

Дислокационные механизмы низкотемпературного внутреннего трения в наноструктурных материалах

В.Д. Нацик^{1,2}, Ю.А. Семеренко¹

¹Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: semerenko@ilt.kharkov.ua

²Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина

Статья поступила в редакцию 17 ноября 2015 г., опубликована онлайн 23 декабря 2015 г.

Разработан метод статистического описания дислокационной составляющей низкотемпературного внутреннего трения в наноструктурных материалах. Этим термином обозначены ультрамелкозернистые поликристаллы с большими плотностями внутризеренных и зернограничных дислокаций, линии которых разделены на фрагменты нанометрового масштаба (дислокационные релаксаторы) со случайными геометрическими и энергетическими характеристиками. Рассмотрено резонансное взаимодействие упругих колебаний с термически активированными возбуждениями таких релаксаторов и проанализированы обусловленные ими пики на температурной зависимости внутреннего трения. Показано, что в условиях низких температур форма пиков и область их локализации на температурной оси определяется в значительной мере дисперсией энергии активации релаксаторов. Сформулирован алгоритм анализа пиков внутреннего трения, зарегистрированных в эксперименте, который позволяет идентифицировать физическую модель соответствующего релаксатора и получить эмпирические оценки его параметров.

Розроблено метод статистичного опису дислокаційної складової низькотемпературного внутрішнього тертя у наноструктурних матеріалах. Цим терміном позначено ультрадрібнозернисті полікристали з великою густиною внутрішньозернових і зернограничних дислокацій, лінії яких розділені на фрагменти нанометрового масштабу (дислокаційні релаксатори) з випадковими геометричними та енергетичними характеристиками. Розглянуто резонансну взаємодію пружних коливань з термічно активованими збудженнями таких релаксаторів та проаналізовано обумовлені ними піки на температурній залежності внутрішнього тертя. Показано, що в умовах низьких температур форма піків та область їх локалізації на осі температур значною мірою визначаються дисперсією енергії активації релаксаторів. Сформульовано алгоритм аналізу піків внутрішнього тертя, які реєструються в експерименті, котрий дозволяє ідентифікувати фізичну модель відповідного релаксатора і одержати емпіричні оцінки його параметрів.

PACS: **81.07.-b** Наноматериалы и структуры: синтез и определение характеристик;
61.46.-w Структура нанокристаллических материалов;
62.40.+i Квазиупругость, внутреннее трение, релаксация напряжений и механические резонансы.

Ключевые слова: внутреннее трение, наноструктурный материал, дислокационный механизм, релаксатор, энергия активации.

1. Введение

Термином «наноструктурные материалы» обозначим два класса ультрамелкозернистых поликристаллов с широким спектром размеров зерен $10^2 \text{ нм} \leq l \leq 10 \text{ нм}$:

– поликристаллы с зернами нанометрового масштаба $l \approx 10 \text{ нм}$, их часто называют нанокристаллическими материалами;

– поликристаллы с более крупными зернами $10^2 \text{ нм} \leq l \leq 10 \text{ нм}$, если такие зерна содержат боль-

шое количество субзеренных фрагментов нанометрового масштаба.

Уточним, что в материалах второго типа роль нанометровых фрагментов могут играть некогерентные межзеренные и двойниковые границы, а также ультракороткие сегменты дислокаций сопряжения в таких границах и дислокаций скольжения внутри больших зерен. Формирование на дислокационных линиях ультракоротких сегментов может быть результатом их закрепления точечными дефектами или узлами дислокационной сетки, а в кристаллах с высоким потенциальным рельефом Пайерлса на дислокационных линиях появляются геометрические кинки с шириной нанометрового масштаба.

В настоящее время для получения наноструктурных материалов разработано несколько технологических методов [1]. Один из наиболее эффективных методов базируется на применении интенсивной пластической деформации (ИПД) для механической обработки крупнозернистых поликристаллов ($l > 10^3$ нм), позволяющий сильно измельчить зерна и фрагментировать их структуру до нанометровых размеров. Для металлических материалов максимальный эффект фрагментации дают специальные схемы деформирования в условиях высоких гидростатических давлений и низких температур (например, в среде жидкого азота): прокатка, равноканальное угловое прессование, кручение и т.п. В процессе ИПД реализуются очень большие локальные пластические деформации материала, происходит накопление предельно больших плотностей дислокаций различных типов в зернах и межзеренных границах ($N_D \sim 10^{10} - 10^{12} \text{ см}^{-2}$) и возникают неоднородные знакопеременные внутренние напряжения с большим статистическим разбросом амплитуды.

Как специфическую разновидность наноструктурных материалов можно также рассматривать твердый ^4He , который кристаллизуется в жесткой ячейке под давлением выше $2,5 \cdot 10^6$ Па (≈ 25 атмосфер) [2]. Методы экспериментального изучения механических и акустических свойств таких кристаллов разработаны для интервала давлений $40 \text{ атм} < P < 50 \text{ атм}$ и температур $0,1 \text{ К} < T < 2 \text{ К}$ [3–5]. В этих условиях кристаллы гелия имеют сильно анизотропную ГПУ структуру и довольно большой коэффициент теплового расширения, что позволяет в образцах, помещенных в жесткую ячейку, вызывать большие неоднородные термоупругие напряжения при быстрых изменениях температуры. Вместе с тем эти кристаллы имеют очень малую величину предела текучести и возникающие при быстром термоциклировании напряжения релаксируют вследствие процессов локальной пластической деформации по нескольким системам скольжения без возможности выхода дислокаций на поверхность образца. В результате возникает возможность накопления в кристаллах гелия большого количества дислокаций с плотностями

$N_D \sim 10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-2}$, которые характерны для наноструктурного состояния и являются причиной значительной аморфизации твердого гелия [3,5].

Наноструктурные материалы занимают промежуточное положение между кристаллами (монокристаллы или крупнозернистые поликристаллы) и стеклами, их можно рассматривать как своеобразную смесь кристаллической и стеклоподобной подсистем или «фаз».

Одно из важных направлений в физике наноструктурных материалов — исследование их акустических свойств при изменениях частоты колебаний и температуры в широких пределах [6–11]. В частности, методы акустической спектроскопии позволяют получить разнообразную информацию о дислокационной структуре этих материалов, а также изучить динамику и кинетику элементарных дислокационных процессов при очень больших плотностях дислокаций и хаотических конфигурациях дислокационных линий.

Наиболее информативной характеристикой материала, которая регистрируется в акустических экспериментах, является внутреннее трение $Q^{-1}(T, \omega)$ как функция температуры T и частоты колебаний ω [12,13]. Стандартная постановка эксперимента — регистрация температурной зависимости $Q^{-1}(T)_\omega$ при постоянном значении частоты $\omega \approx \text{const}$. При изучении кристаллических материалов (монокристаллов или крупнозернистых поликристаллов) в достаточно широком интервале темпе-

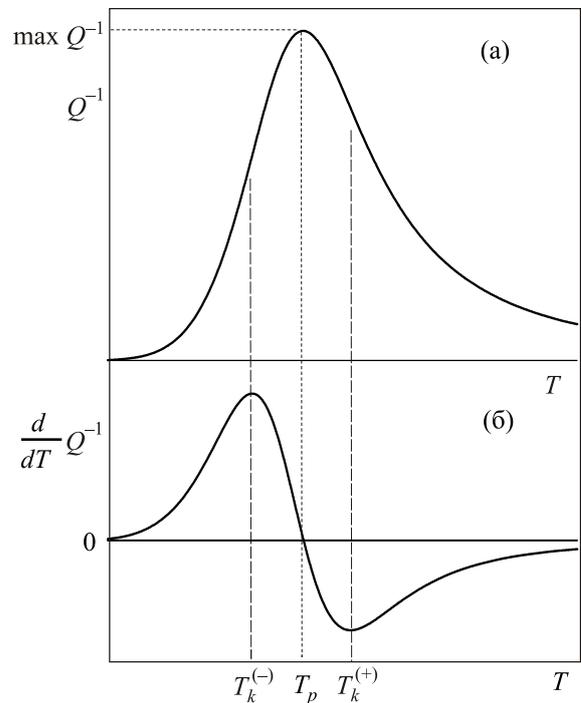


Рис. 1. Пик внутреннего трения (схема): температурные зависимости $Q^{-1}(T)$ (а) и $(d/dT) Q^{-1}(T)$ (б); T_p — температура максимума, $\max Q^{-1}$ — высота пика, $T_k^{(-)}$ и $T_k^{(+)}$ — точки перегиба на зависимости $Q^{-1}(T)$ слева и справа от вершины пика.

ратур на этой зависимости наблюдается серия пиков (акустический спектр), обусловленных резонансным взаимодействием упругих колебаний с различными типами релаксаторов — точечными дефектами, сегментами дислокационных линий, квазилокальными решеточными колебаниями и т.п. Регистрация точки максимума T_p на температурной шкале, высоты пика $\max Q^{-1} = Q^{-1}(T_p)_{\omega}$ и анализ его профиля (рис. 1) дают информацию, необходимую для идентификации физической природы соответствующего ему релаксатора. Информативность эксперимента существенно повышается при использовании колебаний с различными частотами $\omega = \omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots$ и регистрации сдвигов температуры пика $T_p = T_p(\omega_1), T_p(\omega_2), T_p(\omega_3), \dots$ вследствие изменений частоты.

При изучении металлических монокристаллов и крупнозернистых поликристаллов в области низких температур $T < 300$ К зарегистрирована серия пиков внутреннего трения, обусловленных различными дислокационными релаксаторами: пики Бордони [14] и Хасигути [15] в ГЦК металлах, α - и γ -пики в ОЦК металлах [16], пик Крамера–Бауэра в ниобии [17], динамический дислокационный резонанс Гранато–Люкке в нескольких металлических и щелочно-галоидных кристаллах [18]. Условием их наблюдения было создание в изучаемых образцах дислокационных структур с умеренно высокими плотностями $N_D \sim 10^9\text{--}10^{10}$ см⁻²: для этого использовались специальные способы деформирования при умеренных величинах пластической деформации. Анализ этих пиков позволил сопоставить каждому из них конкретные типы элементарных дислокационных процессов и получить эмпирические оценки для параметров релаксаторов: отрыв дислокационных сегментов от примесных центров закрепления, резонансное возбуждение парных кинков на дислокационных линиях в рельефе Пайерлса I рода, преодоление одиночными кинками барьеров Пайерлса II рода, возбуждение собственных колебаний дислокационных сегментов с закрепленными концами.

Основная цель настоящей работы — теоретический анализ трансформаций температурно-частотного спектра дислокационной составляющей внутреннего трения при переходе материалов из кристаллического состояния (КС монокристаллы или крупнозернистые поликристаллы) в наноструктурное состояние (НС), созданное методами ИПД. Для него характерны высокие плотности дислокаций, фрагментация дислокационных линий до размеров нанометрового масштаба и большой статистический разброс геометрических и энергетических характеристик дислокационных сегментов. Выполненное здесь исследование продолжает серию работ [19–21], в которых предложен общий метод описания изменений стандартных пиков дислокационного внутреннего трения вследствие статистического разброса параметров

дислокационных релаксаторов и рассмотрен предел относительно малой дисперсии.

2. Два типа низкотемпературных пиков дислокационного внутреннего трения

При физической интерпретации и теоретическом анализе дислокационной составляющей внутреннего трения кристаллических материалов в качестве первого приближения обычно рассматриваются модели нескольких типов дислокационных релаксаторов с одинаковыми для каждого типа геометрическими и энергетическими характеристиками [12,13]. В подавляющем большинстве случаев обсуждаются результаты акустических экспериментов, которые выполнены на частотах колебаний $\omega < 10^7$ с⁻¹. В этом диапазоне частот на температурных зависимостях внутреннего трения наблюдаются пики, обусловленные различными термически активированными дислокационными релаксаторами. Отдельный конкретный релаксатор пространственно локализован и характеризуется зависящим от температуры временем релаксации $\tau(T)$ в соответствии с законом Аррениуса

$$\tau(T) = \tau_0 \exp\left(\frac{U_0}{kT}\right), \quad (1)$$

где U_0 и τ_0 — энергия активации и эффективный период колебаний (период попыток), k — постоянная Больцмана. Отметим, что для некоторых моделей релаксаторов множитель τ_0 в (1) не является чисто механической характеристикой и может иметь относительно слабую зависимость от температуры кинетической природы [17]: при низких температурах такой зависимостью можно пренебрегать на фоне экспоненциально сильной температурной зависимости второго множителя.

Релаксационный резонанс, соответствующий системе релаксаторов с одинаковыми величинами параметров U_0 и τ_0 , описывается формулой вида

$$Q^{-1}(T, \omega) = C_r \Delta_0 f(\omega\tau). \quad (2)$$

Здесь Δ_0 и C_r — соответственно удельный вклад отдельного релаксатора и их концентрация, а $f(\omega\tau)$ — положительно определенная функция с острым максимумом при значениях $\omega\tau \approx 1$. Конкретный вид этой функции и положение ее максимума на оси температур $T_p^{(0)}(\omega)$ зависят от физической природы релаксатора и значений его активационных параметров U_0 и τ_0 , а высота пика внутреннего трения $\max Q^{-1}$ пропорциональна множителю $C_r \Delta_0$. Поэтому регистрация в экспериментах температурно-частотных спектров внутреннего трения как совокупности релаксационных пиков, а также их характеристик $T_p^{(0)}(\omega)$ и $\max Q^{-1} = Q^{-1}(T_p^{(0)}, \omega)$ открывают возможности полу-

чения оценок для плотности дислокаций в изучаемых материалах, идентификации физической природы релаксаторов и эмпирических оценок их параметров, а также для разработки адекватных представлений о деталях динамики и кинетики соответствующих релаксационных процессов.

Конкретный вид функции $f(\omega\tau)$ и точное положение ее максимума зависят от физической природы релаксаторов. Большинство известных релаксаторов можно разделить на два класса: релаксаторы Дебая [22], для которых термическая активация происходит одновременно как в прямом, так и в обратном направлении по отношению к возбуждающему напряжению; релаксаторы Коивы–Хасигути [23], для которых термическая активация стимулирует переходы только в прямом направлении. Наличие или отсутствие симметрии релаксационного процесса относительно увеличения или снятия внешнего напряжения приводит к двум различным выражениям для функции $f(\omega\tau)$ [23]:

$$f_D(\omega\tau) = \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2},$$

$$f_{K-H}(\omega\tau) = \frac{\omega^2\tau^2}{2(1 + \omega^2\tau^2)} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{\omega\tau}\right) \right]. \quad (3)$$

При заданном значении ω системе одинаковых релаксаторов соответствует пик поглощения с температурой $T_p^{(0)}$, которая определяется формулами

$$T_p^{(0)} = \frac{U_0}{k\alpha_{D,K-H}},$$

$$\alpha_D = -\ln \omega\tau_0, \quad \alpha_{K-H} = \ln 2,67 - \ln \omega\tau_0. \quad (4)$$

Различие температурных зависимостей функций $f_D(\omega\tau)$, $f_{K-H}(\omega\tau)$ и их производных иллюстрирует рис. 2.

Стандартный метод анализа таких пиков, позволяющий получить эмпирические оценки для параметров τ_0 и U_0 , требует регистрации в эксперименте сдвига $T_p^{(0)}$ при изменении ω [12,13], что сопряжено с рядом методических затруднений и не обеспечивает достаточно высокую точность оценок. Одна из возможностей избежать этих затруднений — анализ профиля пика при фиксированном значении частоты ω (рис. 1) и регистрация вместе с точкой максимума $T_p^{(0)}$ также точек перегиба $T_k^{(-)}$ и $T_k^{(+)}$ на зависимости $Q^{-1}(T)$, в которых производная $(\partial/\partial T)Q^{-1}(T)$ достигает максимума (точка $T_k^{(-)}$) и минимума (точка $T_k^{(+)}$).

Численный компьютерный анализ формул (1)–(3) показал, что соотношения между значениями параметров пика $T_p^{(0)}$, $T_k^{(-)}$, $T_k^{(+)}$ и их связь с параметрами релак-

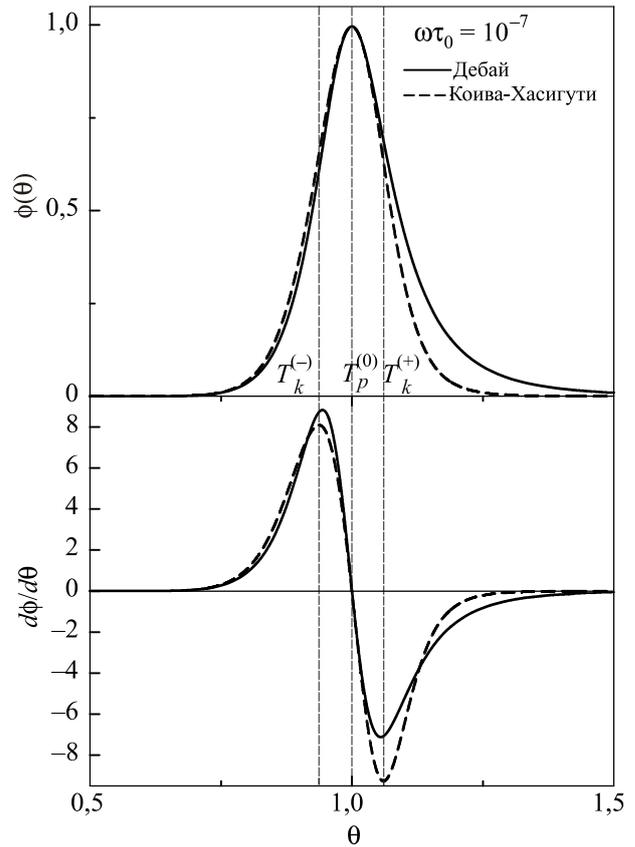


Рис. 2. Различие температурных зависимостей функций $f_D(\omega\tau)$, $f_{K-H}(\omega\tau)$ и их производных, представленных в безразмерных переменных: $\phi(\theta) = f_{D,K-H}(\omega\tau)/\max f_{D,K-H}$, $\theta = T/T_p^{(0)}$. В силу весьма малого различия $T_k^{(-)}$ и $T_k^{(+)}$ для пиков «D» и «K-H» вертикальные линии, соответствующие этим точкам, показаны только для пика «K-H».

сатора U_0 и τ_0 можно аппроксимировать простыми формулами с относительной точностью порядка 1%.

Для релаксаторов Дебая эти формулы имеют вид

$$T_k^{(-)} = T_p^{(0)} \left(1 - \frac{1}{\alpha_D} \right), \quad T_k^{(+)} = T_p^{(0)} \left(1 + \frac{7}{8\alpha_D} \right),$$

$$T_p^{(0)} = \frac{8T_k^{(+)} + 7T_k^{(-)}}{15}, \quad (5)$$

$$U_0 = kT_p^{(0)} \frac{T_p^{(0)}}{T_p^{(0)} - T_k^{(-)}} = kT_p^{(0)} \frac{7T_p^{(0)}}{8(T_k^{(+)} - T_p^{(0)})}, \quad (6)$$

$$\ln \omega\tau_0 = \frac{T_p^{(0)}}{T_k^{(-)} - T_p^{(0)}} = \frac{7T_p^{(0)}}{8(T_p^{(0)} - T_k^{(+)})}. \quad (7)$$

Так как $\max f_D(\omega\tau) = f_D(1) = 0,5$, то регистрация $\max Q_D^{-1}$ позволяет получить эмпирическую оценку:

$$C_r \Delta_0 = 2 \max Q_D^{-1}. \quad (8)$$

Параметры пика Коивы–Хасигути связаны между собой и с параметрами соответствующего релаксатора соотношениями

$$T_k^{(-)} = T_p^{(0)} \left(1 - \frac{5}{4\alpha_{K-H}} \right), \quad T_k^{(+)} = T_p^{(0)} \left(1 + \frac{9}{8\alpha_{K-H}} \right),$$

$$T_p^{(0)} = \frac{10T_k^{(+)} + 9T_k^{(-)}}{19}, \quad (9)$$

$$U_0 = kT_p^{(0)} \frac{5T_p^{(0)}}{4(T_p^{(0)} - T_k^{(-)})} = kT_p^{(0)} \frac{9T_p^{(0)}}{8(T_k^{(+)} - T_p^{(0)})}, \quad (10)$$

$$\ln \frac{\omega\tau_0}{2,67} = \frac{5T_p^{(0)}}{4(T_k^{(-)} - T_p^{(0)})} = \frac{9T_p^{(0)}}{8(T_p^{(0)} - T_k^{(+)})}. \quad (11)$$

Функция $f_{K-H}(\omega\tau)$ имеет максимальную величину $\max f_{K-H} \approx 0,4$ при $\omega\tau \approx 2,67$. Для пиков этого типа регистрация $\max Q_{K-H}^{-1}$ позволяет получить эмпирическую оценку:

$$C_r \Delta_0 = 2,5 \max Q_{K-H}^{-1}. \quad (12)$$

Для идентификации типа релаксатора при экспериментальной регистрации зависимостей $Q^{-1}(T, \omega)$ полезно также рассмотреть еще одну характеристику профиля пика — величину

$$K(\omega\tau_0) = \frac{\max \frac{\partial}{\partial T} Q^{-1}(T, \omega)}{\left| \min \frac{\partial}{\partial T} Q^{-1}(T, \omega) \right|}. \quad (13)$$

Численный анализ функций $f_D(\omega\tau)$ и $f_{K-H}(\omega\tau)$ позволил получить для зависимостей $K(\omega\tau_0)$ аналитические аппроксимации вида

$$K_D(\omega\tau_0) = 1 + \frac{10}{(-\ln \omega\tau_0)^{1,35}}, \quad (14)$$

$$K_{K-H}(\omega\tau_0) = 0,7 + \frac{10}{(-\ln \omega\tau_0)^{1,43}}. \quad (15)$$

На рис. 3 показаны графики функций $K_D(\omega\tau_0)$ и $K_{K-H}(\omega\tau_0)$ для значений $\omega\tau_0$, адекватных условиям большинства экспериментов: $10 \text{ с}^{-1} < \omega < 10^7 \text{ с}^{-1}$, $10^{-13} \text{ с} < \tau_0 < 10^{-10} \text{ с}$.

Выполненный выше анализ и его результаты (формулы (6), (7), (10), (11), (14), (15)) позволяет сформулировать алгоритм термоактивационного анализа пиков внутреннего трения, если измерения $Q^{-1}(T)$ выполнены при одном значении частоты колебаний ω , а в изучаемом кристаллическом материале статистический разброс значений параметров релаксаторов U_0 и τ_0 можно считать пренебрежимо малым.

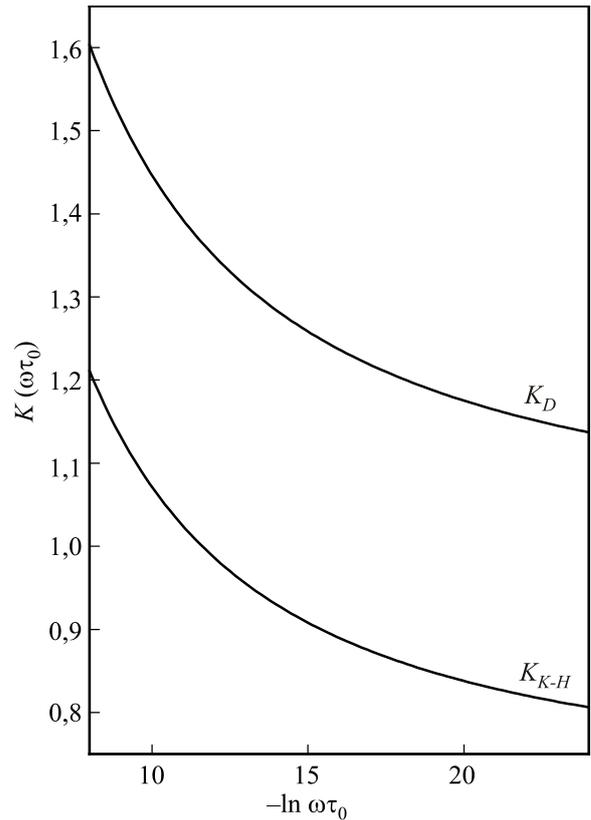


Рис. 3. Графики функций $K_D(\omega\tau_0)$ (14) и $K_{K-H}(\omega\tau_0)$ (15) при $10^{-10} < \omega\tau_0 < 10^{-4}$.

– Прежде всего, следует учитывать, что наблюдаемая в экспериментах зависимость $Q_{\text{exp}}^{-1}(T)$ состоит из суммы резонансного $Q_R^{-1}(T)$ и фонового $Q_{BG}^{-1}(T)$ поглощения, а в окрестностях каждого отдельного пика резонансную составляющую можно выделить, если использовать простые и достаточно универсальные аппроксимации [24,25]:

$$Q_{\text{exp}}^{-1}(T) = Q_{BG}^{-1}(T) + Q_R^{-1}(T), \quad Q_R^{-1}(T) = C_r \Delta_0 f(\omega\tau),$$

$$Q_{BG}^{-1}(T) = A_1 + A_2 \exp\left(\frac{T_{BG}}{T}\right). \quad (16)$$

Подбирая оптимальные значения параметров фона A_1 , A_2 и T_{BG} , получаем экспериментальные значения резонансной составляющей $Q_R^{-1} = Q_{\text{exp}}^{-1} - Q_{BG}^{-1}$, анализ которой позволяет получить эмпирические оценки для параметров релаксатора U_0 и τ_0 , ответственного за пик. Пример практического использования этой процедуры показан на рис. 4.

– Выделив резонансную составляющую $Q_R^{-1}(T)$, следует также построить график температурной зависимости производной $(d/dT)Q_R^{-1}(T)$ (рис. 1) и получить с его помощью эмпирические значения параметров $T_p^{(0)}$, $T_k^{(-)}$, $T_k^{(+)}$ и K (13).

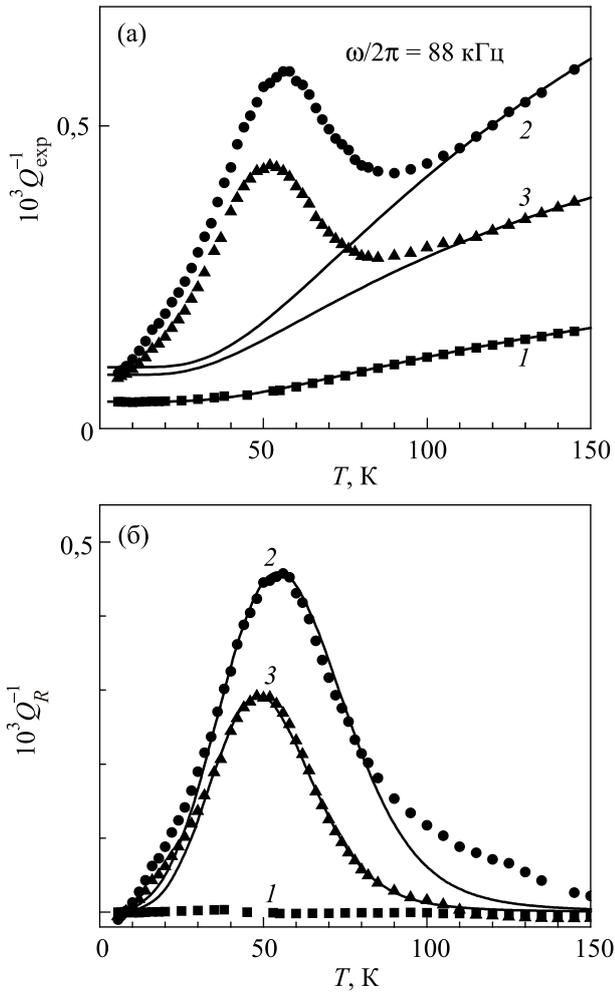


Рис. 4. Температурные зависимости внутреннего трения в монокристаллическом высокочистом железе в различных структурных состояниях (данные работы [20]). (а) — исходные экспериментальные кривые: недеформированный образец (1); образец деформированный при комнатной температуре до величины остаточной деформации $\epsilon_{pl} = 3\%$, измерения проведены непосредственно после деформации (2); тот же образец через 3 дня после деформации (3). Сплошные линии – фон поглощения, описываемый формулой (16) при значениях параметров: $A_1 = 5 \cdot 10^{-5}$, $A_2 = 3 \cdot 10^{-4}$, $T_{BG} = 116$ К (1); $A_1 = 1 \cdot 10^{-4}$, $A_2 = 1,3 \cdot 10^{-3}$, $T_{BG} = 116$ К (2); $A_1 = 9 \cdot 10^{-5}$, $A_2 = 4 \cdot 10^{-4}$, $T_{BG} = 116$ К (3). (б) — температурные зависимости $Q_R^{-1}(T)$ после процедуры вычитания фона (нумерация структурных состояний соответствует рис. 4(а)). Сплошные линии — теоретические кривые с учетом статистического усреднения, см. разд. 3.

– Сопоставление эмпирической оценки для параметра K с графиком на рис. 3 позволяет определить тип релаксатора, ответственного за данный пик («D» или «K–H»). Однозначность такого разделения обеспечивается тем, что в области актуальных значений $\omega\tau_0$ выполняется соотношение $K_D > K_{K-H}$.

– После идентификации типа релаксатора использование формул (6), (7) или (10), (11) позволяет получить

эмпирическую оценку параметра U_0 и уточнить значение параметра τ_0 . Так как имеется возможность получить два значения U_0 и три значения τ_0 , то в качестве окончательных оценок целесообразно рассматривать среднеарифметические величины.

– Соотношения (8) и (12) позволяют получить эмпирические оценки $C_r\Delta_0 = 2 \max Q_D^{-1}$ и $C_r\Delta_0 = 2,5 \max Q_{K-H}^{-1}$.

Примеры практической реализации описанного здесь алгоритма и полученные при его использовании выводы о физической природе дислокационных релаксаторов в кристаллических материалах можно найти в публикациях [19–21]. В следующих разделах настоящей статьи будет показано, что аналогичный метод анализа дислокационных механизмов внутреннего трения можно использовать и при изучении наноструктурных материалов, если модифицировать его путем учета большого статистического разброса параметров релаксаторов.

3. Статистическое описание низкотемпературных релаксационных резонансов

При изучении акустических свойств кристаллических материалов давно установлено [12,13,24], что различные воздействия, изменяющие внутреннюю структуру материала, могут в той или иной степени изменять его акустический спектр. Например, пластическая деформация различной величины, как правило, весьма существенно изменяет дислокационную составляющую внутреннего трения $Q^{-1}(T, \omega)$: повышает фон поглощения, приводит к значительному увеличению высоты и ширины отдельных пиков, а также смещению их положения на оси температур и частот, в ряде случаев появляются новые пики внутреннего трения. Появление и изменения отдельного пика вследствие пластической деформации хорошо иллюстрирует рис. 4(а) [20].

На качественном уровне понимания отмеченные выше изменения акустических спектров кристаллических материалов естественно объяснять размножением дислокаций в процессе деформации, увеличением числа тех дислокационных релаксаторов, которые уже присутствовали в структуре исходного материала, увеличением статистического разброса их параметров, а в ряде случаев — появлением новых типов релаксаторов. Как уже отмечалось во Введении, переход материалов из кристаллического в наноструктурное состояние в процессе ИПД увеличивает на несколько порядков интегральную плотность дислокаций от $N_D \sim 10^8 - 10^9$ см⁻² (КС) до $N_D \sim 10^{11} - 10^{12}$ см⁻² (НС) и весьма существенно хаотизирует дислокационную структуру. Выполненные на протяжении последних лет экспериментальные исследования акустических свойств наноструктурных материалов показали [6–11], что характерные для кристаллического состояния низкотемпературные

пики внутреннего трения при переходе в наноструктурное состояние, как правило, сохраняются, но их форма и область локализации существенно изменяются. Еще одним свидетельством сильной хаотизации дислокационной структуры в этих материалах является наблюдение в области температур $T \leq 10$ К специфических аномалий акустических свойств ряда металлов [11] и термодинамических свойств твердого гелия [3–5], которые характерны для аморфных твердых тел (стекол). Эти наблюдения свидетельствуют о значительном увеличении влияния дислокационной структуры на физико-механические свойства кристаллических материалов при переходе их в наноструктурное состояние, при этом на первый план выступает сильная фрагментация дислокационных линий и большой статистический разброс их динамических и кинетических характеристик.

При описании дислокационной составляющей внутреннего трения наноструктурных материалов естественно сохранить представления о дислокационных релаксаторах, изложенные в предыдущем разделе, но считать, что параметры элементарного релаксатора U_0 , τ_0 и Δ_0 приобретают в различных областях материала случайные добавки, величины которых порядка или меньше их значений в кристаллическом состоянии. Это означает, что вместо каждого из этих параметров следует рассматривать случайную величину и соответствующую ей функцию распределения, а с результатами измерений сопоставлять температурно-частотную зависимость средней величины внутреннего трения, полученную усреднением формулы (2):

$$\bar{Q}^{-1}(T, \omega) = C_r \bar{\Delta}_0 \cdot \bar{f}(T, \omega). \quad (17)$$

3.1. Функция распределения для энергии активации

Специфика предлагаемого здесь статистического описания внутреннего трения заключается в существенном использовании двух предположений: будем считать, что случайные параметры релаксаторов имеют характерные значения U_0 , τ_0 и Δ_0 с дисперсией порядка или меньше этих значений; рассматривается область достаточно низких температур $kT \ll U_0$, из которой исключены предельно низкие температуры $T \leq 1$ К, где существенную роль играют квантовые свойства релаксаторов [11].

Чтобы подчеркнуть существенное значение неравенства $kT \ll U_0$ при анализе $\bar{Q}^{-1}(T, \omega) = C_r \bar{\Delta}_0 \cdot \bar{f}(T, \omega)$, оценим влияние случайных изменений периода попыток $\Delta\tau_0$ и энергии активации ΔU_0 на величину времени релаксации $\tau(T)$, которое описывается формулой (1):

$$\frac{\Delta\tau}{\tau} = \left(1 + \frac{\Delta\tau_0}{\tau_0}\right) \exp \frac{\Delta U_0}{kT} - 1 \leq \begin{cases} \frac{\Delta\tau_0}{\tau_0}, & \Delta U_0 = 0, \\ \exp \frac{\Delta U_0}{kT}, & \Delta\tau_0 = 0. \end{cases} \quad (18)$$

Отсюда видно, что при $\Delta U_0 = 0$ изменение $\Delta\tau_0 \approx \tau_0$ приводит к относительному изменению времени релаксации порядка единицы, тогда как при $\Delta\tau_0 = 0$ изменение $\Delta U_0 \approx U_0$ экспоненциально увеличивает время релаксации. Данное обстоятельство позволяет при статистическом описании внутреннего трения учитывать в первом приближении только дисперсию энергии активации и с экспоненциальной точностью пренебрегать дисперсией периода попыток.

Принимая во внимание сделанные выше замечания, при усреднении функции $f(\omega\tau)$ будем считать единственным случайным параметром задачи энергию активации элементарного релаксатора U ($U_0 \rightarrow U$). В качестве статистической характеристики этой величины введем функцию $P(U)$ — плотность вероятности значений U , заданную на интервале $(0, \infty)$ и удовлетворяющую условию нормировки

$$\int_0^{\infty} P(U) dU = 1. \quad (19)$$

Критический анализ всей совокупности результатов экспериментального изучения дислокационной составляющей внутреннего трения в кристаллических материалах при низких температурах привел к заключению, что уширение и смещение пиков на температурных зависимостях $Q_{\text{exp}}^{-1}(T)$, обусловленное хаотизацией дислокационной структуры при увеличении плотности дислокаций, находит удовлетворительное статистическое описание при выборе функции $P(U)$ в виде сравнительно простого квази-гауссового распределения с двумя параметрами — затравочной величиной энергии активации U_0 и параметром дисперсии D :

$$P(U) = \frac{C(D)}{D\sqrt{2\pi}} \frac{U}{U_0} \exp \left[-\frac{(U - U_0)^2}{2D^2} \right], \quad (20)$$

здесь $C(D)$ — коэффициент, обеспечивающий условие нормировки (19). Если ввести безразмерный параметр дисперсии d , то его величина определяется формулами

$$C(d) = \frac{\Phi(d)}{\Phi(d) + \frac{d}{\sqrt{\pi}} \exp \left(-\frac{1}{d^2} \right)},$$

$$\Phi(d) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{1/d} e^{-t^2} dt, \quad d = \frac{D\sqrt{2}}{U_0}. \quad (21)$$

График функции $C(d)$ показан на рис. 5. При $D \rightarrow 0$ распределение (20) превращается в дельта-функцию $P(U) = \delta(U - U_0)$, что обеспечивает переход функции $\bar{f}(T, \omega)$ в функцию $f(\omega, \tau)$, в которой $\tau = \tau(T)$ определяется формулой (1).

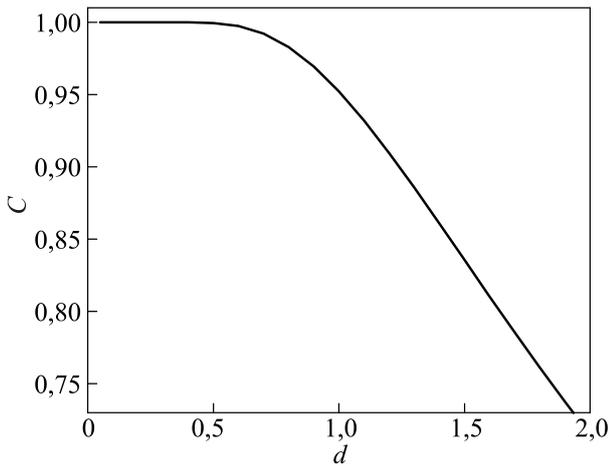


Рис. 5. Зависимость коэффициента C , обеспечивающего условие нормировки, от параметра дисперсии d .

В работах [9,19–21] функция распределения (20) при малых значениях параметра дисперсии $D \ll U_0$ использована для усреднения дебаевского релаксационного резонанса $f_D(\omega, \tau)$, а результат такого усреднения позволил предложить статистическую интерпретацию низкотемпературных пиков внутреннего трения в кристаллах железа и ниобия, наблюдаемых после пластической деформации сравнительно малой величины. В данном исследовании рассмотрим более общий случай $D \leq U_0$, а также получим и проанализируем усредненные функции $\bar{f}_D(T, \omega)$ и $\bar{f}_{K-H}(T, \omega)$ для обоих типов дислокационных релаксаторов.

При выполнении сделанных выше предположений средняя величина внутреннего трения как функция температуры T и частоты колебаний ω будет также зависеть от параметров рассматриваемой системы релаксаторов U_0 , τ_0 и D :

$$\bar{Q}^{-1} = \bar{Q}^{-1}(T, \omega; \tau_0, U_0, D) = C_r \bar{\Delta}_0 \int_0^{\infty} dU P(U) f(\omega \tau),$$

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{U}{kT}\right). \quad (22)$$

Распределение значений энергии активации (20) сохраняет пик на температурной зависимости $\bar{Q}^{-1}(T, \omega)$ при фиксированном значении частоты ω (рис. 1). Поэтому в качестве основных характеристик внутреннего трения, которые целесообразно регистрировать в экспериментах, будем рассматривать высоту пика $\max \bar{Q}^{-1} = \bar{Q}^{-1}(T_p)$, координаты на оси температур вершины пика $T_p(\omega; \tau_0, U_0, D)$ и двух точек перегиба $T^{(-)}(\omega; \tau_0, U_0, D)$ и $T^{(+)}(\omega; \tau_0, U_0, D)$ соответственно на левом и правом склонах, а также параметр

$$\bar{K} = \frac{\max \frac{\partial}{\partial T} \bar{Q}^{-1}}{\left| \min \frac{\partial}{\partial T} \bar{Q}^{-1} \right|}. \quad (23)$$

Дальнейший анализ выражения (22) для \bar{Q}^{-1} удобно выполнять, используя новые безразмерные переменные и параметры d , Ω , θ , x :

$$d = \frac{\sqrt{2}D}{U_0}, \quad \Omega = \omega \tau_0, \quad \theta = \frac{T}{T_p^{(0)}} = \frac{\alpha kT}{U_0}, \quad \ln x = \frac{U}{kT}, \quad (24)$$

$$P(U)dU = \frac{\theta^2 C(d) \ln x}{\sqrt{\pi} \alpha^2 d x} \exp\left[-\left(\frac{\theta \ln x - \alpha}{\alpha d}\right)^2\right] dx. \quad (25)$$

В новых переменных в качестве основных характеристик пиков будем рассматривать безразмерные величины:

$$\theta_p = \frac{T_p}{T_p^{(0)}}, \quad \Delta\theta_k^{(-)} = \frac{T_p - T_k^{(-)}}{T_p^{(0)}},$$

$$\Delta\theta_k^{(+)} = \frac{T_k^{(+)} - T_p}{T_p^{(0)}}, \quad (26)$$

где $T_p^{(0)}$ определено формулами (4).

3.2. Релаксаторы Дебая

Функция $f_D(\omega \tau)$, определенная первой из формул (3), в новых переменных (24) приобретает вид

$$f_D(\omega \tau) = f(x) = \frac{\Omega x}{1 + \Omega^2 x^2}, \quad (27)$$

а результат ее усреднения с распределением (25) приводит к формулам

$$\bar{Q}^{-1}(\theta, \Omega, d) = C_r \bar{\Delta}_0 C(d) \bar{f}_D(\theta, \omega, d), \quad (28)$$

$$\bar{f}_D = \frac{\Omega \theta^2}{\sqrt{\pi} d \alpha_D^2} \int_1^{\infty} dx \exp\left[-\left(\frac{\theta \ln x - \alpha_D}{\alpha_D d}\right)^2\right] \frac{\ln x}{1 + \Omega^2 x^2}. \quad (29)$$

Нам не удалось найти способ аналитического вычисления этой функции и выполнить анализ ее зависимостей от θ , Ω и d аналитическими методами, поэтому дальнейшее исследование выполнено численными методами.

Основной интерес представляли трансформации профиля пика $f_D(\theta)$ при увеличении параметра d , а также зависимости $\theta_p(d, \Omega)$, $\Delta\theta_k^{(+)}(d, \Omega)$ и $\theta_k^{(-)}(d, \Omega)$. Численное интегрирование в формуле (29) выполнено при вариациях значений параметров в пределах $0 < d < 2$ и $10^{-8} < \Omega < 10^{-5}$.

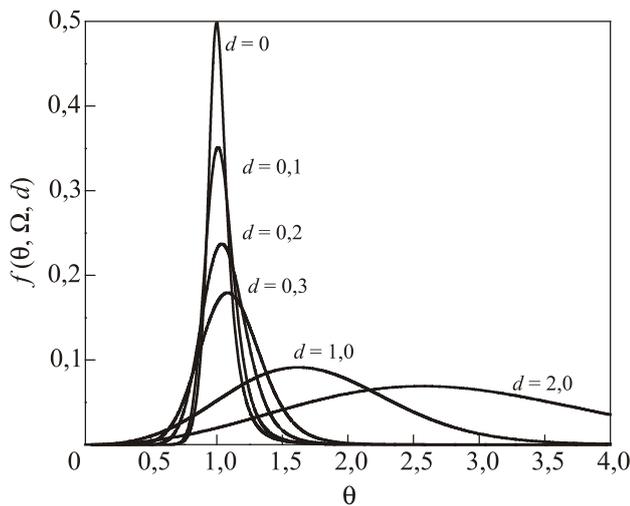


Рис. 6. Трансформация релаксационного резонанса Дебая $f_D(\theta)$ при возрастании параметра d : результат численного интегрирования в формуле (29) при фиксированном значении частотного параметра $\Omega = 10^{-7}$ и различных значениях параметра $d = 0; 0,1; 0,2; 0,3; 1,0; 2,0$.

Трансформация графика зависимости $f_D(\theta)$ при увеличении безразмерного параметра d показана на рис. 6: вариации безразмерной частоты Ω в указанных пределах не меняют характер этой зависимости. Этот рисунок иллюстрирует весьма значительное увеличение ширины пика и смещение его максимума в сторону высоких температур при увеличении дисперсии.

Безразмерная температура пика θ_p оказалась нечувствительной к изменению Ω , а характер ее изменений при увеличении параметра d иллюстрирует рис. 7. С высокой точностью можно также констатировать отсутствие зависимости от безразмерной частоты

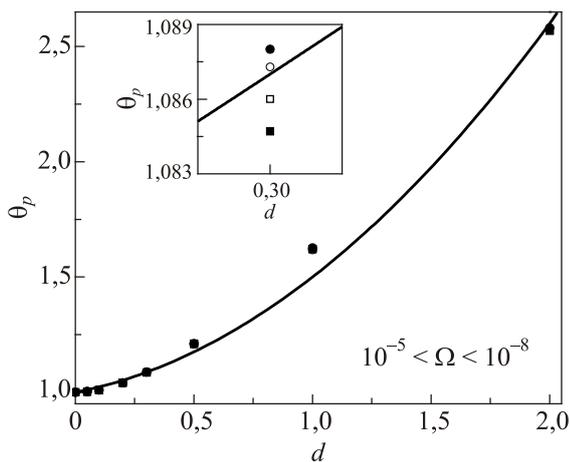


Рис. 7. Зависимости безразмерной температуры пика релаксации Дебая θ_p от параметра d , полученные в результате численного интегрирования по формуле (29) при существенно различных значениях частотного параметра Ω : 10^{-5} (●); 10^{-6} (○); 10^{-7} (□); 10^{-8} (■) (степень различия иллюстрирует вставка). Сплошная линия — аналитическая аппроксимация (30).

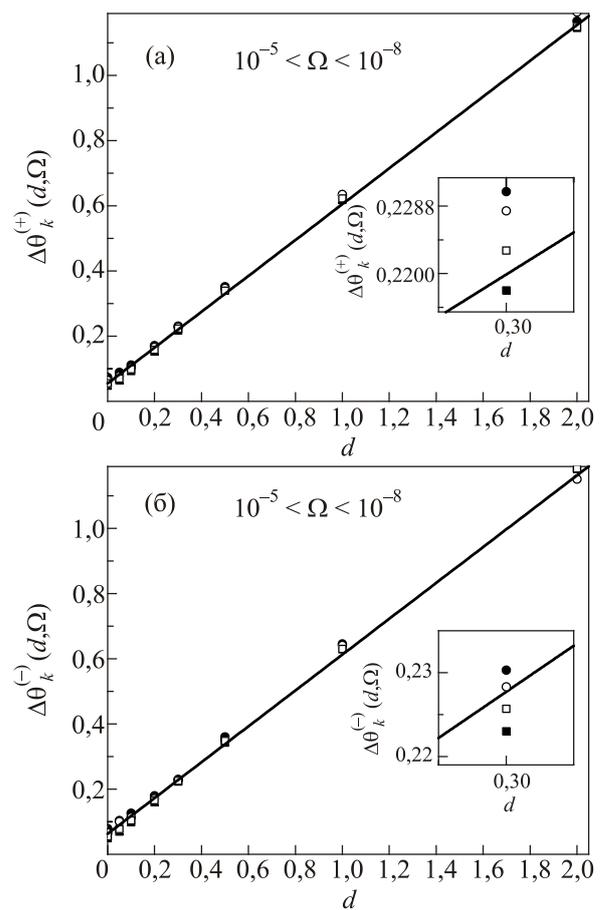


Рис. 8. Зависимости величин $\Delta\theta_k^{(+)}(d, \Omega)$ (а) и $\Delta\theta_k^{(-)}(d, \Omega)$ (б) от параметра d , полученные в результате численного интегрирования в формуле (29) при существенно различных значениях частотного параметра Ω : 10^{-5} (●); 10^{-6} (○); 10^{-7} (□); 10^{-8} (■) (степень различия иллюстрирует вставка). Сплошные линии – аналитические аппроксимации (30).

Ω у величин $\Delta\theta_k^{(+)}(d, \Omega)$ и $\Delta\theta_k^{(-)}(d, \Omega)$, а их зависимость от параметра d оказалась практически линейной (рис. 8).

Зависимость высоты пика $\max f_D = f_D(\theta_p)$ от параметра d и безразмерной частоты Ω показана на рис. 9.

Результаты численного анализа формулы (29), показанные на рис. 7–9 в виде графиков, допускают простые аналитические аппроксимации:

$$\theta_p = 1 + 0,2d + 0,3d^2, \quad \Delta\theta_k^{(-)} = \frac{1}{\alpha_D} + 0,55d,$$

$$\Delta\theta_k^{(+)} = \frac{7}{8\alpha_D} + 0,55d, \quad (30)$$

$$\max \bar{f}_D = 0,5 \exp\left(-\frac{3\alpha_D d}{19d + 10}\right). \quad (31)$$

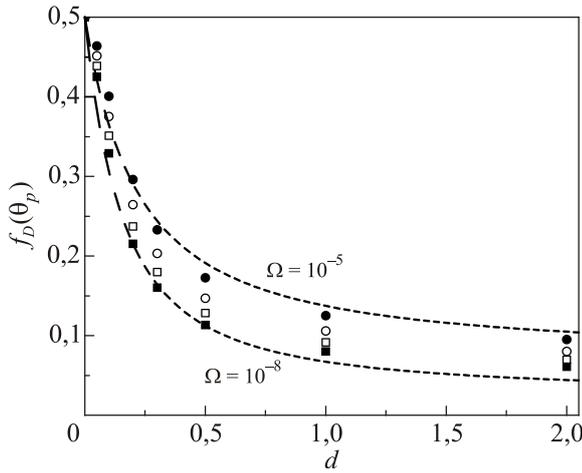


Рис. 9. Зависимость высоты пика $f_D = f_D(\theta_p)$ от параметра d при различных значениях безразмерной частоты Ω : 10^{-5} (●); 10^{-6} (○); 10^{-7} (□); 10^{-8} (■). Пунктирные линии — графики аналитической аппроксимации (31) для граничных значений Ω .

Соотношения (30) будем рассматривать как систему трех уравнений относительно величин U_0 , D и $\alpha_D = -\ln \omega\tau_0$ с коэффициентами T_p , $T_k^{(-)}$, $T_k^{(+)}$, которые можно определять путем анализа профиля пика поглощения на оси температур $\bar{Q}_R^{-1}(T)_\omega$ при заданной величине частоты ω . Подстановка (26) в (30) приводит к уравнениям:

$$5kT_p\alpha_D U_0 = 5U_0^2 + \sqrt{2}DU_0 + 3D^2, \quad (32)$$

$$8k(T_p - T_k^{(-)})\alpha_D^2 = 8U_0 + 4,4\sqrt{2}D\alpha_D, \quad (33)$$

$$8k(T_k^{(+)} - T_p)\alpha_D^2 = 7U_0 + 4,4\sqrt{2}D\alpha_D. \quad (34)$$

Это система нелинейных алгебраических уравнений. Легко убедиться, что в отсутствие дисперсии энергии активации $D = 0$ ее решения сводятся к соотношениям (6) и (7). При $D \neq 0$ решения системы уравнений (32)–(34) также удается получить в виде довольно громоздких формул. Для их записи в относительно компактной форме целесообразно использовать специальные комбинации величин T_p , $T_k^{(-)}$, $T_k^{(+)}$:

$$T_1^D = 2T_p - T_k^{(-)} - T_k^{(+)}, \quad T_2^D = 7T_k^{(-)} + 8T_k^{(+)} - 15T_p, \\ T_3^D = 28T_k^{(-)} + 32T_k^{(+)} - 71T_p. \quad (35)$$

Решения уравнений (32)–(34) можно получить, используя несколько простых алгебраических операций. Вычитание (34) из (33) приводит к соотношению между U_0 и α_D :

$$U_0 = 8kT_1^D\alpha_D^2. \quad (36)$$

Подстановкой (36) в (33) или (34) получаем связь между D и α_D :

$$D = \frac{20}{11\sqrt{2}}kT_2^D\alpha_D. \quad (37)$$

И, наконец, подстановка (36) и (37) в (32) приводит к квадратичному уравнению для α_D :

$$\alpha_D^2 + \frac{T_3^D}{88T_1^D}\alpha_D + \frac{15}{968}\left(\frac{T_2^D}{T_1^D}\right)^2 = 0. \quad (38)$$

Согласно (37), в отсутствие дисперсии $D = 0$ величина $T_2^D = 0$, что позволяет из двух решений уравнения (38) выбрать то, которое в отсутствие дисперсии согласуется с формулой (7):

$$\alpha_D = -\frac{T_3^D}{176T_1^D}\left[1 + \sqrt{1 - 480\left(\frac{T_2^D}{T_1^D}\right)^2}\right], \quad \omega\tau_0 = \exp(-\alpha_D). \quad (39)$$

Из соотношений (36) и (37) следует также выражение для параметра d в формуле (31), которое определяет высоту пика Дебая, что открывает возможность получения эмпирической оценки для параметра $C_r\bar{\Delta}_0$:

$$d_D = \frac{\sqrt{2}D}{U_0} = \frac{5T_2^D}{22T_1^D\alpha_D}, \\ (C_r\bar{\Delta}_0)_D = \frac{2\max\bar{Q}^{-1}}{C(d_D)}\exp\left(\frac{3d_D\alpha_D}{19d_D + 10}\right). \quad (40)$$

Численными методами получена также величина \bar{K}_D , которая определена формулой (23). Оказалось, что с относительной точностью порядка 1% график зависимости $\bar{K}_D(\omega\tau_0)$ совпадает с графиком на рис. 3, а \bar{K}_D является функцией только величины $\alpha_D = -\ln \omega\tau_0$ и не зависит от дисперсии D^2 . Поэтому в качестве аналитической аппроксимации этой зависимости $\bar{K}_D(\omega\tau_0) \approx K_D(\omega\tau_0)$ можно использовать формулу (14).

Эмпирическая оценка \bar{K} , полученная при анализе зарегистрированного в эксперименте пика на зависимости $Q_{\text{exp}}^{-1}(T)_\omega$, вместе с графиком на рис. 3 позволяют идентифицировать тип релаксаторов, ответственных за этот пик, а также дают еще один способ получения эмпирической оценки для параметра τ_0 .

Таким образом, если при изучении внутреннего трения наноструктурного материала зарегистрирован пик дебаевского типа и определены его характеристики T_p , $T_k^{(-)}$, $T_k^{(+)}$ и $\max\bar{Q}^{-1}$, то формулы (35)–(40) позволяют получить эмпирические оценки для основных параметров системы релаксаторов, ответственных за этот пик U_0 , D , τ_0 и $C_r\bar{\Delta}_0$.

3.3. Релаксаторы Коивы–Хасигути

Функция $f_{K-H}(\omega\tau)$ при переходе к безразмерным величинам (24) приобретает вид

$$f_{K-H}(\omega\tau) = \frac{\Omega^2 x^2}{2(1+\Omega^2 x^2)} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{\Omega x}\right) \right], \quad (41)$$

а результат ее усреднения с распределением (25) приводит к формулам

$$\bar{Q}^{-1}(\theta, \Omega, d) = C_r \bar{\Delta}_0 C(d) \bar{f}_{K-H}(\theta, \Omega, d), \quad (42)$$

$$\bar{f}_{K-H} = \frac{\Omega^2 \theta^2}{2\sqrt{\pi} d \alpha_{K-H}^2} \int_1^\infty dx \frac{x \ln x}{1+\Omega^2 x^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{\Omega x}\right) \right] \exp\left[-\left(\frac{\theta \ln x - \alpha_{K-H}}{d \alpha_{K-H}}\right)^2\right]. \quad (43)$$

Численный анализ формулы (43) был выполнен аналогично анализу формулы (29) в предыдущем разделе. Полученные в результате анализа графики зависимостей $\bar{f}_{K-H}(\theta)$, $\theta_p(d)$, $\Delta\theta^{(-)}(d)$, $\Delta\theta^{(+)}(d)$ и $\max \bar{f}_{K-H}(d, \Omega)$ с точностью до небольших численных поправок совпадают с соответствующими графиками на рис. 6–9. Для этих зависимостей также получены аналитические аппроксимации:

$$\theta_p = 1 + 0,2d + 0,3d^2, \quad \Delta\theta_k^{(-)} = \frac{10}{8\alpha_{K-H}} + 0,55d, \quad (44)$$

$$\Delta\theta_k^{(+)} = \frac{9}{8\alpha_{K-H}} + 0,55d.$$

$$\max \bar{f}_{K-H} = 0,4 \exp\left(-\frac{7\alpha_{K-H}d}{56d+20}\right). \quad (45)$$

Соотношения (44) эквивалентны системе уравнений для величин U_0 , D и $\alpha_{K-H} = \ln\left(\frac{2,67}{\omega\tau_0}\right)$:

$$5kT_p \alpha_{K-H} U_0 = 5U_0^2 + \sqrt{2} D U_0 + 3D^2, \quad (46)$$

$$8k(T_p - T_k^{(-)}) \alpha_{K-H}^2 = 10U_0 + 4,4\sqrt{2} D \alpha_{K-H},$$

$$8k(T_k^{(+)} - T_p) \alpha_{K-H}^2 = 9U_0 + 4,4\sqrt{2} D \alpha_{K-H}.$$

Для компактной записи решений этой системы уравнений удобно ввести величины:

$$T_1^{K-H} = 2T_p - T_k^{(-)} - T_k^{(+)}, \quad (47)$$

$$T_2^{K-H} = 9T_k^{(-)} + 10T_k^{(+)} - 19T_p,$$

$$T_3^{K-H} = 36T_k^{(-)} + 40T_k^{(+)} - 87T_p.$$

Использование предложенных в предыдущем разделе преобразований приводит к соотношениям

$$\alpha_{K-H} = -\frac{T_3^{K-H}}{176T_1^{K-H}} \left[1 + \sqrt{1 - 480 \left(\frac{T_2^{K-H}}{T_3^{K-H}}\right)^2} \right], \quad (48)$$

$$\omega\tau_0 = 2,67 \exp(-\alpha_{K-H}),$$

$$U_0 = 8kT_1^{K-H} \alpha_{K-H}^2, \quad (49)$$

$$D = \frac{20}{11\sqrt{2}} kT_2^{K-H} \alpha_{K-H}. \quad (50)$$

Для пиков Коивы–Хасигути величина $\bar{K}_{K-H}(\omega\tau_0) \approx K_{K-H}(\omega\tau_0)$, определенная формулой (23), в пределах точности вычислений не зависит от параметра дисперсии D , а ее зависимость от $\omega\tau_0$ представлена графиком на рис. 3 и аналитической аппроксимацией этого графика (15). Сравнение эмпирической оценки величины \bar{K} , полученной при анализе результатов измерений $\bar{Q}^{-1}(T)$, с графиками на рис. 3 позволяет идентифицировать тип релаксаторов и получить оценку для τ_0 .

Следствием формул (44) и (48)–(50) являются соотношения

$$d_{K-H} = \frac{\sqrt{2}D}{U_0} = \frac{5T_2^{K-H}}{22T_1^{K-H} \cdot \alpha_{K-H}},$$

$$(C_r \bar{\Delta}_0)_{K-H} = \frac{2,5 \cdot \max \bar{Q}^{-1}}{C(d_{K-H})} \exp\left(\frac{7d_{K-H} \alpha_{K-H}}{56d_{K-H} + 20}\right). \quad (51)$$

Эти формулы вместе с графиком функции $C(d)$ на рис. 5 позволяют получить эмпирическую оценку для $C_r \bar{\Delta}_0$.

4. Заключение

В настоящем исследовании предложена статистическая интерпретация и разработан алгоритм анализа пиков внутреннего трения, которые часто наблюдаются при изучении акустических свойств наноструктурных материалов в области умеренно низких температур $10 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$. Как правило, эти пики обусловлены резонансным взаимодействием упругих колебаний с термически активированными дислокационными релаксаторами. Их аналоги ранее многократно наблюдались при изучении дислокационной составляющей внутреннего трения в различных кристаллических материалах — монокристаллах или крупнозернистых поликристаллах.

Наноструктурные материалы, полученные методами интенсивной пластической деформации крупнозернистых поликристаллов, представляют собой ультрамелкозернистые поликристаллы с большими плотностями внутризеренных и зернограницных дислокаций, а линии

этих дислокаций разделены на фрагменты нанометрового масштаба со случайными геометрическими и энергетическими характеристиками. Естественным следствием таких изменений дислокационной структуры материала является значительная трансформация дислокационных пиков внутреннего трения: увеличение их высоты вследствие повышения плотности дислокаций, увеличение ширины из-за статистического разброса параметров отдельных релаксаторов, смещение области локализации пиков на температурной оси, возрастание и усложнение фона внутреннего трения.

Отдельный фрагмент дислокационной линии, как термически активированный релаксатор, в относительно совершенном кристалле характеризуется энергией активации U_0 , эффективным периодом колебаний τ_0 и удельным вкладом в поглощение Δ_0 , а система однотипных релаксаторов — удельной концентрацией C_r . В результате резонансного взаимодействия упругих колебаний с такими релаксаторами на температурной зависимости внутреннего трения $Q^{-1}(T)_\omega$ появляется относительно узкий пик: регистрация его высоты $\max Q^{-1}$, точки максимума $T_p^{(0)}$ и анализ профиля пика дают информацию, необходимую для получения эмпирических оценок перечисленных выше параметров релаксатора, а также для выбора его физической модели. Соответствующий алгоритм анализа пика описан в разд. 2.

При переходе к наноструктурному состоянию материала параметры релаксаторов приобретают случайные добавки и в эксперименте регистрируется усредненный вклад релаксаторов во внутреннее трение $\bar{Q}^{-1}(T)_\omega$. Теоретическое описание зависимости $\bar{Q}^{-1}(T)_\omega$ требует рассмотрения функций статистических распределений для каждого из параметров релаксатора, что увеличивает число независимых характеристик релаксаторов: наряду с параметрами U_0 , τ_0 и Δ_0 необходимо также рассматривать параметры функций распределения, например, дисперсию соответствующей величины.

Выполненные в разд. 3.1 оценки показали, что при изучении дислокационной составляющей низкотемпературного внутреннего трения основное влияние на величину и характер температурной зависимости $\bar{Q}^{-1}(T)_\omega$ оказывает, с экспоненциальной точностью, статистический разброс энергии активации — дисперсия D^2 разности $(U - U_0)^2$. Это означает, что измеряемая в экспериментах величина $\bar{Q}^{-1}(T)_\omega$, кроме температурно-частотной зависимости, определяется также набором как минимум четырех характеристик релаксаторов: $\bar{Q}^{-1} = \bar{Q}^{-1}(T; U_0, D, \tau_0, C_r \bar{\Delta}_0)_\omega$. В соответствии с этим конечной целью анализа отдельного пика на температурной зависимости внутреннего трения следует считать идентификацию физической модели соответствующего ему релаксатора и получение эмпирических оценок для его параметров U_0 , D , τ_0 , $C_r \bar{\Delta}_0$.

В разд. 3 данной статьи разработана процедура (алгоритм) решения сформулированной выше задачи для двух основных моделей дислокационных релаксаторов, обозначенных символами «D» и «K-H». Этот алгоритм предполагает регистрацию пика на зависимости $\bar{Q}^{-1}(T)_\omega$, возможность отделения резонансной составляющей $\bar{Q}_R^{-1}(T)_\omega = \bar{Q}_{\text{exp}}^{-1}(T)_\omega - Q_{BG}^{-1}(T)$ от фона (см. формулу (16)) и построение сглаженных температурных зависимостей $\bar{Q}_R^{-1}(T)_\omega$ и $(d/dT)\bar{Q}_R^{-1}(T)_\omega$. В результате получаем шесть характеристик пика (рис. 2): высоту $\max \bar{Q}_R^{-1}$, координату максимума T_p и точек перегиба $T_k^{(-)}$ и $T_k^{(+)}$ на левом и правом склонах пика, а также значения производных $\frac{d}{dT}\bar{Q}_R^{-1}(T = T_k^{(-)})_\omega$ и $\frac{d}{dT}\bar{Q}_R^{-1}(T = T_k^{(+)})_\omega$.

Для идентификации типа релаксаторов, ответственных за пик, следует использовать значения параметра \bar{K} — отношение производных в точках перегиба (23). Сопоставление величины $\bar{K} = K(\omega\tau_0)$ с графиками на рис. 3 позволяет установить принадлежность релаксаторов к «D» или «K-H» типу, а также получить эмпирическую оценку для эффективного периода колебаний τ_0^D или τ_0^{K-H} .

Следующий шаг процедуры — вычисление значений параметров $T_1^{D,K-H}$, $T_2^{D,K-H}$, $T_3^{D,K-H}$ в соответствии с формулами (35) или (47) и получение эмпирических оценок для остальных параметров теории на основе формул

$$\omega\tau_0^D = \exp(-\alpha_D), \quad \omega\tau_0^{K-H} = 2,67 \exp(-\alpha_{K-H}),$$

$$\alpha_{D,K-H} = -\frac{T_3^{D,K-H}}{176T_1^{D,K-H}} \left[1 + \sqrt{1 - 480 \left(\frac{T_2^{D,K-H}}{T_3^{D,K-H}} \right)^2} \right],$$

$$U_0^{D,K-H} = 8kT_1^{D,K-H} \alpha_{D,K-H}^2,$$

$$D^{D,K-H} = \frac{20}{11\sqrt{2}} kT_2^{D,K-H} \alpha_{D,K-H}$$

$$d_D = \frac{5T_2^D}{22T_1^D \alpha_D}, \quad (C_r \bar{\Delta}_0)_D = \frac{2 \max \bar{Q}_R^{-1}}{C(d_D)} \exp\left(\frac{3d_D \alpha_D}{19d_D + 10}\right),$$

$$d_{K-H} = \frac{5T_2^{K-H}}{22T_1^{K-H} \cdot \alpha_{K-H}},$$

$$(C_r \bar{\Delta}_0)_{K-H} = \frac{2,5 \max \bar{Q}^{-1}}{C(d_{K-H})} \exp\left(\frac{7d_{K-H} \alpha_{K-H}}{56d_{K-H} + 20}\right).$$

Функция $C(d)$ определяется формулами (21), а ее график показан на рис. 5.

Дальнейшие уточнения деталей кинетики элементарных релаксационных процессов, ответственных за пик, предполагают сравнение результатов анализа и полученных оценок с известными в литературе моделями дислокационных релаксаторов.

Авторы благодарят П.П. Паль-Валь за интерес к работе и полезные обсуждения различных аспектов проблемы наноструктурных материалов, а также В.А. Майданова, Э.Я. Рудаковского и С.Н. Смирнова за обсуждение свойств твердого гелия.

1. Р.З. Валиев, И.В. Александров, *Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства*, Академкнига, Москва (2007).
2. Б.Н. Есельсон, В.Н. Григорьев, В.Г. Иванцов, Э.Я. Рудаковский, *Свойства жидкого и твердого гелия*, Изд-во стандартов, Москва (1978).
3. И.А. Дегтяров, А.А. Писунов, В.А. Майданов, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудаковский, А.С. Рыбалко, В.А. Тихий, *ЖЭТФ* **138**, 699 (2010).
4. J. Day and J. Beamish, *Nature* **450**, 853 (2007).
5. M.J. Graf, Z. Nussinov, and A.V. Balatsky, *J. Low Temp. Phys.* **158**, 550 (2010).
6. И.С. Головин, *ФММ* **110**, 424 (2010) [*Phys. Met. Metallogr.* **110**, 405 (2010)].
7. Е.Н. Ватажук, П.П. Паль-Валь, Л.Н. Паль-Валь, В.Д. Нацик, М.А. Тихоновский, А.А. Куприянов, *ФНТ* **35**, 528 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 417 (2009)].
8. Е.Н. Ватажук, П.П. Паль-Валь, В.Д. Нацик, Л.Н. Паль-Валь, М.А. Тихоновский, А. Н. Великодный, П.А. Хаймович, *ФНТ* **37**, 210 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 169 (2011)].
9. Е.Н. Ватажук, В.Д. Нацик, *ФНТ* **37**, 792 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 625 (2011)].
10. Ю.А. Семеренко, В.А. Москаленко, А.Р. Смирнов, *Металлофизика и новейшие технологии* **35**, 499 (2013) [*Metallofiz. Nov. Tekhn.* **35**, 497 (2013)].
11. В.Д. Нацик, Е.Н. Ватажук, П.П. Паль-Валь, Л.Н. Паль-Валь, В.А. Москаленко, *ФНТ* **39**, 1381 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 1078 (2013)].
12. А. Новик, Б. Берри, *Релаксационные явления в кристаллах*, Атомиздат, Москва (1975).
13. *Физическая акустика*, У. Мезон (ред.), Мир, Москва (1969), т. III, ч. А.
14. P.G. Bordoni, *J. Acoust. Soc. Amer.* **26**, 495 (1954).
15. R.R. Hasiguti, N. Igata, and G. Kamoshita, *Acta. Met.* **10**, 442 (1962).
16. Р. Чамберс, в кн.: *Физическая акустика*, Мир, Москва (1969), т. II, ч. А.
17. В.Д. Нацик, П.П. Паль-Валь, *ФНТ* **23**, 1229 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 922 (1997)].
18. A. Granato and K.Lücke, *J. Appl. Phys.* **27**, 583 (1956).
19. В.Д. Нацик, П.П. Паль-Валь, Л.Н. Паль-Валь, Ю.А. Семеренко, *ФНТ* **25**, 748 (1999) [*Low Temp. Phys.* **25**, 558 (1999)].
20. В.Д. Нацик, П.П. Паль-Валь, Л.Н. Паль-Валь, Ю.А. Семеренко, *ФНТ* **26**, 711 (2000) [*Low Temp. Phys.* **26**, 522 (2000)].
21. В.Д. Нацик, П.П. Паль-Валь, Л.Н. Паль-Валь, Ю.А. Семеренко, *ФНТ* **27**, 547 (2001) [*Low Temp. Phys.* **27**, 404 (2001)].
22. П. Дебай, *Полярные молекулы*, ГНТИ, Москва–Ленинград (1931).
23. M. Koiwa and R.R. Hasiguti, *Acta Met.* **13**, 1219 (1965).
24. В.С. Постников, *Внутреннее трение в металлах*, Металлургия, Москва (1974).
25. Б.И. Шаповал, В.М. Аржавитин, *Механизмы высокотемпературного фона внутреннего трения металлов*, ЦНИИАтоминформ, Москва (1988).

Dislocation mechanism of low-temperature internal friction in nanostructured materials

V.D. Natsik and Yu.A. Semerenko

The method of statistical description of the dislocation component of the low-temperature internal friction in nanostructured material has been developed. The resonant interaction of elastic oscillations with thermally activated excitations of relaxators has been considered. It is shown that at low temperatures the peak shape and its localization on the temperature axis is determined essentially by the dispersion of the activation energy of the relaxators. The algorithm of analysis of the experimental peaks of internal friction has been formulated. This algorithm allows the identification of physical model of the corresponding relaxators and enables to receive the empirical estimates for the parameters of oscillators.

PACS: **81.07.-b** Nanoscale materials and structures: fabrication and characterization;
61.46.-w Structure of nanoscale materials;
62.40.+i Anelasticity, internal friction, stress relaxation, and mechanical resonances

Keywords: internal friction, nanostructured material, dislocation mechanism, relaxator, activation energy.