

- [8] Kebaocioglu R., Müller A. // Chem. Phys. Lett. 1971. V. 8. P. 59–62.
 [9] Treedaway M.J., Powel R.C. // J. Chem. Phys. 1974. V. 61. P. 4003–4011.
 [10] Grasser R., Pitt E., Scharmann A., Zimmerer G. // Phys. Stat. Sol. (b). 1975. V. 69. P. 359–368.
 [11] Bernhardt H.J. // Phys. Stat. Sol. (a). 1977. V. 40. P. 257.
 [12] Born G., Hofstaetter A., Scharmann A., Schwarz G. // J. Luminescence. 1970. V. 54. P. 641.
 [13] Kurik V.M. // Phys. Stat. Sol. (a). 1971. V. 8. P. 9–45.
 [14] Нагиев В.М., Эфендиев Ш.М., Дарвишов Н.Г., Мельник Н.Н. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 9. С. 2872–2874.

Бакинский государственный
 университет им.М.Э.Расулзаде

Поступило в Редакцию
 15 апреля 1994 г.

© Физика твердого тела, том 36, № 10, 1994
 Solid State Physics, vol. 36, N 10, 1994

УМЕНЬШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ ЖЕСТКОСТИ МАЛОУГЛОВЫХ ГРАНИЦ ВБЛИЗИ ТОЧЕК ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Д.А.Лисаченко

В ряде работ [1,2] была установлена неустойчивость конфигурации ряда простейших элементов дефектного ансамбля кристалла и выявлена возможность самопроизвольной перестройки дефектного ансамбля вследствие «одевания» дислокаций «шубами» новой фазы вблизи точек фазовых переходов. В частности, рассматривалась на полукачественном уровне возможность распада малоугловых границ на отдельные дислокации [2]. В настоящем сообщении приводятся результаты численного моделирования этого процесса.

Постановка задачи и описание модели были даны в [2], поэтому здесь мы лишь кратко их напомним. Малоугловая граница в кристалле моделируется стенкой краевых дислокаций. В случае стрикционной связи параметра порядка с упругой дилатацией при фазовом переходе первого рода форма зародышей новой фазы вдоль дислокаций будет повторять форму областей кристалла с соответствующими значениями локальной температуры фазового перехода, зависящей от локальной деформации. Уравнение межфазной границы вблизи невозмущенной малоугловой границы имеет вид

$$1 = k\rho(T) \sin(ky) / (\operatorname{ch}(kx) - \cos(ky)),$$

где

$$k = 2\pi/h, \quad \rho(T) = bf(T)/\varepsilon, \quad f(T) = q\varepsilon / (6\alpha(T - T_*)),$$

$\rho(T)$ — радиус шубы на изолированной дислокации, h — расстояние между дислокациями в малоугловых границах, $f(T)$ — параметр перенормировки линейной энергии дислокации при фазовом переходе, α — параметр в разложении Ландау, q — стрикционный модуль, ε — однородная дилатация фазового перехода, b — вектор Бюргерса.

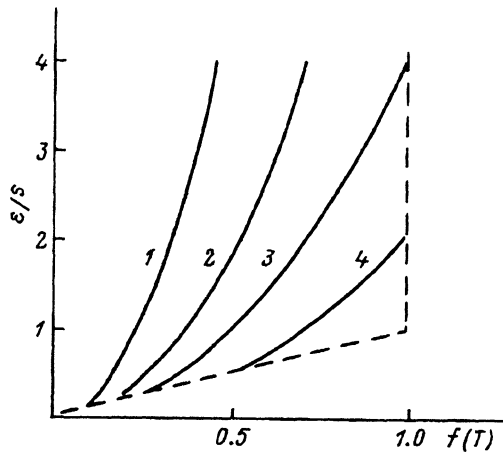


Рис. 1. Диаграмма устойчивости малоугловых границ.

Малоугловые границы неустойчивы в области между соответствующей кривой и прямой $\varepsilon/s = f(T)$. $N = 2$ (1), 5 (2), 10 (3), 20 (4).

Дисперсия эффективного упругого модуля κ изгибных колебаний малоугловых границ (без фазового перехода) вычислена в [3]: упругая энергия на единицу длины одной дислокации в изогнутой стенке есть

$$\Delta E = \pi \mu s^2 a^2 / (4(1 - \nu)N), \quad (1)$$

где a — амплитуда прогиба, μ — упругий модуль сдвига, ν — модуль Пуассона, $s = b/h$, N связано с длиной волны: $\lambda = Nh$.

Наш расчет позволил проследить зависимость κ от T и λ вблизи фазового перехода. Границей применимости модели являются значения $f(T) < 1$ и $0.1 < \rho(T)/h < 1$ (пунктирные прямые на рис. 1). Обобщая результаты расчета для различных N и T (N от 2 до 64, температура менялась в пределах, соответствующих $0.1 < \rho(T)/h < 1$), можно записать зависимость $\Delta\Phi$ изменения энергии «шубы» при прогибе (на единицу длины одной дислокации) от амплитуды a и длины волны λ в

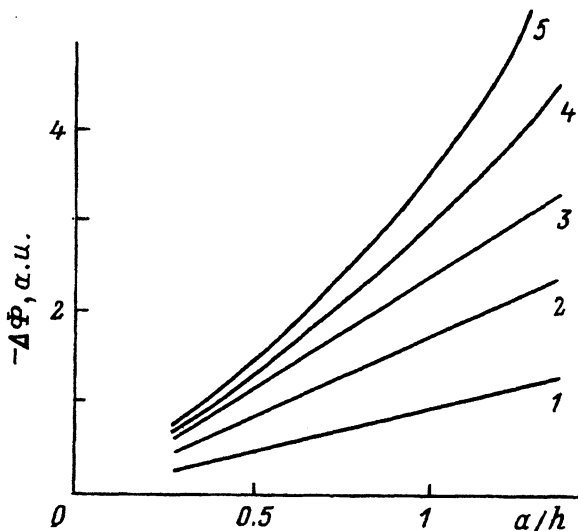


Рис. 2. Изменение энергии «шубы» в зависимости от амплитуды прогиба дислокационной стенки. $\lambda = 16h$. $\rho(T)h = 0.1$ (1), 0.2 (2), 0.3 (3), 0.4 (4), 0.5 (5).

$$\Delta\Phi = \frac{\mu b^2 \varepsilon}{\pi s} (a/\lambda)^2 \cdot 160(\rho(T)/h)^2. \quad (2)$$

Пример результатов расчета для $\lambda = 16h$ дан на рис. 2.

Одновременно рассчитывалось изменение чисто упругой энергии тех же конфигураций, которое хорошо совпало с аналитическим результатом [3].

Складывая (1) и (2), получаем полное изменение свободной энергии малоугловых границ, включающее в себя упругий и неупругий вклады. Полагая $\nu = 1/3$, получаем упругий модуль стенки $\kappa(T)$ в виде

$$\kappa(T) = \kappa_0 \left(1 - \frac{40 \varepsilon}{N s} \left(\frac{\rho(T)}{h} \right)^2 \right) = \kappa_0 \left(1 - \frac{40 s}{N \varepsilon} f(T)^2 \right). \quad (3)$$

Достижение значения $\kappa(T) = 0$ при некоторых T и N означает возникновение неустойчивости относительно спонтанного прогиба с длиной волны $\lambda = Nh$. Как видно из (3), стенка неустойчива относительно коротковолновых возмущений. Область неустойчивости находится ниже кривой с соответствующим N , но выше прямой $\varepsilon/s = f(T)$ на диаграмме рис. 1.

Для анализа прохождения ультразвуковой волны (поперечные колебания стенки) удобно записать $s = b/h$ и $N = c/\nu h$, где ν — частота в Hz, c — скорость звука. Положив для оценок $c = 3 \cdot 10^5$ см/с, $b = 3 \cdot 10^{-8}$ см, имеем $\kappa = \kappa_0(1 - f^2 10^{-6} \nu(\text{МГц})/\varepsilon)$. Отсюда видно, что заметное изменение модуля $\kappa(T)$ достигается при $\varepsilon = 10^{-3}$ на частотах порядка сотен МГц в кристаллах с малым значением скачка спонтанной деформации и на малоугловых границах с углом $s = b/h$ порядка ε .

Таким образом, в определенной области параметров, отражающих структуру кристалла и характеристики фазового перехода, меняется эффективный упругий модуль изгибных колебаний малоугловых границ в кристаллах и возможен самопроизвольный процесс, обратный полигонизации, — распад малоугловых границ на составляющие их дислокации.

Автор благодарен А.Л.Корженевскому за интерес к работе и Международному научному фонду за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] Корженевский А.Л. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1324–1331.
- [2] Корженевский А.Л., Лисаченко Д.А. // Изв. АН. Сер. физ. 1993. Т. 57. № 3. С. 11–14.
- [3] Косевич А.М., Поляков М.Л. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 10. С. 2941–2946.

Санкт-Петербургский государственный
электротехнический университет

Поступило в Редакцию
21 апреля 1994 г.