

Д.ф.-м.н. Малашенко В.В., Малашенко Т.И., Перетолчина Г.Б.,

Улицкая Н.Ю.

Донецкий физико-технический институт имени А.А. Галкина НАН Украины;

Донецкий национальный технический университет, Украина

**СПЕЦИФИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИЧЕСКОГО
СКОЛЬЖЕНИЯ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В НАНОРАЗМЕРНЫХ
МАТЕРИАЛАХ**

Свободные поверхности кристалла, а также границы раздела в поликристаллах способны оказывать существенное, а иногда и определяющее влияние на различные свойства кристаллов, в том числе механические, и в частности, на динамическое скольжение дислокаций [1]. Особенно возрастает роль поверхности и межзеренных границ в наноматериалах, исследование которых является одним из наиболее перспективных и бурно развивающихся направлений современной физики [2; 3]. При движении дислокаций в приповерхностных слоях кристалла возрастает роль так называемых сил изображения, действующих на дислокацию со стороны свободной поверхности или межкристаллитной границы. В большинстве работ по исследованию влияния сил изображения на поведение дислокаций, выполненных в последние годы, методами компьютерного моделирования решалась задача о выходе дислокации на поверхность либо анализировался процесс роста кристалла [4].

Поверхность, являясь структурным дефектом, может и сама содержать различные дефекты, например, точечные, и влиять не только на движение дислокаций, но и на их взаимодействие с точечными дефектами, содержащимися как на поверхности, так и в объеме кристалла.

Пусть бесконечная краевая дислокация движется под действием постоянного внешнего напряжения σ_0 в положительном направлении оси OX с постоянной скоростью v параллельно поверхности кристалла, совпадающей с плоскостью XOZ . Линия дислокации параллельна оси OZ , а ее вектор Бюргера параллелен оси OX . Точкам кристалла отвечают значения $y \leq 0$. Плоскость

скольжения дислокации совпадает с плоскостью $y = -L$, а положение дислокации определяется функцией

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

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

Уравнение движения дислокации имеет следующий вид

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

Здесь σ_{xy}^s – компонента тензора напряжений, создаваемых поверхностными точечными дефектами на линии дислокации,

σ_{xy}^i – силы изображения, действующие на дислокацию благодаря наличию свободной поверхности.

Силу динамического торможения дислокации поверхностными точечными дефектами вычислим во втором порядке теории возмущений

$$F_S = \frac{n_s b^2}{4\pi m} \int dq_x dq_z |q_x| \cdot |\sigma_{xy}(q_x, q_z, y)|^2 \delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z)) \quad (3)$$

Здесь n_s – поверхностная концентрация точечных дефектов,

$\delta(q_x^2 v^2 - \omega^2(q_z))$ – это δ -функция Дирака,

$\omega(q_z)$ – спектр дислокационных колебаний, который имеет вид

$$\omega^2 = c^2 q_z^2 + \Delta_S^2; \quad \Delta_S = \frac{b}{L} \sqrt{\frac{D}{2m}} \approx \frac{c}{L} \quad (4)$$

Выполним численные оценки. Возьмем типичные значения $c = 3 \cdot 10^3$ м/с, $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м. Тогда для $L \approx 10b$ получим $\Delta_S \approx 10^{12}$ с⁻¹, для $L \approx 100b$ оценки дают $\Delta_S \approx 10^{11}$ с⁻¹. Выполняя интегрирование, получим выражение для силы торможения дислокации поверхностными дефектами

$$F_S = \frac{n_s b^2 \mu^2 \varepsilon^2 R^6}{mc} \left(\frac{\Delta_S^9 L^3}{v^{11}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{2L\Delta_S}{v}\right) \quad (5)$$

Значение предэкспоненциального множителя не превышает силу электронного торможения, т.е. само по себе весьма мало, а экспонента делает эту величину пренебрежимо малой. Следовательно, можно говорить о блокировке механизма торможения дислокации, связанного с возбуждением дислокационных колебаний поверхностными примесями. Таким образом, свободная поверхность не создает силу, действующую на дислокацию в плоскости скольжения, но она препятствует возникновению дислокационных колебаний в этой плоскости.

Рассмотрим теперь случай, когда краевая дислокация движется параллельно поверхности кристалла, содержащего точечные дефекты, случайным образом распределенные в его объеме.

Динамическое взаимодействие распределенных в объеме кристалла дефектов с дислокацией в зависимости от скорости дислокационного скольжения может иметь как коллективный характер, так и характер независимых столкновений [5–9]. Точечные дефекты тоже оказывают влияние на дислокационный спектр: они создают щель в области коллективного взаимодействия с дислокацией, то есть в области, где дислокация за время взаимодействия с дефектом успевает “почувствовать” влияние многих других дефектов. Эта щель, согласно [9], описывается выражением

$$\Delta_d = \frac{c}{b} (n_0 v \varepsilon^2)^{1/3} = \frac{c}{l} ; \quad b (n_0 v \varepsilon^2)^{-1/3} = l \approx l_d \quad (6)$$

Здесь n_0 – безразмерная концентрация точечных дефектов, $n_0 = nR^3$,

l_d – среднее расстояние между дефектами в кристалле.

В области независимых столкновений щель в спектре дислокационных колебаний не возникает.

Таким образом, вид колебательного спектра определяется конкуренцией взаимодействия дислокации с поверхностью и с точечными дефектами. Указанные выше взаимодействия дают аддитивный вклад в формирование спектральной щели

$$\Delta^2 = \Delta_s^2 + \Delta_d^2 \quad (7)$$

В этом случае главный вклад в формирование щели вносят силы изображения. Граница этой области определяется неравенствами

$$(bc/v) \ll L; l \ll L. \quad (8)$$

Поскольку влияние поверхности является доминирующим в данной области, сила торможения зависит от расстояния до этой поверхности

$$F_d = \mu b n_{ov} \varepsilon^2 \frac{v}{c} \left(\frac{L}{b} \right)^2 \quad (9)$$

Чтобы оценить степень влияния поверхности на движение дислокаций, возьмем отношение сил торможения F_{d2} в приповерхностном слое, где влияние поверхности доминирует, и F_{d1} в слое, где оно не существенно

$$\frac{F_{d2}}{F_{d1}} = \left(\frac{L}{l} \right)^2 \quad (10)$$

Выполним численные оценки. Для значений $n_{ov} \approx 10^{-4}$, $\varepsilon \approx 10^{-1}$, $L \approx 10b$ получим $(F_{d2}/F_{d1}) \approx 10^{-2}$, то есть наличие поверхности приводит к уменьшению силы торможения на два порядка. Оценим толщину приповерхностного слоя, в пределах которого поверхность оказывает существенное влияние на динамическое взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Для типичных значений $c = 3 \cdot 10^3$ м/с, $b = 3 \cdot 10^{-10}$ м, $n_{ov} \approx 10^{-2} \div 10^{-6}$, $v \approx 10^{-2} \div 10^{-1} c$ получим, что толщина оцениваемого слоя может составлять от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров.

Список использованных источников:

1. Kodambaka S., S. V. Khare, W. Swich, K. Ohmori, I. Petrov, J. E. Greene. // Nature. – 2004. – Vol. 429. – P. 49–52.
2. Головин Ю. И. // ФТТ. – 2008. – Т. 50, № 12. – С. 2113–2142.
3. Малыгин Г. А. // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 6. – С. 961–982.
4. Liu X. H., F. M. Ross, K. W. Schwarz. // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 85, № 19. – P. 4088–4091.
5. Малашенко В. В. // Кристаллография. – 2009. – Т. 54, № 2. – С. 312–315.
6. Малашенко В. В. // ФТТ. – 2009. – Т. 51, № 4. – С. 703–705.
7. Малашенко В. В. // ЖТФ. – 2009. – Т. 79, № 4. – С. 146–149.
8. Malashenko V. V. // Modern Phys. Lett. B. – 2009. – Vol. 23, № 16. – P. 2041–2047.
9. Malashenko V. V. // Physica B: Phys. Cond. Mat. – 2009. – Vol. 404, № 21. – P. 3890–3893.