ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦЫ ОБРАЗЦА НА ПЛАВЛЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ РЕШЕТОК

В.Н.Подкорытов

Донецкий физико-технический институт академии наук Украины,
340114, Донецк, Украина

(Поступила в Редакцию 7 октября 1994 г.
В окончательной редакции 20 апреля 1995 г.)

Теоретически исследовалось плавление двумерных полубесконечных решеток в приближении среднего поля. На примере треугольной решетки вычислена температура плавления как функция расстояния от края. Вычислена энергия дислокации, взаимодействующей со своим изображением вблизи края образца, с учетом экранировки термоактивированными дислокационными диполями. Показано, что за счет взаимодействия дислокаций с краем образца температура плавления у границы раздела понижается и степенным образом повышается к центру образца.

Особенностью плавления двумерной решетки является возможность перехода в жидкость путем постепенного разрушения без одновременного сосуществования двух фаз. Плавление происходит посредством двух непрерывных переходов: вначале путем диссоциации дислокационных пар, а затем диссоциации дисклинационных пар. На эту особенность впервые указали Костерлиц и Таулес [1], а Гальперин, Нельсон и Янг [2–5] обобщили и развили теорию дислокационного плавления.

Возможность дислокационного плавления обусловлена уменьшением числа связей между узлами двумерной решетки по сравнению с трехмерной и вследствие этого понижением ее прочности в точке перехода. В настоящее время существует ряд экспериментов и численных моделей как подтверждающих дислокационное плавление [6–11], так и говорящих в пользу обычного перехода первого рода [12–18].

Неоднозначность сценария плавления объясняется влиянием дополнительных параметров, таких как плотность и энергия ядер дислокации и дисклинации. В [19] было показано, что вид перехода зависит от интенсивности ориентационных флуктуаций, энергии ядра дислокации и относительного размера ее ядра.

Однако известно, что энергия дислокации вблизи края образца понижается. Это обусловлено возникновением как «изображения» дислокации, так и дополнительных дальнодействующих напряжений [20]. В данной работе проводится анализ влияния конечности образца на плавление двумерной решетки.

1. Дислокационный гамильтониан

Запишем термодинамический потенциал двумерной решетки (гамильтониан) в виде [20]

$$F = \frac{1}{2}\int d^2r\left[2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2\right], \qquad (1)$$

где $u_{ij} = 1/2[\partial_i u_j(\mathbf{r}^{\not{C}}) + \partial_j u_i(\mathbf{r})]$ — тензор деформаций, по повторяющимся индексам производится суммирование, а μ, λ — коэффициенты Ламэ.

Уравнение для поля деформаций получается путем варьирования (1)

$$\partial_j \sigma_{ij} = 0, \qquad (2)$$

где σ_{ij} — тензор напряжений.

$$\sigma_{ij} = 2\mu u_{ij} + \lambda u_{ll}\delta_{ij}. \qquad (3)$$

Запишем тензор напряжений через функцию напряжений $\chi(\mathbf{r})$

$$\sigma_{ij} = \varepsilon_{ik}\varepsilon_{jl}\partial_k\partial_l\chi(\mathbf{r}), \qquad (4)$$

где ε_{ij} — антисимметричная матрица.

Дислокация в точке $\mathbf{r}$ характеризуется величиной приращения, которое получает контурный интеграл от поля смещений при обходе по замкнутому контуру, содержащему дислокацию [20],

$$\oint d\mathbf{u} = -a_0\mathbf{b}(\mathbf{r}), \qquad (5)$$

где $\mathbf{b}(\mathbf{r})$ — безразмерный вектор Бюргерса, a_0 — период решетки. Используя (2)–(4) и полагая, что в точках $\mathbf{r}_i$ имеется N дислокаций, получим уравнение для функции напряжений в случае полубесконечной решетки

$$\nabla^4\chi(\mathbf{r}) = -\frac{\mu(\mu+\lambda)}{2\mu+\lambda}a_0\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{mn}\partial_m b_n(\mathbf{r})\left[\delta(\mathbf{r}^{\not{C}} - \mathbf{r}_i) - \delta(\mathbf{r}^{\not{C}} + \mathbf{r}_i)\right], \qquad (6)$$

функция напряжений имеет вид

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{a_0}{4\pi}\frac{4\mu(\mu+\lambda)}{2\mu+\lambda}\sum_{i=1}^{N}\left\{\varepsilon_{mn}b_n(\mathbf{r})(\mathbf{r}^{\not{C}} - \mathbf{r}_i)_m\left[\ln\frac{|r-r_i|}{a} + C\right] - \right.$$

$$\left. -\varepsilon_{mn}b_n(\mathbf{r})(\mathbf{r}^{\not{C}} + \mathbf{r}_i)_m\left[\ln\frac{|r+r_i|}{a} + C\right] + e_{mnk}b_n(\mathbf{r})r_n^{\not{C}}r_k(\mathbf{r}^{\not{C}} + \mathbf{r}_i)^{-2}\right\}. \qquad (7)$$

Первый и второй члены в фигурных скобках соответствуют функции напряжений дислокации и ее изображения. Третий член представляет дополнительные напряжения, возникающие из условия обращения в нуль компонент тензора напряжений на границе раздела сред на линии $x = 0$. Второе слагаемое в фигурных скобках выражения (7) соответствует изображению дислокаций относительно края решетки.

Легко видеть, что выражение (1) для свободной энергии дислокаций, выраженное через функцию напряжений, примет вид

$$F = \int d^2r\chi(\mathbf{r})\nabla^4\chi(\mathbf{r}). \tag{8}$$

2. Плавление двумерных ограниченных решеток

Согласно теории дислокационного плавления, при повышении температуры в двумерной решетке, находящейся в твердой фазе, происходят термоактивация дислокационных пар с равным нулю вектором Бюргерса и их распад на свободные дислокации. Переход решетки в гексатическую фазу является результатом резкого роста числа свободных дислокаций при некоторой критической температуре (температуре плавления). Температура плавления характеризуется равенством энергии связи дислокационной пары ее тепловой энергии. При плавлении полубесконечной решетки суммарная энергия распаривания дислокаций будет зависеть от координат.

Рассмотрим для простоты треугольную решетку с единичными дислокациями

$$\mathbf{b}^n = \begin{pmatrix} \sin(n\pi/3) \\ \cos(n\pi/3) \end{pmatrix}, \tag{9}$$

где $n = 1, 2, \ldots 6$. Подставляя (7) в (8), получим энергию N дислокаций в полубесконечной решетке

$$U = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} a_0 b_m(\mathbf{r}_i)\partial_m\chi(\mathbf{r}_i). \tag{10}$$

Введем плотность дислокаций $n^i(\mathbf{r})$ с вектором Бюргерса $\mathbf{b}^i$. Полагая, что плотность мала, и используя (11), запишем соотношение Больцмана

$$n^i(\mathbf{r}) = n_0 \exp\{-a_0\beta b_m^i\chi(\mathbf{r})/2\}, \tag{11}$$

где $\beta = 1/k_BT$, k_B — постоянная Больцмана. Таким образом, по аналогии с уравнением Пуассона–Больцмана, описывающим экранировку заряда в плазме, запишем уравнение для функции напряжений

$$\nabla^4\chi(\mathbf{r}) = -\frac{4\mu(\mu+\lambda)}{2\mu+\lambda}\left\{a_0 b_m^i\partial_m\left[\delta(\mathbf{r}^{\not{\subset}} - \mathbf{r}_i) - \delta(\mathbf{r}^{\not{\subset}} + \mathbf{r}_i)\right] + a_0\sum_{i=1}^{6} b_m^i\partial_m n_i(\mathbf{r})\right\} \tag{12}$$

с граничными условиями

$$\sigma_{ik}\Big|_{x=0} = 0. \tag{13}$$

Разлагая (11) до линейных членов и подставляя в (12), решим результирующее уравнение методом Фурье. Фурье-образ функции напряжений примет вид

$$\chi(\mathbf{k}) = -\frac{2ia_0b_mk_m\exp(-k_yx')\sin(k_xx')}{(gn_0+k^2)k^2}, \tag{14}$$

где $g = 24\beta a_0^2K$, $K = 4\mu(m+\lambda)(2\mu+\lambda)^{-1}$.

Считая, что n_0 в выражении (11) в свою очередь подчиняется распределению Больцмана, получаем

$$n_0 = \frac{1}{s}\exp(-\beta\mu_d), \tag{15}$$

где $s = a_0\sqrt{3}/2$ — площадь элементарной ячейки решетки, μ_d — химический потенциал дислокации.

$$\mu_d = E_d + U. \tag{16}$$

Величина E_d включает нелинейные эффекты при образовании дислокации и соответствует энергии ядра, U соответствует упругой энергии отдельной дислокации. Поскольку упругая энергия дислокации расходится, введем радиус обрезания r_0 для функции напряжения $\chi(\mathbf{r})$, соответствующий размеру ее ядра. Восстанавливая по фурье-образу (14) функцию напряжений и подставляя ее в (10), получим

$$U(r_0) = K\frac{a_0^2}{8\pi}\left[K_0(\xi) + \alpha x^{-2}\right], \tag{17}$$

где $\xi = r_0/\sqrt{gn_0}$, $\alpha = 8\pi^2/gn_0$. Подставляя (17) в (15), получим перенормировку температуры плавления двумерной решетки

$$T = T_c(1 - \alpha x^{-2}). \tag{18}$$

Как видно из выражения (18), температура плавления становится функцией расстояния от края ($x = 0$).

Таким образом, температура дислокационного плавления полубесконечной двумерной решетки является функцией расстояния до ее края. В связи с этим вблизи края возникает зона, в которой уже существует жидкая фаза, в то время как вдали от края решетка находится в твердом состоянии. Этот эффект, несмотря на чисто дислокационный характер плавления, формально говорит в пользу перехода первого рода. Следует заметить, что в рассмотренном случае, как и во многих других краевых эффектах, важны тип и качество границы. При нечетком, размытом крае изображение дислокации не будет формироваться и плавление вблизи края будет отсутствовать.

Список литературы

[1] Kosterlitz J.M., Thoules D.J. J. Phys. C. **6**, 1181 (1974).
[2] Halperin B.I., Nelson D.R. Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
[3] Young A.P. Phys. Rev. **B 19**, 1855 (1979).
[4] Nelson D.R., Halperin B.I. Phys. Rev. **B 19**, 2457 (1979).
[5] Nelson D.R. Phys. Rev. **B 26**, 269 (1982).
[6] Brinkman W.F., Fisher D.S. Science. **287**, 693 (1982).
[7] Stanburg K.J. Rev. Mod. Phys. **60**, 161 (1988).
[8] Greiser N., Held G.A., Frahm R., Greene R.L., Horn P.M., Suter R.M. Phys. Rev. Lett. **59**, 1706 (1987).
[9] Nagler S.E., Horn P.M., Rosenbaum T.F., Birgenau R.J., Sutton M., Mochrie S.G.J., Moneton D.E., Clarke R. Phys. Rev. **B 32**, 7373 (1985).

[10] Larese J.Z., Passel L., Heidemann A.D., Richter D., Wicksted J.P. Phys. Rev. Lett. **61** 432 (1988).
[11] Udink C., Frenkel D. Phys. Rev. **B 35**, 6933 (1987).
[12] Kleinert H. Phys. Lett. **A 95**, 381 (1983).
[13] Chui S.T. Phys. Rev. **B 31**, 178 (1983).
[14] Bakker A.F., Bruin C., Hilhorst H.J. Phys. Rev. Lett. **52**, 449 (1984).
[15] Janke W., Kleinert H. Phys. Lett. **A 114**, 255 (1986).
[16] Alder B.J., Wainwrigh T.E. Phys. Rev. **127**, 359 (1962).
[17] Dimon P., Horn P.M., Sutton M. // Phys. Rev. **B 31**, 437 (1985).
[18] Saito Y. Phys. Rev. **B 26**, 6239 (1982).
[19] Рыжов В.Н. ЖЭТФ **100**,1627 (1991).
[20] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М. (1987). С. 246.