

## Ускорение атомов в кристаллах при пластической деформации

© В.И. Сугаков

Институт ядерных исследований Академии наук Украины,  
252028 Киев, Украина

(Поступила в Редакцию 25 октября 1996 г.)

Показана возможность возникновения при механических нагрузках двухъямного потенциала для атомов в рядах, параллельных оси винтовой дислокации и расположенных в окрестности ядра дислокации, а также возможность ускорения атомов при скольжении дислокаций до энергий, намного превышающих энергию связи атомов в кристалле.

В работах [1,2] показано, что в системе, у которой для каждого атома кристалла в направлении некоторого кристаллического ряда имеются два минимума и в первоначальный момент атомы находились в минимумах с большей энергией, возможно существование цепочки последовательных столкновений, при которых атомы из верхних минимумов будут переходить в нижние, отдавая энергию одному из атомов (последнему в цепочке столкновений), который при этом ускоряется. Таким образом, имеет место когерентная (индуцированная) релаксация атомов. Время когерентной релаксации значительно короче времени назависимой релаксации отдельных атомов из верхнего минимума в нижний. Известное в радиационной физике явление фокусировки [3] при движении атомов вдоль кристаллического ряда способствует многократному повторению столкновений, т.е. одномерности движения. Однако остается открытым принципиальный вопрос о реализации таких систем с инверсной заселенностью атомами минимумов. В [2,4] показано, что инверсная заселенность может возникнуть при сильных деформациях сдвига или при структурных фазовых переходах. Однако параметры, при которых это имеет место, довольно жесткие: деформация сдвига должна быть большой ( $\epsilon > 0.25$ ), а при фазовых переходах должно реализоваться специальное расположение вдоль кристаллического ряда минимумов потенциальной энергии, между которыми переходят атомы. В данной работе показано, что при определенных условиях в полях внешних напряжений для атомов, расположенных в рядах в окрестности ядра винтовой дислокации, атомы соседних рядов создают двухъямный потенциал, причем при увеличении напряжения относительные глубины минимумов меняются и атомы оказываются расположенными в минимумах с большей энергией. При переходе атомов из одного минимума в другой происходит скольжение дислокации. С помощью численного моделирования рассмотрены процессы ускорения атомов при таком переходе.

Рассмотрим винтовую дислокацию в кристалле с симметрией типа решетки каменной соли с вектором Бюргерса, направленным вдоль [110]. Будем предполагать, что существует смещение атомов только

вдоль оси дислокации, и учитывать взаимодействие между атомами ближайших рядов. Обозначим смещение атомов ряда через  $u(n, m)$ , где  $n$  и  $m$  нумеруют ряды вдоль осей  $x$  и  $y$  соответственно, ось  $x$  направлена вдоль [001], ось  $y$  — вдоль  $[\bar{1}10]$ -направлений кристалла, а ось  $z$  — вдоль оси дислокации (рис. 1). Представим взаимодействие атома некоторого ряда со всеми атомами другого ряда в виде разложения в ряд Фурье. Ограничиваясь двумя гармониками, для энергии взаимодействия атома со всеми атомами других рядов получим

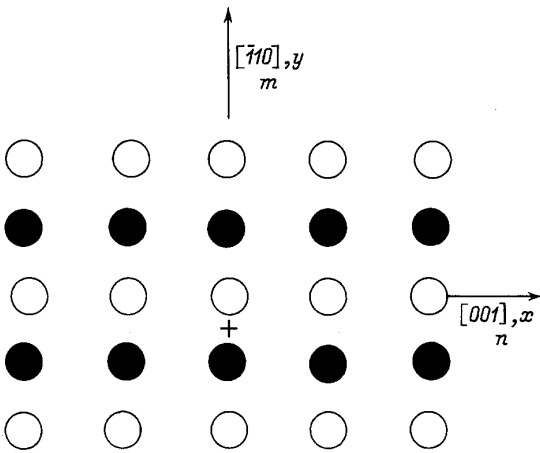
$$V^l = \sum_i \left[ V_0^i + V_1^i \cos(2\pi u^i) + V_2^i \cos(4\pi u^i) \right], \quad (1)$$

где индекс  $l$  нумерует ближайшие к данному атому ряды; в приближении взаимодействия ближайших рядов для кристалла рассматриваемой симметрии  $l = 1, 2$ ,  $u^i$  — относительное смещение атомов рассматриваемых рядов, выраженное в единицах длины вектора Бюргерса  $b$ .

Смещения атомов определяются из условия равенства нулю сил, действующих на каждый атом со стороны всех остальных рядов,

$$\begin{aligned} & \left( V_1^1 \left[ \sin \{ 2\pi [u(n, m) - u(n-1, m)] \} \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \sin \{ 2\pi [u(n, m) - u(n+1, m)] \} \right] \right. \\ & \quad \left. + 2V_2^1 \left[ \sin \{ 4\pi [u(n, m) - u(n-1, m)] \} \right] \right. \\ & \quad \left. + \sin \{ 4\pi [u(n, m) - u(n+1, m)] \} \right] \\ & \quad + V_1^2 \left[ \sin \{ 2\pi [u(n, m) - u(n, m-1)] \} \right] \\ & \quad + \left[ \sin \{ 2\pi [u(n, m) - u(n, m+1)] \} \right] \\ & \quad + 2V_2^2 \left[ \sin \{ 4\pi [u(n, m) - u(n, m-1)] \} \right] \\ & \quad \left. + \left[ \sin \{ 4\pi [u(n, m) - u(n, m+1)] \} \right] \right] = 0, \quad (2) \end{aligned}$$

где  $V_1^1, V_2^1, V_1^2, V_2^2$  — феноменологические параметры, которые характеризуют взаимодействие атома некоторого ряда с соседними рядами. Из данных об упругих постоянных кристаллов и оценок на основе



**Рис. 1.** Пересечение плоскости  $xOy$  атомными рядами. Атомы в рядах, обозначенных темными и светлыми кружками, смещены относительно друг друга вдоль оси  $z$  наполовину вектора Бюргерса. Крестиком показана точка пересечения плоскости линией дислокации.

микроскопических моделей межатомного взаимодействия следует, что для разных кристаллов величины  $V_1^1$  и  $V_1^2$  меняются в пределах 0.1–1 eV, а  $V_2^1$  и  $V_2^2$  составляют величины порядка 0.1–0.2 от этих значений.

Следует отметить, что использованные приближения (учет смещений только вдоль оси дислокации, взаимодействие между ближайшими рядами, аппроксимация взаимодействия в виде (1)) широко применяются в микроскопической теории дислокаций [5–8]. Однако мы выполним анализ, не проводившийся в работах по теории дислокаций, а именно будем изучать возможности возникновения двухъямного потенциала, созданного атомами соседних рядов, вдоль оси дислокации, появления инверсной заселенности и ее проявления в ускорении атомов.

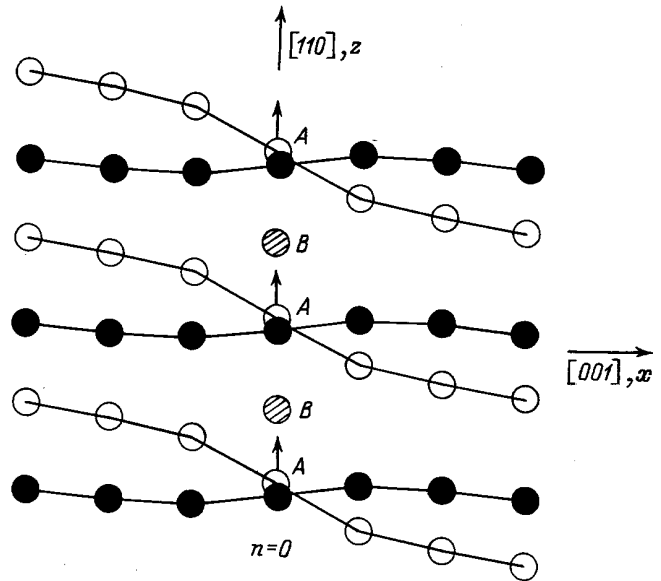
При расчете деформаций смещения атомов для некоторой области в окрестности ядра дислокации находились численно в дискретной модели из решения системы уравнений (2). Вне этой области (вне кристаллита), где деформация мала, ее значение находилось из континуальной модели. На границе кристаллита решение сшивалось с решением линейризованной системы уравнений (2) (т. е. с решением линейной теории упругости). При наличии внешних механических напряжений решение на границе удовлетворяет условию  $u(n, m) = u_l(n, m) + \varepsilon_{zx}(n - n_0) + \varepsilon_{zy}(m - m_0)$ , где  $u_l(n, m)$  — поле смещений атомов при наличии винтовой дислокации в модели линейной теории упругости,  $\varepsilon_{zx}$  и  $\varepsilon_{zy}$  — тензоры деформации, созданной механическими напряжениями,  $n_0, m_0$  — исходное положение ядра дислокации ( $n_0 = m_0 = 1/2$  или  $n_0 = 0, m_0 = 1/2$  [5]).

Сначала определялись атомные смещения при отсутствии внешних напряжений. При увеличении де-

формации происходит плавное изменение смещений атомов. Однако при деформациях, больших некоторого критического значения ( $\varepsilon_{zx}^c$  или  $\varepsilon_{zy}^c$ ), имеет место резкое изменение положений атомов, что соответствует скольжению дислокации. Если  $\varepsilon_{zx} > \varepsilon_{zx}^c, \varepsilon_{zy} = 0$ , скольжение имеет место в плоскости (001). Если  $\varepsilon_{zy} > \varepsilon_{zy}^c, \varepsilon_{zx} = 0$ , скольжение происходит в плоскости  $(\bar{1}10)$ . При расчетах кроме зависимости  $u(n, m)$  от  $\varepsilon_{zx}$  и  $\varepsilon_{zy}$  строилась зависимость потенциальной энергии атома, созданной атомами соседних рядов при их фиксированном положении, от величины смещения атома вдоль оси дислокации и анализировалась возможность появления двухъямного потенциала.

Зависимость смещений  $u(n, m)$  от тензора деформаций была рассчитана из системы уравнений (2) для различных значений гармоник потенциальной энергии взаимодействия между рядами в (1). Продемонстрируем основные результаты на конкретном примере для параметров взаимодействия, равных  $V_1^1 = -0.53$  eV,  $V_2^1 = 0.0$ ,  $V_1^2 = -0.4$  eV,  $V_2^2 = -0.08$  eV, при выборе размеров кристаллита  $13 \times 13$  рядов. Проанализируем результаты расчетов для различных направлений приложенного напряжения.

а)  $\varepsilon_{zx} \neq 0, \varepsilon_{zy} = 0$ . Расположение атомов в окрестности ядра дислокации в двух плоскостях, параллельных плоскости  $(\bar{1}10)$ , т. е.  $xOz$ , при наличии в кристалле деформации представлено на рис. 2. Атомы, помеченные темными кружками, расположены в плоскости, параллельной  $(\bar{1}10)$  при  $m = -1$ , а светлыми кружками — в параллельной ей плоскости при



**Рис. 2.** Расположение атомов в окрестности оси дислокации в деформированном кристалле ( $\varepsilon_{zx} = -0.08$ ) в плоскостях, параллельных плоскости  $xOz$ . Светлыми кружками обозначены атомы в плоскости с  $m = 0$ , темными кружками — с  $m = -1$ .

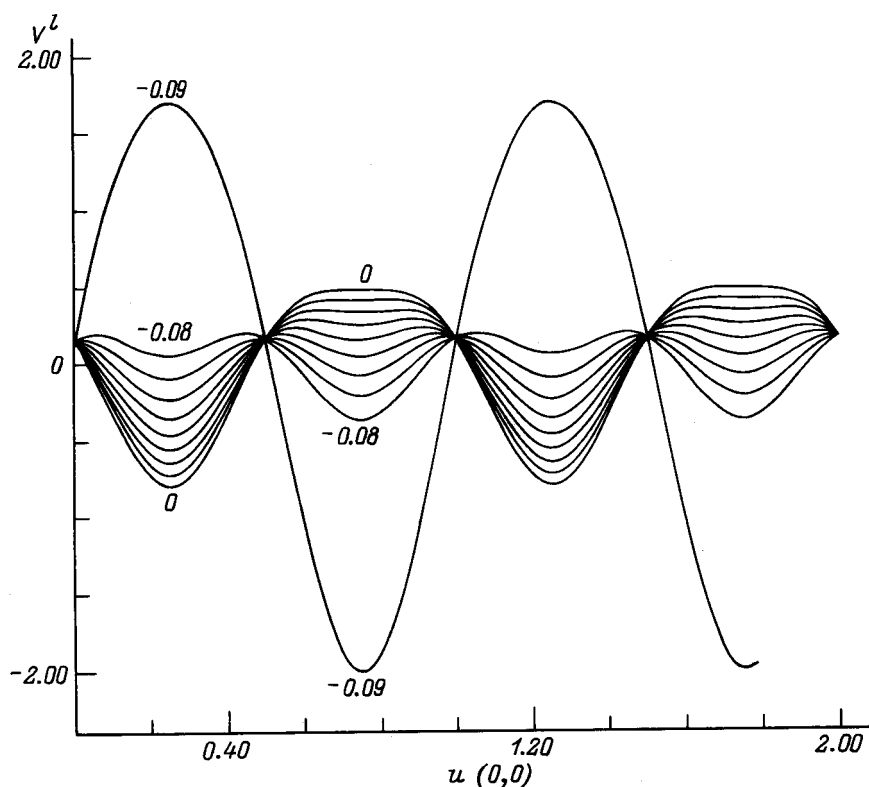


Рис. 3. Зависимость потенциальной энергии, создаваемой соседними рядами, для атома в ряду с  $n = m = 0$  от смещения атома вдоль ряда для различных значений механической нагрузки.

$m = 0$ . Поскольку атомы в рассматриваемых плоскостях расположены по разные стороны от линии дислокации (рис. 1), смещения атомов как функции  $x$  (или  $n$ ) в рядах, расположенных в окрестности линии дислокации ( $n \sim 0$ ), ведут себя по-разному: смещения для светлых кружков уменьшается, для темных — растут. С ростом напряжения происходят значительные изменения в смещениях атомов в окрестности ядра дислокации, при  $\varepsilon_{zx} < 0$  возникает большой градиент смещений для атомов в плоскости  $m = 0$  (светлые кружки на рис. 2). Наибольший градиент имеет место в центре дислокации в ряду  $m = 0, n = 0$  (атомы типа А).

Рассмотрим потенциальную энергию взаимодействия атома А с атомами соседних рядов (т. е. потенциальную энергию атома А без учета взаимодействия с атомами ряда  $m = 0, n = 0$ , в котором находится рассматриваемый атом), как функцию смещения атома вдоль ряда. При этом положение атомов соседних рядов предполагается фиксированным и соответствующим решению системы (2). На рис. 3 представлена зависимость этой потенциальной энергии от координаты атома А для различных значений внешнего напряжения. Различные кривые соответствуют разным значениям внешней нагрузки, при которой компонента тензора деформаций  $\varepsilon_{zx}$  изменялась от 0.0 до  $-0.09$ . Цифра у кривых указывают значения  $\varepsilon_{zx}$ ,

которые отличаются для соседних кривых на 0.01. При малых нагрузках зависимость имеет минимум при исходном расположении атома А. Однако при определенном значении напряжения в потенциальной энергии появляется второй минимум. При некотором напряжении второй минимум становится ниже исходного, в котором атом локализован первоначально. При увеличении внешней нагрузки начальный минимум исчезает совсем, и атомы данного ряда должны перейти в другое положение, смещенное на 0.5 (в положение В — заштрихованные кружки на рис. 2). Критическое значение деформации при рассматриваемых значениях параметров равно  $\varepsilon_{zx} = -0.085$ . Если все атомы А перейдут в положение В (переходы указаны стрелками на рис. 2), то поведение смещений атомов, обозначенных светлыми кружками (плоскость  $m = 0$ ), при  $n \sim 0$  будет таким же, как поведение смещений атомов, обозначенных темными черными кружками (плоскость  $m = -1$ ): смещения будут расти с ростом  $x$ . Это означает, что обе рассматриваемые плоскости после перехода атомов из положения А в положение В находятся по одну сторону от линии дислокации; таким образом, имеем место скольжение дислокации в плоскости (001), и линия дислокации перемещается в направлении оси  $y$ . Отметим, что, как и должно быть,

при изменении знака  $\varepsilon_{zx}$  смещение линии дислокации происходит в противоположном направлении.

б)  $\varepsilon_{zx} = 0$ ,  $\varepsilon_{zy} \neq 0$ . В этом случае при рассматриваемых значениях параметров взаимодействия двухъямный потенциал не возникает. При увеличении нагрузки атомы находятся в прежних положениях, испытывая малые смещения. Если напряжение превышает критическое значение ( $\varepsilon_{zy} > \varepsilon_{zy}^c$ ), происходит скольжение дислокации в плоскости  $(\bar{1}10)$ . В отличие от случая а в случае б при скольжении перестройку испытывает большое число атомов во многих рядах, а результаты для критического напряжения более чувствительны к выбору размеров кристаллита. Для рассматриваемых значений параметров критическое  $\varepsilon_{zy}^c$  равно 0.004. Это значительно меньше, чем критические деформации в случае а. Следовательно, при выбранных значениях параметров плоскость  $(\bar{1}10)$  является главной скоростью скольжения, а плоскость  $(001)$  является вторичной плоскостью скольжения.

Скольжение дислокации связано с нестабильностью атомной конфигурации при критических значениях внешних напряжений. Обычно нестабильность имеет место по отношению к определенной нормальной моде. В случае б такой нормальной модой является суперпозиция смещений большого числа атомов в большой области кристалла. В этом случае барьер Пайерлса мал. Двухъямный потенциал возникает в случае а, когда неустойчивая мода почти совпадает со смещением атомов в одном ряду. В этом случае дислокация является узкой, а барьер Пайерлса большой.

Поскольку целью работы является изучение механизма скольжения дислокаций, связанного с появлением двухъямного потенциала и приводящего к ускорению атомов, в дальнейшем будет рассматриваться случай а. Расчеты показывают, что двухъямный потенциал возникает в широкой области изменения параметров  $V_2^1$  и  $V_2^2$ , однако в настоящей работе эта область не анализируется.

Предположим, что напряжения таковы, что в системе реализуется двухъямный потенциал и атомы в ряду  $n = m = 0$  оказываются в верхних минимумах. При переходе атомов ряда из одного минимума в другой (переходы указаны стрелками на рис. 2) произойдет релаксация и, как уже отмечалось, скольжение дислокации. При исследуемом механизме скольжения с образованием двойного перегиба сначала происходит переход на некотором отрезке линии дислокации, а затем этот отрезок растет за счет релаксации атомов на границах отрезка. В данной работе предлагается механизм когерентной, или индуцированной, релаксации, при которой переход из верхних минимумов в нижние происходит вследствие цепочки соударений между атомами при движении вдоль ряда. Если вследствие тепловых флуктуаций некоторый атом имеет энергию, достаточную для преодоления барьера между минимумами, после столк-

новения с соседним атомом он отдает ему энергию и оказывается в окрестности нижнего минимума. Аналогично перейдет в равновесное положение соседний атом, передавая энергию следующему атому вдоль цепочки и т. д. Таким образом, происходит ускорение последнего атома в цепочке столкновений атомов при движении вдоль ряда за счет их переходов из верхних минимумов в нижние [1,2].

Проведем численное моделирование такого процесса ускорения, используя найденный нами двухъямный потенциал, возникающий для атомов в окрестности оси дислокации. Рассмотрим одномерное движение атомов вдоль ряда с  $n = m = 0$ . Положения атомов соседних рядов будем считать фиксированными и соответствующими стационарному решению системы уравнений (2). Обоснование учета движения только атомов одного ряда и одномерности движения детально проанализировано в теории фокусированных столкновений в радиационной физике [3]. Фокусированные столкновения имеют место в определенной области энергий  $E$  сталкивающихся частиц ( $1 < E < 1000$  eV) [3]. В частности, нижняя граница обусловлена тем, что энергия  $E$  должна быть намного большей энергии фононов.

Пусть  $l$ -й атом кристаллического ряда вдоль оси дислокации находится в двухъямном потенциале, созданном атомами соседних рядов  $V_l(u_l)$  (рис. 3), а потенциальная энергия взаимодействия между атомами внутри ряда, находящимися на расстоянии  $u$ , равна  $V^i(u)$ . Система уравнений, описывающих динамику взаимодействующих атомов внутри кристаллического ряда в приближении ближайших соседей, имеет вид

$$M \frac{d^2 u_l}{dt^2} = - \frac{\partial V^l(u_l)}{\partial u_l} - \frac{\partial V^i(u_l - u_{l-1})}{\partial u_l} - \frac{\partial V^i(u_l - u_{l+1})}{\partial u_l}, \quad (3)$$

где  $M$  — масса атомов.

При расчетах взаимодействие между атомами внутри кристаллического ряда представлялось в виде потенциала Леннарда–Джонса. Для взаимодействия  $l$ -й и  $l-1$ -й частиц имеем

$$V^i(u_l - u_{l-1}) = -E_0 \left( [(u_l - u_{l-1})^6]^{-1} - [2(u_l - u_{l-1})^{12}]^{-1} \right). \quad (4)$$

Система уравнений (3) при внешнем потенциале вида (1) представляет собой синусоидальное уравнение Гордона в дискретной решетке, но не с одной, а двумя синусоидальными гармониками. В данной работе система решалась численно для конечного числа частиц (до 320). В начальный момент предполагалось, что атомы ряда неподвижны и находятся в минимумах с более высокой энергией, а одна частица ( $l = 1$ ) имеет скорость  $v \neq 0$  при  $t = 0$ . Результаты расчетов для нагрузки, соответствующей деформации  $\varepsilon_{zx} = -0.08$  (см. соответствующий потенциал на рис. 3), представлены на рис. 4. На этом рисунке показана

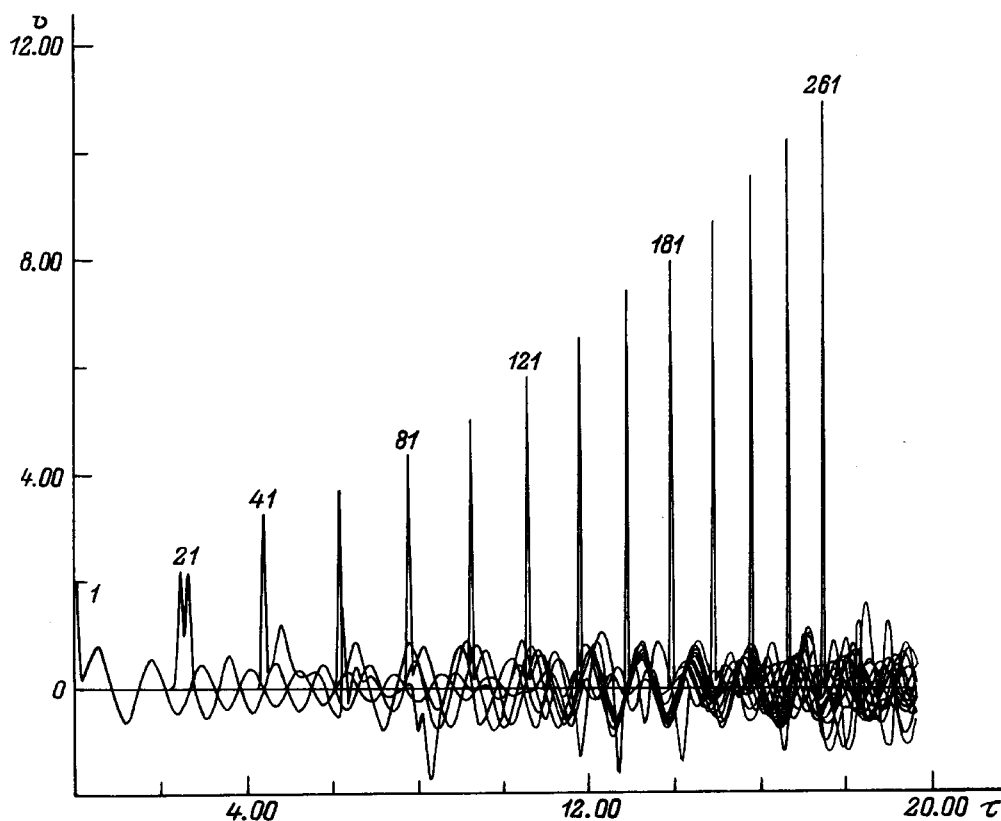


Рис. 4. Зависимость от времени скоростей атомов в кристаллическом ряду при когерентной релаксации. Цифры указывают номер атома.

зависимость безразмерных скоростей частиц от безразмерного времени ( $\tau = t/t_0$ , где  $t_0 = \sqrt{6E_0/Mb^2}$ ) для 1-й, 21-й, 41-й и т. д. частиц при  $E_0 = 0.26$  eV,  $v(0) = 2.5$ .

Из рис. 4 отчетливо видно наличие ускорения. Ускорение имеет место, если начальная скорость превышает некоторое пороговое значение. При первых столкновениях движение частиц сложное, и разница в максимальных значениях скоростей соседних частиц невелика, затем скорость от частицы к частице стабильно нарастает. Вообще говоря, исследование начального момента ускорения требует при моделировании также учета движения атомов соседних рядов. Чтобы избежать этого, в работе предполагается, что энергия первой движущейся частицы, возникшая вследствие флуктуаций, намного превышает энергию фононов. Максимальное значение скорости ограничивают различные механизмы потерь энергии: 1) дефокусировка, существенная при больших энергиях; 2) передача энергии атомам соседних рядов; 3) потери энергии продольного движения вследствие нецентральности столкновений из-за тепловых колебаний атомов; 4) несовершенства решетки, наличие примесей; 5) электронное торможение. Обзор исследований влияния этих процессов на затухание фокусированных столкновений изложен в [3]. Оценки,

проведенные для рассматриваемой системы (ускорения при наличии двухъямного потенциала и первоначальной инверсной заселенности минимумов), показывают [1,2], что верхняя граница энергии для легких атомов составляет величину порядка нескольких десятков электрон-вольт, а для тяжелых атомов — порядка нескольких сотен электрон-вольт.

При переходе атомов ряда из верхних минимумов в нижние происходит скольжение дислокации, при этом инверсия возникает в соседнем ряду и т. д.

В процессе последовательных столкновений атомов с перебрасыванием их из верхнего минимума в нижний и ускорением одного атома часть атомов ряда соответствует их расположению до скольжения дислокации, а другая часть, в которой столкновения уже произошли, — расположению атомов после скольжения. Поэтому рассматриваемый механизм скольжения описывает ускоренное движение перегиба дислокации. Ответ на вопрос о том, будет ли начинаться процесс скольжения образованием двойного перегиба или с последовательных столкновений атомов, требует моделирования начального процесса скольжения дислокации в трехмерной модели решетки. Особенностью рассматриваемого механизма ускорения является то обстоятельство, что в результате скольжения дислокации потенциальная энергия, накопленная в

отдельных атомах, которая в целом может быть большой, концентрируется в кинетической энергии одного из атомов, которая может значительно превышать энергию связи атомов в кристаллах.

Результаты работы могут быть использованы для объяснения некоторых аномальных явлений в кристаллах, возникающих при сильной механической нагрузке, что будет сделано в дальнейшем.

Исследования, представленные в работе, выполнены при поддержке Международной соросовской программы поддержки просвещения в области точных наук Международного фонда "Возрождение (гранты ISSEP SPU042065). "

### Список литературы

- [1] В.И. Сугаков. УФЖ **37**, 8, 1212 (1992).
- [2] V.I. Sugakov. Phys. Stat. Sol. (b) **179**, 43 (1993).
- [3] М. Томпсон. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М. (1971). 268 с.
- [4] В.И. Сугаков. ФТТ **35**, 10, 2714 (1993).
- [5] A.A. Maradudin. J. Phys. Chem. Sol. **9**, 1, 1 (1959).
- [6] Z.S. Basinski, M.S. Dutsbery, R. Taylor. Can. J. Phys. **49**, 2160 (1971).
- [7] F. Minami, E. Kuramoto, S. Takeuchi. Phys. Stat. Sol. (a) **22**, 81 (1974).
- [8] K. Ohsawa, H. Koisumi, O.K. Kirchner, T. Suzuki. Phil. Mag. **A69**, 1, 171 (1994).