

УДК 537.226

© 1991

## ТЕРМОФЛУКТУАЦИОННОЕ ДВИЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИИ В ПОЛЕ УПРУГОГО ТОЧЕЧНОГО ЦЕНТРА ВБЛИЗИ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА

*А. Л. Корженевский, Д. А. Лисаченко*

Рассмотрен процесс преодоления дислокационным сегментом упругого поля точечного дефекта под действием внешнего упругого напряжения. Установлено, что приближение к точке структурного фазового перехода 1-го рода меняет характеристики этого термофлуктуационного процесса: в частности, активационный характер движения может смениться безактивационным.

Анализ процесса преодоления дислокационным сегментом поля упругого точечного дефекта лежит в основе термофлуктуационной теории скорости деформации пластичных твердых тел. Изменение формы сегмента и высота активационного барьера при его движении в поле точечного центра дилатации изучались с помощью различных приближений (линейное натяжение, приближение малых прогибов, сосредоточенная сила) еще в работах [1-4]. В настоящее время основное внимание исследователей сосредоточено на статистической стороне проблемы термофлуктуационной пластичности, при моделировании которой обычно исходят из представления о критическом угле отрыва [5-8].

Вместе с тем в наших работах [9-12] было показано, что возможность одевания дислокаций подвижными «шубами» новой фазы вблизи точек фазовых переходов (ФП) 1-го рода может приводить к перестройке структуры дислокационного ансамбля, а также к существенному изменению характера движения дислокаций. Поэтому в настоящей статье мы проанализируем особенности процесса термофлуктуационного перемещения дислокации под действием внешней нагрузки в интервале температур, близких к точке ФП 1-го рода.

1. Пусть сегмент дислокации с вектором Бюргерса  $b$ , направленным по оси  $OY$ , закрепленный в точках  $x = \pm a$ ,  $y = 0$ , движется в своей плоскости скольжения под действием внешнего однородного упругого напряжения  $\sigma_{ik}^0$  и напряжения  $\sigma_{ik}^d(r)$ , создаваемого точечным дефектом, расположенным на оси  $OZ$  в точке  $z$  (рис. 1). Энергия сегмента есть

$$H = \int_{-a}^a E(y') \sqrt{1 + y'^2} dx - \int_{-a}^a dx \int_0^{y(x)} F_y(x, y) dy, \quad (1)$$

где функция  $y(x)$  описывает форму сегмента,  $F_y = -\tau_x b_y (\sigma_{zy}^0 + \sigma_{zy}^d(r))$  — компонента силы Пича—Келера,  $\tau$  — касательный к дислокации единичный вектор. Линейную энергию дислокации  $E(y')$  представим вблизи точки ФП 1-го рода в виде суммы энергий винтовой и краевой компонент [10]

$$E(y') = \mu b^2 \cos^2 \theta + \frac{\mu b^2}{1-\nu} (1-f_*) \sin^2 \theta \equiv \mu b^2 \frac{1+y'^2(1-f)}{1+y'^2},$$

где  $y' = \operatorname{tg} \theta$ ,  $\mu$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $1-f = (1-f_*)/(1-\nu)$ . Параметр  $f_*$  отражает резкую температурную зависимость линей-

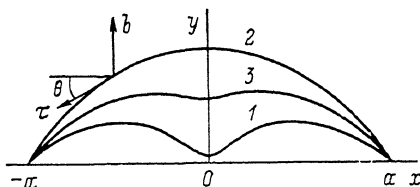
ной энергии краевой компоненты дислокации в модели ФП 1-го рода со стрикционной связью вида  $q\eta^2\epsilon_{kk}$  [9] вблизи температуры ФП в идеальном кристалле  $T_*$

$$f_* = \frac{4\pi q^2 \eta_0^2}{\alpha(T-T_*) \mu \ln(2a/b)} \sim \frac{q\epsilon_0}{\alpha(T-T_*)}, \quad (2)$$

где  $q$  — стрикционный модуль,  $\epsilon_{ik}$  — тензор упругих деформаций,  $\eta_0$  и  $\epsilon_0$  — скачки параметра порядка и однородной деформации при ФП,  $\alpha$  — коэффициент в члене  $\alpha(T-T_0)\eta^2$  разложения свободной энергии.

Дислокационная неустойчивость возникает в характерном интервале температур  $\Delta T_d \sim q\epsilon_0/\alpha$ , где  $f \geq 1/2$  [9-12]. При этом радиус дислокационной «шубы» достигает значений  $\rho \sim qb/(\alpha(T-T_*)) \sim b/\epsilon_0$ , и в случае характерных деформаций  $\epsilon_0 \sim 10^{-2}$  и плотности дислокаций  $n_d \sim 10^6 \text{ см}^{-2}$  доля новой фазы составляет  $\xi \sim \rho^2 n_d \sim 10^{-3}$ . Это значит, что аномалии должны быть заметны уже в самом начале процесса ФП.

Рис. 1. Равновесные конфигурации дислокационного сегмента в процессе преодоления упругого поля точечного дефекта.



Поле упругих напряжений дефекта  $\sigma_{yz}^d(\mathbf{r}) = 2\mu\epsilon_{yz}^d(\mathbf{r})$  находим по его тензору силовых диполей  $P_{ik}$ , используя упругоизотропную функцию Грина  $G_{ik}(\mathbf{r})$  [13]

$$\epsilon_{ik}^d = (\partial u_i^d / \partial x_k + \partial u_k^d / \partial x_i) / 2,$$

$$u_i^d = P_{km} (\partial / \partial x_m) G_{ik}(\mathbf{r}).$$

В приближении упругоизотропной среды со стрикцией вида  $q\eta^2\epsilon_{kk}$  дефекты типа «дилатационный центр», а также цилиндрические «шубы» на дислокациях вне своего объема не создают дилатацию, поэтому величина их упругого взаимодействия не меняется при ФП и аномалии обусловлены только перенормировкой линейной энергии параметром  $f$ . Если же дефект создает  $\epsilon_{kk}^d \neq 0$  или стрикция не чисто дилатационная, необходимо учитывать упругие поля зародышей новой фазы.

2. В случае движения дислокации в поле дилатационного центра тензор  $P_{ik}$  имеет вид  $P_{ik} = P\delta_{ik}$ , а поле дефекта

$$\sigma_{yz}^d = \frac{3P(1-2\nu)yz}{4\pi(1-\nu)r^5}, \quad \epsilon_{kk}^d = 0.$$

Форму сегмента находим, решая численно уравнение Эйлера для функционала (1), которое в переменных  $s = \sigma_{yz}a/\mu b$ ,  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}/a$  имеет вид

$$\frac{y''}{(1+y'^2)^{3/2}} \left( 1 + f \frac{y'^2 - 2}{1+y'^2} \right) = s^0 + s^d(\mathbf{r}),$$

$$s^d(\mathbf{r}) = D \frac{yz}{r^3}, \quad D = \frac{3(1-2\nu)P}{4\pi(1-\nu)\mu a^2 b}. \quad (3)$$

Подставив решения (3) в (1), определим энергию сегмента для его различных конфигураций. В частном случае  $f=0$ ,  $y' \ll 1$  уравнение (3) сводится к  $y'' = s^0 + s^d(\mathbf{r})$ , рассмотренному в [4], где было показано, что при определенных условиях сегмент может занимать одно из двух положений: устойчивое либо метастабильное (кривые 1, 2 на рис. 1), между которыми находится решение уравнения (3), отвечающее максимуму энергии (кривая 3). Разности энергий сегмента в этих положениях  $H_{12} = H_3 - H_1$ ,  $H_{21} = H_3 - H_2$  являются активационными барьерами при пере-

скоках сегмента из положения 1 в 2 и обратно. Наличие этих барьеров и обуславливает термофлуктуационный характер движения дислокаций.

Наши расчеты показывают, что вблизи ФП 1-го рода равновесная конфигурация дислокаций может сильно зависеть от температуры. На рис. 2 приведена типичная зависимость прогиба в центре сегмента  $y(0)=y_0$  от  $f(T)$  при разных значениях однородного напряжения  $s^0$  и при  $z=0.01$ ,

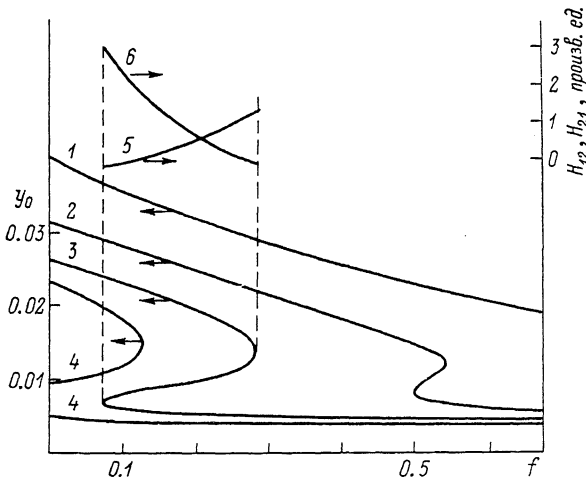


Рис. 2. Температурные зависимости стрелы прогиба дислокационного сегмента  $y_0$  (1—4) и высот активационных барьеров  $H_{12}$  (5) и  $H_{21}$  (6) в окрестности точки ФП.  $D=10^{-4}$ ,  $z=10^{-2}$ ,  $s^0=0.7$  (1), 0.6 (2), 0.54 (3, 5, 6), 0.5 (4).

что соответствует плотности дислокаций  $n_d \sim 10^8 \text{ см}^{-2}$  и дефектов  $n \sim \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . Видно, что в некотором интервале температур и напряжений возможны две равновесные конфигурации сегмента и, следовательно, переходы между ними. Вне этого интервала остается только одно решение при каждом  $s^0$  и, следовательно, движение сегмента становится безактивационным. Температурная зависимость высоты барьера представлена на рис. 2, а интервала напряжений  $(s_1, s_2)$  активационного движения при двух разных  $z$  — на рис. 3. При  $s^0 < s_1$  сегмент закреплен на дефекте (его форме соответствует кривая 1 на рис. 1), а при  $s^0 > s_2$  дефект преодолевается безактивационно (кривая 2). Интервал  $(s_1, s_2)$  вблизи ФП меняется и может вообще исчезнуть (кривая 2 на рис. 3), и, таким образом,

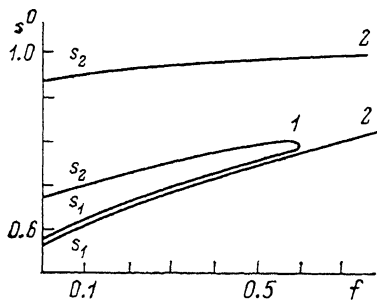


Рис. 3. Изменение интервала напряжений активационного движения дислокационного сегмента при приближении к точке ФП.  $D=2 \cdot 10^{-4}$ ,  $z=0.012$  (1), 0.01 (2).

напряжение, необходимое для преодоления сегментом дефекта, увеличивается. Для сегмента винтовой дислокации оно, напротив, уменьшается. Поэтому при движении дислокации сквозь сетку препятствий критическое напряжение на разных ее участках будет различным в зависимости от ориентации последних. Это же относится и к критическому углу атаки дефекта.

Изменение конфигурации сегмента, высоты барьера и критического напряжения обусловлено тем, что в энергию системы «дислокация+дефект» при приближении к точке структурного ФП входит помимо обычной упругой энергии решетки также и энергия тех степеней свободы кристалла, с которыми связан ФП, причем последняя существенно зависит

от ориентации элемента дислокационной линии, вдоль которой образуется зародыш новой фазы. Вследствие этого изменяются энергии равновесных конфигураций сегмента и соответственно высота активационного барьера.

При больших  $\sigma^0$  сегмент может сработать как дислокационный источник Франка—Рида. Поскольку после отрыва от дефекта  $\sigma^d(r) \ll \sigma^0$ , критическое напряжение  $\sigma_{кр}$  можно оценить, как и для сегмента в однородном поле. Тогда из решения [10] получаем, что для краевого сегмента  $\sigma_{кр}$  не меняется, а для винтового  $\sigma_{кр} = (\mu b/2a)(1-f)$ .

3. В качестве примеров движения дислокации в полях недилатационных центров мы рассмотрели тетраэдрические дефекты и дефекты типа сдвиговый центр. Первые характеризуются тензором силовых диполей с ненулевыми диагональными компонентами вида  $P_{xx} = P_1$ ,  $P_{yy} = P_{zz} = P_2$  и, в частности, при  $P_1 = P$ ,  $P_2 = 2P$  создают поле упругих напряжений

$$\sigma_{xy}^d(r) = \frac{3Pyz}{4\pi(1-\nu)r^3} \left[ 5 - \left(1 - \frac{x^2}{r^2}\right) - 8\nu \right]$$

и ненулевую знакопеременную дилатацию

$$\varepsilon_{kk}^d(r) = \frac{P(1-2\nu)}{8\pi\mu(1-\nu)r^3} \left( 1 - 3\frac{x^2}{r^2} \right),$$

характерная величина которой  $\varepsilon^d \sim P/(8\pi\mu r^3)$ . Дефекты типа сдвиговый центр, для которых тензор  $P_{ik}$  имеет ненулевые компоненты  $P_{yz} = P_{zy} = P$ , также создают знакопеременную дилатацию

$$\varepsilon_{kk}^d = \frac{3P(1-2\nu)yz}{4\pi\mu(1-\nu)r^3} \sim \frac{P}{3\pi\mu r^3}.$$

В силу знакопеременности  $\varepsilon_{kk}^d$  такие дефекты всегда одеваются «шубой» (независимо от знаков  $q$  и  $P$ ) характерного размера  $\rho \sim |Pq|/[a\mu(T-T_*)]^{1/2}$ , создающей упругие деформации с характерной величиной  $\Delta\varepsilon(r) \sim (q\gamma_0^0/K)(\rho/r)^3$ , где  $K$  — упругий модуль. В итоге добавка к полю «голого» дефекта имеет вид  $\Delta\varepsilon \sim \varepsilon^d f_d$  с параметром  $f_d$ , близким по величине к рассмотренному ранее параметру  $f$ . Таким образом, одновременно с перенормировкой линейной энергии дислокации необходим учет упругого поля «шубы» дефекта.

Численные расчеты показывают, что в этих случаях при приближении к точке ФП 1-го рода поведение сегмента имеет более сложный характер. В частности, дефект тетраэдрического типа нельзя определить однозначно как притягивающий или отталкивающий, поскольку это зависит и от его ориентации относительно сегмента. Дефект типа сдвиговый центр создает упругое поле со сложной угловой зависимостью, в результате чего возможно появление более чем двух устойчивых конфигураций дислокационного сегмента, между которыми происходят термоактивационные переоскоки. Эти обстоятельства необходимо учитывать при статистическом моделировании процесса пластической деформации.

Отметим, что при экспериментальном исследовании пластических свойств кристаллов, находящихся в окрестности точек ФП 1-го рода, величина аномалий будет определяться как свойствами самого ФП (симметрия параметра порядка, значения скачков деформации решетки), так и дефектностью кристалла (структура дислокационного ансамбля, преимущественный тип точечных дефектов). Поэтому, чтобы облегчить интерпретацию происхождения механических аномалий, целесообразно сравнивать результаты для образцов с такими дефектными структурами, у которых аномальные вклады от эффекта «одевания» максимально различны.

В заключение отметим, что среди огромного числа работ по изучению свойств кристаллов вблизи ФП довольно мало целенаправленных исследований аномалий пластических свойств. Отчасти это объясняется трудностями выращивания необходимых для этого кристаллов с достаточно

большими размерами и тем, что в приложениях часто важны не столько механические, сколько сегнетоэлектрические или оптические свойства. Однако исследования аномалий пластических характеристик не только важны для понимания процесса ФП в реальном кристалле, но и интересны с прикладной точки зрения. В качестве примеров приведем здесь два: 1) существует уникальная возможность визуального наблюдения в окрестности точек ФП дислокаций, одетых «шубами» новой фазы в диэлектриках и полупроводниках [14]; 2) от возможных нежелательных последствий микропластичности можно избавиться при наличии трикритической точки, если внешними воздействиями (электрическое и магнитное поле, давление) переместить траекторию ФП в область ФП 2-го рода, где в характерном интервале  $\Delta T_d$  рассматриваемые эффекты малы по сравнению с ФП 1-го рода [9].

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Wit de G., Koehler J. S. // Phys. Rev. 1959. V. 116. N 5. P. 1113—1120.
- [2] Bacon D. J. // Physica Status Solidi. 1967. V. 23. P. 527—538.
- [3] Foreman A. J. E. // Phil. Mag. 1967. V. 15. N 137. P. 1011—1021.
- [4] Чернов В. М., Инденбом В. Л. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 11. С. 3331—3341.
- [5] Судзуки Т., Есинага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989. 294 с.
- [6] Предводителев А. А., Тяпунина Н. А., Зиненкова Г. М., Бушуева Г. В. Физика кристаллов с дефектами. М., 1986. 240 с.
- [7] Белан В. И., Ландау А. И. // ФММ. 1988. Т. 65. № 2. С. 259—267.
- [8] Малашенко В. В., Соболев В. Л., Худик Б. И. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 5. С. 1614—1616.
- [9] Корженевский А. Л. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1324—1331.
- [10] Корженевский А. Л., Лисаченко Д. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1492—1494.
- [11] Korzhenevskii A. L., Lissachenko D. A. // Abstracts of VII Int. Meet. on Ferroelectricity. IMF-7. Saarbrücken, FRG, 1989. P. 201.
- [12] Корженевский А. Л., Лисаченко Д. А. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 6. С. 1769—1771.
- [13] Лейбфрид Г., Броер Н. Точечные дефекты в металлах. М.: Мир, 1981. 440 с.
- [14] Белоусов М. В., Вольф Б. Е. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. № 6. С. 348—352.

Ленинградский

электро-технический институт им. В. И. Ленина

Поступило в Редакцию

24 июля 1990 г.

В окончательной редакции

27 декабря 1990 г.