

## Эффект динамической блокировки влияния поверхностных точечных дефектов на скольжение краевых дислокаций

© В.В. Малашенко

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Национальной академии наук Украины,  
Донецк, Украина  
Донецкий национальный технический университет,  
Донецк, Украина

E-mail: malashenko@kinetic.ac.donetsk.ua

(Поступила в Редакцию 10 июня 2008 г.)

Теоретически исследовано влияние сил изображения на скольжение краевой дислокации параллельно свободной поверхности кристалла, содержащей точечные дефекты. Показано, что силы изображения блокируют механизм торможения, основанный на возбуждении колебаний дислокации поверхностными дефектами.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Bb

При формировании свойств нанокристаллов важную роль играют как межзеренные границы [1], так и свободная поверхность кристалла. Сама поверхность может содержать дефекты, например примеси. Современные технологии позволяют наносить их контролируемым образом. Эти примеси, взаимодействуя с дислокациями, могут влиять на их движение, а следовательно, и на пластические свойства кристаллов. Медленно движущиеся дислокации преодолевают локальные барьеры, создаваемые дефектами, с помощью термических флуктуаций; быстро движущиеся дислокации преодолевают локальные барьеры, создаваемые дефектами, с помощью термических флуктуаций; быстро движущиеся не нуждаются в термоактивации, поскольку их кинетическая энергия превосходит высоту потенциальных барьеров [2]. Это динамическая область скольжения, которая включает скорости  $v \geq 10^{-2}c$ , где  $c$  — скорость распространения поперечных звуковых волн. В большинстве металлов дислокации движутся с большими скоростями даже при относительно невысоком уровне внешних напряжений. Динамическое торможение краевых дислокаций точечными дефектами, хаотически распределенными по объему кристалла, изучалось в работах [3–7]. Торможение дислокаций точечными дефектами поверхности исследовалось в [8]; механизм диссипации заключался в необратимом переходе кинетической энергии движущейся дислокации в энергию дислокационных колебаний, однако влияние сил изображения не учитывалось. В настоящей работе показано, что учет сил изображения приводит к возникновению щели в спектре дислокационных колебаний, которая блокирует действие данного механизма.

Пусть бесконечная краевая дислокация движется под действием постоянного внешнего напряжения  $\sigma_0$  в положительном направлении оси  $OX$  с постоянной скоростью  $v$  параллельно поверхности кристалла, совпадающей с плоскостью  $XOY$ . Линия дислокации параллельна оси  $OY$ , а ее вектор Бюргерса параллелен оси  $OX$ . Точкам кристалла отвечают значения  $z \leq 0$ . Плоскость скольжения дислокации совпадает с плоскостью  $z = -L$ ,

а положение дислокации определяется функцией

$$X(z = -L, y, t) = vt + w(z = -L, y, t), \quad (1)$$

где функция  $w(z = -L, y, t)$  является случайной величиной, описывающей колебания элементов краевой дислокации в плоскости скольжения относительно невозмущенной дислокационной линии.

Уравнение движения дислокации имеет следующий вид:

$$m \left\{ \frac{\partial X^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 X}{\partial y^2} \right\} = b \left[ \sigma_0 + \sigma_{xz}(vt + w; y) + \sigma_{xz}^s(vt + w; y) \right] - B \frac{\partial X}{\partial t}. \quad (2)$$

Здесь  $\sigma_{xz}$  — компонента тензора напряжений, создаваемых поверхностными точечными дефектами на линии дислокации,  $\sigma_{xz} = \sum_{i=1}^N \sigma_{xz,i}$ ,  $N$  — число дефектов,  $\sigma_{xz}^s$  — силы изображения, действующие на дислокацию благодаря наличию свободной поверхности,  $b$  — модуль вектора Бюргерса дислокации,  $m$  — масса единицы длины дислокации,  $B$  — константа демпфирования, обусловленная фоновыми, магнотными, электронными либо иными механизмами диссипации, характеризующимися линейной зависимостью силы торможения дислокации от скорости ее скольжения,  $c$  — скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле. Как и в работах [3–8], влиянием константы демпфирования на величину силы торможения дислокации точечными дефектами можно пренебречь в силу малости безразмерного параметра  $\alpha = Bbv/(mc^2)$ , который, согласно оценкам [3], является малым в подавляющем большинстве случаев.

Необходимую нам компоненту тензора напряжений поверхностного точечного дефекта возьмем из работы [8]

$$\sigma_{xz}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} \frac{z^2}{r^3}. \quad (3)$$

Здесь  $\mu$  — модуль сдвига,  $\varphi$  — параметр несоответствия поверхностного дефекта,  $R$  — величина порядка радиуса

дефекта. Фурье-образ данной компоненты определяется выражением

$$\sigma_{xz}(q_x, q_y, z) = \frac{2}{\pi} i\mu R^2 \varepsilon q_x \times \exp(-q|z|) \cdot (1 - q|z|); \quad q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}. \quad (4)$$

Воспользовавшись результатами работы [8], запишем силу динамического торможения дислокации точечными поверхностными дефектами в следующем виде:

$$F = \frac{n_s b^2}{4\pi m} \int dq_x dq_y |q_x| \cdot |\sigma_{xz}(q_x, q_y, z)|^2 \times \delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_y)), \quad (5)$$

где  $n_s$  — поверхностная концентрация точечных дефектов,  $\delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_y))$  —  $\delta$ -функция Дирака,  $\omega(q_y)$  — спектр дислокационных колебаний.

Для вычисления силы изображения, действующей на дислокацию, воспользуемся стандартным методом изображений [9]. Суть его заключается в построении изображения дислокации таким образом, чтобы суммарные напряжения дислокации  $\sigma_{ik}^d$  и ее изображения  $\sigma_{ik}^i$  на свободной поверхности равнялись нулю. Если же при этом какие-либо суммарные компоненты все же оказываются не равными нулю на поверхности, к решению добавляется дополнительное слагаемое, вычисленное с помощью функции напряжений  $\psi$ , которое и обеспечивает выполнение граничного условия. Напряжения, создаваемые дислокацией с координатами  $(x = 0, z = -L)$ , имеют вид

$$\sigma_{xx}^d = -D \frac{(z+L)(3x^2 + (z+L)^2)}{(x^2 + (z+L)^2)^2},$$

$$\sigma_{zz}^d = D \frac{(z+L)(x^2 - (z+L)^2)}{(x^2 + (z+L)^2)^2}, \quad (6)$$

$$\sigma_{xz}^d = D \frac{x(x^2 - (z+L)^2)}{(x^2 + (z+L)^2)^2}, \quad D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\gamma)}. \quad (7)$$

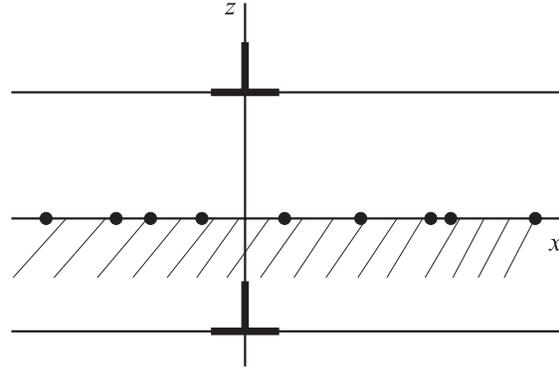
Построим простое изображение краевой дислокации (см. рисунок). Напряжения, создаваемые изображением, описываются выражениями

$$\sigma_{xx}^i = -D \frac{(z-L)(3x^2 + (z-L)^2)}{(x^2 + (z-L)^2)^2},$$

$$\sigma_{zz}^i = D \frac{(z-L)(x^2 - (z-L)^2)}{(x^2 + (z-L)^2)^2}, \quad (8)$$

$$\sigma_{xz}^i = D \frac{x(x^2 - (z-L)^2)}{(x^2 + (z-L)^2)^2}. \quad (9)$$

При суперпозиции напряжений, созданных данной дислокацией и ее изображением, все компоненты напряжений на свободной поверхности, кроме  $\sigma_{xz}$ , обращаются в нуль. Выполняя несложные, но довольно



движение краевой дислокации параллельно свободной поверхности в упругом поле поверхностных точечных дефектов.

громоздкие вычисления по методу, изложенному в [9], получим дополнительное слагаемое, обеспечивающее выполнение граничных условий

$$\sigma_{xz}^0 = D \frac{2x((z-L)^4 + 6zL(z-L)^2 - 2zLx^2 - x^4)}{((x^2 + (z-L)^2)^3)}. \quad (10)$$

Несложно убедиться, что теперь граничное условие удовлетворено, т.е. при  $z = 0$  получим  $\sigma_{xz}^d + \sigma_{xz}^i + \sigma_{xz}^0 = 0$ . Таким образом, дополнительные напряжения, возникающие на линии дислокации благодаря наличию свободной поверхности, определяются выражением

$$\sigma_{xz}^s = \sigma_{xz}^i + \sigma_{xz}^0 = D \frac{x((z-L)^4 + 12zL(z-L)^2 - 4zLx^2 - x^4)}{((x^2 + (z-L)^2)^3)}. \quad (11)$$

Легко видеть, что на невозмущенной линии дислокации эти напряжения равны нулю:  $\sigma_{xz}^s = 0$  при  $x = 0$ , т.е. наличие поверхности не приводит к возникновению сил, действующих на прямолинейную краевую дислокацию в плоскости скольжения, параллельной этой поверхности. Однако поверхность изменяет форму спектра дислокационных колебаний. Чтобы получить явный вид этого спектра, как и в работе [6], в уравнении движения (2) перейдем в систему центра масс дислокации, предварительно разложив  $\sigma_{xz}^s(vt+w; y)$  по малому параметру  $w/L$

$$\sigma_{xz}^s(vt+w; y) \approx -D \frac{w}{4L^2}. \quad (12)$$

Выполняя преобразование Фурье, получим спектр колебаний в виде

$$\omega^2 = c^2 p_y^2 + \Delta^2, \quad \Delta = \frac{b}{L} \sqrt{\frac{M}{2m}} \approx \frac{c}{L}. \quad (13)$$

Таким образом, скольжение краевой дислокации параллельно поверхности в некотором смысле эквивалентно задаче о движении пары дислокаций, рассмотренной в работе [6]. В данном случае пару образуют дислокация и ее изображение.

Воспользовавшись результатами работы [8], запишем силу торможения дислокации поверхностными примесями для двух предельных случаев. Если  $L\Delta \ll v$ , сила торможения имеет вид

$$F = \frac{n_s b^2 \mu^2 \varepsilon^2 R^6}{mc v L^3}. \quad (14)$$

Однако условие  $L\Delta \ll v$  в нашем случае не может быть реализовано, поскольку  $L\Delta \approx c \gg v$ , т.е. выполняется только условие  $L\Delta \gg v$ . Тогда сила торможения определяется выражением

$$F = \frac{n_s b^2 \mu^2 \varepsilon^2 R^6}{mc} \left( \frac{\Delta^9 L^3}{v^{11}} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{2L\Delta}{v}\right). \quad (15)$$

Чтобы оценить величину полученной силы, преобразуем ее к виду

$$\begin{aligned} F &\approx n_0 \varepsilon^2 \mu b \left(\frac{R}{L}\right)^3 \left(\frac{c}{v}\right)^{11/2} \exp\left(-\frac{2c}{v}\right) \\ &= n_0 \varepsilon^2 \mu b \left(\frac{R}{L}\right)^3 \exp\left(-\frac{2c}{v} + \frac{11}{2} \ln \frac{c}{v}\right). \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь  $n_0 = n_s R^2$  — безразмерная поверхностная концентрация точечных дефектов. Проанализировав зависимость полученного выражения от скорости движения дислокации, мы увидим, что сила торможения растет до значений  $v = \frac{4}{11} c$ , а затем начинает убывать. Поскольку рассматриваемая нами модель справедлива только для  $v \ll c$ , во всем исследуемом интервале сила растет с ростом скорости и достигает максимума при  $v \approx 10^{-1} c$ . Выполним численные оценки максимального значения полученной силы. Для типичных значений  $\varepsilon \approx 10^{-1}$ ,  $\mu \approx 5 \cdot 10^{10}$  Па,  $b \approx 3 \cdot 10^{-10}$  м, безразмерной концентрации  $n_0 \approx 10^{-2}$ ,  $L \approx 10R$ ,  $v \approx 10^{-1} c$  получим  $F_{\max} \approx 10^{-6} \exp(-7)$  Н/м. Значение предэкспоненциального множителя не превышает силу электронного торможения, т.е. само по себе весьма мало, а экспонента делает эту величину пренебрежимо малой. Следовательно, можно говорить о блокировке механизма торможения дислокации, связанного с возбуждением дислокационных колебаний поверхностными примесями. Таким образом, свободная поверхность не создает силу, действующую на дислокацию в плоскости скольжения, но она препятствует возникновению дислокационных колебаний в этой плоскости.

Полученные результаты могут быть полезными при анализе пластических свойств нанокристаллов.

## Список литературы

- [1] Г.А. Малыгин. ФТТ **49**, 6, 961 (2007).
- [2] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. УФН **115**, 1, 1 (1975).
- [3] V.D. Natsik, K.A. Chishko. Cryst. Res. Technol. **19**, 6, 763 (1984).

- [4] V.V. Malashenko, V.L. Sobolev, B.I. Khudik. Phys. Status Solidi B **143**, 2, 425 (1987).
- [5] В.В. Малашенко. ФТТ **29**, 5, 1614 (1987).
- [6] В.В. Малашенко. ФТТ **48**, 3, 433 (2006).
- [7] В.В. Малашенко. ФТТ **49**, 1, 78 (2007).
- [8] V.V. Malashenko, V.L. Sobolev, B.I. Khudik. Phys. Status Solidi B **144**, 2, 463 (1987).
- [9] Д. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Наука, М. (1972). 599 с.