Особенности динамического поведения винтовой дислокации при возбуждении поперечных дислокационных колебаний

© В.В. Малашенко

Донецкий национальный технический университет, 83000 Донецк, Украина Донецкий физико-технический институт Национальной академии наук Украины, 83114 Донецк, Украина E-mail: malashenko@kinetic.ac.donetsk.ua

(Поступила в Редакцию 22 августа 2006 г.)

Исследовано динамическое торможение винтовой дислокации точечными дефектами с учетом возбуждения поперечных колебаний элементов дислокации как в плоскости скольжения, так и в перпендикулярной ей плоскости. Показано, что учет колебаний в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения, не меняет зависимости силы торможения от скорости скольжения и концентрации дефектов, однако значительно увеличивает величину этой силы (в частности, в случае изотропной модели сила торможения возрастает в 2 раза).

PACS: 61.72.Bb, 61.72.Lk

Точечные дефекты (примеси, вакансии, междоузельные атомы) способны оказывать существенное влияние на движение дислокаций в динамической области, т.е. в той области скоростей, в которой кинетическая энергия дислокации превосходит энергию ее взаимодействия с точечными дефектами [1]. В работах [2-8] исследовалась сила динамического торможения дислокаций точечными дефектами, возникающая в результате необратимого перехода кинетической энергии поступательного движения дислокации в энергию поперечных колебаний ее элементов в плоскости скольжения. Оказалось, что этот механизм диссипации приводит к различному динамическому поведению винтовых и краевых дислокаций. В частности, в работе [5] было показано, что в области независимых столкновений сила торможения винтовой дислокации FSCR линейно зависит от скорости дислокационного скольжения v, в то время как сила торможения краевой дислокации FED обратно пропорциональна этой скорости; кроме того, выполняется соотношение

$$\frac{F_{\rm SCR}}{F_{\rm ED}} = \frac{v^2}{c^2},$$

где *с* — скорость распространения поперечных звуковых волн.

Однако в отличие от краевой дислокации для винтовой дислокации возможно колебательнное движение в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения, и даже двойное поперечное скольжение [1,9]. Движение винтовой дислокации при двойном поперечном скольжении нельзя описать динамическими уравнениями типа использованных в работах [3–8]. Однако существуют системы скольжения, допускающие малые поперечные колебания элементов винтовой дислокации перпендикулярно плоскости скольжения под влиянием упругих полей точечных дефектов, тем не менее исключающие поперечное скольжение винтовых дислокаций. Такая ситуация реализуется, например, в цинке для дислокаций, ориентированных вдоль $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, а при низких температурах — и в натрии для системы скольжения $\langle 111 \rangle \{112\}$. Системы такого типа являются объектами исследования настоящей работы.

Пусть винтовая дислокация, параллельная оси OZ с вектором Бюргерса (0, 0, b), под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 движется в положительном направлении оси OX с постоянной скоростью v в плоскости y = 0 в поле хаотически распределенных дефектов. Поскольку элементы дислокации способны совершать колебания относительно невозмущенной линии дислокации и в плоскости y = 0, и в плоскости X = vt, движение дислокационного элемента может быть описано системой двух скалярных уравнений

$$m\left\{\frac{\partial X(z,t)}{\partial t^{2}} + \beta \frac{\partial X(z,t)}{\partial t} - c^{2} \frac{\partial^{2} X(z,t)}{\partial z^{2}}\right\}$$
$$= b \left[\sigma_{0} + \sigma_{yz}^{d}(X;w_{y};z)\right], \qquad (1)$$

$$m\left\{\frac{\partial^2 w_y(z,t)}{\partial t^2} + \beta \frac{\partial w_y(z,t)}{\partial t} - c^2 \frac{\partial^2 w_y(z,t)}{\partial z^2}\right\}$$
$$= b \left[\sigma_0 + \sigma_{xz}^d(X;w_y;z)\right].$$
(2)

Здесь m — масса единицы длины дислокации; величина коэффициента β определяется выражением $\beta = B/m$, где B — коэффициент динамического торможения дислокации, обусловленного фононными, магнонными или электронными механизмами диссипации. Величина X(z,t) определяет положение дислокационного элемента в плоскости скольжения

$$X(z,t) = vt + w_x(z,t), \tag{3}$$

где функция $w_x(z, t)$ — случайная величина, описывающая поперечные колебания элемента дислокации в плоскости скольжения; ее среднее значение по хаотическому распределению дефектов и по длине дислокации равно нулю. Это усреднение в дальнейшем будет обозначаться символом $\langle \ldots \rangle$. Если перейти к системе координат, связанной с центром масс дислокации, получим дифференциальное уравнение для определения $w_x(z, t)$

$$m\left\{\frac{\partial^2 w_x(z,t)}{\partial t^2} + \beta \, \frac{\partial w_x(z,t)}{\partial t} - c^2 \, \frac{\partial^2 w_x(z,t)}{\partial z^2}\right\}$$
$$= b \left[\sigma_0 + \sigma_{yz}^d\right]. \tag{4}$$

Поскольку поставленная задача решается в рамках изотропной модели, все коэффициенты левой части уравнения (4) совпадают с коэффициентами левой части уравнения (2) для функции $w_y(z, t)$, описывающей колебания элементов дислокации в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения; при этом $\langle w_y(z, t) \rangle = 0$. В правых частях этих уравнений содержатся различные компоненты тензора напряжений, создаваемых дефектами на линии дислокации, а именно: в уравнении (2) — компонента $\sigma_{xz} = \sum_{i=1}^{N} \sigma_{xz,i}$ (*N* — число дефектов в кристалле, $\sigma_{xz,i}$ — компонента тензора напряжений, создаваемых *i*-м дефектом), в уравнении (4) — компонента $\sigma_{yz} = \sum_{m=1}^{N} \sigma_{yz,m}$. Как и в работах [3–8], константа β обеспечивает сходимость интегралов, возникающих в процессе вычислений, однако ее влиянием на величину силы торможения мы пренебрегаем в меру малости параметра $\alpha = \beta bv/c^2$.

Считая колебания дислокационных элементов малыми, во втором порядке теории возмущений получаем

$$F_{d} = b \left\langle \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial x} w_{x} \right\rangle + b \left\langle \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} w_{y} \right\rangle.$$
 (5)

Вычисления удобно производить в импульсном пространстве, в котором

$$w_x(q,\omega) = G(q,\omega)\sigma_{yz}(q,\omega),$$

 $w_y(q,\omega) = G(q,\omega)\sigma_{xz}(q,\omega).$ (6)

Здесь $G(q, \omega)$ — Фурье-образ функции Грина уравнений (2) и (4) (вследствие изотропности используемой модели функции Грина этих уравнений одинаковы). Как и в работах [3–5], точечные дефекты будем считать центрами дилатации. Необходимые нам компоненты тензоров напряжений имеют вид

$$\sigma_{yz} = \mu R^3 \varepsilon \, \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \, \frac{1}{r}, \qquad \sigma_{xz} = \mu R^3 \varepsilon \, \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \, \frac{1}{r}, \qquad (7)$$

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

Первое слагаемое в выражении (5) представляет собой силу торможения винтовой дислокации, обусловленную возбуждением дислокационных колебаний в плоскости скольжения. Воспользовавшись результатами работы [5], его можно представить в виде

$$F_{1} = \frac{nb^{2}}{4\pi^{2}m}$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dq_{y} \int_{-\infty}^{\infty} dq_{z} \int_{0}^{\infty} dq_{x}q_{x} |\sigma_{yz}(q)|^{2} \delta \left[q_{x}^{2}v^{2} - c^{2}q_{z}^{2}\right], \quad (8)$$

где $\delta \left[q_x^2 v^2 - c^2 q_z^2 \right]$ — дельта-функция Дирака, *n* — объемная концентрация точечных дефектов. Фурье-образы необходимых нам компонент тензора деформаций имеют вид

$$\sigma_{yz}(q) = \mu R^3 \varepsilon \, \frac{q_y q_z}{q^2}, \qquad \sigma_{xz}(q) = \mu R^3 \varepsilon \, \frac{q_x q_z}{q^2}. \tag{9}$$

Следовательно, выражение для силы торможения дислокации дефектами типа центра дилатации можно представить в виде

$$F_{1} = \frac{nb^{2}\mu^{2}R^{6}\varepsilon^{2}}{4\pi^{2}m}$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dq_{y} \int_{-\infty}^{\infty} dq_{z} \int_{0}^{\infty} dq_{x}q_{x} \frac{q_{y}^{2}q_{z}^{2}}{q^{4}} \delta\left[q_{x}^{2}v^{2} - c^{2}q_{z}^{2}\right].$$
(10)

Этот интеграл расходится на верхнем пределе. Для устранения такой расходимости обычно применяется стандартная процедура обрезания верхнего предела интегрирования величиной порядка R^{-1} . Выполняя вычисления и используя явное выражение для массы дислокации [1], получим окончательное выражение для силы торможения, обусловленной колебаниями дислокации в плоскости скольжения, согласующееся с результатами работы [5],

$$F_1 = n_0 \varepsilon^2 \mu b \, \frac{v}{c},\tag{11}$$

где $n_0 = nR^3$ — безразмерная концентрация дефектов. Рассмотрим теперь второе слагаемое в выражении (5). Оно определяет силу торможения дислокации, возникающую благодаря колебаниям элементов дислокации в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения. Выполняя вычисления, аналогичные проделанным ранее, получим выражение для этого слагаемого в виде

$$F_{2} = \frac{nb^{2}}{8\pi^{2}m}$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dq_{y} \int_{-\infty}^{\infty} dq_{z} \int_{-\infty}^{\infty} dq_{x}q_{y}\sigma_{yz}(q)\sigma_{xz}(-q)\delta\left[q_{x}^{2}v^{2} - c^{2}q_{z}^{2}\right].$$
(12)

Заметим, что для центра дилатации $\sigma_{ik}(-q) = \sigma_{ik}(q)$. Подставляя в (12) Фурье-образы необходимых компонент тензора деформаций (9), получим окончательное выражение для F_2 , в точности совпадающее с выражением (10) для F_1 . Таким образом, в изотропном случае возбуждение дислокационных колебаний как в плоскости скольжения, так и в перпендикулярной ей плоскости вносит в точности одинаковый вклад в силу торможения винтовой дислокации, а полная сила торможения, определяемая данным механизмом диссипации, равна

$$F = F_1 + F_2 = 2n_0 \varepsilon^2 \mu b \, \frac{v}{c}.$$
 (13)

Следовательно учет дислокационных колебаний в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения, приводит к тому, что сила торможения винтовой дислокации, обусловленная данным механизмом диссипации, возрастает по величине в 2 раза, а ее зависимость от скорости скольжения дислокации и концентрации точечных дефектов остается прежней. Данный результат получен для дефектов типа центра дилатации. Однако нетрудно убедиться, что он справедлив для всех дефектов, тензор деформации которых может быть представлен в следующем виде:

$$\sigma_{ik} = \eta \, \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} f(r). \tag{14}$$

Здесь f(r) — произвольная функция расстояния от точечного дефекта до исследуемой точки, η — коэффициент, зависящий от упругих модулей кристалла и мощности дефекта. В этом случае также имеет место равенство $F_1 = F_2$, т. е. сила торможения также возрастает в 2 раза и пропорциональна концентрации точечных дефектов и скорости скольжения дислокации, однако коэффициент пропорциональности будет, естественно, другим. Такая же зависимость от концентрации и скорости должна сохраниться для исследуемых дефектов и в анизотропном случае, однако тогда равенство $F_1 = F_2$ не выполняется и численный коэффициент в формуле (13) будет зависеть от соотношения значений соответствующих модулей упругости.

Учет исследованных особенностей динамического поведения винтовых дислокаций особенно важен при низких температурах и высоких концентрациях примеси.

Список литературы

- [1] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. УФН 115, 1 (1975).
- [2] V.D. Natsik, K.A. Chishko. Cryst. Res. Technol. 19, 763 (1984).
- [3] V.V. Malashenko, V.L. Sobolev, B.I. Khudik. Phys. Stat. Sol. (b) 143, 425 (1987).
- [4] В.В. Малашенко. ФТТ 29, 1614 (1987).
- [5] В.В. Малашенко. ФТТ **32**, 645 (1990).
- [6] В.В. Малашенко. ФТТ **39**, 493 (1997).
- [7] В.В. Малашенко. ЖТФ 76, 127 (2006).
- [8] В.В. Малашенко. ФТТ **48**, 433 (2006).
- [9] Р.П. Житару, Н.А. Палистрант. ФТТ 41, 1041 (1999).