

Торможение дислокаций в низкотемпературной фазе фуллерита C_{60} , обусловленное ориентационной релаксацией молекул

В. Д. Нацик, А. В. Подольский

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины
Украина, 61164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: natsik@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 28 июля 1999 г., после переработки 21 сентября 1999 г.

Обсуждено взаимодействие краевой дислокации с пентагонными (p) и гексагонными (h) ориентационными состояниями молекул в низкотемпературной ПК фазе фуллерита C_{60} . Рассмотрен интервал температур $T_g < T < T_c$, где $T_c = 260$ К — температура фазового перехода, $T_g = 90$ К — температура ориентационного стеклования. Описано неоднородное распределение h -конфигураций вокруг линии неподвижной дислокации и определена стартовая сила $F_s(T)$, способная вырвать дислокацию из образованного ею облака h -конфигураций. Вычислена и проанализирована сила динамического торможения $F_D(T, V)$, возникающая в результате термически активированных переходов между p - и h -конфигурациями под действием упругого поля дислокации, движущейся с постоянной скоростью V .

Обговорено взаємодію крайової дислокації з пентагонними (p) і гексагонними (h) орієнтаційними станами молекул у низькотемпературній ПК фазі фулериту C_{60} . Розглянуто інтервал температур $T_g < T < T_c$, де $T_c = 260$ К — температура фазового переходу, $T_g = 90$ К — температура орієнтаційного склування. Описано неоднорідний розподіл h -конфігурацій навколо лінії нерухомої дислокації і визначено стартову силу $F_s(T)$, котра здатна вирвати дислокацію з утвореної нею атмосфери h -конфігурацій. Обчислено та проаналізовано силу динамічного тертя $F_D(T, V)$, яка виникає в результаті термічно активованих переходів між p - і h -конфігураціями під дією пружного поля дислокації, що рухається з постійною швидкістю V .

PACS: 62.20.-x, 61.70.Le

Введение

Изучение пластической деформации монокристаллов фуллерита C_{60} методом микроиндентирования показало [1–5], что в широкой области умеренно низких температур 300–80 К носителями пластичности в них являются дислокации, принадлежащие системе скольжения $(111)\langle 110 \rangle$. Дискретная дислокационная структура линий скольжения в окрестности отпечатка индентора выявлена методами термического и химического травления в работах [1,3]. Поэтому на пути построения последовательной микроскопической теории пластичности и прочности кристаллического C_{60} одной из первоочередных задач является анализ подвижности дислокаций в этом материале [6].

Движение дислокации в кристалле всегда сопровождается диссипацией энергии, приводящей

к ее торможению. Часть энергетических потерь дислокации связана с дискретностью структуры кристалла, и их описание требует микроскопического подхода — например торможение, обусловленное потенциальным рельефом Пайерлса или неподвижными локальными примесными барьерами [7–9]. Другие механизмы потерь имеют макроскопическое происхождение и могут быть проанализированы в рамках континуальной теории [8–10]: к ним относятся различные релаксационные процессы, происходящие в упругом поле движущейся дислокации, например, диффузия примесных атмосфер, релаксация в газе квазичастиц и т. п.

В низкотемпературной простой кубической (ПК) фазе фуллерита C_{60} , существующей ниже $T_c = 260$ К, наиболее эффективным механизмом диссипации механической энергии является решеточно-ориентационное взаимодействие и ориента-

ционная релаксация молекул — термически активированные переходы молекул между двумя энергетически неэквивалентными ориентациями, получившими название пентагонной (p) и гексагонной (h) конфигураций. Влияние ориентационной релаксации на тепловые и реологические свойства кристаллов фуллерита детально проанализировано в нашей предыдущей работе [11]. В [11] можно также найти список публикаций, в которых отражена предыстория данной проблемы и содержится подробная характеристика решеточно-ориентационной структуры фуллерита C_{60} . Ниже мы максимально кратко опишем только отдельные детали этой структуры, сведения о которых необходимы для четкой формулировки рассматриваемой задачи.

В ПК фазе оси симметрии третьего порядка молекул C_{60} ориентационно упорядочены и молекулы могут совершать только малые либрации и заторможенные повороты вокруг этих осей. При таких вращениях реализуются два типа минимумов угловой зависимости энергии парного межмолекулярного взаимодействия: более глубокий глобальный (p -конфигурация) и локальный (h -конфигурация) минимумы; различие в энергиях этих конфигураций в расчете на одну межмолекулярную связь $\Delta \approx 0,01$ эВ. Пентагонная и гексагонная конфигурации разделены энергетическим барьером порядка $0,3$ эВ: если символом U_p обозначить барьер для $p \rightarrow h$ -перехода, то барьер для обратного $h \rightarrow p$ -перехода будет иметь величину $U_h = U_p - \Delta$. В классическом пределе (без учета квантовых эффектов) идеальной термодинамически равновесной структуре фуллерита соответствуют p -конфигурации всех парных межмолекулярных связей, а h -конфигурации следует рассматривать как локальные дефекты структуры, которые могут возбуждаться, например, тепловым движением молекул. В состоянии термодинамического равновесия объемные концентрации гексагонных N_h и пентагонных N_p конфигураций определяются распределением Больцмана и соотношением баланса:

$$\bar{n}_h = \frac{\bar{N}_h}{N_0} = \left(1 + \exp \frac{\Delta}{kT} \right)^{-1}; \quad \bar{n}_p = \frac{\bar{N}_p}{N_0} = 1 - \bar{n}_h; \quad (1)$$

здесь черта над символом обозначает состояние равновесия, а $N_0 = N_p + N_h$ — объемная концентрация двухъямных ориентационных состояний.

Средние времена термически активированного разрушения p -конфигураций τ_p и h -конфигураций τ_h определяются активационной формулой вида

$$\tau_{p,h} = \tau_0 \exp \frac{U_{p,h}}{kT}, \quad (2)$$

где τ_0 — характерный период либраций, который предполагается одинаковым для обеих конфигураций (эмпирические оценки приводят к значениям $\tau_0 \approx 10^{-13} - 10^{-14}$ с). В соответствии с этим изменение со временем неравновесной заселенности дефектных h -конфигураций $n_h(t)$ (ориентационная релаксация) описывается простым кинетическим уравнением:

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} n_h + n_h = \frac{\tau}{\tau_p}, \quad \tau = \frac{\tau_p \tau_h}{\tau_p + \tau_h}. \quad (3)$$

В температурном интервале $T_c > T > T_g \approx 90$ К равновесная концентрация дефектных h -конфигураций изменяется в пределах $0,4 > \bar{n}_h > 0,2$, а характерное время установления ориентационного равновесия $\tau < 10^3$ с. При таких температурах термически активированные переходы между p - и h -конфигурациями происходят достаточно быстро в масштабах лабораторного времени и состояние кристалла может рассматриваться как своеобразная ориентационная жидкость (ОЖ). С другой стороны, при охлаждении фуллерита ниже T_g термодинамическое равновесие между p - и h -конфигурациями не успевает устанавливаться за стандартные лабораторные времена. Поэтому при $T < T_g$ кристалл попадает в состояние ориентационного стекла с концентрацией замороженных дефектных конфигураций $n_{hg} \approx 0,2$, а граничная температура T_g имеет смысл температуры ориентационного стеклования.

Для описания связи вращательных степеней свободы молекул с деформациями кристаллической решетки фуллерита в работе [11] предложено ввести деформационные добавки к перечисленным выше параметрам межмолекулярного взаимодействия U_p , U_h и Δ . Принимая во внимание кубическую симметрию фуллерита и ограничиваясь линейным приближением по компонентам тензора деформации ϵ_{ik} , имеем

$$U_{p,h}^{(\epsilon)} = U_{p,h} - v_{p,h} \epsilon_{ll}, \quad \Delta^{(\epsilon)} = \Delta - v_{\Delta} \epsilon_{ll}. \quad (4)$$

Здесь ϵ_{ll} — сумма диагональных компонент тензора деформаций, а v_p , v_h и $\Delta = v_p - v_h$ — константы деформационного потенциала, для которых в работе [11] получены эмпирические оценки: $v_p \approx v_h \approx 2,0$ эВ, $v_{\Delta} \approx 2\Delta \approx 2,4 \cdot 10^{-2}$ эВ.

Модель двухъямных ориентационных состояний молекул, дополненная соотношениями (4) и кинетическим уравнением (3), создает все необходимые предпосылки для анализа взаимодействия дислокации с вращательными степенями свободы молекул в низкотемпературной фазе фуллерита C_{60} , в том числе и для описания динамического трения дислокаций, обусловленного этим взаимодействием. Ранее качественная характеристика такого трения была дана в работе [6], в которой при описании дислокационно-ориентационного взаимодействия использовано приближение линейного отклика, не учитывающее зависимость времени ориентационной релаксации τ от локальных значений дислокационных деформаций ϵ_{ik} . Это приближение значительно упрощает анализ задачи, но его применимость нарушается в окрестности ядра дислокации (данное обстоятельство было отмечено в [6]). Ниже будут проанализированы те качественные и количественные изменения динамического трения дислокаций в фуллерите C_{60} , которые возникают в результате более строгого подхода к описанию решеточно-ориентационного взаимодействия, предложенного в [11].

1. Общая характеристика дислокационно-ориентационного взаимодействия

Присутствие дислокации в кристалле фуллерита C_{60} нарушает однородное распределение (1) пентагонных и гексагонных конфигураций молекул. При заданной постоянной температуре в упругом поле неподвижной дислокации $\epsilon_{ik}(\mathbf{r})$ образуется неоднородная равновесная «атмосфера» дефектных h -конфигураций, подобная атмосфере из примесей внедрения, окружающей дислокационную линию в ОЦК металле (атмосфера Снука) [8]. Можно рассмотреть стартовую силу $F_s(T)$, которая способна достаточно быстро (формально — мгновенно) привести в движение ранее покоившуюся дислокацию, т.е. вырвать ее из облака h -конфигураций. Величина такой силы определяется изменением упругой энергии кристалла при смещении линии дислокации относительно центра остающегося неподвижным облака.

Поле деформаций $\epsilon_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{V}t)$ дислокации, движущейся с постоянной скоростью \mathbf{V} ($V \ll s$, где s — характерная скорость звука), нарушает локальное термодинамическое равновесие между p - и h -конфигурациями и возбуждает релаксационный процесс, восстанавливающий это равновесие. Диссипация энергии, сопровождающая такой релаксационный процесс, приводит к появлению эквивалентной силы динамического торможения

дислокации $\mathbf{F}_D(\mathbf{V}, T)$, зависящей от ее скорости и температуры кристалла.

Последовательное описание дислокационной пластичности фуллерита C_{60} предполагает вычисление обеих указанных сил, хотя их относительная роль в различных температурных интервалах неодинакова. Из общих соображений можно ожидать, что при $T < T_g$ релаксационное торможение практически отсутствует и основную роль будет играть стартовая сила $\mathbf{F}_s(T)$, тогда как при $T > T_g$ на первый план должна выступить сила $\mathbf{F}_D(\mathbf{V}, T)$.

Для дислокаций в анизотропных кристаллических структурах явный вид поля деформаций $\epsilon_{ik}(\mathbf{r})$ неизвестен, поэтому при решении задач, подобных рассматриваемой в данной работе, приходится прибегать к модели эквивалентной упруго-изотропной среды. Два модуля упругости такой среды вычисляются с помощью специальных методов усреднения модулей упругости кристалла. Согласно сформулированной в [8] рекомендации, при расчете локальных характеристик упругого поля дислокации целесообразно использовать метод усреднения Фогта. В случае кубического кристалла с модулями упругости C_{11} , C_{12} и C_{14} метод Фогта приводит к эквивалентной упруго-изотропной среде с модулями всестороннего сжатия B и сдвига G , которые определяются соотношениями [8]

$$3B = C_{11} + 2C_{12}, \quad 5G = 3C_{44} + C_{11} - C_{12}. \quad (5)$$

Использование значений модулей упругости монокристалла фуллерита при комнатной температуре, измеренных акустическими методами [12], приводит к оценкам: $B \approx 1,1 \cdot 10^{10}$ Па, $G \approx 0,5 \cdot 10^{10}$ Па.

В дальнейшем мы будем рассматривать прямолинейную краевую дислокацию с вектором Бюргера \mathbf{b} , которая покоится или движется в своей плоскости скольжения с постоянной скоростью \mathbf{V} . В прямолинейной системе координат с осью x_3 вдоль линии дислокации и осью x_1 вдоль направления векторов \mathbf{b} и \mathbf{V} поле дилатаций дислокации $\epsilon_{ll}(\mathbf{r} - \mathbf{V}t)$, записанное в изотропном приближении, имеет вид [7,8]

$$\epsilon_{ll}(\mathbf{r} - \mathbf{V}t) \equiv \epsilon_{ll}(x_1 - Vt, x_2) = \epsilon_0 r_0 \Psi(x_1 - Vt, x_2), \quad (6)$$

$$\epsilon_0 = \frac{3Gb}{\pi(3B + 4G)r_0}, \quad \Psi(x_1, x_2) = -\frac{x_2}{x_1^2 + x_2^2}.$$

В эту формулу мы преднамеренно ввели параметр r_0 — радиус ядра дислокации, предполагая в

дальнейшем устранение нефизической расходимости (6) на линии дислокации ($x_1 = Vt$, $x_2 = 0$). Если воспользоваться стандартной оценкой $r_0 \simeq b$ и приведенными выше оценками модулей B и G , то для величины деформации в ядре дислокации получим оценку $\varepsilon_0 \simeq 0,1^*$.

Рассмотрим вначале структуру атмосферы h -конфигураций, сформировавшейся на неподвижной дислокации ($V = 0$) при температурах $T_g < T < T_c$. Избыточную равновесную концентрацию $\bar{v}_h^{(\varepsilon)} = \bar{n}_p^{(\varepsilon)} - \bar{n}_h$ гексагональных конфигураций, обусловленную дилатацией (6), легко получить, используя формулы (1) и (4). Так как в рассматриваемом температурном интервале $T > T_g$ справедливо неравенство $q = v_{\Delta} \varepsilon_0 / (kT) \ll 1$, то выражение для $\bar{v}_h^{(\varepsilon)}$ можно записать в линейном по q приближении, считая, что после устранения расходимости $|r_0 \psi(x_1, x_2)| \leq 1$:

$$\bar{v}_h^{(\varepsilon)}(\mathbf{r}) = qr_0 \bar{n}_p \bar{n}_h \psi(x_1, x_2). \quad (7)$$

Мгновенное смещение дислокации вдоль оси x_1 на расстояние z по отношению к центру образованного ею облака h -конфигураций (7) при фиксированной температуре приводит к изменению плотности решеточно-ориентационной части свободной энергии фуллерита [11] на величину

$$\begin{aligned} \delta W^{(hd)}(x_1, x_2; z) = & -\gamma \bar{v}_h^{(\varepsilon)}(x_1, x_2) \times \\ & \times [\varepsilon_{II}(x_1 - z, x_2) - \varepsilon_{II}(x_1, x_2)], \end{aligned} \quad (8)$$

где γ — феноменологический параметр ориентационно-решеточного взаимодействия. Используя (8), можно вычислить отнесенную к единице длины дислокации стартовую силу F_s , которую необходимо приложить к дислокации в плоскости скольжения, чтобы вырвать ее из облака h -конфигураций:

$$F_s = \gamma \bar{n}_p \bar{n}_h q \varepsilon_0 r_0^2 \max |I(z)|, \quad (9)$$

$$I(z) = \frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \psi(x_1, x_2) \psi(x_1 - z, x_2).$$

Вычисление этого интеграла предполагает, естественно, указание корректной процедуры устранения расходимостей подынтегрального выражения в точках ($x_1 = 0$, $x_2 = 0$) и ($x_1 = z$, $x_2 = 0$).

Скольжение дислокации с постоянной скоростью V через объем кристалла с равновесным однородным распределением гексагональных configura-

ций будет приводить к нарушению локального равновесия: $n_h(\mathbf{r}, t) = \bar{n}_h + v_h(\mathbf{r}, t)$, где v_h — неравновесная добавка, индуцированная упругим полем дислокации (6). Уравнение для неравновесной добавки $v_h(\mathbf{r}, t)$, согласно (2)–(4), имеет вид

$$\tau^{(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial t} v_h + v_h = \frac{\tau^{(\varepsilon)}}{\tau_p^{(\varepsilon)}} - \bar{n}_h. \quad (10)$$

Здесь $\tau^{(\varepsilon)}$ и $\tau_{p,h}^{(\varepsilon)}$ — соответственно локальные значения времени ориентационной релаксации и времен активированного разрушения пентагональных и гексагональных конфигураций в упругом поле движущейся дислокации:

$$\tau^{(\varepsilon)} = \frac{\tau_p^{(\varepsilon)} \tau_h^{(\varepsilon)}}{\tau_p^{(\varepsilon)} + \tau_h^{(\varepsilon)}}, \quad (11)$$

$$\tau_{p,h}^{(\varepsilon)} = \tau_0 \exp \left[\frac{U_{p,h} - v_{p,h} \varepsilon_{II}(x_1 - Vt, x_2)}{kT} \right].$$

Легко показать, что в рассматриваемом температурном интервале $T_g < T < T_c$ правая часть уравнения (10) вне ядра дислокации допускает линейаризацию по величине дилатации $\varepsilon_{II}(x_1 - Vt, x_2)$ (формально — по малому параметру $q = v_{\Delta} \varepsilon_0 / kT \ll 1$). Вместе с тем время релаксации $\tau^{(\varepsilon)}$ не допускает такой линейаризации: оно содержит большой параметр $Q = v_p \varepsilon_0 / kT$ и остается существенно нелинейной (экспоненциальной) функцией дилатации $\varepsilon_{II}(x_1 - Vt, x_2)$.

Уравнение (10) представляет собой линейное дифференциальное уравнение с переменными коэффициентами, и его решение, удовлетворяющее естественному начальному условию $v_h(\mathbf{r}, -\infty) \equiv 0$, можно записать в квадратурах [13]. В линейном по параметру q приближении имеем

$$\begin{aligned} v_h(x_1, x_2, t) = & \frac{qr_0 \bar{n}_p}{\tau_p} \int_0^{\infty} dt' \psi[x_1 - V(t-t'), x_2] \times \\ & \times \exp \left\{ Qr_0 \psi[x_1 - V(t-t'), x_2] - \right. \\ & \left. - \frac{1}{\bar{n}_h \tau_p} \int_0^{t'} dt'' \exp [Qr_0 \psi(x_1 - V(t-t''), x_2)] \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

* Малая величина $\varepsilon_0 \ll 1$ в определенной степени оправдывает использование линейного по ε_{II} приближения в разложениях (4).

$$q = \frac{v_{\Delta} \varepsilon_0}{kT}, \quad Q = \frac{v_p \varepsilon_0}{kT}.$$

Индукцированный упругим полем движущейся дислокации релаксационный процесс (12) в системе ориентационных состояний сопровождается диссипацией механической энергии кристалла с эквивалентной силой трения $F_D(V, t)$. Производная по времени от локальной плотности энергии дислокационно-ориентационного взаимодействия определяется выражением

$$\frac{\partial}{\partial t} W^{(hd)}(x_1, x_2, t) = -\gamma v_h(x_1, x_2, t) \times \frac{\partial}{\partial t} \varepsilon_{ll}(x_1 - Vt, x_2). \quad (13)$$

Интегрирование (13) по координатам x_1 и x_2 дает величину диссипативной функции процесса, отнесенную к единице длины дислокации. Приравнявая эту величину произведению $F_D V$, получаем для силы трения единицы длины дислокации выражение

$$F_D = \frac{qr_0^2 \varepsilon_0 \bar{n}_p \gamma}{\tau_p} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \psi[x_1 - Vt, x_2] \times \int_0^{\infty} dt' \psi[x_1 - V(t-t'), x_2] \times \exp [Qr_0 \psi(x_1 - V(t-t'), x_2)] \times \exp \left\{ -\frac{1}{\bar{n}_h \tau_p} \int_0^{t'} dt'' \exp [Qr_0 \psi(x_1 - V(t-t''), x_2)] \right\}. \quad (14)$$

Эта формула, как и формула (9), приобретает физический смысл только после устранения расходимости, связанной с сингулярностью функции $\psi(x_1, x_2)$.

Интегралы (9) и (14) дают решение в квадратурах задачи о вычислении силы торможения дислокации, возникающей в результате взаимодействия ее упругого поля с ориентационными конфигурациями молекул. Следующий этап анализа — получение в явном виде зависимости этой силы от температуры кристалла и скорости дисло-

кации, а также оценок характерной величины силы трения в различных температурно-скоростных интервалах.

2. Температурная зависимость стартовой силы $F_s(T)$

Наиболее простой способ устранения сингулярности при вычислении интеграла $I(z)$ в выражении (9) — удаление из области интегрирования полосы $|x_2| < r_0$, где r_0 — радиус ядра дислокации. Выполняя после этого замену переменных интегрирования $\xi x_2 = x_1$ и $\eta x_2 = z$, получаем

$$I(z) = -2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{r_0}^{\infty} dx_2 \psi(x_1, x_2) \frac{\partial}{\partial x_1} \psi(x_1 - z, x_2) = -\frac{2}{z} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_0^{z/r_0} d\eta \psi(\xi, 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi - \eta, 1) = \frac{2}{z} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi(\xi, 1) \int_0^{z/r_0} d\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \psi(\xi - \eta, 1) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{(1 + \xi^2)^2} \left[\frac{2\xi r_0 - z}{r_0^2 + (\xi r_0 - z)^2} \right].$$

Оставшийся интеграл легко вычислить, используя теорему вычетов теории функций комплексного переменного:

$$I(z) = -\frac{\pi z}{4r_0^2 + z^2}, \quad \max |I(z)| = \frac{\pi}{4r_0}. \quad (15)$$

Подстановка (15) в (9) приводит к оценке

$$F_s \approx \frac{\pi r_0^2 v_{\Delta} \gamma \bar{n}_p \bar{n}_h}{4kT} = \frac{b^2 v_{\Delta} \gamma \bar{n}_p \bar{n}_h}{4\pi r_0 kT} \left[\frac{3G}{3B + 4G} \right]^2. \quad (16)$$

В рамках феноменологической термодинамики ориентационных состояний [11] коэффициент γ не определен, он остается феноменологическим параметром теории. В связи с этим целесообразно выразить этот коэффициент через характеристики фуллерита, допускающие экспериментальное определение, например через теплоемкость. Используя результаты работы [11], приходим к соотношению

$$\gamma = \frac{v_{\Delta} k T^2 C_v^{(or)}(T)}{\Delta^2 \bar{n}_p \bar{n}_h}, \quad (17)$$

где $C_v^{(or)}$ — ориентационная составляющая теплоемкости единицы объема. Вместе с тем коэффициенту γ можно придать также микроскопический смысл. Замечая, что возбуждение единичной h -конфигурации сопровождается повышением энергии кристалла на величину Δ , получаем

$$C_v^{(or)} = N_0 \Delta \left(\frac{d\bar{n}_h}{dT} \right)_V = \frac{N_0 \Delta^2 \bar{n}_p \bar{n}_h}{k T^2}. \quad (18)$$

Сравнение (17) и (18) дает для коэффициента γ выражение

$$\gamma = N_0 v_{\Delta}. \quad (19)$$

Подстановка (1) и (19) в (16) приводит к выражению для стартовой силы, которое в явном виде определяет ее температурную зависимость:

$$F_s(T) = \left(\frac{3G}{3B + 4G} \right)^2 \frac{b^2 v_{\Delta}^2 N_0}{4\pi r_0 k T} \frac{\exp(\Delta/kT)}{[1 + \exp(\Delta/kT)]^2}. \quad (20)$$

Отметим, что фигурирующие в формулах для F_s параметры B и G — изотермические модули упругости, хотя, строго говоря, при той точности, с которой получены эти формулы, нет смысла различать изотермические и адиабатические значения модулей, а также учитывать их зависимость от температуры.

3. Сила динамического торможения

Расходимость в интеграле (14), определяющем силу динамического торможения равномерно движущейся дислокации, устраняется, как и при вычислении стартовой силы, исключением из области интегрирования полосы $|x_2| < r_0$. Кроме того, легко видеть, что интеграл несколько упрощается при замене $x_1 - Vt \rightarrow x_1$ и интегрировании по частям по переменной t' :

$$F_D = q\gamma \varepsilon_0 r_0^2 \bar{n}_p \bar{n}_h \times \\ \times \int_{r_0}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \psi(x_1, x_2) \right] \int_0^{\infty} dt \left[\frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1 + Vt, x_2) \right] \times$$

$$\times \left\{ \exp \left[-\frac{1}{\bar{n}_h \tau_p} \int_0^t dt' \exp [Qr_0 \psi(x_1 + Vt', x_2)] \right] + \right. \\ \left. + \exp \left[-\frac{1}{\bar{n}_h \tau_p} \int_0^t dt' \exp [-Qr_0 \psi(x_1 + Vt', x_2)] \right] \right\}.$$

В дальнейшем удобно перейти к безразмерным переменным интегрирования η , ξ , v , выполнив замены $x_1 = Qr_0 \xi$, $x_2 = Qr_0 \eta$, $Vt = Qr_0 v$:

$$F_D = q\gamma \varepsilon_0 r_0^2 \bar{n}_p \bar{n}_h I \left(Q, \frac{V_T}{V} \right); \quad (21)$$

$$I \left(Q, \frac{V_T}{V} \right) = \frac{1}{Q} \int_{1/Q}^{\infty} d\eta \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi, \eta) \right] \times$$

$$\times \int_0^{\infty} dv \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi + v, \eta) \right] \times$$

$$\times \left\{ \exp \left[-\frac{V_T}{V} \int_0^v dv' \exp [\psi(\xi + v', \eta)] \right] + \right.$$

$$\left. + \exp \left[-\frac{V_T}{V} \int_0^v dv' \exp [-\psi(\xi + v', \eta)] \right] \right\}, \quad (22)$$

$$V_T = \frac{r_0 Q}{\tau_p \bar{n}_h}.$$

Асимптотические оценки интеграла (22) можно получить, рассматривая предельные случаи достаточно малых и больших скоростей дислокации: $V \ll V_T$ и $V \gg V_T$.

3.1. Область малых скоростей

Переходя к вычислению асимптотик интеграла $I(Q, V_T/V)$, прежде всего отметим, что для стоящих в показателе экспоненты интегралов справедлива простая асимптотическая оценка:

$$I_1^{(\pm)} = \int_0^v dv' e^{\pm \psi(\xi + v', \eta)} \simeq \begin{cases} v e^{\pm \psi(\xi, \eta)}, & v \rightarrow 0; \\ v \pm \pi, & v \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (23)$$

В предельном случае очень малых скоростей дислокации $V \rightarrow 0$ основной вклад в интеграл по переменной v дает область малых значений $v \rightarrow 0$, что позволяет под знаком интеграла положить $\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi + v, \eta) \approx \frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi, \eta)$ и с экспоненциальной точностью пренебречь первым слагаемым в фигурных скобках (22):

$$I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) = \frac{2V}{QV_T} \int_{1/Q}^{\infty} d\eta \int_0^{\infty} d\xi \left[\frac{\partial \psi(\xi, \eta)}{\partial \xi} \right]^2 e^{\psi(\xi, \eta)}, \quad V \rightarrow 0.$$

Интегрирование по частям по переменной ξ и еще одна замена переменных позволяют преобразовать этот интеграл к виду

$$I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) \approx -\frac{2V}{V_T} \int_1^{\infty} d\eta \int_0^{\infty} d\xi \left[\frac{\partial^2 \psi(\xi, \eta)}{\partial^2 \xi} \right] e^{Q\psi(\xi, \eta)}. \quad (24)$$

Основной вклад по параметру $Q \gg 1$ в интеграл (24) дает малая область вблизи точки $\xi = 0$, $\eta = 1$. Заменяя под знаком интеграла

$$\frac{\partial^2 \psi(\xi, \eta)}{\partial^2 \xi} \approx \left(\frac{\partial^2 \psi(\xi, \eta)}{\partial^2 \xi} \right)_{\xi=0, \eta=1} = -2, \\ \psi(\xi, \eta) \approx 2 - \eta - \xi^2$$

и выполняя интегрирование, получаем окончательное выражение для асимптотики интеграла (22) при малых скоростях:

$$I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) = \frac{2\sqrt{\pi} e^{QV}}{Q^{3/2}}, \quad V \rightarrow 0. \quad (25)$$

Более точный анализ показывает, что величина интеграла (22) в области малых скоростей довольно плохо приближается к асимптотике (25): в области $V < V_T$ существует большой интервал скоростей, в котором различие между (22) и (25) оказывается весьма значительным. Данное обстоятельство обусловлено существованием в пространстве переменных (ξ, η, v) протяженных областей, в которых нельзя пользоваться верхней из асимптотик (23). В связи с этим величина интеграла (22) была получена численными методами с использованием компьютера для наборов значений параметров V и Q из интервалов $0,1V_T \leq V \leq V_T$ и $10 \leq Q \leq 25$. Результаты вы-

числений позволили получить для интеграла (22) простую аналитическую аппроксимацию, которая в указанных областях значений параметров имеет относительную точность порядка 0,1:

$$I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) \approx \frac{Q^{3/5}}{8} \left(\frac{V}{V_T} \right)^{2/25}, \quad 0,1V_T \leq V \leq V_T. \quad (26)$$

Таким образом, линейная зависимость (25) интеграла $I(Q, V_T/V)$ от скорости дислокации и в области промежуточных скоростей $V \leq V_T$ переходит в очень слабую зависимость (26). Сравнивая (25) и (26), легко получить оценку для характерной скорости V_{T0} , разделяющей две указанные выше области:

$$V_{T0} \approx \frac{V_T Q^2}{30} e^{-Q}. \quad (27)$$

3.2. Область больших скоростей

Проанализируем сначала один из внутренних интегралов в (22):

$$I_2(\xi, \eta) = \int_0^{\infty} dv \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi + v, \eta) \right] \times \\ \times \left\{ \exp \left[-\frac{V_T}{V} I^{(+)}(\xi, \eta, v) \right] + \exp \left[-\frac{V_T}{V} I^{(-)}(\xi, \eta, v) \right] \right\} \equiv \\ \equiv \int_0^{\infty} dv \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi + v, \eta) \right] \left\{ \exp \left[-\frac{V_T}{V} (I_1^{(+)} - v) \right] + \right. \\ \left. + \exp \left[-\frac{V_T}{V} (I_1^{(-)} - v) \right] \right\} \exp \left(-\frac{V_T}{V} v \right).$$

Поскольку производная

$$\frac{\partial}{\partial v} (I_1^{\pm} - v) = e^{\pm \psi(\xi+v, \eta)} - 1$$

не обращается в нуль при конечных значениях v и имеют место асимптотики (23), справедливо неравенство $|I_1^{\pm} - v| \leq \pi$. Следовательно, при $V \gg \pi V_T$ имеем

$$I_2(\xi, \eta) = \int_0^{\infty} dv \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi + v, \eta) \right] \exp \left(-\frac{V_T}{V} v \right). \quad (28)$$

Подстановка (28) в интеграл (22) и несложные преобразования приводят его к виду

$$\begin{aligned}
 I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) &= \frac{2}{Q} \int_{1/Q}^{\infty} d\eta \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi, \eta) \right] \times \\
 &\times \int_0^{\infty} dv \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi + v, \eta) \right] \exp\left(-\frac{V_T}{V} v\right) = \\
 &= -\frac{2V_T}{QV} \int_0^{\infty} dv \exp\left(-\frac{V_T}{QV} v\right) \times \\
 &\times \int_{1/Q}^{\infty} d\eta \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi(\xi, \eta) \frac{\partial}{\partial \xi} \psi(\xi + v, \eta).
 \end{aligned}$$

Интеграл по переменным (η, ξ) совпадает с вычисленным ранее интегралом (15), если полагать $r_0 = 1$, $z = -v$. Следовательно, в рассматриваемом предельном случае

$$\begin{aligned}
 I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) &\approx \frac{\pi V_T}{QV} \int_0^{\infty} dv \frac{v \exp\left(-\frac{V_T}{QV} v\right)}{v^2 + 4} = \\
 &= -\frac{\pi V_T}{QV} \left[\text{ci}\left(\frac{2V_T}{QV}\right) \cos\left(\frac{2V_T}{QV}\right) + \text{si}\left(\frac{2V_T}{QV}\right) \sin\left(\frac{2V_T}{QV}\right) \right],
 \end{aligned} \quad (29)$$

где $\text{si}(x)$ и $\text{ci}(x)$ — соответственно интегральный синус и косинус. В рассматриваемом случае $V \gg \pi V_T$ и $Q \gg 1$ аргументы функций в формуле (29) имеют малую величину, что дает возможность записать для интеграла $I(Q, V_T/V)$ асимптотическое выражение

$$I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) \approx \frac{\pi V_T}{QV} \ln\left(\frac{QV}{2V_T}\right), \quad V \gg \pi V_T. \quad (30)$$

Выражение (30) является медленно убывающей функцией скорости, которая продолжает зависимость (26). Формулы (25), (26) и (30) показывают, что в области скоростей $V \sim V_T$ функция $I(Q, V_T/V)$ имеет широкий пик с почти плоской вершиной (26). Высота этого пика слабо зависит от температуры:

$$\max_{(V)} I\left(Q, \frac{V_T}{V}\right) \approx \frac{Q^{3/5}}{8} = \frac{1}{8} \left(\frac{v_p \varepsilon_0}{kT} \right)^{3/5} \quad (31)$$

Для представляющих практический интерес значений $Q \sim 10-20$ величина $\max I \sim 1-0,5$. Вместе с тем положение пика на оси скоростей V_T и его характерная ширина $V_T - V_{T0}$ экспоненциально чувствительны к изменению температуры.

3.3. Температурно-скоростная зависимость силы динамического торможения

Выполненный выше анализ показывает, что сила динамического торможения дислокации, обусловленная ориентационно-дислокационным взаимодействием и процессами ориентационной релаксации, имеет весьма сложную зависимость от скорости дислокации V и температуры кристалла T . Эта зависимость в нескольких температурно-скоростных областях получена в виде асимптотических выражений. Прежде чем переходить к обсуждению полученных асимптотик, полезно сравнить силу динамического торможения F_D со стартовой силой F_s , вычисленной во втором разделе. Используя формулы (9), (15) и (21), получаем

$$F_D(T, V) = \frac{4}{\pi} F_s(T) I\left[Q(T), \frac{V_T}{V}\right]. \quad (32)$$

Выше было показано, что $\max I \approx 1$, поэтому характерный масштаб силы ориентационного торможения дислокаций задается стартовой силой $F_s(T)$. Согласно (20), эта сила в температурном интервале (T_g, T_c) медленно возрастает с понижением температуры, достигая максимального значения в области температуры ориентационного стеклования.

На рис. 1 схематически показана зависимость динамической компоненты силы торможения от скорости дислокации V . Эта зависимость немонотонна: небольшой линейный участок при малых скоростях $V \ll V_{T0}$ сменяется широким максимумом в области скоростей $V \sim V_T$ и медленным убыванием в области больших скоростей $V \gg V_T$. При изменении температуры качественный характер зависимости силы $F_D(T, V)$ от скорости сохраняется, но происходят значительные количественные изменения, так как характерные скорости V_T, V_{T0} и наклон линейного участка при малых скоростях экспоненциально зависят от температуры:

$$V_T = \frac{r_0}{\tau_0 \bar{n}_h} \left(\frac{v_p \varepsilon_0}{kT} \right) \exp\left(-\frac{U_p}{kT}\right),$$

$$V_{T0} = \frac{r_0}{3\tau_0 \bar{n}_h} \left(\frac{v_p \varepsilon_0}{kT} \right)^3 \exp \left(- \frac{U_p + v_p \varepsilon_0}{kT} \right). \quad (33)$$

Отметим, что вывод о немонотонной зависимости силы $F_D(T, V)$ от скорости V получен ранее при анализе динамического взаимодействия дислокации с ориентационными состояниями молекул в приближении линейного отклика [6]. Это приближение дает качественно правильную оценку скорости V_T и характера скоростной зависимости силы торможения при $V \gg V_T$. Учет нелинейных эффектов в окрестности ядра дислокации приводит к сильному уширению пика на скоростной зависимости $F_D(T, V)$ со стороны низких скоростей и более сильной температурной чувствительности наклона линейного участка в области малых скоростей.

Заключение

Проанализировано квазистатическое и динамическое взаимодействия краевой дислокации с пентагонными и гексагонными конфигурациями молекул в низкотемпературной фазе фуллерита C_{60} .

Описано неоднородное распределение гексагонных конфигураций, обладающих избыточной энергией, которое возникает вокруг линии неподвижной дислокации при $T_g < T < T_c$, где $T_c = 260$ К — температура фазового перехода между ПК и ГЦК структурами, $T_g \approx 90$ К — температура ориентационного стеклования. Вычислена стартовая сила $F_s(T)$, позволяющая вырвать дислокацию из образованной ею атмосферы h -конфигураций.

Описан релаксационный процесс переходов между p - и h -конфигурациями молекул, возникающий в упругом поле движущейся с постоянной скоростью V дислокации. Вычислена динамическая компонента силы торможения дислокации $F_D(T, V)$, обусловленная ориентационной релаксацией.

Детально проанализированы температурная зависимость стартовой силы $F_s(T)$ и температурно-скоростная зависимость силы динамического торможения $F_D(T, V)$. Характерной особенностью динамической компоненты силы трения является наличие на ее зависимости от скорости V широкого пика с почти плоской вершиной, положение которого на оси скоростей экспоненциально зависит от температуры.

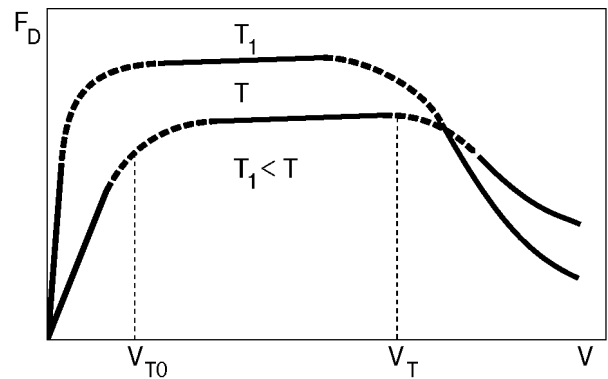


Рис. 1. Схематическое изображение зависимости динамической компоненты силы торможения $F_D(T, V)$ от скорости дислокации V при различных температурах T . Температурные зависимости характерных значений скорости V_T и V_{T0} описываются формулами (33). Сплошными линиями показаны участки зависимости $F_D(T, V)$, для которых получены аналитические аппроксимации (25), (26) и (30).

1. В. И. Орлов, В. И. Никитенко, Р. К. Николаев, И. Н. Кременская, Ю. А. Осипьян, *Письма в ЖЭТФ* **59**, 667 (1994).
2. M. Tachibana, M. Michiyama, K. Kikuchi, Y. Achiba, and K. Kojima, *Phys. Rev.* **B49**, 14945 (1994).
3. M. Tachibana, H. Sakuma, M. Michiyama, and K. Kojima, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2618 (1995).
4. Л. С. Фоменко, В. Д. Нацик, С. В. Лубенец, В. Г. Лирцман, Н. А. Аксенова, А. П. Исакина, А. И. Прохвятилов, М. А. Стржемечный, Р. С. Руофф, *ФНТ* **21**, 465 (1995).
5. С. В. Лубенец, В. Д. Нацик, Л. С. Фоменко, А. П. Исакина, А. И. Прохвятилов, М. А. Стржемечный, Н. А. Аксенова, Р. С. Руофф, *ФНТ* **23**, 338 (1997).
6. В. Д. Нацик, С. В. Лубенец, Л. С. Фоменко, *ФНТ* **22**, 337 (1996); *Phys. Status Solidi A* **157**, 303 (1996).
7. J. Fridel, *Dislocations*, Pergamon Press (1964); Ж. Фридель, *Дислокации*, Мир, Москва (1967).
8. J. P. Hirth and J. Lote, *Theory of Dislocations*, Pergamon Press (1964); Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
9. А. М. Косевич, В. Д. Нацик, *Континуальная и динамическая теория дислокаций*. Гл. 14 в кн.: *Физическое материаловедение в СССР: история, современное состояние, перспективы развития*, Наукова думка, Киев (1986).
10. А. М. Косевич, В. Д. Нацик, *ФТТ* **8**, 1250 (1966).
11. В. Д. Нацик, А. В. Подольский, *ФНТ* **24**, 689 (1998).
12. Н. П. Кобелев, Р. К. Николаев, Я. М. Соيفер, С. С. Хасанов, *ФТТ* **40**, 173 (1998).
13. В. И. Смирнов, *Курс высшей математики*, т. 2, ГИТТЛ, Москва (1950).

Dislocation drag in the low-temperature phase
of fullerite C_{60} caused by orientational
relaxation of the molecules

V. D. Natsik and A. V. Podolskiy

The interaction between an edge dislocation and the pentagonal (p) and hexagonal (h) orientational states of the molecules in the low-temperature (sc) phase of fullerite C_{60} is discussed. The temperature range $T_g < T < T_c$ ($T_c = 260$ K is the phase transition temperature, $T_g = 90$ K is the orientational glass formation temperature) is considered. An

inhomogeneous distribution of the h configurations formed around the motionless dislocation line is described. The starting force $F_s(T)$ capable of pulling out the dislocation from the cloud of the h configurations produced by this dislocation is calculated. The dynamic drag force $F_D(T, V)$ due to thermally activated transitions between p and h configurations in the elastic field of the dislocation moving at a constant velocity V is calculated and analysed.