Физика и техника высоких давлений 2004, том 14, № 3

PACS: 61.72.Ji, 61.72.Lk

В.В. Малашенко

ВЛИЯНИЕ РЕАЛЬНЫХ РАЗМЕРОВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ДИНАМИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

Донецкий национальный технический университет
ул. Артема, 58, г. Донецк, 83000, Украина

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

Статья поступила в редакцию 5 июля 2004 года

Исследовано влияние реальных размеров точечных дефектов на характер торможения краевых и винтовых дислокаций как в немагнитных кристаллах, так и в кристаллах, обладающих ферромагнитным упорядочением. Указаны области скоростей, в которых пренебрежение конечными размерами дефектов недопустимо.

Реальные кристаллы обычно содержат большое количество дефектов кристаллической структуры, как линейных (дислокации), так и точечных (вакансии, примеси, междоузельные атомы), наличие которых оказывает существенное влияние на свойства твердых тел [1,2]. Так, взаимодействие дислокаций с точечными дефектами является одним из важных факторов, определяющих особенности пластической деформации кристалла. Огромное количество задач в этой области решается методами континуальной теории, в рамках которой мы пренебрегаем как дискретной структурой реальных кристаллов, так и конечными размерами исследуемых дефектов, в частности дислокационных ядер и примесей. Однако подобное пренебрежение не всегда допустимо и может привести к грубым физическим ошибкам, поэтому в каждой конкретной задаче требует серьезного обоснования. В работе [2] было показано, что при исследовании фононного ветра, который является одним из основных механизмов торможения дислокации при комнатных температурах, учет конечности размеров дислокационного ядра не только снижает на порядок величину константы демпфирования, но и приводит к существенному изменению ее температурной зависимости, что позволило устранить имевшееся расхождение между теорией и экспериментом. Авторами [3] оценен вклад дислокационных ядер в рассеяние рентгеновских лучей кристаллами с дислокациями. И хотя основной вклад в экспериментально определенную интенсивность рассеяния рентгеновских лучей вносят области, удаленные от дислокаций, однако в деформационных процессах при упрочнении существенную роль играют искаженные области кристалла, расположенные вблизи дислокационных линий. Эти области вносят основной вклад в силы контактного взаимодействия дислокаций как между собой, так и с точечными дефектами [1,4–6]. Поэтому исследование роли реальных размеров дефектов в подобных процессах представляет собой важную и пока что недостаточно изученную задачу теории пластичности.

Целью настоящей работы является учет влияния конечных размеров точечных дефектов на их динамическое взаимодействие с краевыми и винтовыми дислокациями.

Действие точечного дефекта на окружающую его сплошную среду в рамках континуальной теории упругости может быть описано плотностью сил следующего вида (дефект помещен в начале координат) [7]:

$$f(\mathbf{r}) = -\mu R^3 \varepsilon \nabla \delta(\mathbf{r}) . \tag{1}$$

Здесь μ – модуль сдвига; R – величина порядка атомного радиуса дефекта; ε – параметр несоответствия, характеризующий мощность дефекта; $\delta(\mathbf{r})$ – δ-функция Дирака. По классификации упругих полей в изотропной среде дефект, описываемый плотностью (1), является центром дилатации. Создаваемые им напряжения определяются следующим выражением:

$$\sigma_{ik} = \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \frac{1}{r}, \tag{2}$$

т.е. убывают с ростом расстояния как r^{-3}. В формулах (1), (2) игнорируются конечные размеры дефекта, что приводит к неограниченному росту напряжений в области малых расстояний и расходимости возникающих в задачах интегралов, которая обычно устраняется путем обрезания нижнего предела интеграла величиной порядка R в координатном пространстве или верхнего предела величиной порядка R^{-1} в пространстве импульсов [8]. Как будет показано ниже, такое обрезание допустимо не всегда и при определенных условиях приводит к неверным физическим результатам.

Рассмотрим задачу о скольжении бесконечной краевой дислокации под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в поле точечных дефектов, случайным образом распределенных в объеме кристалла. Линия дислокации параллельна оси OZ, ее вектор Бюргерса параллелен оси OX, в положительном направлении которой дислокация движется с постоянной скоростью v. Взаимодействие дислокации с точечными дефектами приводит к возбуждению дислокационных колебаний в плоскости XOZ.

Уравнение движения дислокации имеет вид

$$m\left\{\frac{\partial X(z,t)}{\partial t^2} + \delta \frac{\partial X(z,t)}{\partial t} - c^2 \frac{\partial^2 X(z,t)}{\partial z^2}\right\} = b\left[\sigma_0 + \sigma_{xy}^{(d)}(vt + w; z)\right]. \tag{3}$$

Здесь m – масса единицы длины дислокации; $X(z,t) = vt + w(z,t)$, где $w(z,t)$ – случайная величина, среднее значение которой по ансамблю дефектов и расположению элементов дислокации равно нулю; $\sigma_{xy}^{(d)}$ – компонента тензора напряжений, создаваемых дефектами на линии дислокации, $\sigma_{xy}^{(d)} = \sum_{i=1}^{N} \sigma_{xy,i}^{(d)}$, N – число дефектов в кристалле. Производя расчеты, аналогичные выполненным ранее в работе [4], получаем выражение для силы торможения краевой дислокации точечными дефектами в виде

$$F = \frac{nb^2}{4\pi^2 mcv} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_y \int_{\Delta/v}^{\infty} \mathrm{d}p_x \frac{p_x \left|\sigma_{xy}(p_x, p_y, 0)\right|^2}{\sqrt{p_x^2 - (\Delta/v)^2}} . \tag{4}$$

Здесь Δ – активация в спектре дислокационных колебаний, которая возникает в области коллективного взаимодействия дефектов с дислокацией и определяется из уравнения

$$\Delta^2 = \frac{nb^2}{8\pi^3 m^2} \iiint \mathrm{d}^3 p \frac{p_x^2 \left|\sigma_{xy}(p)\right|^2}{\Delta^2 + c^2 p_z^2 - p_x^2 v^2} . \tag{5}$$

Интегрирование выполняется по всему импульсному пространству от $-\infty$ до ∞. В области независимых столкновений активация не возникает, поэтому выражение (4) можно преобразовать к виду

$$F = \frac{nb^2}{4\pi^2 mcv} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_y \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}p_x \left|\sigma_{xy}(p_x, p_y, 0)\right|^2 . \tag{6}$$

Фурье-образ тензора напряжений центра дилатации (2) описывается следующим выражением

$$\sigma_{xy}(\mathbf{p}) = 4\pi\mu R^3 \varepsilon \frac{p_x p_y}{p^2} . \tag{7}$$

Полученный несобственный интеграл (6) является расходящимся. Но поскольку стоящее под интегралом выражение не зависит ни от скорости скольжения дислокации, ни от концентрации дефектов, в данном случае обрезание пределов интегрирования величиной порядка R^{-1} не изменит качественную зависимость силы торможения от перечисленных выше величин. Ситуация изменяется коренным образом в области коллективного взаимодействия, т.е. при скоростях $v < R\Delta$. Здесь подобное обрезание недопустимо, так как в этом случае нижний предел $\Delta/v > R^{-1}$, под корнем возникает отрицательная величина и интеграл становится мнимым. Чтобы правильно вычислить этот интеграл, необходимо устранить расходимость, связанную с пренебрежением конечными размерами точечных дефектов, т.е. ввести плавное обрезание создаваемых дефектом напряжений на расстояниях порядка его радиуса:

$$\sigma_{ik} = \mu R^3 \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \frac{1 - \mathrm{e}^{-r/R}}{r} . \tag{8}$$

Фурье-образ этого тензора имеет вид

$$\sigma_{xy}(\mathbf{p}) = 4\pi\mu R^3 \varepsilon \frac{p_x p_y}{p^2} \frac{R^{-2}}{p^2 + R^{-2}} . \tag{9}$$

Вычисленная таким образом сила торможения в области коллективного взаимодействия оказывается линейной функцией скорости, что согласуется как с экспериментальными данными, так и с выводами феноменологической теории Косевича и Нацика [9]:

$$F = \frac{\pi}{3} \mu b \frac{v}{c} \sqrt[3]{n R^3 \varepsilon^2} . \tag{10}$$

В случае винтовой дислокации взаимодействие с дефектами определяется компонентой $\sigma_{zy}(\mathbf{p})$. Симметрия подынтегральной функции в этом случае будет иной, что приводит к изменению зависимости силы торможения от концентрации и скорости дислокационного скольжения. Однако и в этом случае в области независимых столкновений пренебрежение конечными размерами точечных дефектов не влияет на характер торможения:

$$F = \frac{n b^2 v}{4\pi^2 m c^3} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_y \int\limits_{0}^{\infty} \mathrm{d}p_x \left| \sigma_{xy}(p_x, p_y, 0) \right|^2 . \tag{11}$$

Здесь учтено, что после интегрирования по переменной p_z получаем $\sigma_{zy}(\mathbf{p}) =$ $= \frac{v^2}{c^2} \sigma_{xy}(p_x, p_y, 0)$, так как $p_z = \frac{v}{c} p_x$.

В области коллективного взаимодействия, как и в случае краевой дислокации, пренебрежение конечными размерами дефектов приводит к тому, что полученный интеграл утрачивает смысл. И лишь вводя плавное обрезание (8), можно получить выражение для силы торможения в этой области (см. [5]):

$$F = \frac{\pi}{3} \mu b \frac{v^3}{c^3} . \tag{12}$$

Воспользовавшись выражениями для активации в спектре краевой и винтовой дислокаций (см. [4,5]), окончательно получим, что учет конечных размеров точечных дефектов необходим при скоростях скольжения $v < \sqrt{n R^3} c \varepsilon$ в случае винтовой дислокации и $v < \sqrt[3]{n \varepsilon^2} c R$ – в случае краевой.

Рассмотрим задачу о динамическом торможении с учетом дислокационного взаимодействия на примере двух краевых дислокаций, равномерно движущихся в параллельных плоскостях скольжения, расстояние между которыми обозначим a. Для этого в правую часть уравнения движения (3) необходимо добавить силу взаимодействия дислокаций (см. [10]). Повторяя предыдущие рассуждения, приходим к выводу, что и в этом случае в области независимых столкновений сила торможения описывается формулой (6), т.е. обрезание верхнего предела интегрирования влияет лишь на величину численного коэффициента, а не на характер торможения. Но в области коллективных эффектов, в которой взаимодействие дислокаций оказывает доминирующее влияние на формирование спектра дислокационных колебаний, силу торможения можно получить, лишь вводя плавное обрезание тензора напряжений по формуле [8]. Воспользовавшись результатами работы [10], получим выражение для этой силы в виде

$$F = \ln\left(\frac{L}{r_0}\right)\frac{\pi n b^5 \mu^2 \varepsilon^2 a^2}{3 m c^3 R} v . \tag{13}$$

Здесь L – величина порядка размеров кристалла, r_0 – длина дислокации. Область скоростей, в которой необходимо учитывать реальные размеры дефектов, в этом случае задается неравенством

$$v < c\frac{R}{a}\sqrt{\frac{2}{\ln(L/r_0)}} . \tag{14}$$

Особый интерес представляет движение дислокации в магнитоупорядоченном кристалле, которое мы рассмотрим на примере ферромагнетика с анизотропией типа «легкая ось» [11]. Здесь формула (6) также справедлива для независимых столкновений, а в области коллективного взаимодействия пренебрежение конечными размерами дефектов недопустимо. В случае, когда главный вклад в формирование спектральной щели вносит магнитоупругое взаимодействие, получим следующее выражение для силы торможения

$$F = \frac{16\pi^2 n R^3 \mu^2 \varepsilon^2 c_s^2}{3 B^2 b c \omega_M \ln(\theta_C/\varepsilon_0)} v . \tag{15}$$

Здесь B – константа магнитоупругого взаимодействия; $\omega_M = gM_0$, g – гидромагнитное отношение, M_0 – намагниченность; θ_C – температура Кюри. Параметры ε_0 и c_s определяют спектр магнонов в ферромагнетике с анизотропией типа легкая ось, когда магнитное поле направлено вдоль оси анизотропии: $\varepsilon_k = \varepsilon_0 + c_s^2 k^2$ (k – волновой вектор). В этом случае нельзя пренебрегать конечными размерами дефектов при скоростях

$$v < \frac{RBb}{4c_s}\sqrt{\frac{\omega_M}{\pi m}\ln\frac{\theta_C}{\varepsilon_0}} . \tag{16}$$

Таким образом, коллективное взаимодействие дефектов с дислокацией в динамической области не может быть описано без учета конечных размеров дефектов, т.е. в данном случае характер торможения определяется именно их контактным взаимодействием с дислокациями.

Полученные результаты могут использоваться как при анализе взаимодействия одиночных дислокаций с дефектами, так и при изучении динамики дислокационных скоплений.

1. *Дж. Хирт, И. Лоте*, Теория дислокаций, Атомиздат, Москва (1972).
2. *В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом*, УФН **1**, 3 (1975).
3. *А.И. Дехтяр*, ФТТ **43**, 818 (2001).
4. *В.В. Малашенко, В.Л. Соболев, Б.И. Худик*, ФТТ **29**, 1614 (1987).
5. *В.В. Малашенко*, ФТТ **39**, 493 (1997).
6. *В.В. Малашенко, Т.И. Малашенко*, ФТВД **9**, № 4, 30 (1999).
7. *А.М. Косевич*, Основы механики кристаллической решетки, Наука, Москва (1972).
8. *A. Ookawa, K. Jazu*, J. Phys. Soc. Jpn. **18,** 36 (1968).
9. *А.М. Косевич, В.Д. Нацик*, ЖЭТФ **51**, 1207 (1966).
10. *В.В. Малашенко, Т.И. Малашенко*, ФТВД **12**, № 2, 57 (2002).
11. *В.В. Малашенко*, ФТВД **13**, № 2, 108 (2003).

V.V. Malashenko

INFLUENCE OF REAL DIMENSIONS OF POINT DEFECTS ON DYNAMIC INTERACTION WITH DISLOCATIONS

Influence of real dimensions of point defects on character of edge and screw dislocation deceleration has been studied for nonmagnetic crystals and crystals possessing ferromagnetic ordering. The velocity ranges where final dimensions of defects could not be neglected are determined.