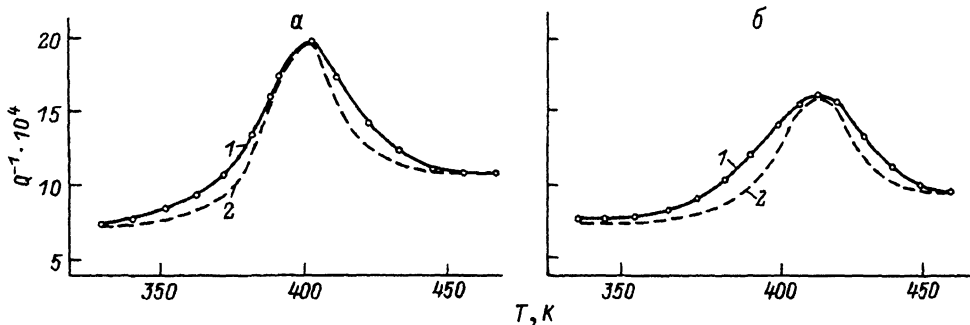


Рис. 2. Зависимости внутреннего трения от температуры в α -железе для облученного (а) и необлученного (б) образцов.

1 — экспериментальная кривая, 2 — дебаевский пик.

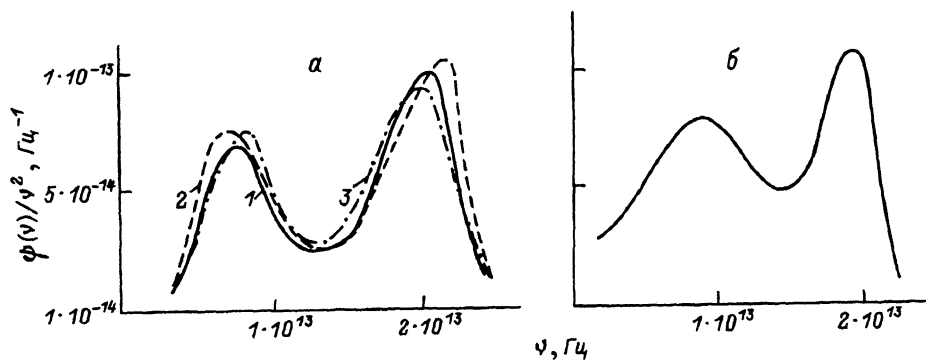


Рис. 3. Частотные спектры атомов примеси кислорода в тантале (а) и углерода в α -железе (б).

Расчет по формулам: 1 — (7), 2 — (9), 3 — (11).

диффузией углерода в α -Fe и кислорода в Ta. При изменении частоты колебаний образцов путем возбуждения колебаний на высших гармониках имел место сдвиг температур максимумов пиков без изменения их формы. Следовательно, измеренные зависимости относятся к процессам с одной энергией активации, а уширение экспериментальных пиков по сравнению с простыми дебаевскими можно объяснить наличием непрерывных спектров релаксации, которые имеют простой физический смысл и могут быть отождествлены с частотными спектрами атомов углерода.

При обработке экспериментальных данных фон VT выделялся экстраполяцией ТЗВТ до нуля в координатах $\tilde{Q}^{-1}(\omega)$ и $\tilde{Q}^{-1}(1/\omega)$. Для определения функции распределения атомов углерода по частотам использовались изложенные выше численные и аналитические методы. Процедура выделения спектров релаксации производилась для ряда повторных измерений ТЗВТ. Результаты расчетов приведены на рис. 3, из которого видно, что отклонения рассчитанных колебательных спектров для различных серий измерений и способов расчета не превышают 15%. Рассчитанные зависимости характерны для частотных спектров атомов легких примесей в ОЦК-металлах [9], на которых, как правило, пик, связанный с максимальным колебанием отдельного примесного атома уширяется в примесную зону. Сильное взаимодействие приводит к тому, что от спектра частот отщипляется примесная зона, являющаяся сильно искаженным подобием спектра частот матрицы.

Полученные результаты говорят о применимости метода VT для определения колебательных спектров кристаллов. Преимуществом описанной методики является ее избирательность, т.е. возможность получения функций распределения по частотам колебаний отдельных дефектов (атомов примесей, матрицы), ответственных за наблюдаемый релаксационный процесс. Особенно перспективно применение метода VT при изучении влияния на колебательные спектры различных внешних воздействий, в том числе радиационных.

Список литературы

- [1] Постников В.С. Внутреннее трение в металлах. М.: Металлургия, 1974. 350 с.
- [2] Штрайтман К.М., Пигунов Ю.В., Логвиненко Ю.С. // Заводская лаб. 1974. Т. 40. № 6. С. 729-733.
- [3] Новик А., Берри Б. Релаксационные явления в металлах. М.: Атомиздат, 1975. 472 с.
- [4] Шабат Б.В. Введение в комплексный анализ. М.: Наука, 1976. Ч. 2. 244 с.
- [5] Морс Ф.М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. М.: ИЛ, 1958. 932 с.
- [6] Хермандер Л. Анализ линейных дифференциальных операторов с частными производными. Теория распределений и анализ Фурье. М.: Мир, 1986. 462 с.
- [7] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1977. 370 с.
- [8] Купчишин А.И., Зайкин Ю.А., Иванов М.С. и др. // Тр. Всесоюз. конф. по автоматизации научных исследований. Алма-Ата: Наука АН КазССР, 1985. Т. 2. С. 152-158.
- [9] Satija S.K., Comes K.R., Shirane A. // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1985. Vol. 32. N 5. P. 3309-3317.

Научно-исследовательский институт
экспериментальной и теоретической физики
при Казахском университете им.Аль-Фараби
Алма-Ата

Поступило в Редакцию
24 июня 1993 г.