

О влиянии поперечных возмущений на движение краевой дислокации

© А.Н. Бугай, С.В. Сазонов

Калининградский государственный университет,
236041 Калининград, Россия

E-mail: foton1@baltnet.ru

(Поступила в Редакцию 13 апреля 2004 г.
В окончательной редакции 21 июня 2004 г.)

На основе метода усредненного лагранжиана типа Ритца–Уизема проведено исследование влияния поперечных возмущений на движение краевой дислокации, которая описывается моделью Френкеля–Конторовой, дополненной упругим ангармонизмом и учетом дискретности кристалла (акустической дисперсии). Показано, что квадратичный ангармонизм и акустическая дисперсия способствуют самофокусировке дислокации и образованию микротрещин. Кубический ангармонизм при определенных условиях способен стабилизировать поперечное сжатие дислокации, что может привести к образованию „краудионных капель“.

1. Введение

Одномерная модель Френкеля–Конторовой [1] достаточно хорошо описывает движение в кристалле ядра краевой дислокации. При приближении к поперечным краям ядра дислокации ее фронт искривляется, и одномерная модель перестает быть пригодной. При движении ядро дислокации может эволюционировать динамическим образом: выгибаться своими поперечными краями вперед по направлению движения, что приведет к самофокусировке и образованию трещин, или назад. В последнем случае внутренние напряжения в области, занимаемой дислокацией, будут ослабевать, что приведет в конце концов к расползанию дислокации и ее исчезновению в макроскопическом объеме. При самофокусировке же дислокации внутренние напряжения растут, а ее характерные размеры уменьшаются. Как следствие, необходимо учитывать ангармонизм колебаний узлов кристаллической решетки и ее дискретность. В работах [2,3] проведен соответствующий учет в рамках модельных упрощающих предположений. Основное из них заключается в том, что константы кубического ангармонизма и дискретности решетки (акустической дисперсии) связаны друг с другом жестким соотношением. Данное ограничение позволило получить аналитическое выражение для поля дислокации [2], а также свести решение задачи к вполне интегрируемой системе [3]. Учет кубического ангармонизма и акустической дисперсии привел авторов работы [2] к выводу о возможности движения дислокации со сверхзвуковой скоростью. Оказывается, что учет квадратичного ангармонизма провести гораздо сложнее, чем кубического [2]. В то же время в большинстве случаев в кристаллах преобладает именно квадратичная акустическая нелинейность, являющаяся главной причиной теплового расширения.

Цель настоящей работы — учет влияния поперечных возмущений на движение краевой дислокации, когда существенны упругий ангармонизм второго и третьего порядков, а также акустическая дисперсия.

2. Теоретическая модель

Рассмотрим распространение краевой дислокации типа краудиона в кубическом кристалле в направлении оси z , совпадающей с одной из кристаллических осей четвертого порядка. Поперечную динамику учтем в параксиальном приближении [4], которое соответствует относительно слабому искривлению фронтов дислокации. В этой связи заметим сразу, что данное приближение, во-первых, позволяет существенно упростить математические расчеты, а во-вторых, достаточно хорошо описывает известные эффекты волновой теории вплоть до самофокусировки [5]. Акустическую дисперсию также будем считать малой, а потому учтем ее минимальным образом. Итак, эффекты поперечной динамики, акустической дисперсии и упругого ангармонизма будем считать сравнимыми по порядку величины. Суммируя указанное выше, запишем гамильтониан поля смещений пластической деформации в кристалле

$$H = \int H d^3\mathbf{r}, \quad (1)$$

где плотность гамильтониана

$$H = \frac{\rho^2}{2nm} + \frac{\lambda_{11}}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + nU_0 \sin^2 \frac{\pi u}{h} + \frac{\lambda_{11}}{2} (\nabla_{\perp} u)^2 - \frac{\lambda_{11} h^2}{24} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)^2 + \left(\lambda_{11} + \frac{\lambda_{111}}{3} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^3 + \left(\lambda_{11} + \frac{\lambda_{111}}{3} + \frac{\lambda_{1111}}{4} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^4. \quad (2)$$

Здесь ρ — плотность импульса, соответствующая смещению u кристаллических узлов вдоль оси z ; λ_{11} , λ_{111} , λ_{1111} — адиабатические модули упругости второго, третьего и четвертого порядков соответственно; h — постоянная кристаллической решетки; m — масса атомов, совершающих перемещения по кристаллу в режиме пластической деформации; n — их концентрация;

U_0 — высота барьера Френкеля–Конторовой, образуемого „подложкой“, которая считается неподвижной.

Четвертое и пятое слагаемые в гамильтониане (2) описывают соответственно поперечные возмущения и акустическую дисперсию, шестое и седьмое соответствуют квадратичному и кубическому ангармонизмам. Первые же три слагаемых соответствуют классической одномерной модели Френкеля–Конторовой.

Запишем уравнения Гамильтона для поля смещений

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta u}, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta p}. \quad (3)$$

Из системы (3), используя (1) и (2), можно получить следующее уравнение:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - \frac{1}{v_0^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} = a \sin \theta + b_2 \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - b_3 \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} - b \frac{\partial^4 \theta}{\partial z^4} - \Delta_{\perp} \theta, \quad (4)$$

где

$$\theta = \frac{2\pi u}{h}, \quad a = \frac{2\pi^2 n^2 m U_0}{\lambda_{11} h^2}, \quad b = \frac{h^2}{12}, \quad b_2 = \frac{h\Gamma}{\pi},$$

$$b_3 = \frac{2h^2}{\pi^2} \left(\frac{3\lambda_{1111}}{8\lambda_{11}} - \Gamma \right),$$

$\Gamma = -(3/2)(1 + \lambda_{111}/3\lambda_{11})$ — постоянная Грюнаизена, $v_0 = \sqrt{\lambda_{11}/nm}$ — линейная скорость звука.

Константы a , b , b_2 и b_3 стоят при слагаемых в правой части, описывающих соответственно влияние потенциала Френкеля–Конторовой, акустической дисперсии, квадратичного и кубического ангармонизмов.

Поскольку используется паракиральное приближение $\partial^2 \theta / \partial z^2 \gg \Delta_{\perp} \theta$, слагаемые, стоящие в правой части (4) после $\sin \theta$, являются малыми по отношению к слагаемым в левой части. Исходя из этого, решение (4) будем искать с помощью последовательных приближений по этим малым слагаемым. В нулевом приближении имеем $\theta = \theta(z - v_0 t)$, рассматривая только дислокацию, движущуюся в одном направлении вдоль оси z . В следующем приближении в качестве поправки введем „медленное время“ $\tau = \delta t$, где $\delta \ll 1$. Тогда решение примет вид $\theta = \theta(\xi, \tau)$, где $\xi = z - v_0 t$. В пренебрежении слагаемыми $\sim \delta^2$ имеем

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}, \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \cong v_0^2 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - 2\delta v_0 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \tau}.$$

После подстановки данных соотношений в (4) и возвращения к переменной t получим

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi \partial t} = \alpha \sin \theta + \beta_2 \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} - \beta_3 \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} - \beta \frac{\partial^4 \theta}{\partial \xi^4} - \frac{v_0}{2} \Delta_{\perp} \theta, \quad (5)$$

где

$$\alpha = a v_0 / 2, \quad \beta = b v_0 / 2, \quad \beta_{2,3} = b_{2,3} v_0 / 2.$$

Частный случай полученного уравнения при $\beta_2 = 0$, $\beta_3 = 3\beta/2$ (ограничения Косевича–Ковалева) в отсутствии поперечных возмущений ($\Delta_{\perp} \theta = 0$) исследован в [3], где была доказана интегрируемость данного уравнения при указанных соотношениях и получено его многосолитонное решение.

3. Учет поперечных возмущений в геометрическом приближении

Дальнейший анализ уравнения (5) проведем с помощью вариационного метода „усредненного лагранжиана“ [6–8]. Лагранжиан, соответствующий (5), можно записать в виде

$$L = \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \alpha (1 - \cos \theta) - \frac{\beta_2}{6} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)^3 + \frac{\beta_3}{12} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)^4 - \frac{\beta}{2} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \right)^2 + \frac{v_0}{4} (\nabla_{\perp} \theta)^2. \quad (6)$$

Выберем пробное решение типа краудина, рассмотренного в [2,3],

$$\theta = 4 \operatorname{arctg} \exp(\rho(\xi - \Phi)). \quad (7)$$

В одномерном случае $\rho = 1/l = \text{const}$, а $\Phi = (v - v_0)t$, v — скорость дислокации, зависящая от ее длины l . Учет неоднородности в паракиральном приближении позволяет говорить, что $\rho = \rho(t, \mathbf{r}_{\perp})$ и $\Phi = \Phi(t, \mathbf{r}_{\perp})$ в этом случае являются „медленной“ и „быстрой“ функциями своих переменных.

Подставляя (7) в (6) и интегрируя полученное выражение по „быстрой“ переменной ξ , получим „усредненный лагранжиан“

$$\Lambda \equiv \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} L d\xi = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \frac{\alpha}{\rho} + \frac{\pi}{6} \beta_2 \rho^2 - \left(\frac{4}{3} \beta_3 - \beta \right) \frac{\rho^3}{3} - \frac{\pi^2}{6} v_0 \frac{(\nabla_{\perp} \rho)^2}{\rho^3} - \frac{1}{2} v_0 \rho (\nabla_{\perp} \Phi)^2. \quad (8)$$

Варьируя Λ по переменным ρ и Φ , запишем уравнения Эйлера–Лагранжа

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\perp} (\rho \mathbf{V}_{\perp}) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\mathbf{V}_{\perp}^2}{2} + \int \frac{dP}{\rho} = F(t, \mathbf{r}_{\perp}), \quad (10)$$

где $\varphi = -v_0 \Phi$, $\mathbf{V}_{\perp} = \nabla_{\perp} \varphi$,

$$\frac{dP}{d\rho} = 2v_0 \left(\frac{\alpha}{\rho^2} - \frac{\pi}{6} \beta_2 \rho + \left(\frac{4}{3} \beta_3 - \beta \right) \rho^2 \right), \quad (11)$$

$$F(t, \mathbf{r}_{\perp}) = \frac{\pi^2}{12} v_0^2 \rho^{-3} \left(\Delta_{\perp} \rho - \frac{3}{2} \frac{(\nabla_{\perp} \rho)^2}{\rho} \right). \quad (12)$$

В пространственно одномерном случае ($\nabla_{\perp} = 0$) система (9), (10) с учетом (11) легко интегрируется. При этом скорость одномерного краудиона

$$v = v_0 \left[1 - \frac{al^2}{2} - \frac{\pi b_2}{6l} + \left(\frac{4}{3} b_3 - b \right) \frac{1}{2l^2} \right]. \quad (13)$$

При ограничениях Косевича–Ковалева ($b_2 = 0$, $b_3 = 3b/2$) выражение для v имеет вид

$$v = v_0 \left(1 - \frac{al^2}{2} + \frac{b}{2l^2} \right),$$

что с точностью до переобозначений коэффициентов a и b совпадает с соответствующим выражением, полученным в [3]. Данное обстоятельство является существенным аргументом в пользу принятого здесь подхода, основанного на методе „усредненного лагранжиана“.

Правая часть (10) содержит производные по поперечным координатам от „медленной“ переменной ρ . Отталкиваясь от аналогии с оптикой [4,9], можно сказать, что функция $F(t, \mathbf{r}_{\perp})$ описывает волновые свойства дислокации и соответствует эффектам ее дифракции на собственных неоднородностях. На начальной стадии искривления фронта дислокации волновыми свойствами можно пренебречь и ограничиться „эйкональным“ (геометрическим) приближением, когда $F = 0$. Тогда система (9), (10) совпадает по виду с уравнениями потенциального течения идеальной жидкости (уравнение неразрывности и интеграл Коши для нестационарного течения соответственно). Здесь φ является аналогом потенциала скорости \mathbf{V}_{\perp} , а P и ρ — давления и плотности. Соотношение (11) имеет смысл уравнения процесса (уравнения адиабаты) для изоэнтропийного течения данной „жидкости“. Тогда условие устойчивого течения „жидкости“ вида (9)–(11)

$$dP/d\rho > 0 \quad (14)$$

соответствует устойчивости решения (7) по отношению к самофокусировке [10–12]. В нашем случае это означает, что дислокация будет расплзаться по кристаллу, предотвращая образование трещин, так как локальные напряжения при этом уменьшаются. С учетом (11) неравенство (14) примет вид

$$\frac{a}{\rho^2} + \frac{4}{3} b_3 \rho^2 - \frac{\pi}{6} b_2 \rho - b \rho^2 > 0. \quad (15)$$

Условие (15) имеет ясную физическую интерпретацию. Действительно, учитывая связь $l = 1/\rho$ и выражение (13), легко видеть, что (15) в точности совпадает с условием $dv/d\rho > 0$. Из определения θ видно, что $\partial\theta/\partial\xi \sim \partial u/\partial z \sim \varepsilon$, где ε — относительная локальная деформация. В то же время, используя (7), запишем

$$\frac{\partial\theta}{\partial\xi} = 2\rho \operatorname{sech}[\rho(\xi - \Phi)].$$

Таким образом, $\rho \sim \varepsilon_m$, где ε_m — амплитудное значение ε .

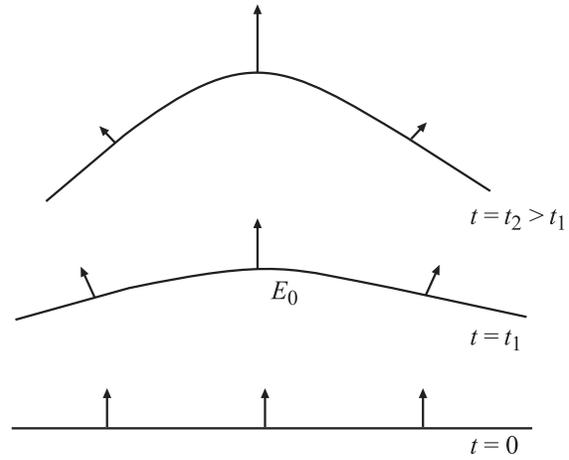


Рис. 1. Выгибание поперечных фронтов краевой дислокации при ее дефокусировке.

В центре поперечного сечения дислокации величина ε_m максимальна. Если с увеличением ε_m скорость v возрастает (т.е. $dv/d\rho > 0$), фронт дислокации выгибается таким образом, что его центральные участки движутся быстрее, чем периферийные (рис. 1). Это приводит к дефокусировке дислокации. В противном случае она теряет устойчивость по отношению к самофокусировке.

Из (15) видно, что вопрос устойчивости краудиона по отношению к самофокусировке сводится к анализу влияния конкурирующих эффектов. Кристаллический потенциал Френкеля–Конторовой U_0 создает дефокусирующий эффект. В то же время квадратичный ангармонизм, ответственный за тепловое расширение, и акустическая дисперсия способствуют самофокусировке. Роль кубического ангармонизма может быть двойкой: при $\lambda_{1111} > 8\Gamma\lambda_{11}/3 \equiv 8\Gamma n m v_0^2/3$ кубическая нелинейность препятствует самофокусировке, в противном случае имеем фокусирующий эффект.

4. Влияние дифракции

Пусть в (10) $F \neq 0$, что соответствует учету дифракции краудиона на им же создаваемых неоднородностях кристалла. Влияние дифракции проведем аналогично тому, как это делается в задачах оптики и общей волновой теории [4,5]. Поле дислокации будем считать аксиально симметричным. Следуя [4,5], представим ρ в автомодельном виде

$$\rho = \rho_0 \frac{R_0^2}{R^2} \exp\left(-\frac{r^2}{R^2}\right), \quad (16)$$

где R_0 , $R(t)$ — соответственно начальный и текущий поперечные радиусы краудиона. Функцию φ разложим в ряд по степеням r и, ограничиваясь приосевым при-

ближением ($r^2/R^2 \ll 1$) [4,5], учтем первые два члена ряда

$$\varphi = f_1(t) + f_2(t) \frac{r^2}{2} + \dots \quad (17)$$

Подставляя (16) и (17) в (9), получим

$$f_2 = \frac{\dot{R}}{R}. \quad (18)$$

После подстановки (16), (17) в (10) и приравнивания выражения при нулевой и второй степенях r/R , получим следующую пару уравнений:

$$\dot{f}_1 = \frac{v_0^2}{2} \left(\frac{aR^4}{\rho_0^2 R_0^4} + \frac{\pi}{6} b_2 \rho_0 \frac{R_0^2}{R^2} - \left(\frac{4}{3} b_3 - b \right) \rho_0^2 \frac{R_0^4}{R^4} - \frac{2\pi^2}{3} \frac{R^2}{\rho_0^2 R_0^4} \right), \quad (19)$$

$$f_2 + f_2^2 = 2v_0^2 \left(\frac{aR^2}{\rho_0^2 R_0^4} + \frac{\pi}{6} b_2 \rho_0 \frac{R_0^2}{R^4} + \left(\frac{4}{3} b_3 - b \right) \rho_0^2 \frac{R_0^4}{R^6} - \frac{5\pi^2}{6} \frac{1}{\rho_0^2 R_0^4} \right). \quad (20)$$

Подставляя (18) в (20), приходим к дифференциальному уравнению для радиуса дислокации

$$\ddot{R} = -\frac{\partial U}{\partial R}, \quad (21)$$

которое совпадает по виду с уравнением движения ньютоновской частицы единичной массы в „потенциальном поле“

$$U(R) = \frac{v_0^2}{2} \left[\left(\frac{4}{3} b_3 - b \right) \rho_0^2 \frac{R_0^4}{R^4} - \frac{\pi}{3} b_2 \rho_0 \frac{R_0^2}{R^2} - \frac{a}{\rho_0^2} \frac{R^4}{R_0^4} + \frac{5\pi^2}{3} \frac{R^2}{\rho_0^2 R_0^4} \right]. \quad (22)$$

Первые два слагаемых в квадратных скобках (22) соответствуют кубическому и квадратичному решеточным ангармонизмам, третье описывает влияние периодического кристаллического потенциала подложки в модели Френкеля–Конторовой.

Легко видеть, что роли перечисленных слагаемых в точности совпадают с ролями соответствующих физических механизмов в поперечной динамике краудиона, выявленными в предыдущем разделе на основе геометрического приближения.

Дифракционные эффекты учитываются последним слагаемым в квадратных скобках (22), которое формально совпадает с потенциальной энергией гармонического осциллятора с той разницей, что здесь $R > 0$. Заметим, что в геометрическом приближении ($R_0, R \rightarrow \infty$) эффекты дифракции в (22) исчезают в отличие от перечисленных выше эффектов. Видно, что данное слагаемое

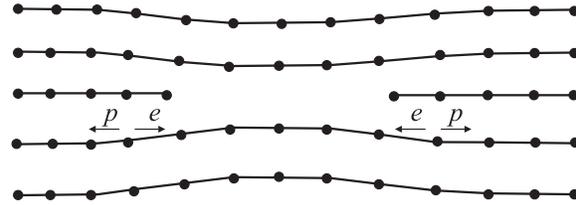


Рис. 2. Конкурирующее влияние упругой „e“ и пластической „p“ деформаций на поперечную структуру краевой дислокации.

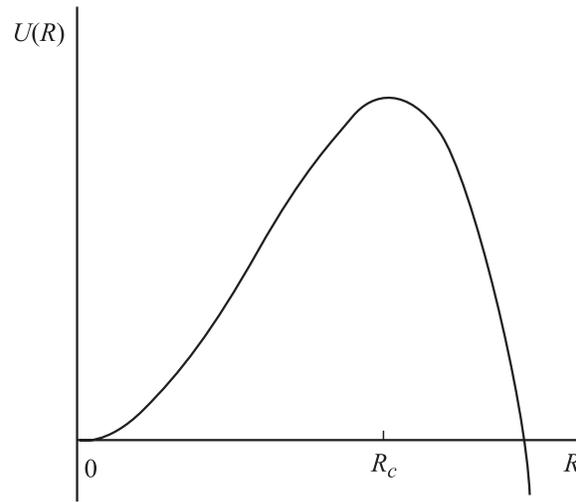


Рис. 3. Зависимость $U(R)$, соответствующая модели Френкеля–Конторовой.

способствует самофокусировке краудиона, т.е. притяжению различных его участков к областям наибольших локальных деформаций. Дело в том, что в нашем случае эффекты дифракции соответствуют упругой деформации в плоскостях поперечных сечений краудиона. Пластическая деформация, действующая в этих направлениях, стремится „растянуть“ краудион, освобождая атомные вакансии (рис. 2). Упругая же деформация, как обычно, препятствует пластической деформации, стремясь восстановить симметрию кристалла.

Используя аналогию с уравнением движения, удобно проследить за динамикой краудиона при его распространении. Так, при $R \rightarrow 0$ будет происходить самофокусировка дислокации, которая в конечном итоге приведет к образованию трещины в кристалле. При $R \rightarrow \infty$ дислокация будет расплываться и в конце концов исчезнет в объеме кристалла. Качественно о поведении функции $R(t)$ можно судить, исследуя зависимость $U(\dot{R})$ вида (22).

Рассмотрим важный частный случай, а именно классическую модель Френкеля–Конторовой, когда в (22) $b = b_2 = b_3 = 0$.

Из зависимости $U(R)$ в этом случае видно (рис. 3), что такая дислокация может либо схлопываться при

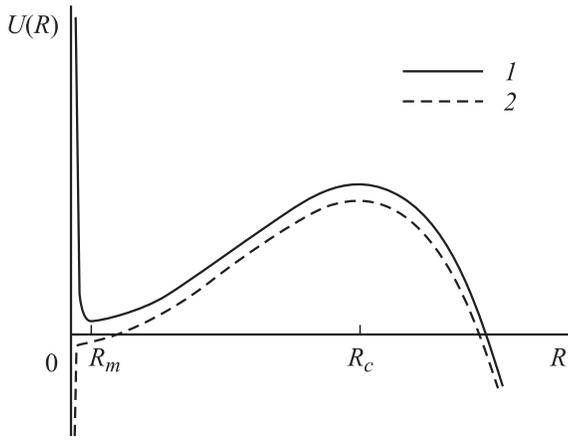


Рис. 4. Кривые $U(R)$ в присутствии квадратичного и кубического ангармонизмов: зависимость 1 соответствует случаю $b_3 > 3b/4$, когда возможно образование „краудионных капель“, а зависимость 2 — случаю $b_3 < 3b/4$.

$R_0 < R_c$, либо расплываться при $R_0 > R_c$, где

$$R_c = \sqrt{\frac{5}{6}} \pi l_s \approx 2.9l_s. \quad (23)$$

Здесь $l_s = 1/\sqrt{a}$ — размер статической дислокации Френкеля–Конторовой, $l_0 = 1/\rho_0$. В этом случае, учитывая близость v к v_0 , можно записать $v = v_0\sqrt{1 - al^2} \equiv v_0\sqrt{1 - l^2/l_s^2} \cong v_0(1 - l^2/2l_s^2)$, что совпадает с (13) при $b = b_2 = b_3 = 0$.

Квадратичный ангармонизм и акустическая дисперсия смещают R_c в область больших значений. Кроме того, при $R \rightarrow 0$ $U(R) \rightarrow -\infty$ (рис. 4). Таким образом, данные механизмы усиливают самофокусирующий эффект, т.е. делают более вероятным образование микротрещин. Кубический ангармонизм играет противоположную роль. Если $b_3 < 3b/4$, он неспособен предотвратить образование трещин. Однако при $b_3 > 3b/4$ кубическая нелинейность может воспрепятствовать самофокусировке. Здесь возможны два процесса: расплывание дислокации или режим, при котором радиус дислокации колеблется около некоторого равновесного значения R_m (рис. 4). В последнем случае можно говорить о движении „краудионной капли“.

Рассмотрим подробнее условия формирования данного режима. Для этого обратимся к выражению (22) для „потенциальной энергии“. Условие экстремума $\partial U/\partial R|_{R=R_m} = 0$ можно записать в виде уравнения

$$Q(q_m) = q_m^4 - Dq_m^3 - B_2q_m + B_3 = 0, \quad (24)$$

где $q_m = (R_m/R_0)^2$, $D = R_c^2/R_0^2$, $B_2 = \pi b_2 l_s^2/6l_0^3$, $B_3 = (4b_3/3 - b)l_s^2/l_0^4 > 0$.

Для образования „краудионной капли“ данный экстремум должен соответствовать минимуму U , т.е. $\partial^2 U/\partial R^2|_{R=R_m} > 0$, что с учетом (24) можно переписать в виде

$$S(q_m) = Dq_m^3 + 3B_2q_m - 4B_3 < 0. \quad (25)$$

Заметим, что в образовании „капли“ участвуют различные конкурирующие эффекты. С одной стороны, это кубический ангармонизм, вкладу которого соответствуют последние слагаемые в (24), (25), а с другой — эффект дифракции и квадратичный ангармонизм (второе и третье слагаемые в (24) соответственно).

Найдем скорость распространения „краудионной капли“. Заметим, что $\xi - \Phi = z - v_0t - \Phi = z - (v_0 + \dot{\Phi})t$. Таким образом, скорость в лабораторной системе отсчета описывается выражением $v = v_0(1 - \dot{\Phi}/v_0^2)$. Тогда, используя (19) и (24), найдем

$$v = v_0 \left(1 - \frac{l_0^2}{10l_s^2 q_m^2} (Dq_m^3 + 10B_2q_m - 10B_3) \right). \quad (26)$$

Из (26) с учетом (25) следует, что „краудионная капля“ может двигаться со сверхзвуковой скоростью при отсутствии квадратичного ангармонизма.

Условия (24), (25) в общем случае довольно громоздки и сложны для анализа. Поэтому рассмотрим некоторые важные предельные случаи, позволяющие проиллюстрировать основные особенности.

Предположим, что эффекты дифракции малы. Полагая в (24) и (25) $D = 0$, найдем условия, налагаемые на начальные параметры дислокации для образования „капли“. Рассмотрим многочлен $Q(q_m)$. Для того чтобы он имел корни, на коэффициенты накладываются определенные условия. Из анализа (24) в этом случае следует, что значение $q_m = (B_2/4)^{1/3}$ соответствует минимуму кривой $Q(q_m)$ и является точкой перегиба „потенциальной энергии“. Чтобы существовали хотя бы два корня (24), один из которых является минимумом $U(R)$, необходимо выполнение неравенства $Q((B_2/4)^{1/3}) < 0$. Отсюда получим условие на параметры среды

$$B_3 < 0.47B_2^{4/3},$$

которое соответствует возможности образования „краудионных капель“. Из (24), (25) можно получить область значений размера „капли“

$$R_m < 0.87B_3^{1/8}R_0.$$

Рассмотрим теперь случай, когда квадратичный ангармонизм мал, а эффекты дифракции существенны. Полагая в (24), (25) $B_2 = 0$ и выполняя вычисления, аналогичные проведенным выше, найдем необходимое условие формирования „капель“

$$R_0 < 0.87B_3^{1/8}R_c.$$

Размер „капли“ в этом случае удовлетворяет неравенству

$$R_m < 1.15B_3^{1/8}R_0.$$

„Краудионная капля“ в этом случае движется со сверхзвуковой скоростью.

Рассмотрим возможность реализации „краудионных капель“ в кристаллах. Для оценок используем потенциал Морзе [13]

$$W = W_0(e^{-2\xi/r_0} - 2e^{-\xi/r_0}),$$

где $\xi \equiv u_{j+1} - u_j$ относительное смещение узлов, r_0 — параметр, определяющий область действия потенциала, W_0 — его глубина.

В окрестности минимума данный потенциал можно представить в виде разложения

$$W = W_0 \left\{ \frac{h^2}{r_0^2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 - \frac{h^3}{r_0^3} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^3 + \frac{7h^4}{12r_0^4} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^4 \right\}.$$

Сравнивая с (2), получим $\lambda_{111}/\lambda_{11} = -3h/2r_0$, $\lambda_{1111}/\lambda_{11} = 7h^2/6r_0^2$. С помощью упругих модулей второго и третьего порядков, величины которых достаточно хорошо известны, можно оценить упругий модуль четвертого порядка λ_{1111} .

В качестве примера рассмотрим кристаллы поваренной соли NaCl. В этом случае имеем $h = 5.63 \text{ \AA}$, $\lambda_{11} = 49 \text{ GPa}$ [14], $\lambda_{111} = -8.5 \times 10^2 \text{ GPa}$ [15]. При этом $b_2 = 3.7 \text{ \AA}$, $b_3 = 48.3 \text{ \AA}^2$, $b = 2.6 \text{ \AA}^2$. Таким образом, необходимое условие $b_3 > 4b/3$ (рис. 4) выполняется. Полагая параметры дислокации $l_0 \sim 10h$, $l_s \sim 100h$, получим $B_2 = 3.5$, $B_3 = 2$. Пусть $R_0 = 0.5R_c = 145h$, тогда из (24), (25) имеем $R_m = 0.68R_0 = 99h$. В поперечном сечении такая дислокация сначала начнет сжиматься, а затем в процессе распространения будет осциллировать вблизи равновесного размера R_m . Амплитудные значения относительной пластической деформации внутри „краудионной капли“ $\varepsilon_m \cong h/\pi l_0 = 0.03$. При этом скорость „капли“ практически совпадает со скоростью звука, лишь на сотые доли процента превышая последнюю.

5. Заключение

В отличие от работ, использующих одномерные модели атомных цепочек, в настоящем исследовании проведен учет влияния поперечных возмущений на движение краевой дислокации, когда существенны упругий ангармонизм второго и третьего порядков, а также акустическая дисперсия, и выяснены роли каждого из этих эффектов в динамике дислокации.

Устойчивость краевой дислокации типа краудиона по отношению к самофокусировке сводится к анализу влияния конкурирующих эффектов. Кристаллический потенциал Френкеля–Конторовой создает дефокусирующий эффект. В то же время квадратичный ангармонизм, ответственный за тепловое расширение, и акустическая дисперсия способствует самофокусировке. Роль кубического ангармонизма может быть двойкой: значительная по сравнению с акустической дисперсией кубическая нелинейность способна воспрепятствовать самофокусировке, в противном случае возникает фокусирующий эффект.

В определенных условиях возможен режим, при котором радиус дислокации колеблется около некоторого равновесного значения. В этом случае можно говорить о „краудионной капле“, которая может двигаться со сверхзвуковой скоростью. Для образования режимов типа „краудионной капли“ важно наличие конкурирующих эффектов. В данном случае это кубический ангармонизм, преобладающий над акустической дисперсией (что соответствует $b_3 > 3b/4$), который создает дефокусирующий эффект, с одной стороны, и квадратичный ангармонизм, наряду с эффектом дифракции способствующий самофокусировке, с другой стороны.

Пробное решение (7) выбрано из тех соображений, что в отсутствие упругого ангармонизма оно соответствует односолитонному решению в модели Френкеля–Конторовой. Как показано в [16], учет квадратичного ангармонизма может привести в одномерном случае к принципиально новым решениям типа дислокаций, которые не сводятся к солитону Френкеля–Конторовой. В дальнейшем, на наш взгляд, представляет интерес исследование влияния поперечных возмущений на дислокации такого типа.

Список литературы

- [1] Я.И. Френкель, Т.А. Конторова. ЖЭТФ **8**, 12, 1340 (1938).
- [2] A.M. Kosevich, A.S. Kovalev. Solid State Commun. **12**, 763 (1973).
- [3] K. Konno, W. Kameyama, H. Sanuki. J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 171 (1974).
- [4] Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. Колебания, волны, структуры. Физматлит, М. (2003).
- [5] М.Б. Виноградова, О.В. Руденко, А.П. Сухоруков. Теория волн. Наука, М. (1990).
- [6] D. Anderson. Phys. Rev. A **27**, 3135 (1983).
- [7] С.К. Жданов, Б.А. Трубников. ЖЭТФ **92**, 1612 (1987).
- [8] С.К. Жданов, Б.А. Трубников. Квазигазовые неустойчивые среды. Наука, М. (1991).
- [9] С.В. Нестеров, С.В. Сазонов. Квантовая электроника **34**, 2, 151 (2004).
- [10] С.В. Сазонов. ЖЭТФ **119**, 3, 419 (2001).
- [11] С.В. Сазонов. УФН **171**, 6, 663 (2001).
- [12] С.В. Сазонов, А.Ф. Соболевский. ЖЭТФ **123**, 6, 1160 (2003).
- [13] А.Н. Орлов. Введение в теорию дефектов в кристаллах. Высш. шк., М. (1983).
- [14] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Физматлит, М. (1963).
- [15] Л.К. Зарембо, В.А. Красильников. УФН **102**, 4, 549 (1970).
- [16] С.А. Беклемишев, В.Л. Клочихин. ФТТ **37**, 1, 150 (1995).