

PACS: 61.72.Ji, 61.72.Lk

В.В. Малашенко

СКОЛЬЖЕНИЕ ПАРЫ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ, СОДЕРЖАЩИХ ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ НА ПОВЕРХНОСТИ

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 9 марта 2004 года

Исследовано динамическое торможение пары краевых дислокаций, расположенных в плоскости, перпендикулярной их плоскостям скольжения, и движущихся параллельно поверхности кристалла, на которой случайным образом распределены точечные дефекты. Получена зависимость силы торможения дислокаций от концентрации дефектов, скорости дислокационного скольжения, расстояния между ними и удаленности от поверхности кристалла. Показано, что эти зависимости имеют немонотонный характер.

Скорость пластической деформации кристалла определяется, как известно, скоростью движения дислокаций, которая, в свою очередь, лимитируется взаимодействием дислокаций с элементарными возбуждениями кристалла (фононами, магнонами), другими дислокациями, электронами проводимости (в металлах), точечными дефектами (примесями, вакансиями, междоузельными атомами и т.д.). Исследованию влияния точечных дефектов, хаотически распределенных в объеме кристалла, на скорость скольжения дислокаций в динамической области был посвящен целый ряд работ [1–8]. Однако особый интерес представляет вопрос о торможении дислокаций точечными дефектами поверхности, поскольку, во-первых, все реальные кристаллы имеют конечные размеры, во-вторых, современные технологии позволяют наносить примеси на поверхность кристалла контролируемым образом, что дает возможность оказывать целенаправленное влияние на свойства тонких пленок. В работах [9,10] исследовалось движение одиночных дислокаций в поле поверхностных точечных дефектов. Однако в процессе скольжения дислокации взаимодействуют между собой, что приводит к перестройке спектра дислокационных колебаний и изменению характера торможения.

Целью настоящей работы является изучение динамического поведения пары краевых дислокаций с учетом их взаимодействия между собой, а также с точечными дефектами поверхности.

Рассмотрим две бесконечные краевые дислокации, движущиеся под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 параллельно поверхности кристалла, совпадающей с плоскостью XOZ , в поле точечных дефектов, хаотически распределенных по этой поверхности. Линии дислокаций параллельны оси OZ , их векторы Бюргера параллельны оси OX , в положительном направлении которой происходит скольжение дислокаций с постоянной скоростью v . Расстояние между плоскостями скольжения обозначим a , расстояние от поверхности кристалла до первой дислокации – y . Дислокации расположены в одной плоскости, перпендикулярной плоскостям их скольжения, и могут совершать малые колебания, возбуждение которых и является каналом диссипации кинетической энергии их поступательного движения.

В работе [8] было показано, что взаимодействие дислокаций между собой приводит к перестройке спектра дислокационных колебаний – в нем появляется щель, величина которой определяется силой дислокационного взаимодействия, т.е. зависит от расстояния между дислокациями и от упругих констант кристалла.

Положение дислокаций определяется функциями

$$X_1(y, z, t) = vt + w_1(y, z, t), \quad X_2(y + a; z, t) = vt + w_2(y + a; z, t),$$

где w_1, w_2 – случайные величины, среднее значение которых по ансамблю дефектов и расположению элементов дислокации равно нулю. Таким образом, $\langle X_1 \rangle = \langle X_2 \rangle = vt$, усреднение по ансамблю поверхностных дефектов выполняется с помощью стандартной процедуры:

$$\langle X \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{dz}{L} \int_S \prod_{i=1}^N X \frac{dr_i}{S^N},$$

где S – площадь поверхности кристалла, N – число точечных дефектов. Равенство $\langle X_1 \rangle = \langle X_2 \rangle$ может, однако, нарушаться в случае, когда вклад поверхностных дефектов в торможение дислокации будет доминирующим, так как дислокации удалены от поверхности кристалла на различное расстояние, а потому и сила их взаимодействия с этими дефектами будет различной.

Движение каждой дислокации описывается уравнением

$$m \left\{ \frac{\partial X_K^2(z, t)}{\partial t^2} + \delta \frac{\partial X_K(z, t)}{\partial t} - c^2 \frac{\partial^2 X_K(z, t)}{\partial z^2} \right\} = b \left[\sigma_0 + F_{\text{dis}} + \sigma_{xy}^{(d)}(vt + w_K; z) \right].$$

Здесь $\sigma_{xy}^{(d)}$ – компонента тензора напряжений, создаваемых дефектами на

линии соответствующей дислокации, $\sigma_{xy}^{(d)} = \sum_{i=1}^N \sigma_{xy,i}^{(d)}$; m – масса единицы

длины дислокации; N – число дефектов в кристалле; F_{dis} – сила взаимодействия дислокаций между собой; индекс $k = 1, 2$ – номер дислокации.

Компоненты тензора напряжений, создаваемых поверхностными дефектами, получим, используя результаты работы [10]:

$$\sigma_{xy}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \mu R_d^3 \chi_S \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \frac{z^2}{r^3}.$$

Здесь μ – модуль сдвига, χ_S – параметр несоответствия поверхностного дефекта, R_d – величина порядка радиуса дефекта.

Фурье-образ данной компоненты определяется выражением

$$\sigma_{xy}(q_x, q_z, y) = q_x f(q, y),$$

где

$$f(q, y) = \frac{2}{\pi} i \mu R_d^3 \chi_S \exp(-qy)(1 - qy).$$

Здесь $q = \sqrt{q_x^2 + q_z^2}$.

Сила торможения дислокации точечными дефектами в соответствии с результатами работы [3] вычисляется по формуле

$$F = \frac{2n_S b^2 \mu^2 \chi_S^2 R_d^6}{\pi^3 m c v z^3} \int d^3 q |q_x| |\sigma_{xy}(q)|^2 \delta\{q_x^2 v^2 - \varepsilon^2(q_z)\}.$$

Здесь $\varepsilon(q_z)$ – спектр дислокационных колебаний, n_S – поверхностная концентрация точечных дефектов, c – скорость распространения в кристалле поперечных звуковых волн.

Производя интегрирование по переменной q_z и пренебрегая членами порядка v^2/c^2 , выражение для силы торможения можно преобразовать к виду

$$F = \frac{n_S b^2}{2\pi m c v} \int_{\frac{\Delta}{v}}^{\infty} dq_x \frac{q_x^3 |f(q, y)|^2}{\sqrt{q_x^2 - \frac{\Delta^2}{v^2}}}.$$

Здесь Δ – щель в спектре дислокационных колебаний. Выражение для активации, возникающей в спектрах дислокаций благодаря их взаимодействию между собой, получим, воспользовавшись результатами работы [8]:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_d = \frac{c}{a} \sqrt{\frac{2}{\ln \frac{R_0}{r_0}}},$$

где R_0 – величина порядка размеров кристалла, r_0 – длина дислокации.

Вклад поверхностных дефектов в активацию дислокационного спектра определим с помощью результатов работы [10]:

$$\Delta_S = \frac{c}{y} n_{0S}^{1/2} \left(\frac{R_d}{y} \chi_S \right)^{2/3}.$$

Поскольку величины Δ_d и Δ_S входят в выражение для спектральной щели аддитивным образом и характеризуются различной зависимостью от пара-

метров кристалла, при различном соотношении этих величин зависимость силы торможения от концентрации дефектов, удаленности от поверхности кристалла, расстояния между дислокациями и т.д. также будет различной.

Оценим максимальное значение величин Δ_d и Δ_S . Для этого будем считать $y = 10b$, $R_d \approx b \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м, $c \approx 3 \cdot 10^3$ м/с, $\chi_S \approx 10^{-1}$, $n_{0S} \approx 10^{-2}$. При этих значениях получим $\Delta_S \approx 10^{10} \text{ с}^{-1}$. Для оценки максимального значения Δ_d примем $a \approx 10b$, выражение, входящее в формулу для Δ_d под знаком квадратного корня, будем считать по порядку величины равным единице. Тогда $\Delta_d \approx 10^{12} \text{ с}^{-1}$.

Полученные зависимости схематически представлены на рис. 1.

На графике 1,а изображена зависимость силы торможения от расстояния между дислокацией и поверхностью. В области расстояний $y < v/\Delta$ эта сила с ростом удаленности убывает степенным образом:

$$F = \frac{n_S b^2 \mu^2 \chi_S^2 R_d^6}{m c v y^3}.$$

В области $y > v/\Delta$ сила торможения убывает экспоненциально:

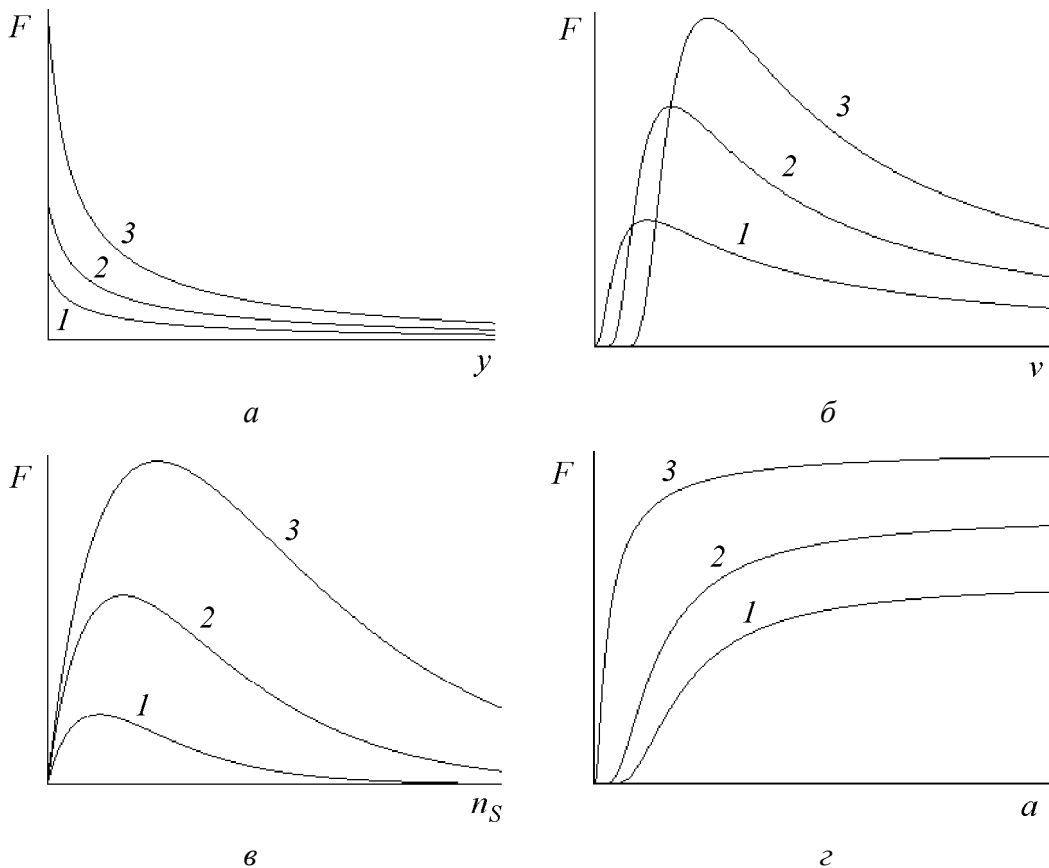


Рис. 1. Зависимость силы торможения дислокации от удаленности от поверхности кристалла (а), скорости дислокационного скольжения (б), концентрации дефектов (в) и расстояния между дислокациями (г)

$$F = \frac{n_S b^2 \mu^2 \chi_S^2 R_d^6 y^2 \Delta^5}{m c v^6} \exp(-2y\Delta/v).$$

Кривые 1, 2, 3 соответствуют различным значениям концентрации дефектов – с ростом концентрации сила торможения возрастает ($n_3 > n_2 > n_1$).

График 1,б описывает зависимость силы торможения от скорости дислокационного скольжения. Максимум кривой соответствует скорости $v_0 \approx R\Delta$. Это критическая скорость, определяющая изменение характера динамического взаимодействия поверхностных дефектов с дислокацией. При $v_0 < v$ оно имеет характер независимых столкновений и описывается зависимостью $F \sim v^{-1}$. При скоростях $v_0 > v$ взаимодействие приобретает коллективный характер, и тогда скоростная зависимость имеет вид $F \sim v^{-6} \exp(-2y\Delta/v)$. Сравнивая полученные формулы с результатами работ [5,10], приходим к выводу, что в области высоких скоростей скольжения взаимодействие дислокации и с поверхностными дефектами, и с дефектами, хаотически распределенными в объеме кристалла, приводит к тому, что сила торможения убывает обратно пропорционально дислокационной скорости. Однако в области коллективного взаимодействия возникают существенные различия: при наличии дефектов в объеме кристалла эта сила приобретает квазивязкий характер (т.е. линейно зависит от скорости), сила торможения поверхностными дефектами с ростом скорости растет экспоненциально. Кривые 1, 2, 3 отвечают различным расстояниям до поверхности кристалла ($y_1 > y_2 > y_3$, т.е. с ростом удаления от поверхности уменьшаются и значения критической скорости, и величина силы торможения).

Оценим величину критической скорости v_0 . Для случая $\Delta_d < \Delta_S$ получим следующее выражение:

$$v_0 = n_{0S}^{1/2} \left(\frac{R_d}{y} \chi_S \right)^{2/3} c.$$

Выполним численные оценки для значений $y = 10b$, $R_d \approx b \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м, $c \approx 3 \cdot 10^3$ м/с, $\chi_S \approx 10^{-1}$, $n_{0S} \approx 10^{-2}$. Получим $v_0 \sim 10^{-2} c \approx 30$ м/с.

Рассмотрим теперь противоположный случай: $\Delta_d > \Delta_S$, т.е. влияние дислокационного взаимодействия на формирование щели в спектре колебаний превосходит соответствующее влияние поверхностных дефектов. В этом случае выражение для критической скорости имеет вид

$$v_0 = c \frac{y}{a} \sqrt{\frac{2}{\ln \frac{R_0}{r_0}}}.$$

Поскольку стоящая под корнем величина меняется очень мало, скорость v_0 в этом случае фактически определяется величиной отношения y/a (напомним, что используемая модель имеет смысл при $v < c$).

Описанные выше особенности поведения критической скорости схематично изображены на рис. 2.

График, приведенный на рис. 1,в, иллюстрирует зависимость силы дислокационного торможения от концентрации точечных дефектов поверхности. В области низких концентраций дефекты взаимодействуют с дислокацией независимо, и увеличение их концентрации приводит к росту торможения. В области коллективного взаимодействия следует рассмотреть два случая. Если главный вклад в формирование щели вносят поверхностные дефекты, то с ростом концентрации растет и величина спектральной щели, что приводит к экспоненциальному спаданию силы торможения. Если же при формировании щели доминирующим является взаимодействие дислокаций между собой, то сила торможения остается линейной функцией концентрации во всей исследуемой области. Кривые 1, 2, 3 соответствуют различным значениям скорости скольжения ($v_3 > v_2 > v_1$, т.е. с повышением скорости растет и критическое значение концентрации, соответствующее максимуму кривой, и величина силы торможения).

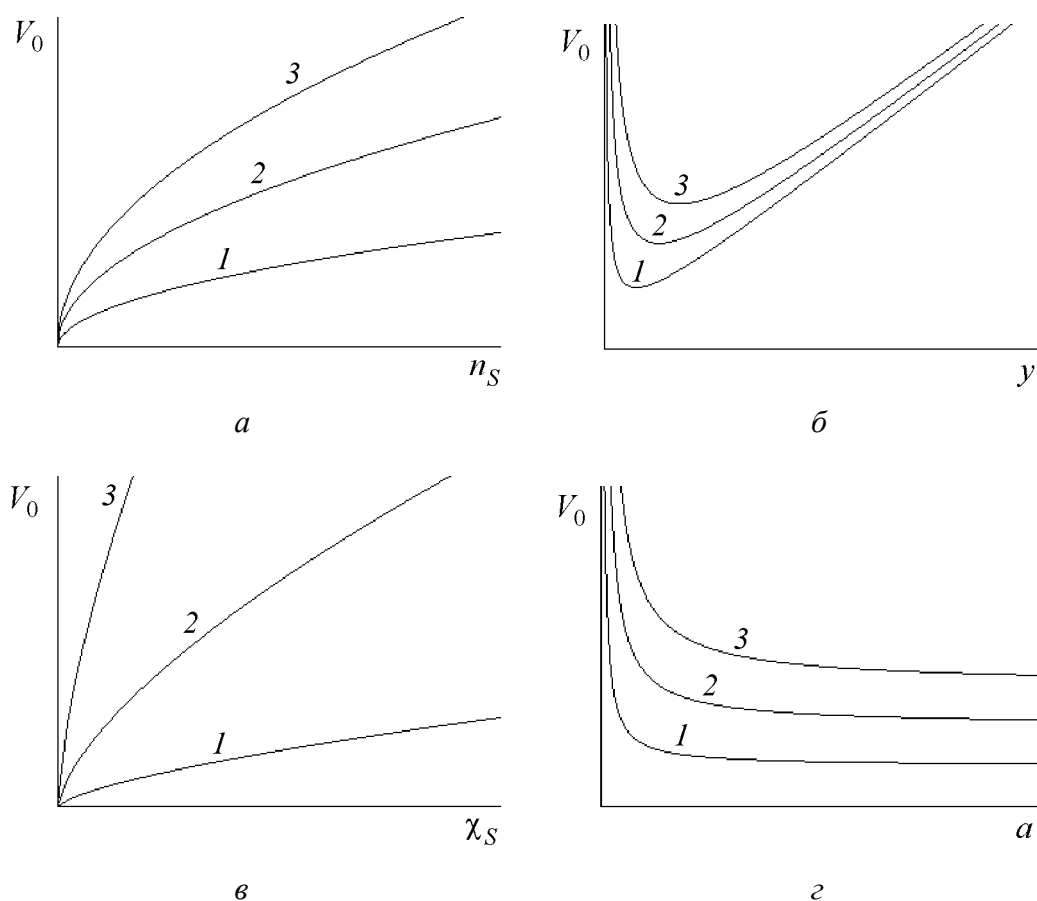


Рис. 2. Зависимость величины критической скорости от концентрации дефектов (а), удаленности дислокаций от поверхности кристалла (б), расстояния между ними (г) и величины параметра несоответствия (в)

График 1,2 описывает зависимость силы торможения от расстояния между дислокациями. При малых значениях этих расстояний дислокационное взаимодействие оказывается основным при формировании спектра колебаний, причем величина щели уменьшается с ростом a . При большой удаленности дислокаций друг от друга их взаимодействие ослабевает и перестает играть существенную роль в исследуемых процессах. Найдем критическое расстояние a_0 , выше которого дислокационное взаимодействие не оказывает заметного влияния на величину силы торможения:

$$a_0 = \sqrt{\frac{2}{n_{0S} \ln \frac{R_0}{r_0} \left(\frac{y}{\chi_S R_d} \right)^{2/3}} y}.$$

Оценим порядок величины критического расстояния. Для значений $y = 10b$, $R_d \approx b \approx 3 \cdot 10^{-10}$ м, $\chi_S \approx 10^{-1}$, $n_{0S} \approx 10^{-2}$ получим $a_0 \sim 10^3 b$.

Кривые 1, 2, 3 получены для различных значений концентрации дефектов ($n_3 > n_2 > n_1$, т.е. чем больше концентрация, тем больше сила торможения и тем меньше критическое расстояние).

Анализируя скоростную зависимость дислокационной силы торможения, приходим к выводу, что она не имеет линейных участков, т.е. мы не можем в данном случае вычислить константу демпфирования, поэтому для сравнения с другими механизмами диссипации кинетической энергии скользящей дислокации мы должны численно оценить величину силы торможения. Выполним такие оценки для случая, когда взаимодействие дислокаций между собой превосходит взаимодействие дислокации с поверхностными дефектами, т.е. $\Delta_d > \Delta_S$. Для значений $y \approx 10^{-2} a$, $v \approx 10^{-2} c \approx 30$ м/с, $n_{0S} \approx 10^{-2}$, $\chi_S \approx 10^{-1}$ получим $F \approx 10^{-3} - 10^{-4}$ Н/м. Отметим, что в случае доминирования данного механизма устойчивое стационарное движение дислокации может быть обеспечено лишь в области коллективного взаимодействия с дефектами, так как в области независимых столкновений сила торможения обратно пропорциональна скорости дислокационного скольжения. Следует также помнить, что этот механизм является температурно-независимым. Проведем сравнительный анализ вкладов различных механизмов торможения в константу демпфирования B , воспользовавшись результатами обзорной работы [2] (в скобках приведены значения силы торможения для скорости $v \approx 10^{-2} c \approx 30$ м/с). При температурах $T < T_e = 25$ К основным каналом рассеяния энергии движущейся дислокации является взаимодействие с электронами проводимости $B_e \sim 10^{-6}$ кг/(м·с) (соответственно сила торможения $F_e \sim 10^{-5}$ Н/м). При $T_e < T < T_m \approx 100$ К доминирующим становится магنونный механизм торможения (соответствующая ему константа демпфирования $B_m \sim 10^{-5} - 10^{-6}$ кг/(м·с) в указанной области температур, т.е. $F_m \sim 10^{-4}$ Н/м). При $T_m < T < \Theta_C \sim 1000$ К (Θ_C – температура Кюри) торможение дислокаций определяется в основном

фононными механизмами рассеяния: $B_f \sim 10^{-4} - 10^{-5} \text{ kg(m}\cdot\text{s)}$ (при этом $F_f \sim 10^{-3} - 10^{-4} \text{ N/m}$). Следовательно, мы можем сделать вывод, что исследуемый нами механизм диссипации для приведенных выше значений концентрации дефектов и скорости скольжения дислокации может быть доминирующим при температурах $T < T_m \approx 100 \text{ K}$.

Таким образом, в настоящей работе показано, что учет взаимодействия движущихся дислокаций существенно изменяет характер дислокационного торможения примесями и другими точечными дефектами, причем зависимость силы торможения от скорости скольжения, концентрации дефектов, расстояния между дислокациями имеет немонотонный характер, кривые соответствующих зависимостей имеют выраженные максимумы, что облегчает экспериментальную проверку полученных результатов. Контролируемое нанесение дефектов на поверхность кристалла позволяет выделить вклад исследуемого механизма диссипации на фоне других механизмов торможения.

Полученные результаты могут быть использованы при решении задач о движении межзеренных границ в кристаллах, поскольку эти границы представляют дислокационную стенку, в которой взаимодействие дислокаций является очень сильным, а также при исследовании свойств тонких пленок, в которых наличие свободной поверхности играет существенную роль.

1. Дж. Хирт, И. Лоте, Теория дислокаций, Атомиздат, Москва (1972).
2. В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом, УФН **1**, 3 (1975).
3. А. Ookawa, К. Jazu, J. Phys. Soc. Japan **18**, 36 (1968).
4. Т. Kaneda, J. Phys. Soc. Japan **28**, 1205 (1970).
5. В.В. Малащенко, В.Л. Соболев, Б.И. Худик, ФТТ **29**, 1614 (1987).
6. В.В. Малащенко, Т.И. Малащенко, ФТВД **9**, № 4, 30 (1999).
7. В.В. Малащенко, Т.И. Малащенко, ФТВД **11**, № 2, 121 (2001).
8. В.В. Малащенко, Т.И. Малащенко, ФТВД **12**, № 2, 57 (2002).
9. В.В. Малащенко, ФТВД **12**, № 3, 127 (2002).
10. V.V. Malashenko, V.L. Sobolev, B.I. Khudik, Phys. Status Solidi **B143**, 425 (1987).

V.V. Malashenko

SLIPPAGE OF A PAIR OF EDGE DISLOCATIONS IN CRYSTALS CONTAINING SURFACE POINT DEFECTS

Dynamic deceleration of a pair of edge dislocations located in plane perpendicular to their slip planes and moving in parallel to crystal surface with randomly distributed point defects has been investigated. Dependences of deceleration force on concentration of defects, dislocation-slip velocity, interdislocation distance and distance from crystal surface have been obtained. The dependences are shown to be of nonmonotonic character.

Fig. 1. Dependence of the force of dislocation deceleration on distance from crystal surface (a), dislocation-slip velocity (\bar{v}), concentration of defects (ϱ) and interdislocation distance (z)

Fig. 2. Dependence of critical-velocity value on concentration of defects (a), dislocation-to-crystal surface distance (\bar{v}), interdislocation distance (z), and value of misfit parameter (ϱ)