01;05;08
Журнал технической физики, т. 64, в. 11, 1994

ОТКРЕПЛЕНИЕ ДИСЛОКАЦИИ ОТ ТОЧЕЧНЫХ ПРЕПЯТСТВИЙ В ПОЛЕ ЗВУКОВОЙ ВОЛНЫ

Е.С.Савин

Московский педагогический государственный университет,
107005, Москва, Россия
(Поступило в Редакцию 19 января 1994 г.)

Согласно экспериментальным данным (см., например, [1]), пластическая деформация кристаллов определяется динамическим поведением дислокаций. Если приложенное напряжение превышает напряжения Пайерлса и взаимодействие дислокации с фононами, электронами и другими элементарными возбуждениями кристалла является малым, то скорость деформации будет определяться скоростью преодоления дислокациями различных препятствий, в частности барьеров, порождаемых точечными дефектами. Во внешнем периодическом (по времени) поле такие барьеры (стопоры) могут преодолеваться различными способами. В [2] рассматривали термофлуктуационное открепление дислокации от стопоров, совершающих независимое от дислокации колебательное движение (в результате воздействия на точечные дефекты звукового поля), и для вероятности такого процесса получили выражение аррениусовского типа. Полученные в [2] результаты относятся к предельному случаю малого внешнего воздействия, когда выполняется условие $u_0 \ll a$, где u_0 — амплитуда вынужденного смещения атома кристалла, a — постоянная решетки. Также предполагается, что $\hbar\omega_0 < U_0$, где ω_0 — частота внешнего поля; U_0 — величина потенциального барьера, преодолеваемого дислокацией при отрыве от препятствия.

В настоящей работе исследуется другой возможный способ преодоления барьеров — "механический", когда также выполняется условие малости внешнего воздействия $u_0 \ll a$, но вместе с тем $\hbar\omega_0 > U_0$ и открепление дислокации от точечных дефектов в поле звуковой волны носит безактивационный характер. Подобная ситуация может возникнуть при низких температурах, когда термофлуктуационный механизм открепления не реализуется, а открепление путем туннельного перехода через потенциальный барьер в силу различных причин (например, из-за того, что энергетические уровни атомов, определяемые соответствующим видом потенциального барьера, являются стационарными) маловероятно.

В качестве модели, позволяющей сделать необходимые оценки, рассмотрим более простую, чем предложенную в [2], модель открепления дислокации от препятствий. Кроме того, для простоты не будем учитывать вклада диссипативных эффектов в процесс торможения дислокации. Взаимодействие точечного дефекта с участком дислокации, непосредственно прилегающим к центру пиннинга, будем представлять парной межатомной связью, разрыв которой и будет означать открепление дислокации от стопора. В качестве парного потенциала, обеспечивающего связанное состояние дефекта и дислокации, выберем модельный потенциал вида

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 + \frac{m\omega^2}{2}x^2, & |x| \leqslant a, \\ 0, & |x| > a\ , \end{cases} \tag{1}$$

где m — приведенная масса атомов связи, ω — частота колебаний связи, $a = (2U_0/m\omega^2)^{1/2}$, U_0 — глубина потенциальной ямы.

Дискретные энергетические уровни связи (атома) в такой потенциальной яме являются стационарными, а условием разрыва связи является переход атома под действием внешнего возмущения в состояния непрерывного спектра. Полагая, что точечные дефекты распределены по кристаллу равномерно, места закрепления дислокаций будем описывать ансамблем различимых парных связей, имеющих одинаковую частоту колебаний ω и общую со всем кристаллом температуру T.

Действие звуковой волны означает, что на связь накладывается слабое однородное поле вида

$$V(x,t) = -x\,F_0 \sin\omega_0 t, \tag{2}$$

где $F_0 \ll F_m = (2U_0 m\omega^2)^{1/2}$ — прочность связи.

Частоту ω_0 периодического возбуждения будем предполагать такой, что $\hbar\omega_0 > -E_n$, где E_n — энергия связи, находящейся в n-м стационарном состоянии дискретного спектра в потенциальной яме (1).

Распределение каждой связи по уровням возбуждения E_n как подсистемы по отношению ко всему ансамблю межатомных связей с температурой T ($T \ll U_0$) определяется статистикой Гиббса

$$P_n = z^{-1}\exp(-E_n/T), \tag{3}$$

где z — статистическая сумма, а для E_n, поскольку нас интересует качественная сторона исследуемого вопроса, примем приближение

$$E_n = -U_0 + \hbar\omega(n + 1/2).$$

В потенциале парной связи (1) инфинитному движению, отвечающему разрыву связи, соответствуют уровни возбуждения $E_n > E_m$, где $E_m = 0$ и происходит только вследствие выброса частицы из ямы. Учитывая (3), выражение для частоты открепления дислокации от стопора (вероятности разрыва связи в единицу времени) в среде с температурой T под действием внешнего поля (2) можно записать в виде

$$\nu = z^{-1}\sum_n w_n e^{-E_n/T}, \tag{4}$$

где w_n — вероятность перехода (в единицу времени) атома, находящегося в n-м стационарном состоянии дискретного спектра, в состояние непрерывного спектра под действием периодического возмущения [3]

$$w_n = \frac{2\pi}{\hbar}\int |F_{\rho n}|^2 \delta(E_\rho - E_n - \hbar\omega_0)\,d\rho. \tag{5}$$

Здесь оператор F входит в оператор периодического возмущения

$$V = -xF_0 \sin\omega_0 t \equiv F \exp(-i\omega_0 t) + F^+ \exp(i\omega_0 t),$$

так что в рассматриваемой задаче $F = -ixF_0/2$. В матричном элементе

$$F_{\rho n} = \int \psi_\rho^* F \psi_n dx, \tag{6}$$

$\psi_n(x)$ — волновая функция осциллятора, для которой примем выражение [3]

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right),$$

где $H_n(z)$ — полиномы Эрмита.

Под ρ (величиной, характеризующей непрерывный спектр) в выражении (5) будем понимать волновой вектор $k = p/\hbar$, где p — импульс свободной частицы, так что $d\rho \equiv dk$ и $E_\rho = \hbar^2 k^2/2m$.

Выполнив интегрирование в (5) по ρ (т. е. по k), получим

$$w_n = \frac{\pi\sqrt{2m}(|F_{k_1 n}|^2 + |F_{k_2 n}|^2)}{\hbar^2[-U_0 + \hbar\omega(n+1/2) + \hbar\omega_0]^{1/2}}, \quad k_{1,2} = \pm\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E_n + \hbar\omega_0)}. \tag{7}$$

В качестве $\psi_k(x)$ выберем волновые функции свободных частиц

$$\psi_k(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp(-ikx),$$

и поскольку в этом случае потенциальная энергия (1) рассматривается как возмущение, то значения k должны удовлетворять условию $|k_{1,2}|^2\hbar^2 \gg mU_0$. Учитывая явный вид волновых функций $\psi_n(x)$, $\psi_k(x)$ и возмущения, а также принимая во внимание рекурентное соотношение для полиномов Эрмита [4] $2xH_n(x) = H_{n+1}(x) + 2nH_{n-1}(x)$, для матричного элемента (6) получим

$$F_{k_1 n} = \frac{i^n F_0}{4\pi^{1/4}(2^n n!)^{1/2}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/4} e^{-\frac{\beta_1^2}{2}}[H_{n+1}(\beta_1) - 2nH_{n-1}(\beta_1)], \tag{8}$$

где $\beta_1 = k_1(\hbar/m\omega)^{1/2}$.

Выражение для $F_{k_2 n}$ получается из (8) заменой β_1 на $-\beta_1$. С учетом (8) для вероятности перехода (7) в непрерывный спектр получим

$$w_n = \frac{\pi^{1/2}F_0^2 e^{-\beta_1^2}}{(2\hbar)^{1/2} m\omega^{3/2} 2^{n+3} n!}\left[-U_0 + \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_0\right]^{-1/2} Q_n(\beta_1;\beta_2),$$

$$Q_n(\beta_1;\beta_2) = [H_{n+1}(\beta_1) - 2nH_{n-1}(\beta_1)]^2 + [H_{n+1}(\beta_2) - 2nH_{n-1}(\beta_2)]^2. \tag{9}$$

Выражение (9), записанное для разрыва изолированной связи, справедливо при частоте внешнего воздействия, удовлетворяющей условию $\hbar\omega_0 > U_0 - \hbar\omega(n+1/2)$. При невыполнении этого условия переходы атома в состояния непрерывного спектра могут происходить в высших порядках теории возмущений со значительно меньшей вероятностью.

Далее рассмотрим предельный случай высоковозбужденных состояний парных связей, для которых квантовое число $n \gg 1$. С учетом (9), используя асимптотическое разложение полиномов Эрмита [4] и заменяя суммирование в (4) интегрированием, для частоты открепления дислокации от препятствий получаем выражение

$$\nu \approx \frac{F_0^2 \epsilon}{8m\hbar\omega^2}\left(\frac{U_0}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2}\left\{1 - e^{-U_0/T}\left[1 + \frac{\hbar\omega}{T}\varphi(n_m)\right]\right\}, \qquad (10)$$

где

$$\varphi(n_m) = \frac{\sin\left(2\sqrt{2(2n_m-1)\omega_0/\omega} - n_m\pi\right)}{a-\pi} + \frac{\sin\left(2\sqrt{2(2n_m-1)\omega_0/\omega} + n_m\pi\right)}{a+\pi},$$

$$n_m = \frac{U_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}, \quad a = \frac{4\left(-U_0/\hbar\omega + 2n_m + \omega_0/\omega\right)}{\sqrt{2(2n_m-1)\omega_0/\omega}}.$$

Существенно, что вероятность разрыва связи, находящейся в среде, согласно (10), уже не имеет в принятом приближении ограничения на частоту внешнего воздействия. Как следует также из (10), зависимость скорости открепления дислокации от стопоров от T и F_0 не имеет аррениусовского вида. При $\hbar\omega \gg T$

$$\nu = \frac{F_0^2 e}{8m\hbar\omega^2}\left(\frac{U_0}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2}\left[1 - \frac{\hbar\omega}{T}e^{-U_0/T}\varphi(n_m)\right],$$

а при $\hbar\omega \ll T$

$$\nu = \frac{F_0^2 e}{8m\hbar\omega^2}\left(\frac{U_0}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2}.$$

Разумеется, рассмотренная модель открепления дислокации от точечных дефектов является весьма приближенной. Можно надеяться, однако, что экспериментальное изучение динамического поведения дислокации во внешнем периодическом поле позволит в ряде случаев установить достоверность полученных с помощью этой модели результатов.

Список литературы

[1] *Судзуки Т., Есинага Х., Такеути С.* Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989. 294 с.

[2] *Варданян Р.А., Кравченко В.Я.* // ДАН СССР. 1982. Т. 266. С. 82–85.

[3] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Изд-во физ.-мат. литературы, 1963. 702 с.

[4] *Лебедев Н.Н.* Специальные функции и их приложения. М.: Изд. физ.-мат. литературы, 1963. 358 с.