01;05

Колебания атомов двойниковой границы

© О.М. Остриков

Мозырский государственный педагогический институт,
247760 Мозырь, Белоруссия

(Поступило в Редакцию 30 марта 1998 г.)

С помощью классического метода получены дисперсионные уравнения колебаний атомов двойниковой границы.

1. Двойникование относится к одному из основных видов пластической деформации кристаллов, поэтому его изучение с научной точки зрения имеет большое значение, так как у ряда материалов (например, Bi, Zn, Sb, TiAl, кремнистое железо) вдоль определенных кристаллографических направлений пластическая деформация осуществляется только двойникованием. Несмотря на большое количество экспериментальных данных [1–3], проблема построения логически завершенной теории двойникования кристаллов все еще ждет своего решения.

Динамические характеристики двойниковых границ являются определяющими при изучении физических закономерностей пластической деформации твердых тел двойникованием. В данной работе с позиции микроскопической теории двойников [2] изучена динамика колебательного движения атомов двойниковой границы.

2. В настоящее время в физике твердого тела классическим результатом [4] стало выражение, описывающее колебания цепочки атомов одинаковой массы M, в виде которой моделируется одномерная кристаллическая решетка

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}\left|\sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right|, \qquad (1)$$

где ω — частота колебаний атомов, q — волновой вектор, a — расстояние между атомами, β — константа.

Используя метод, которым было получено соотношение (1), рассчитаем зависимость ω от q для атома, находящегося на двойниковой границе A_1A_2 (рис. 1).

3. Рассмотрим кристалл, состоящий из атомов одинаковой массы M. Предположим, что каждый атом взаимодействует только с соседними атомами. В гармоническом приближении потенциальная энергия взаимодействия данных атомов связана с расстоянием x между ними соотношением

$$U(x) \sim x^2. \qquad (2)$$

Соответственно сила взаимодействия между атомами f пропорциональна x в первой степени.

Свяжем начало декартовой системы координат с атомом двойниковой границы (рис. 2). Его положение на оси $0X$ обозначим через x_n. Положения атомов *1* и *2* на данной оси соответственно равны $x_{n-1}\cos\alpha$ и $x_{n+1}\cos\alpha$ (α — угол двойникования). Тогда сила, действующая на атом двойниковой границы, будет равна

$$f_n = f_{n+1} + f_{n-1} = \beta(x_{n+1}\cos\alpha + x_{n-1}\cos\alpha - 2x_n), \quad (3)$$

где f_{n+1} — сила, действующая на атом двойниковой границы со стороны атома *1* (рис. 2); f_{n-1} — со стороны атома *2*.

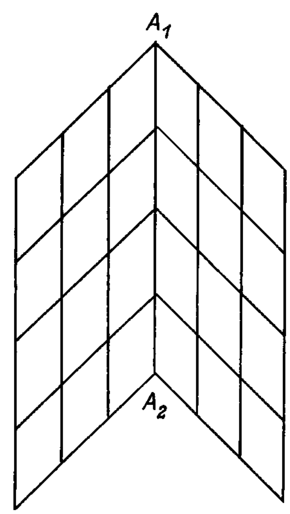

Рис. 1. Схема двойниковой границы A_1A_2.

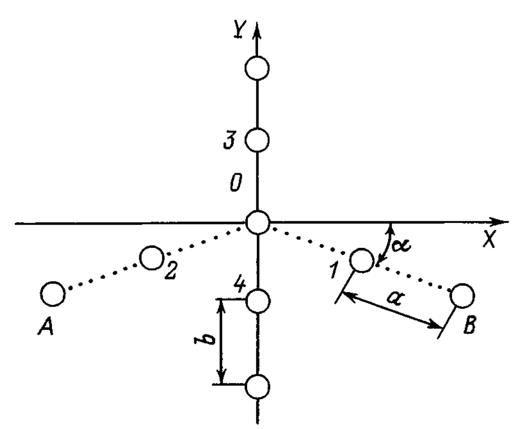

Рис. 2. Атом двойниковой границы в окружении соседних атомов.

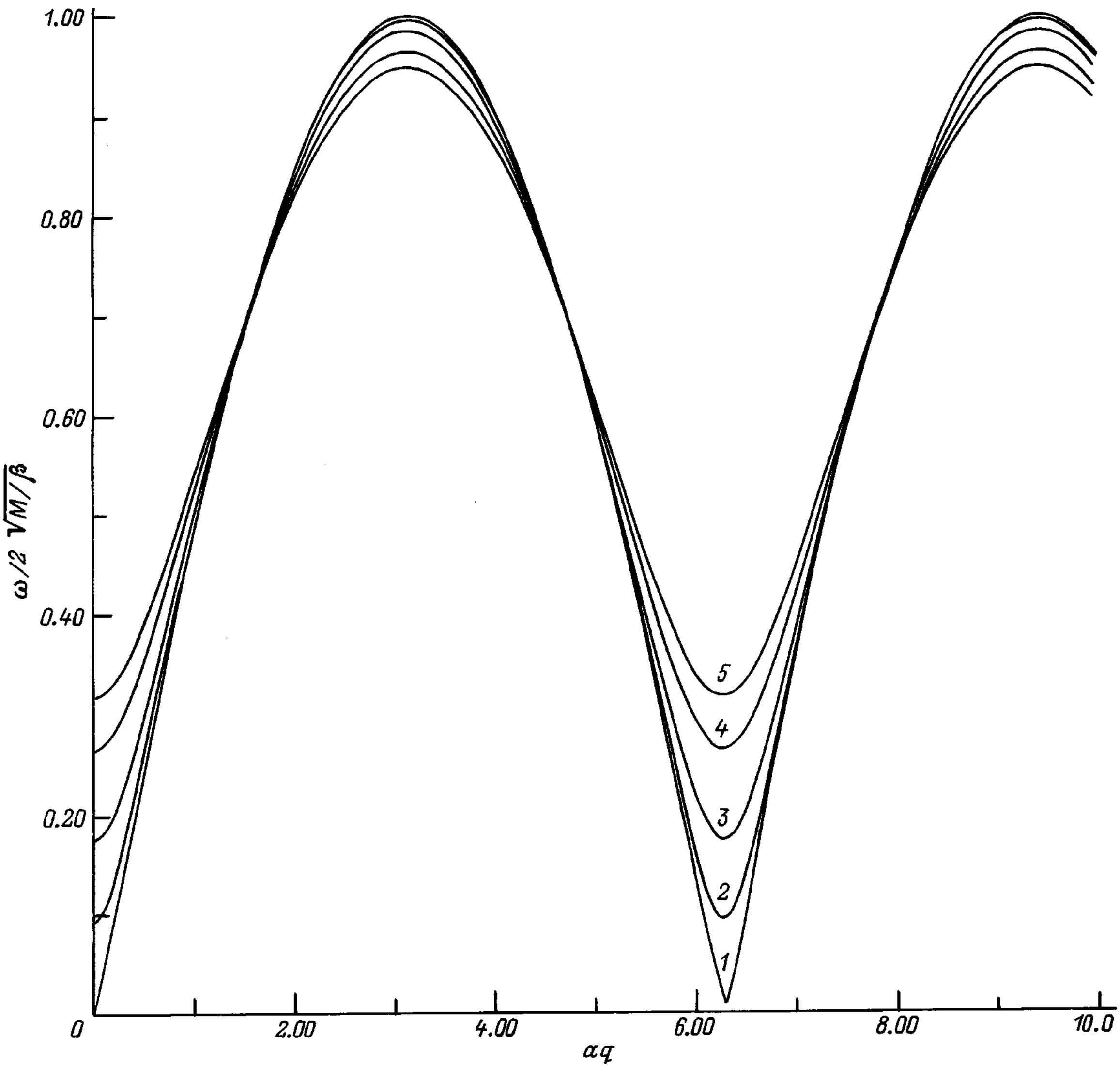

Рис. 3. Зависимость $\frac{\omega}{2}\sqrt{\frac{M}{\beta}}$ от aq: $\alpha = 0$ (*1*), 10 (*2*), 20 (*3*), 30 (*4*), 40° (*5*).

Уравнение движения атомов двойниковой границы в этом случае имеет вид

$$M\ddot{x}_n = \beta(x_{n+1}\cos\alpha + x_{n-1}\cos\alpha - 2x_n). \qquad (4)$$

Решение уравнения (4) будем искать в виде

$$x_n = x_0 \mathbf{e}^{i(\omega t - naq)}, \qquad (5)$$

здесь x_0 — амплитуда колебаний, n — номер атома.

Положение на оси x соседних атомов с номерами $n+1$ и $n-1$ в момент времени t, очевидно, можно задать выражениями

$$x_{n+1} = x_0 \mathbf{e}^{i(\omega t - (n+1)aq)}, \qquad (6)$$

$$x_{n-1} = x_0 \mathbf{e}^{i(\omega t - (n-1)aq)}. \qquad (7)$$

Подстановка (5)–(7) в (4) приведет к решению, которое запишем в виде зависимости ω от q,

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{M}(1 - \cos(aq)\cos\alpha) \qquad (8)$$

или

$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{\beta}{M}\left(\sin^2\left(\frac{aq}{2}\right) + \cos(aq)\sin^2\frac{\alpha}{2}\right)}. \qquad (9)$$

Из сравнения (1) и (9) видно, что данные соотношения отличаются друг от друга слагаемым под знаком корня $\cos(aq)\sin^2(\alpha/2)$. В предельном случае, когда $\alpha = 0$, выражение (9) переходит в (1).

На рис. 3 представлены зависимости

$$\frac{\omega}{2}\sqrt{\frac{M}{\beta}} = \frac{\omega}{2}\sqrt{\frac{M}{\beta}}(aq)$$

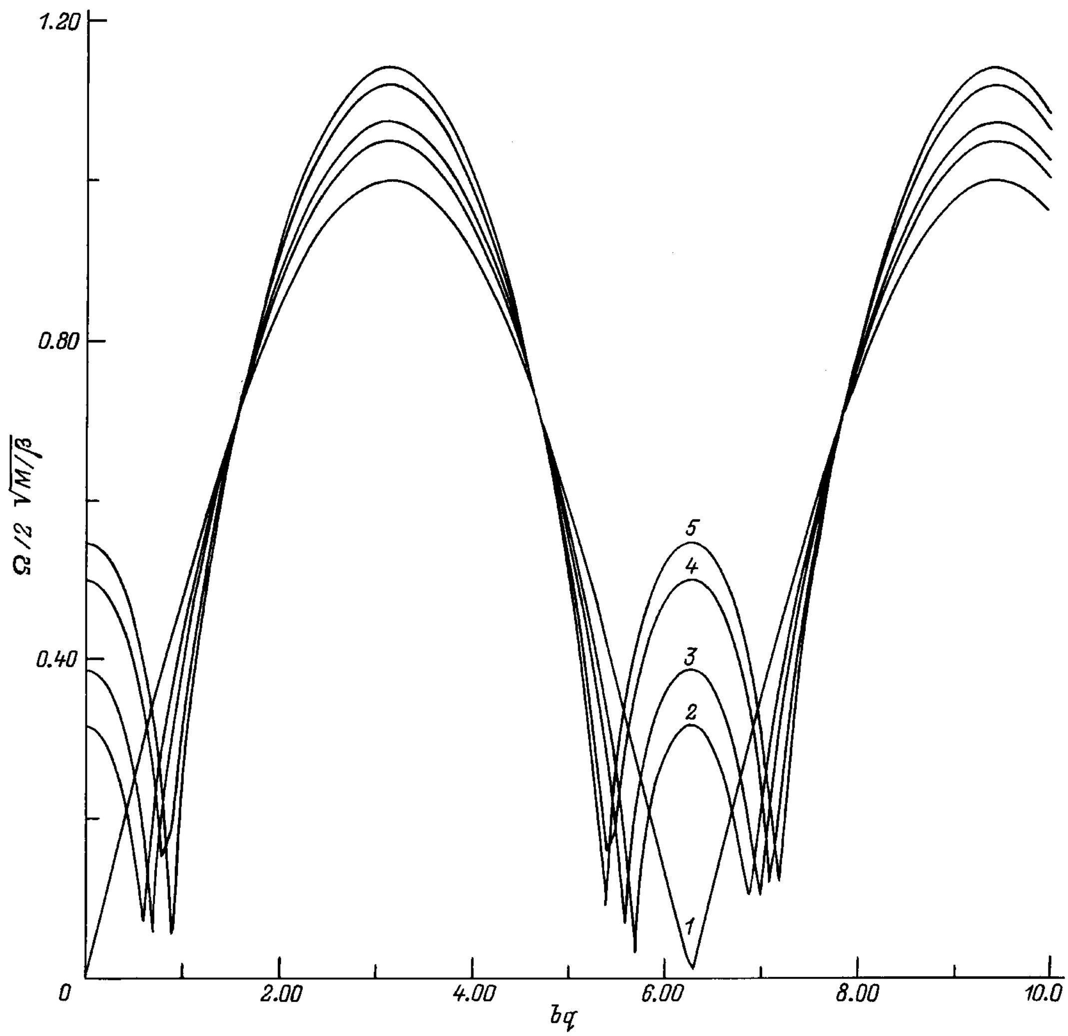

Рис. 4. Зависимость $\frac{\Omega}{2}\sqrt{\frac{M}{\beta}}$ от bq: *1–5* — то же, что и на рис. 3.

для колебания атома двойниковой границы вдоль оси $0X$ при изменении угла двойникования α. Величина угла α изменялась от нуля до 40°. Значения величины $\sin^2(\alpha/2)$ в соотношении (9) при заданных значениях α приведены в таблице.

α	$\sin^2\frac{\alpha}{2}$	$\sin\alpha$
0	0.000	0.0
10	0.008	0.2
20	0.030	0.3
30	0.070	0.5
40	0.100	0.6

Как видно из рис. 3, увеличение угла двойникования α приводит к "срезанию" низких частот и уменьшению диапазона частот колебаний атомов двойниковой границы.

4. Со стороны ближайших атомов *1–4* на атом двойниковой границы вдоль оси y будет действовать сила

$$\begin{aligned} F_n &= F_{n+1} + F_{n-1} + 2F \\ &= \beta(y_{n+1} + y_{n-1}(1 + 2\sin\alpha) - 2y_n), \end{aligned} \tag{10}$$

где F_{n+1} — сила, действующая на атом двойниковой границы со стороны атома *3*; F_{n-1} — со стороны атома *4*; F — сила, действующая со стороны атома *1* или *2*.

Уравнение движения в этом случае примет вид

$$M\ddot{y}_n = \beta(y_{n+1} + y_{n-1}(1 + 2\sin\alpha) - 2y_n), \tag{11}$$

решение которого будем искать в виде

$$y_n = y_0\mathbf{e}^{i(\Omega t - nbq)}, \tag{12}$$

где Ω — частота колебаний атомов вдоль оси y, b — расстояние между атомами вдоль этой же оси.

В данном случае решение уравнения (11) можно записать

$$\Omega^2 = \frac{2\beta}{M}\left(2\sin^2\left(\frac{bq}{2}\right) - \cos(bq)\sin\alpha\right) \qquad (13)$$

или

$$\Omega = \pm 2\sqrt{\frac{\beta}{M}\left(\sin^2\left(\frac{bq}{2}\right) - \frac{1}{2}\cos(bq)\sin\alpha\right)}. \qquad (14)$$

Данное соотношение отличается от соотношения (1) слагаемым под знаком корня $-(1/2)\cos(bq)\sin\alpha$. Так же как и в предыдущем случае (см. формулу (9)), соотношение (14) при $\alpha = 0$ переходит в (1).

График зависимости

$$\frac{\Omega}{2}\sqrt{\frac{M}{\beta}} = \frac{\Omega}{2}\sqrt{\frac{M}{\beta}}(bq)$$

представлен на рис. 4. В данном случае увеличение угла двойникования приводит к появлению дополнительного максимума у границ зоны Бриллюэна и увеличению диапазона частот колебаний атома двойниковой границы.

Отметим, что при построении графика на рис. 4 от соотношения (14) требовалось, чтобы подкоренное выражение было больше нуля.

5. Таким образом, с помощью классического метода можно рассчитать дисперсионную зависимость колебаний атомов двойниковой границы. Увеличение угла двойникования приводит к уменьшению диапазона частот колебаний атома двойниковой границы в направлении, перпендикулярном двойниковой границе, и его увеличению для колебаний, происходящих вдоль двойниковой границы.

Список литературы

[1] *Классен-Неклюдова М.В.* Механическое двойникование кристаллов. М., 1960.

[2] *Косевич А.М., Бойко В.С.* // УФН. 1971. Т. 104. № 2. С. 201–254.

[3] *Савенко В.С., Остриков О.М., Пинчук А.И., Шаврей С.Д.* // Тез. докл. IV Междунар. конф. "Действие электромагнитных полей на пластичность и прочность материалов". 1996. С. 21.

[4] *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М., 1978. 792 с.