

05.1

О релаксации напряжений в пентагональных нитевидных кристаллах

© А.Л. Колесникова, А.Е. Романов

Институт проблем машиноведения РАН, С.-Петербург

E-mail: koles@def.ipme.ru

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

E-mail: aer@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 30 марта 2007 г.

Исследуется механизм релаксации внутренних напряжений в пентагональных нитевидных кристаллах (ПНК), связанный с образованием призматических дислокационных петель вычитания в поперечном сечении ПНК. Показано, что начиная с некоторого критического радиуса ПНК образование дислокационных петель становится энергетически выгодным. Определен оптимальный радиус дислокационной петли, для которого выигрыш в энергии в результате релаксации оказывается максимальным. Представлена зависимость оптимального радиуса образующейся дислокационной петли от размера ПНК.

PACS: 68.70.+w

Хорошо известно, что малые частицы и нитевидные кристаллы (нанопроволоки) могут иметь оси симметрии пятого порядка, см., например, обзор [1] и недавние экспериментальные исследования [2,3]. Структура пентагональных наночастиц (ПНЧ) и пентагональных нитевидных кристаллов (ПНК), а также неотъемлемо присущие им внутренние механические напряжения эффективно описываются в рамках дисклинационного подхода [4] (дисклинационная модель для ПНК показана на рис. 1, *a, b*). Эти внутренние напряжения могут релаксировать путем зарождения различных дефектов [4,5], модифицируя структуру ПНЧ и ПНК. В результате, релаксация может существенно повлиять на физические и особенно на механические свойства ПНЧ, ПНК или материалов, обладающих пентагональными структурными элементами.

В случае ПНК очевидным способом релаксации внутренних напряжений является зарождение краевых дислокаций, параллельных оси ПНК, как показано на рис. 1, *c*. Данный механизм релаксации был обнаружен экспериментально, см. ссылки в обзоре [4], и впервые

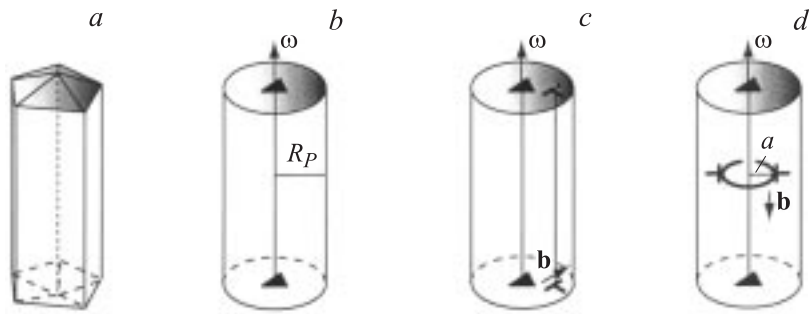


Рис. 1. Зарождение призматической дислокационной петли вычитания в пентагональном нитевидном кристалле: *a* — схематическое изображение пентагонального нитевидного кристалла (ПНК) с кристаллографической огранкой; *b* — дисклинационная модель ПНК, *c* — ПНК с прямолинейной краевой дислокацией; *d* — ПНК с дислокационной призматической петлей; ω — вектор Франка дисклинации, \mathbf{b} — вектор Бюргерса дислокации, R_p — радиус ПНК, a — радиус дислокационной петли.

проанализирован теоретически в [5]. В настоящей работе исследуется другая возможность релаксации дисклинационных внутренних напряжений в ПНК, связанная с зарождением призматических дислокационных петель, залегающих в плоскости, перпендикулярной оси кристалла.

В рамках континуальной модели ПНК представляет собой изотропный линейно-упругий цилиндр радиусом R_p с соосной положительной клиновой дисклинацией мощностью $\omega = 2\pi - 10 \arcsin(1/\sqrt{3}) \approx 7^\circ 21'$ (рис. 1, *b*) [4]. Известно [6], что положительная клиновая дисклинация вызывает в длинном цилиндре осевые напряжения σ_{zz} :

$$\sigma_{zz} = \frac{\nu G}{2\pi(1-\nu)} \omega \left(\ln \frac{r^2}{R_p^2} + 1 \right), \quad (1)$$

где r — радиальная координата, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона. Очевидно, что напряжения, задаваемые формулой (1), оказываются сжимающими вблизи оси цилиндра и растягивающими вблизи его поверхности со сменой знака при $r = R_p/\sqrt{e}$. Такой характер внутренних напряжений позволяет предложить эффективный механизм их релаксации, связанный с возникновением призматической дислокационной петли вычитания в цилиндре с дисклинацией, как

показано на рис. 1, *d*. При образовании петли вычитания диск материала радиусом, равным радиусу петли a , и высотой, равной величине вектора Бюргерса петли b , изымается из поперечного сечения цилиндра, а берега полученной полости схлопываются. В ходе процесса образования призматической петли осевые напряжения (1) совершают работу, которая и является движущей силой процесса релаксации.

Изменение внутренней энергии ΔE при образовании дислокационной петли в цилиндре с дисклинацией может быть записано как

$$\Delta E = E_{\text{int}} + E_{\text{loop}}, \quad (2)$$

где E_{int} — энергия взаимодействия петли и дисклинации, E_{loop} — энергия петли в цилиндре. Как было отмечено, энергия взаимодействия E_{int} вычисляется как работа поля напряжений дисклинации на скачке перемещений при образовании дислокации, что сводится к элементарному интегрированию соотношения (1) по площади петли и приводит к следующему результату:

$$E_{\text{int}} = \frac{\nu G}{1 - \nu} \omega b a^2 \ln \left(\frac{a}{R_p} \right). \quad (3)$$

Заметим, что во всем диапазоне изменения радиуса дислокационной петли $0 < a \leq R_p$ энергия взаимодействия оказывается отрицательной.

Собственная энергия петли E_{loop} рассчитывается на основании точного решения граничной задачи об определении упругих полей дислокационной петли в цилиндре. Данная граничная задача была решена нами с использованием метода виртуальных круговых дислокационных петель, основы которого изложены, например, в [7]. В рамках метода искомое упругое поле, например, поле напряжений σ_{ij} петли в цилиндре представляется в виде суперпозиции поля петли в бесконечной среде ${}^\infty\sigma_{ij}$ и добавочного поля ${}^i\sigma_{ij}$, создаваемого непрерывно распределенными виртуальными круговыми петлями, расположенными вдоль боковой поверхности цилиндра. Распределения виртуальных круговых петель и связанные с ними искомые упругие поля в конечном итоге отыскиваются с помощью решения интегральных уравнений, записанных исходя из требования отсутствия усилий на боковой поверхности цилиндра. Не выписывая здесь найденные громоздкие соотношения для полей напряжений призматической дислокационной петли, приведем только

окончательную формулу для ее собственной энергии

$$E_{\text{loop}} = \frac{G}{2(1-\nu)} b^2 a \left[\ln \left(\frac{\alpha a}{b} \right) - 2 \frac{a}{R_p} \int_0^{\infty} Q(p) dp \right], \quad (4)$$

где логарифмический член задает энергию дислокационной петли в бесконечном упругом континууме, а интегральная часть энергии ответственна за взаимодействие петли со свободной поверхностью цилиндра, причем

$$Q(p) = \frac{\tilde{t} [(pI_0 A_1 + I_1 A_2) B_1 + p^3 (tI_0^* A_3 + I_1^* A_4) B_2]}{D},$$

где

$$\begin{aligned} D &= t [p^2 I_0^2 - (p^2 - 2\nu + 2) I_1^2] [(p^2 + 4) K_1^2 - p^2 K_0^2], \\ A_1 &= p t I_0^* [(p^2 + 4) K_1^2 - p^2 K_0^2] + I_1^* [-2p^2 K_0^2 + p(p^2(t-1) \\ &\quad - 2(1+\nu)) K_1 K_0 + 2(tp^2 - 2\nu + 2) K_1^2], \\ A_2 &= 2p t I_0^* [p^2 K_0^2 + p(1+\nu) K_1 K_0 - (p^2 - 2\nu + 2) K_1^2] \\ &\quad + I_1^* [-2(t-1)p^3 K_0 K_1 + (p^2 - 2\nu + 2)p^2 K_0^2 \\ &\quad - (p^2 + 4)(tp^2 - 2\nu + 2) K_1^2], \\ A_3 &= I_1 [p^2 K_0^2 - (p^2 - 2\nu + 2) K_1^2], \\ A_4 &= I_0 [-p^2 K_0^2 + (tp^2 - 2\nu + 2) K_1^2] - p^2(t-1) I_1 K_0 K_1, \\ B_1 &= -p I_1^{**} K_0 + p \tilde{t} I_0^{**} K_1 + \tilde{t}, \quad B_2 = I_1^{**} K_1 - \tilde{t} I_2^{**} K_2, \end{aligned}$$

$$I_{0,1} = I_{0,1}(p), \quad K_{0,1,2} = K_{0,1,2}(p), \quad I_{0,1}^* = I_{0,1}(tp), \quad I_{0,1,2}^{**} = I_{0,1,2}(\tilde{t}p),$$

а $I_0(\xi)$, $I_1(\xi)$, $I_2(\xi)$, $K_0(\xi)$, $K_1(\xi)$, $K_2(\xi)$ — бесселевы функции аргумента ξ ; $t = \frac{a}{R_p}$, $\tilde{t} = \frac{a-R_C}{R_p}$, $R_C = b/\alpha$ — радиус ядра дислокации, α — параметр, учитывающий вклад ядра в энергию дислокации (обычно $\alpha = 1 \div 4$ [8]).

На рис. 2 представлено семейство зависимостей изменения энергии ΔE от относительного радиуса петли a/R_p для значения мощности

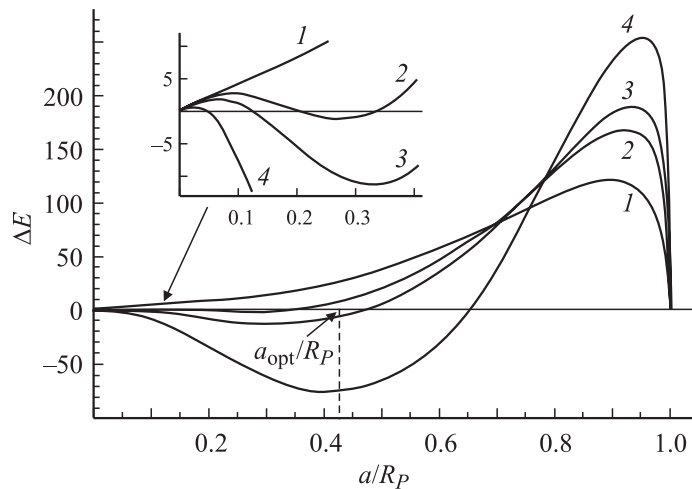


Рис. 2. Изменение внутренней энергии ΔE ПНК при образовании дислокационной петли вычитания в зависимости от относительного радиуса петли a/R_p . Кривые отвечают различным величинам радиуса ПНК: $R_p = 100b$ (1), $135b$ (2), $150b$ (3), $200b$ (4); b — величина Бюргерса дислокации; a_{opt}/R_p показывает значение оптимального радиуса для кривой 4. Энергия выражена в единицах Gb^3 . Графики получены при параметре ядра дислокации $\alpha = 1$, радиусе ядра дислокации $R_c = b$ и коэффициенте Пуассона $\nu = 0.3$.

дисклинации $\omega \approx 7^\circ 21'$, соответствующей реальным ПНК [4]. Естественным параметром семейства кривых оказывается характеристический фактор задачи R_p/b — радиус ПНК в единицах вектора Бюргерса. Особенностью этих зависимостей является изменение количества экстремумов при изменении радиуса ПНК R_p/b и переход кривых в область отрицательных значений при его увеличении. Это означает, что зарождение дислокационной петли возможно только для не слишком тонких ПНК. Критический радиус ПНК может быть найден из условий:

$$\frac{\partial \Delta E \left(\frac{a}{R_p} \right)}{\partial a} = 0; \quad \Delta E \left(\frac{a}{R_p} \right) = 0. \quad (5)$$

При выбранном параметре ядра дислокации $\alpha = 1$, типичного для металлов [8], критический радиус ПНК, определенный из соотноше-

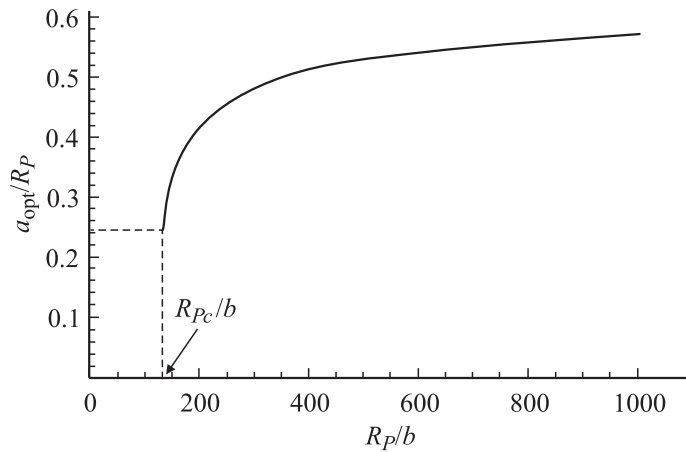


Рис. 3. Зависимость относительного оптимального радиуса дислокационной петли a_{opt}/R_P от радиуса ПНК R_P/b . График построен при параметре ядра дислокации $\alpha = 1$, радиусе ядра дислокации $R_c = b$ и коэффициенте Пуассона $\nu = 0.3$; b — величина вектора Бюргерса дислокации.

ний (5), составляет величину $R_{Pc} \approx 135b$, что для значения величины вектора Бюргерса $b \cong 0.3$ нм дает $R_{Pc} = 40$ нм. Это позволяет говорить о пороговом характере анализируемого явления зарождения призматических дислокационных петель в ПНК. В тонких ПНК $R_P < R_{Pc}$ зарождение петель энергетически невыгодно, в ПНК большего радиуса $R_P > R_{Pc}$ зарождение становится возможным, при этом наибольший выигрыш в энергии достигается для петель оптимального радиуса a_{opt} (см. рис. 2). Энергетический анализ формирования прямолинейных дислокаций в ПНК также свидетельствует о наличии оптимального положения дислокации относительно оси ПНК [5]. Интересно, что величина относительного радиуса петли a_{opt}/R_P , при котором выигрыш в упругой энергии максимальный, сильно зависит от размера R_P для малых ПНК и практически выходит на насыщение для больших ПНК (рис. 3). Значение порога насыщения близко к упомянутому выше характерному относительному радиусу $r/R_P = 1/\sqrt{e} \approx 0.6065$ смены знака осевого напряжения дисклинации.

Формирование дислокационной петли можно рассматривать как один из возможных механизмов возникновения полости в ПНК, на-

блюдаемой в экспериментах [9,10]. Известно, что полость образуется только для достаточно толстых ПНК в процессе их роста. Для тонких кристаллитов она не реализуется, это свидетельствует о пороговом характере ее появления, что аналогично обнаруженному в настоящей работе пороговому характеру зарождения призматической дислокационной петли. Процесс образования полости в ПНК с участием дислокационных петель можно представить в виде следующих шагов:

1) зарождение одиночных дислокационных петель вычитания вдоль оси ПНК, например, за счет коагуляции вакансий, что может иметь место в условиях роста при повышенных температурах, 2) увеличение плотности петель по оси, приводящее к их эффективному „расталкиванию“ и 3) „выщелкивание“ петель на торцевую поверхность ПНК с образованием выемки. Таким образом, можно говорить о несовершенстве ПНК еще до образования видимой полости. Поскольку оптимальный радиус дислокационной петли имеет нижнее ненулевое значение (см. рис. 3), следует ожидать появления выемки конечных размеров на торцах растущего ПНК, начиная с некоторого критического его радиуса.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-08-65503-а).

Авторы выражают благодарность И.А. Полонскому.

Список литературы

- [1] Hofmeister H. // Cryst. Res. Technol. 1998. V. 33. P. 3.
- [2] Chen H., Gao Y., Yu H., Zhang H., Liu L., Shi Y., Tian H., Xie S., Li J. // Micron. 2004. V. 35. P. 469.
- [3] Викарчук А.А., Воленко А.П. // ФТТ. 2005. Т. 47. В. 2. С. 339.
- [4] Gryaznov V.G., Heidenreich J., Kaprelov A.M., Nepijko S.A., Romanov A.E., Urban J. // Cryst. Res. Technol. 1999. V. 34. P. 1091.
- [5] Gryaznov V.G., Kaprelov A.M., Romanov A.E., Polonskii I.A. // Phys. Stat. Sol. (b). 1991. V. 167. P. 441.
- [6] Владимиров В.И., Романов А.Е. // Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986.
- [7] Колесникова А.Л., Романов А.Е. // ФТТ. 2003. Т. 45. В. 9. С. 1626.
- [8] Hirth J.P., Lothe J. // Theory of Dislocations. New York: Wiley, 1982.
- [9] Romanov A.E., Polonsky I.A., Gryaznov V.G., Nepijko S.A., Junghanns T., Vitrykhovski N.V. // J. Cryst. Growth. 1993. V. 129. P. 691.
- [10] Ясников И.С., Викарчук А.А. // ФТТ. 2006. Т. 48. В. 8. С. 1352.