1992 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 34, № 4
1992 SOLID STATE PHYSICS Vol. 34, N 4

УДК 537.226

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ С ДВОЙНИКОВЫМИ ГРАНИЦАМИ ВБЛИЗИ ТОЧЕК СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА

А. Л. Корженевский, Д. А. Лисаченко

Рассчитаны форма двойниковой границы и сила ее пиннинга на дислокациях вблизи точек фазовых переходов с учетом образования зародышей новой фазы на дислокациях.

1. Анализ взаимодействия структурных дефектов необходим для понимания многих наблюдаемых свойств реальных кристаллов, например таких, как пластичность, внутреннее трение, особенности структурных фазовых переходов (ФП). Внимание как теоретиков, так и экспериментаторов давно привлекает взаимодействие точечных дефектов и дислокаций с двойниковыми, доменными и межфазными границами [1–8]. В частности, в работах [3, 8] рассчитаны форма упругой двойниковой границы (ДГ) в упругом поле дислокации и оценена сила пиннинга ДГ на дислокациях, а в [1, 2] рассчитывались и сравнивались с наблюдаемой в эксперименте конфигурация границы магнитных доменов в упругом поле дислокации в пленках типа феррит-гранатов и ее изменение под влиянием магнитного поля.

С другой стороны, достигнут определенный успех в понимании процесса структурного ФП в реальном кристалле с учетом зародышеобразования на дислокациях [9–20]. В частности, в наших работах [17–20] показано, что одевание дислокаций «шубами» новой фазы вблизи точек структурных ФП 1-го рода приводит к изменению линейной энергии дислокации, которое может быть значительным, и, как следствие, к существенному изменению их конфигурации вплоть до потери устойчивости структуры дислокационного ансамбля (ДА) и генерации его новых элементов.

С учетом этого обстоятельства представляется интересным проанализировать вопрос о возможном изменении характера взаимодействия дислокаций с ДГ в окрестности ФП. В настоящей работе рассчитана форма ДГ вблизи «одетых» дислокаций, проанализировано обратное влияние ДГ на зародышеобразование на дислокациях, а также оценено изменение силы пиннинга ДГ на дислокациях.

2. Как известно, форма ДГ определяется из условия равенства на ней сдвиговых компонент упругого напряжения $\sigma^{t}_{ik}(\mathbf{r})$, созданного самой границей, и $\sigma^{d}_{ik}(\mathbf{r})$, созданного источниками (дислокации, точечные дефекты, приложенное к кристаллу внешнее напряжение) [3, 21]

$$\sigma^{t}_{ik}(\mathbf{r}) \;\Big|_{\text{ДГ}} = \sigma^{d}_{ik}(\mathbf{r}) \;\Big|_{\text{ДГ}}, \qquad (1)$$

где

$$\sigma^t_{ik} = \lambda_{iklm}\varepsilon^t_{lm}, \quad \varepsilon^t_{lm} = \frac{1}{2}(\omega^t_{lm} + \omega^t_{ml}),$$

$$\omega^t_{ik}(\mathbf{r}) = -\lambda_{pjlm}e_{iln}e_{nst}s_{tm}\int\frac{\partial}{\partial r_j}G_{kp}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,d\mathbf{f}_s,$$

λ_{pjlm} — тензор упругих модулей кристалла: $\hat{\sigma}^t$, $\hat{\varepsilon}^t$, $\hat{\omega}^t$ — созданные границей напряжение, деформация и дисторсия; $\hat{G}(\mathbf{r})$ — функция Грина смещений упругой среды; $d\mathbf{f}$ — элемент нормали к границе. Будем считать, что скачок собственной дисторсии s_{ik} может быть представлен в виде дуального произведения $s_{ik} = m_i s_k$, где $\mathbf{s}_k$ и $\mathbf{m}_i$ — векторы двойникового сдвига и нормалии к инвариантной плоскости. Интегрирование в (1) ведется по поверхности ДГ. Пусть плоскость (X, Z) есть инвариантная плоскость, векторы $\mathbf{s}$ и $\mathbf{m}$ имеют ненулевые компоненты $s_x = 1$ и $m_y = 1$, ДГ закреплена на прямых $x = \pm l$, $y = 0$, а ее форма описывается функцией $g(x)$ с граничным условием $g(x = \pm l) = 0$.

В рамках континуальной модели изогнутая граница описывается плотностью непрерывно распределенных дислокаций $p(x) = dg(x)/dx = g'(x)$. Метод расчета $g(x)$ в поле упругих напряжений описан в [22] и применен в [3] к случаю взаимодействия ДГ с дислокациями (без учета их «одевания» вблизи ФП).

3. Пусть в кристалле, в котором есть ДГ, происходит структурный ФП 1-го рода, описываемый разложением свободной энергии вида

$$F = \frac{\alpha}{2}(T - T_0)\eta^2 + \frac{\beta_0}{4}\eta^4 + \frac{\gamma}{6}\eta^6 + \frac{\delta}{2}(\nabla\eta)^2 + q\eta^2\varepsilon_{kk} + \sigma^d_{ik}(\mathbf{r})\,\varepsilon_{ik}(\mathbf{r}) +$$

$$+\mu\Big(\varepsilon_{ik} - \frac{\delta_{ik}}{3}\varepsilon_{ll}\Big)^2 + \frac{K}{2}(\varepsilon_{ll})^2,$$

где η — параметр порядка, $\hat{\varepsilon}$ — тензор деформации, $\hat{\sigma}^d(\mathbf{r})$ — тензор напряжений, созданных дислокациями, q — стрикционный модуль, и мы ограничиваемся приближением упругоизотропной среды. Тогда вблизи точки ФП на краевой дислокации образуется цилиндрическая «шуба» новой фазы радиуса $\rho(T)$, сильно зависящего от температуры [18]

$$\rho(T) = \frac{3b\mu qK}{\pi\alpha(T - T_*)\,[K + (4/3)\,\mu]^2},$$

где b — вектор Бюргерса,

$$T_* = T_0 - \frac{3}{16}\frac{\beta^2}{\alpha\gamma}, \quad \beta = \left(\beta_0 - \frac{2q^2}{K + (4/3)\,\mu}\right) < 0.$$

Полагая для оценки $\nu \sim 1/3$, можем записать

$$\rho(T) \sim \frac{b}{16a_0}f(T), \tag{2}$$

где

$$f(T) \approx \frac{\varepsilon_0 q K}{\alpha\,(T - T_*)\,\mu},$$

μ и ν — сдвиговый модуль и модуль Пуассона, ε_0 — однородная дилатация в идеальном свободном кристалле. Появление «шубы» приводит к тому, что линейная энергия дислокации становится температурно-зависящей: $E \approx \mu b^2(1 - f(T))$. «Шуба» в свою очередь создает упругое поле со сдвиговой компонентой $\sigma^c_{xy}(\mathbf{r})$, которая в случае дислокации, проходящей через точку $x = 0$, $y = y_0$ параллельно оси OZ, есть

$$\sigma^c_{xy}(\mathbf{r}) = \frac{\mu\varepsilon_0}{1-\nu}\,\frac{\rho^2 x\,(y - y_0)}{(x^2 + (y - y_0)^2)^2} \tag{3}$$

(учитывая, что $\rho < y_0$, мы для простоты записи принимаем, что ось «шубы» совпадает с дислокацией). Граница, таким образом, находится в поле упругих напряжений $\sigma_{xy}(\mathbf{r}) = \sigma^d_{xy}(\mathbf{r}) + \sigma^c_{xy}(\mathbf{r})$. Полагая, как и в (3), прогиб границы малым, мы линеаризуем уравнение равновесия ДГ по $g(x)$ и находим ее форму как сумму вкладов от «шубы» и от «голой» дислокации $g(x) = g^c(x) + g^d(x)$ (последний был вычислен в [3]).

Уравнение равновесия для производной $g^{c\prime}(x) \equiv p^c(x)$ имеет вид интегрального уравнения с ядром Коши

$$-\frac{\mu\varepsilon_0}{1-\nu}\,\frac{\rho^2 x y_0}{r^4} + \frac{\mu s}{2\pi\,(1-\nu)} \int\limits_{-l}^{l} \frac{p^c(x')\,dx'}{x - x'} = 0, \tag{4}$$

решая которое, получаем $p^c(x)$ и саму функцию $g^c(x)$

$$p^c(x) = -\frac{\varepsilon_0}{s}\rho^2\,\frac{l^2\,(y_0^2 - x^2 - 2x^2 y_0^2/l^2)}{L r^4 \sqrt{l^2 - x^2}}, \tag{5}$$

$$g^c(x) = -\frac{\varepsilon_0}{s}\rho^2\,\frac{x\sqrt{l^2 - x^2}}{L r^2}, \tag{6}$$

где $r^2 = x^2 + y_0^2$, $L^2 = l^2 + y_0^2$.

«Голая» же дислокация с вектором Бюргерса $b = (0, b, 0)$ и $b = (b, 0, 0)$ вызывает прогиб ДГ соответственно [3]

$$g^d(x) = -\frac{b y_0^2}{\pi s}\,\frac{\sqrt{l^2 - x^2}}{L r^2}, \tag{7}$$

$$g^d(x) = -\frac{b}{\pi s}\left(\operatorname{arctg}\frac{x\sqrt{l^2 - x^2}\,(\sqrt{1 + l^2/y_0^2} - 1)}{l^2 + x^2(\sqrt{1 + l^2/y_0^2} - 1)} - \frac{x y_0 \sqrt{l^2 - x^2}}{L r^2}\right). \tag{7a}$$

В частности, при $l \gg y_0$ получаем

$$g(x) = g^c(x) + g^d(x) = g^d(x)\left(1 + \pi\varepsilon_0 \frac{x\rho^2}{by_0^2}\right), \tag{8}$$

где

$$g^d(x) = -\frac{by_0^2}{\pi s r^2},$$

$$g(x) = -\frac{\varepsilon_0}{s}\rho^2\frac{x}{r^2} + \frac{b}{\pi s}\left(\operatorname{arctg}\frac{x}{y_0} - \frac{xy_0}{r^2}\right). \tag{8a}$$

Для оценки максимального изменения формы $g(x)$, вызванного ФП, примем $\rho \lesssim y_0$ и $f(T) \lesssim 1$ (так как случай $f(T) > 1$ требует решения самостоятельной задачи о поведении дислокаций на пороге их собственной устойчивости [17]). Тогда (8) дает с учетом оценки (2)

$$g(x) \approx g^d(x)\left(1 + \frac{x\rho}{5y_0^2}\right),$$

откуда видно, что дополнительный вклад в изменение формы ДГ, вызванный наличием «шубы» на дислокациях, невелик. Такой же вывод справедлив и для (8а).

4. Поскольку мы использовали линеаризованные уравнения равновесия границы, необходимо оценить область их применимости. Для этого представим $g(x)$ в виде итерационного ряда $g(x) = g_0(x) + g_1(x) + \ldots$ и предположим, что $y_0 \gg g_0 \gg g_1 \ldots$. Тогда, разлагая уравнение равновесия, получаем цепочку уравнений, первое из которых имеет вид (4), а каждое последующее дает очередную поправку к $g_0(x)$. Эти уравнения можно проинтегрировать, и в результате получаем

$$|g_1^d(x)/g_0^d(x)| \sim b/sy_0, \quad |g_1^c(x)/g_0^c(x)| \sim (\rho/y_0)^2.$$

Отсюда следует, что использование линейного приближения допустимо при $b/s < y_0$ и $\rho < y_0$.

Еще одним ограничением рассматриваемой теории является приближение одиночной дислокации, при котором считается, что ФП вблизи дислокации зависит только от упругого поля ее самой. Как отмечалось в [19], это приближение выполняется при всех реальных плотностях дислокаций.

5. Искривленная ДГ создает вокруг себя поле деформаций и, в частности, дилатацию, что может изменить условия фазообразования в кристалле с дилатационной стрикцией. Вычисляя дилатацию по формулам (1) в линейном по $g(x)$ приближении, получаем

$$\omega_{kk}^t(0, y_0) = \frac{s(1-2\nu)}{2\pi(1-\nu)}\, y_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p(x')\,dx'}{x'^2 + y_0^2},$$

а подставляя сюда (5) и (8), (8а), находим, что искривленная дислокацией двойниковая граница создает около дислокации дополнительную дилатацию $\omega_{kk}^t = -b(1-2\nu)/8\pi(1-\nu)y_0$ при $b = (b, 0, 0)$ $\omega_{kk}^t = 0$ при $b = (0, b, 0)$. Дополнительная же дилатация, вызванная «шубой», оценивается как $\omega_{kk}^c = -(1-2\nu)\varepsilon_0\rho^2/8(1-\nu)y_0^2$. Обе они на расстояниях, меньших ρ, значительно меньше, чем дилатация от самой дислокации, и, таким образом, не оказывает существенного влияния на процесс зародышеобразования на ней.

6. Сила пиннинга ДГ на одиночной дислокации вдали от точки ФП есть y-компонента силы Пича—Келера

$$F_y^0 = \left(\frac{4}{3}\omega_{xx}^t - \frac{2}{3}\omega_{yy}^t\right)\mu b_x + (\omega_{xy}^t + \omega_{yx}^t)\mu b_y .$$

Для $b = (b, 0, 0)$ получаем $F_y^0 = -\mu b^2/12\pi(1-\nu)y_0$.

Силу взаимодействия «шубы» со стенкой находим как производную от энергии деформации

$$F_y^c = -\frac{\partial}{\partial y}\frac{\pi\rho^2\varepsilon_0}{2(1-\nu)}\sigma_{kk}(0, y) = -\frac{\pi(1+\nu)}{4(1-\nu)^2}\frac{\mu\varepsilon_0^2\rho^4}{y_0^3},$$

где $\sigma_{ik}(0, y)$ — напряжение, созданное границей за счет искривления ее «шубой». Наконец, «перекрестные» члены (взаимодействие «шубы» с ДГ за счет искривления ДГ дислокацией, и наоборот) дают вклад

$$F_y^{cd} = -\frac{2+\nu^2}{12(1-\nu)}\frac{\mu b\varepsilon_0\rho^2}{y_0^2},$$

который может иметь любой знак в зависимости от знаков b и ε_0. Если считать, что при не слишком большой плотности дислокаций сила пиннинга есть сумма вкладов от отдельных дислокаций, то при усреднении $\langle F_y^{cd}\rangle = 0$. В случае $b = (0, b, 0)$ «голая» дислокация со стенкой не взаимодействует и пиннинг обусловлен взаимодействием ДГ с «шубой». Итоговая оценка силы пиннинга примет вид

$$F_y(T) = F_y^0 + F_y^c = F_y^0\left[1 + \frac{2}{5}f^2(T)\left(\frac{\rho(T)}{y_0}\right)^2\right].$$

Учитывая, что $f(T) < 1$ и принимая $\rho < y_0$, мы убеждаемся, что одевание дислокаций не может приводить к существенному изменению силы пиннинга ДГ на них, однако это справедливо только в том случае, когда сама структура ДА остается неизменной в процессе ФП и не происходит увеличения плотности дислокаций n_α. Возможность перестройки ДА и роста n_α путем скольжения и переползания рассматривалась в [17—20] для пластичных и хрупких кристаллов. Если в данном материале такая возможность реализуется, то следует ожидать роста силы пиннинга за счет роста плотности дислокаций.

Список литературы

[1] Дедух Л. М., Инденбом М. В., Никитенко В. И. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 1. С. 380—393.
[2] Власко-Власов В. К., Дедух Л. М., Инденбом М. В., Никитенко В. И. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 1. С. 277—288.
[3] Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рощупкин А. М. // Поверхность. 1983. № 9. С. 25—30.
[4] Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рощупкин А. М. // ФММ. 1984. Т. 58. № 1. С. 5—10.
[5] Сидоркин А. С., Даринский Б. М. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 1. С. 285—288.
[6] Сидоркин А. С., Даринский Б. М., Пачевская Г. Н. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1987. Т. 51. № 2. С. 389—392.
[7] Даринский Б. М., Сидоркин А. С., Лазарев А. П. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1989. Т. 53. № 7. С. 1265—1266.
[8] Горбунов В. В., Даринский Б. М. // Там же. С. 1292—1295.
[9] Набутовский В. М., Шапиро Б. Я. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. № 3. С. 948—959.
[10] Дубровский И. М., Кривоглаз М. А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 3. С. 1017—1031.

[11] Дубровский И. М., Кривоглаз М. А. // ЖЭТФ. 1986. Т. 90. № 4. С. 1466—1477.
[12] Кишинец Ю. М., Леванюк А. П., Сигов А. С., // Кристаллография. Т. 30. № 5. С. 837—840.
[13] Кишинец Ю. М., Леванюк А. П., Морозов А. И., Сигов А. С. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 604—605.
[14] Кошелев А. Е. // ЖЭТФ. 1985. Т. 91. № 5. С. 1856—1866.
[15] Бульбич А. А., Пумпян П. Е. // Кристаллография. 1990. Т. 35. № 2. С. 284—288.
[16] Бульбич А. А., Дитриев В. П., Желнова О. А., Пумпян П. Е. // ЖЭТФ. 1990. Т. 98. № 6(12). С. 1108—1119.
[17] Корженевский А. Л. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1324—1331.
[18] Корженевский А. Л. // Кристаллография. 1987. Т. 32. № 2. С. 279—281.
[19] Корженевский А. Л., Лисаченко Д. А. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1492—1494; 1990. Т. 32. № 6. С. 1769—1771.; 1991. Т. 33. № 5. С. 1558—1562.
[20] Korzhenevskii A. L., Lossachenko D. A. // Ferroelectrics Letters. 1991. V. 12. N 6. C. 135—141.
[21] Ройтбурд А. Л. // УФН. 1974. Т. 113. № 1. С. 69—104.
[22] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М., 1987. 248 с.

Электротехнический институт
им. В. И. Ульянова (Ленина)
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
24 июля 1991 г.