

Влияние коллективных эффектов на характер динамического поведения одиночной краевой дислокации в кристалле с точечными дефектами

© В.В. Малашенко

Донецкий национальный технический университет,
83000 Донецк, Украина

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина Национальной академии наук Украины,
83114 Донецк, Украина

(Поступила в Редакцию 22 марта 2006 г.

В окончательной редакции 18 апреля 2006 г.)

Исследовано скольжение одиночной краевой дислокации в упругом поле хаотически распределенных по кристаллу точечных дефектов с учетом влияния фононной подсистемы кристалла. Вычислена сила торможения дислокации и получены значения скоростей, при которых эта сила имеет локальный максимум и минимум. Проведен сравнительный анализ скольжения одиночной дислокации и скольжения пары краевых дислокаций.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Bb

Наличие в кристаллах точечных дефектов, оказывающих воздействие на движение дислокаций, может существенно влиять на механические характеристики образцов. Влияние точечных дефектов на скольжение одиночных дислокаций в динамической области исследовалось в ряде работ [1–6].

Поскольку при движении дислокаций их взаимодействие с дефектами приводит к возникновению дислокационных колебаний, эффективность диссипации энергии оказывается зависящей от вида спектра этих колебаний [3–6]. В работе [7] исследовалось движение пары краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения с учетом взаимодействия дислокаций как между собой, так и с фононной подсистемой кристалла, содержащего хаотически распределенные точечные дефекты. Было показано, что в этом случае при определенных условиях зависимость силы торможения дислокации от скорости дислокационного скольжения может иметь два экстремума — минимум и максимум, между которыми находится область неустойчивого движения. В настоящей работе проанализировано движение одиночной краевой дислокации и показано, что при определенных условиях в рассматриваемой задаче также возможно возникновение двух экстремумов, ограничивающих область неустойчивости, однако положение максимума в этом случае определяется другими параметрами кристалла.

Цель настоящей работы — исследование скольжения одиночной краевой дислокации в поле хаотически распределенных по кристаллу точечных дефектов с учетом ее взаимодействия с фононной подсистемой кристалла. Как и в работе [7], учет влияния фононной подсистемы осуществляется введением квазивязкого члена в уравнение движения дислокации, что означает фактически учет любых механизмов диссипации, характеризующихся квазивязким характером торможения дислокаций, в частности механизмов, основанных на

взаимодействии движущейся дислокации с электронами и магнонами [8,9].

Рассмотрим равномерное скольжение бесконечной краевой дислокации под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в поле точечных дефектов, хаотически распределенных в объеме кристалла. Линия дислокации параллельна оси OZ , вектор Бюргерса параллелен оси OX , в положительном направлении которой дислокация скользит с постоянной скоростью v . Плоскость скольжения дислокации совпадает с плоскостью XOZ , а ее положение определяется функцией

$$X(y = 0, z, t) = vt + w(y = 0, z, t), \quad (1)$$

где функция $w(y = 0, z, t)$ является случайной величиной, описывающей колебания элементов краевой дислокации в плоскости скольжения относительно невозмущенной дислокационной линии.

Поскольку в настоящей работе исследуется скольжение одиночной дислокации, в правой части уравнения движения в отличие от работы [7] отсутствует слагаемое, описывающее взаимодействие дислокаций между собой (напомним, что именно это взаимодействие при движении пары дислокаций определяло и вид спектра дислокационных колебаний, и характер торможения дислокации точечными дефектами)

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

Здесь m — масса единицы длины дислокации, которая, согласно [10], определяется выражением

$$m = \frac{\rho b^2}{4\pi(1 - \gamma)} \ln \frac{L}{r_0}, \quad (3)$$

где ρ — плотность кристалла; L — величина порядка длины дислокации; r_0 — величина порядка атомных расстояний ($r_0 \sim b$); γ — коэффициент Пуассона;

B — константа демпфирования, обусловленная фононными, магнанными, электронными либо иными механизмами диссипации, характеризующимися линейной зависимостью силы торможения дислокации от скорости ее скольжения; c — скорость распространения поперечных звуковых волн в кристалле; σ_{xy} — компонента тензора напряжений, создаваемых дефектами на линии дислокации; $\sigma_{xy} = \sum_{i=1}^N \sigma_{xy,i}$; N — число дефектов в кристалле.

Как и в работе [3], используем плавное обрезание поля напряжений точечного дефекта на расстояниях порядка его радиуса

$$\sigma_{xy}(\mathbf{r}) = \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \frac{1 - \exp(-r/R)}{r}, \quad (4)$$

где R — радиус дефекта, ε — параметр несоответствия, μ — модуль сдвига.

Безразмерный параметр $\alpha = \beta \lambda v / c^2$ (λ — параметр обрезания, $\lambda \approx b$, $\beta = B/m$) в настоящей работе, как и в работах [2,7], считаем малым, что, согласно оценкам [2], реализуется в подавляющем большинстве случаев. Это позволяет при вычислении силы торможения дислокации дефектами пренебречь влиянием фононных и иных механизмов диссипации, вносящих вклад в константу B , и учитывать их только при анализе полной силы торможения, действующей на дислокацию, добавлением слагаемого Bv .

Как следует из работ [3,4], существует область динамического скольжения одиночной дислокации, в которой спектр ее колебаний является нелинейным

$$\omega^2 = c^2 p_z^2 + \Delta_d^2; \quad (5)$$

величина Δ_d является решением уравнения

$$\Delta_d^2 = \frac{nb^2}{8\pi^3 m^2} \iiint d^3 p \frac{p_x^2 |\sigma_{xy}(\mathbf{p})|^2}{\Delta_d^2 + c^2 p_z^2 - p_x^2 v^2}, \quad (6)$$

где n — объемная концентрация точечных дефектов.

Как известно, динамическое взаимодействие дефектов с дислокацией в зависимости от скорости дислокационного скольжения может носить как коллективный характер, так и характер независимых столкновений [3,4]. Обозначим время взаимодействия дислокации с атомом примеси $\tau_{\text{def}} \approx R/v$, где R — радиус дефекта. Время распространения возмущения вдоль дислокации на расстоянии порядка среднего расстояния между дефектами обозначим $\tau_{\text{dis}} \approx l/c$. В области независимых столкновений $v > v_0 = R\Delta_d$ выполняется неравенство $\tau_{\text{def}} < \tau_{\text{dis}}$, т.е. элемент дислокации за время взаимодействия с точечным дефектом не испытывает на себе влияния других дефектов. В этой области уравнение (6) не имеет решения, т.е. щель в спектре дислокационных колебаний не возникает. В области коллективного взаимодействия ($v < v_0$), наоборот, $\tau_{\text{def}} > \tau_{\text{dis}}$, т.е. за время взаимодействия дислокации с точечным дефектом данный дислокационный элемент успевает „почувствовать“ влияние

других дефектов, вызвавших возмущение дислокационной формы. В этой области в спектре дислокационных колебаний возникает щель

$$\Delta_d = \frac{c}{b} (n_0 \varepsilon^2)^{1/3}, \quad (7)$$

здесь n_0 — безразмерная концентрация точечных дефектов, $n_0 = nR^3$. Таким образом, в отличие от работы [7], в которой спектральная щель возникала в результате взаимодействия дислокаций между собой, существовала во всем исследуемом интервале скоростей и зависела от расстояния между дислокациями, в настоящей работе возникновение щели в дислокационном спектре является результатом коллективного взаимодействия дефектов с дислокацией, существует лишь при скоростях меньше некоторой критической скорости v_0 и зависит от концентрации дефектов.

Для вычисления силы торможения дислокации точечными дефектами воспользуемся результатами работ [3,4]

$$F_d = \frac{nb^2}{4\pi^2 mc v} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{\Delta_d/v}^{\infty} dp_x \frac{p_x |\sigma_{xy}(p_x, p_y, 0)|^2}{\sqrt{p_x^2 - (\Delta_d/v)^2}}. \quad (8)$$

Сила торможения дислокации дефектами линейно растет с ростом скорости при $v < v_0$, т.е. в области коллективного взаимодействия

$$F_d = B_d v, \quad B_d = \frac{\pi n_0^{1/3} \mu^2 \varepsilon^{2/3} b^4}{3mc^3 R}. \quad (9)$$

Величина коэффициента B_d , как следует из приведенной формулы, зависит от концентрации дефектов (в случае двух дислокаций она зависела еще и от расстояния между их плоскостями скольжения).

Учитывая явный вид выражения для массы дислокации (3), а также то, что в реальных условиях, согласно [10], величина $\ln(L/r_0)/(4\pi(1-\gamma))$ порядка единицы и $c^2 = \mu/\rho$, для качественных оценок получим упрощенную формулу

$$F_d = \mu b \left(\frac{b}{R}\right)^2 (n_0 \varepsilon^2)^{1/3} \frac{v}{c}. \quad (10)$$

Выражения (9) и (10) получены для дефектов типа центра дилатации с плавным обрезанием величины тензора деформации на расстоянии порядка радиуса дефекта, описываемым выражением (4). Как показано в работах [3,4], торможение дислокации примесями в области коллективного взаимодействия определяется асимптотическим поведением тензора деформаций именно в этой области, т.е. на малых расстояниях. С другой стороны, в работе [11] было показано, что такую же близкую асимптотику, как и (4), имеют дефекты, у которых компоненты вектора деформации u_i на малых расстояниях пропорциональны $(x_i/r) \sim \cos \varphi$, т.е. с уменьшением расстояния эти деформации не имеют тенденции к

неограниченному росту, они перестают расти, достигнув некоторой предельной величины. Таким образом, с точностью до численного коэффициента формулы (9) и (10) будут справедливы для всех дефектов, удовлетворяющих приведенному выше условию.

При $v > v_0$ в соответствии с результатами работ [3,4] сила торможения обратно пропорциональна скорости дислокационного скольжения

$$F_d = \frac{nb^2}{4\pi^2 m c v} \int_{-\infty}^{\infty} d p_y \int_0^{\infty} d p_x |\sigma_{xy}(p_x, p_y, 0)|^2. \quad (11)$$

Для дефектов типа центра дилатации эта сила имеет вид

$$F_d = \frac{\pi n_0 R b^2 \mu^2 \varepsilon^2}{3 m c v}. \quad (12)$$

Однако при выводе формулы (11) не использовался явный вид тензора напряжений, создаваемых точечным дефектом, т.е. она справедлива не только для дефектов типа центра дилатации, но и для любых точечных дефектов, тензор напряжений которых может быть описан выражением следующего вида:

$$\sigma_{xy}(\mathbf{r}) = A \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} f(r), \quad (13)$$

где A — некоторый коэффициент, характеризующий мощность точечного дефекта и зависящий, естественно, от упругих модулей кристалла и размеров дефекта; $f(r)$ — произвольная функция расстояния от дефекта до исследуемой точки. Таким образом, качественно результат (12) будет справедлив для любых дефектов, описываемых формулой (13), а вычисленные для них силы могут отличаться только величиной численного коэффициента.

При $v = v_0$ сила торможения дислокации точечными дефектами имеет локальный максимум

$$F_{\max} = \mu b \left(\frac{b}{R} \right) n_0^{2/3} \varepsilon^{4/3} \approx \mu b (n_0 \varepsilon^2)^{2/3}, \quad (14)$$

величина которого, как следует из приведенного выражения, зависит от концентрации дефектов, их мощности и упругих модулей кристалла. Чтобы оценить порядок величины F_{\max} , воспользуемся данными работы [2]. Для $\varepsilon \approx 10^{-1}$, безразмерной концентрации $n_0 \approx 10^{-3}$, $\mu \approx 5 \cdot 10^{10}$ Па, $b \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м, $R \approx b$ получим $F_{\max} \approx 10^{-2}$ Н/м. Для сравнения оценим максимальное значение силы торможения в случае движения пары дислокаций. Воспользовавшись результатами работы [7], получим для этого случая

$$F_{\max} = \frac{2\pi^2(1-\gamma)}{3} \mu a (n_0 \varepsilon^2) \approx \mu a (n_0 \varepsilon^2). \quad (15)$$

Для значений $a = 10b$ получим значение $F_{\max} \approx 10^{-3}$ Н/м, для $a = 100b$ соответствующее значение

максимальной силы $F_{\max} \approx 10^{-2}$ Н/м. В случае скольжения одиночной дислокации величина скорости v_0 определяется концентрацией точечных дефектов и, согласно результатам работ [3,4], соответствует переходу от коллективного взаимодействия дефектов с дислокацией к независимым столкновениям

$$v_0 = c \frac{R}{b} (n_0 \varepsilon^2)^{1/3} \approx c (n_0 \varepsilon^2)^{1/3}. \quad (16)$$

Напомним, что для пары дислокаций она зависела от расстояния между дислокациями и не зависела от концентрации дефектов. Скорость же v_1 , при которой полная сила торможения дислокации имеет локальный минимум, и для одиночной дислокации, и для пары определяется одним и тем же выражением

$$v_1 = v_0 \sqrt{\frac{B_d}{B}} = 2\pi\varepsilon \sqrt{\frac{(1-\gamma)n_0\mu Rc}{3B}}. \quad (17)$$

Величина минимального значения этой силы может быть оценена по формуле

$$\begin{aligned} F_{\min} &= 2\pi\mu b \sqrt{\frac{1-\gamma}{3} (n_0 \varepsilon^2) \frac{Bc}{\mu b} \left(\frac{R}{b} \right)} \\ &\approx \mu b \sqrt{(n_0 \varepsilon^2) \frac{Bc}{\mu b}} \approx \sqrt{\mu b (n_0 \varepsilon^2) Bc}. \end{aligned} \quad (18)$$

Полная сила торможения может быть приближенно описана выражением

$$F = F_d + Bv = \frac{B_d v}{1 + \frac{v^2}{v_0^2}} + Bv, \quad (19)$$

т.е. функция $F(v)$ имеет тот же вид, что и в случае скольжения пары дислокаций, однако величины B_d и v_0 определяются теперь иными выражениями и, в частности, имеют иную зависимость от концентрации дефектов.

Схематически зависимость полной силы торможения от скорости при различных значениях концентрации приведена на рис. 1. Как следует из приведенного графика, а также из формул (16), (17), в случае скольжения

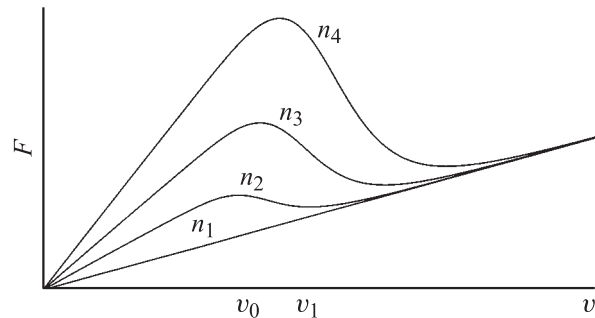


Рис. 1. Зависимость силы торможения дислокации от скорости ее скольжения для различных значений концентрации точечных дефектов ($n_4 > n_3 > n_2 > n_1 = 0$).

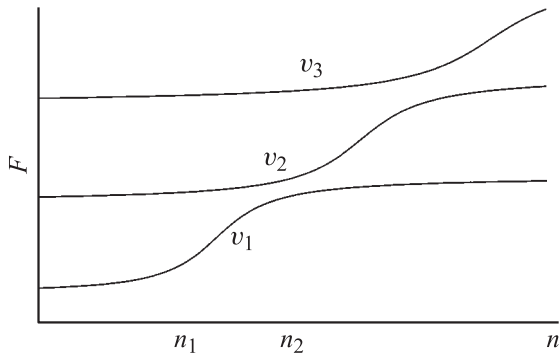


Рис. 2. Зависимость силы торможения дислокации от концентрации точечных дефектов для различных значений скорости скольжения ($v_3 > v_2 > v_1$).

одиночной дислокации положение не только минимумов, как в случае пары дислокаций, но и максимумов с ростом концентрации дефектов смещается в сторону более высоких скоростей. Кривая зависимости $F(v)$ имеет минимум и максимум при выполнении условия

$$B < B_0 = \frac{B_d}{8} = \frac{\mu b (n_0 \varepsilon^2)^{1/3}}{8c}, \quad (20)$$

т. е. величина критического значения фоновой константы демпфирования определяется только концентрацией дефектов (в случае пары дислокаций оно зависело также от расстояния между плоскостями скольжения дислокаций).

Зависимость полной силы торможения дислокации от концентрации точечных дефектов схематически представлена на рис. 2. При значениях концентрации $n < n_1 = \frac{1}{\varepsilon^2} \left(\frac{v}{c}\right)^3$ сила торможения не зависит от концентрации дефектов, поскольку доминирующее влияние на торможение дислокации оказывает фоновая подсистема кристалла. Для скоростей $v \approx 10^{-2}c$ получим $n_1 \approx 10^{-4}$. Если значения концентрации заключены в интервале $n_1 < n < n_2$, где

$$n_2 = \frac{3}{4\pi^2 \varepsilon^2 (1 - \gamma)} \frac{Bv^2}{\mu R c} \approx \frac{1}{(\pi \varepsilon)^2} \left(\frac{Bv}{\mu R}\right) \frac{v}{c}, \quad (21)$$

эта сила растет линейно с ростом концентрации, причем с увеличением скорости скольжения дислокации угол наклона уменьшается обратно пропорционально величине скорости в соответствии с формулой (12) (при $n_1 < n$ имеем $F_d > Bv$, т. е. $F \approx F_d$). При значениях концентрации $n > n_2$ сила торможения дислокации описывается формулой (9), т. е. она пропорциональна кубическому корню из концентрации.

Отметим, что исследуемый механизм диссипации является температурно-независимым. Величина константы демпфирования B , напротив, существенно зависит от температуры, причем в различных температурных интервалах определяется различными механизмами. Проведем сравнительный анализ вкладов раз-

личных механизмов торможения в константу демпфирования B , воспользовавшись данными работы [1]. При температурах $T < T_{el} = 25$ К основным каналом рассеяния энергии движущейся дислокации является взаимодействие с электронами проводимости: $B \approx B_{el} \approx 10^{-6} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. При $T_{el} < T < T_S \approx 100$ К доминирующим становится магнотный механизм торможения (соответствующая ему константа демпфирования $B \approx B_S \approx 10^{-5} - 10^{-6} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ в указанной области температур). При $T_S < T < \Theta_C \sim 1000$ К (Θ_C — температура Кюри) торможение дислокаций определяется в основном фоновыми механизмами рассеяния $B \approx B_f \approx 10^{-4} - 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$.

Выполним численные оценки. Для $\varepsilon \approx 10^{-1}$ и $n_0 \approx 10^{-4}$ получаем значение $v_0 \approx 10^{-2}c \approx 30$ м/с, $v_1 \approx 80$ м/с. Скорость пластической деформации $\dot{\varepsilon}_d$, как известно, связана с плотностью подвижных дислокаций ρ_d и средней скоростью движения дислокаций v соотношением $\dot{\varepsilon}_d = b\rho_d v$. Для значения плотности $\rho_d \approx 10^{11} \text{ m}^{-2}$, получим в этом случае $\dot{\varepsilon}_d \geq 10^3 \text{ s}^{-1}$. Оценим величину константы торможения дефектами: $B_d \approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Тогда для существования двух экстремумов константа демпфирования B должна быть $B \leq 6 \cdot 10^{-6} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Для большинства кристаллов такие значения достигаются при температурах $T \leq 25$ К. Если же концентрация точечных дефектов составляет $n_0 \approx 10^{-3}$, мы получим соответственно $v_0 \approx 60$ м/с, $v_1 \approx 160$ м/с, $B_d \approx 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $B \leq 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Такое значение B достигается при $T \leq 100$ К. Теоретически в случае предельно высоких значений концентрации $n_0 \geq 10^{-2}$ существование двух экстремумов возможно при комнатных температурах. Однако при таких концентрациях мы получим $v_0 \approx 10^{-1}c$, т. е. скорости, близкие к предельно допустимым в рамках данной модели, что снижает надежность оценок, полученных для комнатных температур.

Таким образом, благодаря эффекту коллективного взаимодействия дефектов с дислокацией кривая $F(v)$ может иметь два экстремума и в случае движения одиночной дислокации. Однако в случае скольжения пары дислокаций с каждой из них дефекты также могут взаимодействовать коллективным образом. Возникает вопрос: в каком случае определяющее влияние на вид дислокационного спектра (а, следовательно, и на характер торможения) оказывает взаимодействие дислокаций между собой, а в каком — коллективное взаимодействие дефектов с каждой из дислокаций. Ответ дает сравнение величин щели, определяемых каждым из указанных взаимодействий. При выполнении условия $\Delta_{dis} > \Delta_{def}$, т. е.

$$\frac{c}{a} \sqrt{\frac{2}{\ln(D/L)}} > \frac{c}{b} (n_0 \varepsilon^2)^{1/3}, \quad (22)$$

доминирующим оказывается взаимодействие дислокаций между собой (L — длина дислокации, D — величина порядка размеров кристалла). Именно этот случай исследовался в [7]. Приблизительно это условие может быть

записано в виде

$$a < b (n_0 \varepsilon^2)^{-1/3} \equiv a_1. \quad (23)$$

Для значений концентрации дефектов $n_0 \approx 10^{-4}$ получим $a_1 \approx 10^2 b$. В противном случае ($a > a_1$) дислокационное взаимодействие оказывается несущественным. Таким образом, результаты, полученные в настоящей работе, справедливы не только для одиночной дислокации, но также и для случая движения пары дислокаций, расстояние между которыми превышает величину a_1 .

Поскольку в интервале скоростей $v_0 < v < v_1$ сила дислокационного торможения обратно пропорциональна скорости дислокационного скольжения, границы этого интервала фактически являются границами области динамической неустойчивости движения дислокации. Особенности поведения дислокаций в этой области исследовались в работах [3,4].

Приведенные численные оценки показывают, что исследуемый в настоящей работе механизм диссипации при высоких концентрациях дефектов может оказывать существенное влияние на динамику дислокаций, особенно в области низких температур.

Список литературы

- [1] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. УФН **115**, 1 (1975).
- [2] V.D. Natsik, K.A. Chishko. Crystal Res. Technol. **19**, 763 (1984).
- [3] V.V. Malashenko, V.L. Sobolev, V.I. Khudik. Phys. Stat. Sol. (b) **143**, 425 (1987).
- [4] В.В. Малашенко, В.Л. Соболев, Б.И. Худик. ФТТ **29**, 1614 (1987).
- [5] В.В. Малашенко. ФТТ **32**, 645 (1990).
- [6] В.В. Малашенко. ФТТ **39**, 493 (1997).
- [7] В.В. Малашенко. ФТТ **48**, 433 (2006).
- [8] М.И. Каганов, В.Я. Кравченко, В.Д. Нашик. УФН **111**, 655 (1973).
- [9] В.Г. Барьяхтар, В.В. Тарасенко. ФТТ **22**, 431 (1980).
- [10] А.М. Косевич. Дислокации в теории упругости. Наукова думка, Киев (1978). 220 с.
- [11] В.В. Малашенко, Т.И. Малашенко. ФТВД **9**, 30 (1999).