Электроупругие поля движущихся дислокаций и дисклинаций в пьезоэлектрических кристаллах

© Ш.Х. Ханнанов

Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук,
450075 Уфа, Россия

E-mail: igor@physics.bash.ru

(Поступила в Редакцию 11 сентября 1998 г.
В окончательной редакции 17 ноября 1998 г.)

В рамках четырехмерного формализма динамических функций Грина получены интегральные представления для электроупругих полей движущихся дислокаций и дисклинаций в пьезоэлектрических кристаллах. Рассмотрены случаи непрерывного распределенных и одиночных линейных дефектов. Правильность полученных результатов подтверждается выполнением требований соответствия при переходе к чисто упругому решению.

Линейные дефекты кристаллической решетки являются объектом исследования с точки зрения как механических [1], так и электрических [2] свойств. Природа электрической активности дефектов зависит от рода кристаллов. Здесь речь пойдет о пьезоэлектрических кристаллах [3–5], в которых благодаря электрической поляризации линейные дефекты обладают связанными электроупругими полями [6–8]. Теоретическое исследование этих полей — весьма актуальная задача, привлекавшая внимание ряда исследователей [6–8].

В случае чисто упругого тела с использованием функций Грина были получены общие решения для произвольных распределений движущихся дислокаций и дисклинаций [9,10]. При этом упругие поля полностью выражаются через плотности и потоки дефектов. В случае пьезоупругого тела такое общее решение для электроупругих полей произвольно распределенных движущихся линейных дефектов (дислокаций и дисклинаций) до настоящего времени не было получено. Попытку, сделанную в работе [8], нельзя считать вполне успешной, так как решение в ней выражается не через потоки дефектов, а через макроскопические величины скоростей пластической деформации и пластического изгиба-кручения. Цель настоящей работы — восполнение указанного пробела.

1. Формулировка задачи

В континуальной теории исходят из предположения, что линейные дефекты (дислокации и дисклинации) эквивалентны некоторым пластическим (сингулярным) базисным полям [9]. Последние, как будет показано далее, можно заменить распределениями фиктивных объемных сил f_i и зарядов g. Поэтому задача определения электроупругих полей дефектов сводится к некоторой задаче пьезоупругости при заданных f_i и g.

Рассмотрим пьезоэлектрический кристалл, который характеризуется тензорами упругих λ_{ijkl}, диэлектрических ε_{ij} и пьезоэлектрических β_{kij} констант (обозначения согласно [3], §17), удовлетворяющими известным свойствам симметрии [3–5]. Здесь и далее, если это не оговорено особо, индексы, обозначенные малыми латинскими буквами, принимают значения $1, 2, 3$. Константы входят в линейные уравнения состояния, связывающие упругие напряжения σ_{ij} и электрические смещения D_i с упругими деформациями e_{kp} и напряженностью электрического поля E_k [3–5]. Выражая e_{kp} через вектор упругого смещения u_p в виде $e_{pk} = (u_{p,k} + u_{k,p})/2$, а E_i — через электрический потенциал φ в виде $E_i = -\varphi_{,i}$, указанные уравнения состояния можно записать следующим образом [3–5]: $\sigma_{ij} = \lambda_{ijkp}u_{p,k} + \beta_{kij}\varphi_{,k}$; $D_i = \beta_{ikp}u_{p,k} - \varepsilon_{ij}\varphi_{,j}$. Здесь индекс после запятой означает дифференцирование по соответствующей координате.

Для определения смещения u_i и потенциала φ при заданных f_i и g имеем уравнения движения частиц тела (уравнения теории упругости) [4] $\sigma_{ij,j} - p\ddot{u}_i = -f_i$ и уравнение электростатики [3] $D_{i,j} = g$, где ρ — плотность тела, точка сверху означает дифференцирование по времени. Подставляя в эти уравнения выражения для σ_{ij} и D_i, получаем неоднородные уравнения, содержащие только u_k и φ,

$$\lambda_{ijkp}u_{k,pj} - p\ddot{u}_i + \beta_{kij}\varphi_{,kj} = -f_i, \tag{1}$$

$$\beta_{jkp}u_{k,pj} - \varepsilon_{jk}\varphi_{,jk} = -g. \tag{2}$$

Теперь в уравнениях (1), (2) необходимо выразить f_i и g через базисные пластические поля линейных дефектов.

Согласно [9], тело с движущимися дислокациями и дисклинациями характеризуется набором базисных пластических полей: деформации e^p_{ij}, изгиба-кручения $\varkappa^p_{ij}$, скорости v^p_l и поворота ω^p_q. Как показано в [9] (см. также [11]), пластическую скорость v^p_l можно для физических дефектов положить равной нулю. Величины $\varkappa^p_{ij}$ и ω^p_q не входят в уравнения состояния. Поэтому f_i и g будут определяться фактически только пластической деформацией e^p_{ij}. При наличии $e^p_{ij} \neq 0$ имеем

$$e_{kp} = e^T_{kp} - e^P_{kp} = \frac{1}{2}(u_{p,k} + u_{k,p}) - e^P_{kp}, \tag{3}$$

где e^T_{kp} — полная (пластическая плюс упругая) деформация, а в уравнениях (1), (2) полагаем $f_i = g = 0$ (роль внешних сил и электрических зарядов играют теперь базисные пластические поля дефектов). С учетом этого уравнения (1), (2) принимают вид

$$\lambda_{ijkp} = u_{k,pj} - \rho \ddot{u}_i + \beta_{kij}\varphi_{,kj} = \lambda_{ijkp} e^P_{pk,j}, \tag{4}$$

$$\beta_{jkp} u_{k,pj} - \varepsilon_{jk}\varphi_{,jk} = \beta_{jkp} e^P_{pk,j} \tag{5}$$

Сравнивая уравнения (1), (2) и (4), (5), видим, что линейные дефекты в пьезокристалле эквивалентны распределению фиктивных объемных сил f_i и зарядов g, величина которых определяется равенством

$$f_i = -\lambda_{ijkp} e^P_{pk,j}, \tag{6}$$

$$g = -\beta_{jkp} e^P_{pk,j}. \tag{7}$$

Задача состоит в интегрировании неоднородных уравнений (4), (5). В общем виде это можно сделать, используя формализм функций Грина.

2. Четырехмерный формализм функций Грина

В силу симметрии материальных констант и уравнений задачи (1), (2) удобно ввести четырехмерные динамические тензорные функции Грина $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)$, где $\mathbf{r}$ — радиус-вектор, t — время; индексы, обозначенные греческими буквами, принимают значения $1, 2, 3, 4$. В статическом случае такие функции Грина вводились в работе [12].

Произведя преобразование Фурье

$$\bar{f}(\omega, \mathbf{k}) = \iint f(\mathbf{r}, t) \exp\big[i(\mathbf{kr} - \omega \mathbf{t})\big]\, d\mathbf{r}\, dt,$$

уравнения (1), (2) можно представить в матричной форме

$$D_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) \bar{U}_\beta(\omega, \mathbf{k}) = \bar{F}_\alpha(\omega, \mathbf{k}), \tag{8}$$

где (4×2)-матрица $D_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$ имеет вид (δ_{ik} — символ Кронекера)

$$D_{ik} = \lambda_{ijkp} k_p k_j - \rho\omega^2 \delta_{ik},$$

$$D_{i4} = D_{4i} = \beta_{kij} k_k k_j, \quad D_{44} = -\varepsilon_{jk} k_j k_k,$$

а компоненты четырехмерных векторов U_α и F_α равны

$$U_i = u_i, \qquad U_4 = \varphi,$$

$$F_i = -f_i, \qquad F_4 = -g.$$

Исходя из вида_уравнения (8), Фурье-трансформанту функции Грина $\bar{G}_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$ определим соотношением

$$D_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})\, \bar{G}_{\beta\gamma}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\gamma}, \tag{9}$$

где $\delta_{\alpha\gamma}$ — четырехмерный аналог символа Кронекера. Умножая обе части (9) на матрицу $D^{-1}_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$, находим

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{d_{\beta\alpha}(\omega, \mathbf{k})}{D(\omega, \mathbf{k})}, \tag{10}$$

где $D(\omega, \mathbf{k})$ — определитель матрицы $D_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$, $d_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$ — алгебраическое дополнение элемента $D_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$.

В соответствии с видом уравнений (8), (9) функция Грина $G_{\alpha\beta}$ описывает отклики пьезоупругого тела различного типа: смещение-сила (компоненты G_{ik}), потенциал-сила (компоненты G_{4k}), смещение-заряд (компоненты G_{i4}) и потенциал-заряд (компоненты G_{44}).

В дальнейшем нам понадобится также уравнение для $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)$. Путем обратного преобразования Фурье над уравнением (9) получаем

$$\hat{D}_{\alpha\beta}\left(-i\frac{\partial}{\partial t},\, i\frac{\partial}{\partial x_p}\right) G_{\beta\gamma}(\mathbf{r}, t) = \delta_{\alpha\gamma}\delta(\mathbf{r})\delta(t), \tag{11}$$

где $\hat{D}_{\alpha\beta}(-i\,\partial/\partial t,\, i\,\partial/\partial x_p)$ — матрица с операторными элементами, которая получается из матрицы $D_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})$ путем подстановки $\omega \to -i\,\partial/\partial t$, $k_p \to i\,\partial/\partial x_p$.

3. Электроупругие поля линейных дефектов

Решение основного уравнения (8) дается равенством

$$\bar{U}_\gamma = \bar{G}_{\gamma\alpha}\bar{F}_\alpha$$

или после обратного преобразования Фурье

$$U_\alpha(\mathbf{r}, t) = \iint G_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')\, F_\beta(\mathbf{r}', t')\, d\mathbf{r}' dt',$$

где $U_\alpha = (u_i, \varphi)$, $F_\beta = (-f_i, g)$. Подставляя сюда выражения (6), (7) для плотности фиктивных объемных сил f_i и зарядов g, получаем выражения для смещений u_i и электрического потенциала φ, создаваемых движущимися дефектами

$$u_i(\mathbf{r}, t) = -\iint \Big\{ G_{iq}(\mathbf{R}, T)\lambda_{qjkp} e^P_{pk,j'}(\mathbf{r}', t') + G_{4i}(\mathbf{R}, T)\beta_{ikp} e^P_{pk,j'}(\mathbf{r}', t') \Big\} d\mathbf{r}' dt', \tag{12}$$

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = -\iint \Big\{ G_{4q}(\mathbf{R}, T)\lambda_{qjkp} e^P_{pk,j'}(\mathbf{r}', t') + G_{44}(\mathbf{R}, T)\beta_{ikp} e^P_{pk,j'}(\mathbf{r}', t') \Big\} d\mathbf{r}' dt', \tag{13}$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, $T = t - t'$.

Формулы (12), (13) содержат макроскопическую характеристику e^P_{pk} — тензор пластической деформации. Чтобы исключить макроскопические характеристики и выразить электроупругие поля через характеристики дефектов (тензоры плотности и потока), необходимо проделать процедуру преобразований решения (12), (13), которая во многом аналогична преобразованиям в работе [10] в случае чистой упругости. При этом используются уравнения (11) для функции Грина, а также определяющие соотношения для тензоров плотности α_{ik},

θ_{ik} и потока J_{kl}, S_{kq} дислокаций и дисклинаций [9] (см. также [11])

$$\alpha_{pl} = -\varepsilon_{pmk}\left(e^P_{kl,m} + \varepsilon_{klq}\varkappa^P_{mq}\right),$$

$$\theta_{pq} = -\varepsilon_{pmk}\varkappa^P_{kq,m},$$

$$J_{kl} = \dot{e}^P_{kl} + \varepsilon_{klq}\omega^P_q,$$

$$S_{kq} = -\omega^P_{q,k} + \dot{\varkappa}^P_{kq}.$$

Здесь, как и выше, положили пластическую скорость $v^p_l = 0$, что не сказывается на конечных результатах.

Не приводя подробные выкладки, запишем сразу окончательные выражения для тензора упругой деформации e_{mn} и вектора электрической напряженности E_k

$$e_{mn}(\mathbf{r},t) = \iint \Big\{ \big[\varepsilon_{pmk}C_{\alpha ikl}G_{\alpha n,i}\alpha_{pl} - \rho\dot{G}_{ln}J_{ml}\big] - \varepsilon_{pmk}\big[\varepsilon_{qsl}C_{\alpha ikl}H_{\alpha n,is}\theta_{pq} - \rho\dot{H}_{kn,s}S_{sp}\big]\Big\}_{(mn)} d\mathbf{r}'dt', \quad (14)$$

$$E_m(\mathbf{r},t) = \iint \Big\{ \big[\varepsilon_{pmk}C_{\alpha ikl}G_{\alpha 4,i}\alpha_{pl} - \rho\dot{G}_{l4}J_{ml}\big] - \varepsilon_{pmk}\big[\varepsilon_{qsl}C_{\alpha ikl}H_{\alpha 4,is}\theta_{pq} - \rho\dot{H}_{k4,s}S_{sp}\big]\Big\}_{(mn)} d\mathbf{r}'dt', \quad (15)$$

где mn — операция симметризации, ε_{pmk} — единичный антисимметричный тензор и для простоты записи опущены аргументы $(\mathbf{R}, T)$ у функций Грина $G_{\alpha\beta}$ и потенциалов $H_{\alpha\beta}$, а также аргументы $(\mathbf{r}', t')$ у функций α_{pl}, θ_{pq}, J_{ml}, S_{sp}. Здесь введен тензор материальных констант $C_{\alpha\beta\delta\gamma}$, у которого $C_{jikl} = \lambda_{jikl}$, $C_{4ikl} = \beta_{ikl}$, а остальные компоненты равны нулю. Потенциалы $H_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t)$ определяются согласно [10]

$$H_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t) = \int G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}',t)(2\pi R)^{-1}d\mathbf{r}'.$$

При переходе к чисто упругому случаю, когда $C_{4ikl} = \beta_{ikl} = 0$, $G_{\alpha 4}$ и $H_{\alpha 4}$ обращаются в соответствии с уравнением (9) в нуль, а электрическое поле E_m исчезает (15). В этом случае из (14) следует выражение

$$e_{mn}(\mathbf{r},t) = \iint \Big\{ \big[\varepsilon_{pmk}\lambda_{jikl}G_{jn,i}\alpha_{pl} - \rho\dot{G}_{ln}J_{ml}\big] - \varepsilon_{pmk}\big[\varepsilon_{qsl}\lambda_{jikl}H_{jn,is}\theta_{pq} - \rho\dot{H}_{kn,s}S_{sp}\big]\Big\}_{(mn)} d\mathbf{r}'dt',$$

которое совпадает с выражением (4.6) из работы [10], что является подтверждением правильности полученных результатов.

Решения (14), (15) справедливы при произвольном распределении движущихся дислокаций и дисклинаций. Отсюда легко получить решения для случая одиночных дефектов. Для этого необходимо подставить в (14), (15) известные выражения [10] для плотностей

$$\alpha_{pl}(\mathbf{r},t) = \oint\limits_{L(t)} \delta(\mathbf{R})\big\{b_l + \varepsilon_{lqr}\Omega_q(x'_r - x^0_r)\big\}dL'_p,$$

$$\theta_{pq}(\mathbf{r},t) = \oint\limits_{L(t)} \delta(\mathbf{R})\Omega_q dL'_p$$

и потоков

$$J_{kl}(\mathbf{r},t) = \oint\limits_{L(t)} \varepsilon_{pmk}\delta(\mathbf{R})\big\{b_l + \varepsilon_{lqr}\Omega_q(x'_r - x^0_r)\big\}v_m(\mathbf{r}',t')dL'_p,$$

$$S_{kq}(\mathbf{r},t) = \oint\limits_{L(T)} \varepsilon_{pmk}\delta(\mathbf{R})\Omega_q v'_m(\mathbf{r}',t)dL'_p$$

дислокаций и дисклинаций одиночного линейного дефекта и произвести интегрирование. Здесь $L(t)$ — линия дефекта; x^0_r — координата точки на оси поворота; b_l — вектор Бюргерса дислокации, связанной с линией дефекта; Ω_q — вектор Франка, v_m — скорость движения $L(t)$. В результате интегрирования с учетом свойств дельта-функций получаем

$$e_{mn}(\mathbf{r},t) = \iint\limits_{L(t)} \Big\{\varepsilon_{pmk}\big(C_{\alpha ikl}G_{\alpha n,i} + \rho\dot{G}_{ln}v'_k\big) \times \big(b_l + \varepsilon_{lqr}\Omega_q(x'_r - x^0_r)\big) - \varepsilon_{qmk}\varepsilon_{psl}\big(C_{\alpha ikl}H_{\alpha n,is} + \rho\dot{H}_{kn,s}v'_l\big)\Omega_q\Big\}dL'_p dt'_{(mn)}, \quad (16)$$

$$E_m(\mathbf{r},t) = \iint\limits_{L(t)} \Big\{\varepsilon_{pmk}\big(C_{\alpha ikl}G_{\alpha 4,i} + \rho\dot{G}_{l4}v'_k\big) \times \big(b_l + \varepsilon_{lqr}\Omega_q(x'_r - x^0_r)\big) - \varepsilon_{qmk}\varepsilon_{psl}\big(C_{\alpha ikl}H_{\alpha 4,is} + \rho\dot{H}_{k4,s}v'_l\big)\Omega_q\Big\}dL'_p dt', \quad (17)$$

При переходе к чисто упругому случаю электрическое поле E_m исчезает, а выражение (16) совпадает с выражением (5.7) из работы [10]. Тензор упругих напряжений σ_{ij} и вектор электрического смещения D_i, создаваемые движущимися линейными дефектами, можно найти с помощью уравнений состояния [3–5], подставляя в них полученные выражения (14), (15) или (16), (17) для упругих деформаций e_{mn} и вектора напряженности электрического поля E_m.

Таким образом, получены общие решения для электроупругих полей движущихся дислокаций и дисклинаций в пьезоэлектрических кристаллах. При этом физически наблюдаемые поля определяются через тензоры плотности и потока дислокаций и дисклинаций, которые следует считать заданными.

Список литературы

[1] Б.И. Смирнов. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Наука, Л. (1981). 275 с.
[2] Ю.А. Осипьян, В.Ф. Петренко. В кн.: Проблемы прочности и пластичности твердых тел / Отв. ред. С.Н. Журков. Наука, Л. (1979). С. 118–128.
[3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Наука, М. (1982). 620 с.
[4] Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. Наука, М. (1975). 680 с.
[5] Дж. Най. Физические свойства кристаллов. Мир, М. (1960). 386 с.
[6] А.М. Косевич, Л.А. Пастур, Э.П. Фельдман. Кристаллография **12**, *5*, 916 ((1967).
[7] I.S. Smirnova. Phys. Stat. Sol. (b) **126**, *1*, 177 (1984).
[8] S. Minagawa. Phys. Stat. Sol. (b) **124**, *2*, 565 (1984).
[9] E. Kossecka, R. De Wit. Archives of Mech. **29**, *5*, 633 (1979).
[10] E. Kossecka, R. De Wit. Archives of Mech. **29**, *6*, 749 (1979).
[11] Ш.Х. Ханнанов. ФММ **49**, *1*, 59 (1980).
[12] Н.А. Перцев, К.В. Смирнов. Кристаллография **33**, *6*, 1335 (1988).