Физика твердого тела, 2001, том 43, вып. 4

Экранировка поля деформации в твердом теле точечными дефектами

© В.И. Емельянов

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119899 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 19 июля 2000 г.)

Показано, что в изотропном бесконечном твердом теле с высокой концентрацией точечных дефектов деформация, создаваемая пробным дефектом, спадает с расстоянием от него по закону, аналогичному закону спадания потенциала точечного заряда с дебаевской экранировкой.

1. Внешние воздействия (лазерное облучение, облучение пучками частиц, действие ударных волн и т.п.) создают в твердых телах высокие концентрации точечных дефектов (вакансий и междоузлий). Взаимодействие дефектов с самосогласованным полем деформации приводит к образованию упорядоченных дефектно-деформационных (ДД) структур: кластеров и периодических структур. Теория стационарных ДД-наноструктур развита в [1], нелинейная многомодовая динамика образования ДД-наноструктур рассмотрена в [2].

В настоящей работе рассматривается новый аспект теории самоорганизующейся ДД-системы. Показано, что при достаточно большой концентрации точечных дефектов меняется характер поля деформации, создаваемого точечным дефектом в изотропном твердом теле. Вместо локализованной деформации, характерной для точечного дефекта в идеальном изотропном твердом теле, появляется деформация, спадающая с расстоянием от дефекта r по закону $\exp(-r/r_s)/r$ (аналогично электростатическому потенциалу точечного заряда с дебаевской экранировкой). Определена длина экранировки упругого взаимодействия дефектов r_s, которая лежит в нанометровом диапазоне.

Рассмотренный здесь эффект экранировки поля деформации точечными дефектами может представлять интерес для теории самоорганизации дефектов, включая проблему образования упорядоченных ДД-наноструктур, поверхностное дефектно-индуцированное плавление и др.

2. Пусть в бесконечном изотропном твердом теле распределены точечные дефекты с средней концентрацией n_{d0}. В начале системы координат $\mathbf{r} = 0$ находится дефект (дилатационный центр), который будет рассматриваться как пробный. Дефекты взаимодейсвуют с полем деформации $\xi(\mathbf{r}, t) = \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, где $\mathbf{u}$ — вектор смещения среды, причем энергия одного дефекта равна [3]

$$H_d = -\theta_d \xi, \tag{1}$$

где $\theta_d = K\Omega_d$, K — модуль упругости, Ω_d — изменение объема кристалла при создании одного дефекта.

Найдем поле деформации, создаваемое пробным дефектом, находящимся в начале координат, в присутствии поля подвижных точечных дефектов с концентрацией n_d. Уравнение этой деформации с учетом (1) записывается в виде

$$\frac{1}{c_l^2}\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = \Delta\xi - \frac{\theta_d}{\rho c_l^2}\Delta\big(\delta(\mathbf{r}) + (n_d - n_{d0})\big), \tag{2}$$

где c_l — продольная скорость звука, ρ — плотность среды, Δ — трехмерный оператор Лапласа, $\delta(\mathbf{r})$ — трехмерная δ-функция Дирака. В (1) мы пренебрегаем дисперсией звука.

Уравнение для концентрации дефектов с учетом (1) записывается в виде [1]

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} = D_d \Delta n_d - \frac{D_d \theta_d}{k_B T} \operatorname{div}\big(n_d \operatorname{grad}(\xi + l_d^2 \Delta\xi)\big), \tag{3}$$

где D_d — коэффициент диффузии дефекта, l_d — длина взаимодействия дефект-атом. Первый член в правой части описывает диффузию, а второй член — деформационно-индуцированный дрейф дефектов. Второй член в круглых скобках учитывает нелокальность взаимодействия дефекта с атомом в решетке (l_d — длина взаимодействия дефект–атом в решетке [1]). Уравнения (2), (3) составляют замкнутую систему уравнений, описывающую самосогласованную ДД-систему.

3. Рассмотрим стационарное состояние такой ДД-системы. Стационарное распределение концентрации дефектов в поле самосогласованной деформации находим из (3), где $\frac{\partial n_D}{\partial t} = 0$

$$\begin{aligned} n_d = {} & n_{d0} \exp\left(\frac{\theta_d}{k_B T}\left(\xi + l_d^2 \Delta\xi\right)\right) \\ \approx {} & n_{d0} + n_{d0}\left(\frac{\theta_d}{k_B T}\left(\xi + l_d^2 \delta\xi\right)\right). \end{aligned} \tag{4}$$

Приближенное равенство здесь имеет место при условии $\theta_d\left(\xi + l_d^2\Delta\xi\right)/k_B T \ll 1$. В соответствии с (4) при $r \to \infty$, когда деформация $\xi \to 0$, концентрация дефектов стремится к своему пространственно-однородному значению: $n_d \to n_{d0}$.

Подставим (4) в (2), где положим $\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = 0$. После преобразования получаем для деформации, создаваемой пробным дефектом, следующее уравнение:

$$\Delta\xi - \frac{1}{r_s}\xi = -\frac{\theta_d}{\rho c_l^2 l_d^2 (n_{d0}/n_{dc})}\delta(\mathbf{r}), \tag{5}$$

где длина экранировки упругого взаимодействия

$$r_s = l_d \left(\frac{n_{d0}}{n_{dc}}\right)^{1/2} \Big/ \left(1 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}}\right)^{1/2} \tag{6}$$

и критическая концентрация дефектов

$$n_{dc} = \rho c_l^2 k_B T/\theta_d^2. \tag{7}$$

Решение уравнения (5) при условии

$$n_{d0} < n_{dc} \tag{8}$$

имеет вид

$$\xi(\mathbf{r}) = \frac{\theta_d}{\rho c_l^2 4\pi l_d^2 (n_{d0/n_{dc}})} \frac{\exp(-r/r_s)}{r}. \tag{9}$$

В соответствии с (9) точечный дефект, находящийся в точке $\mathbf{r} = 0$, создает при условии (8) поле деформации, убывающее с расстоянием аналогично потенциалу точечного заряда, заэкранированного самосогласованным распределением других зарядов (дебаевская экранировка). При этом аналогом радиуса Дебая является радиус экранировки упругого взаимодействия (6).

Переход к случаю бездефектной среды с одним пробным дефектом в начале координат $\mathbf{r} = 0$ осуществляется предельным переходом в формуле (9): $n_{d0} \to 0$. Тогда с учетом представления δ-функции

$$\delta(\mathbf{r}) = \lim_{r_s \to 0} \left(\frac{\exp(-r/r_s)}{4\pi r_s^2 r}\right)$$

и (6) из (9) имеем

$$\lim_{n_{d0} \to 0} \xi(\mathbf{r}) = \frac{\theta_d}{\rho c_l^2}\delta(\mathbf{r}). \tag{10}$$

Формула (10) совпадает с обычным выражением для поля деформации точечного дефекта в бесконечном, бездефектном изотропном твердом теле [3].

4. При учете дисперсии звука в уравнении (2) условие (8), определяющее значения концентрации дефектов, при которых существует экранировка деформации, заменяется условием

$$l_0^2 n_{dc}/l_d^2 < n_{d0} < n_{dc}, \tag{11}$$

где l_0 — параметр дисперсии звука (длина взаимодействия атом-атом в решетке). Для металлов $l_d \gg l_0$ [4].

Как видно из (11), экранировка упругого взаимодействия точечных дефектов возникает, когда концентрация дефектов превышает первое критическое значение $n_{dc1} = l_0^2 n_{dc}/l_d^2$, где $n_{dc} \sim 10^{19}\,\mathrm{cm}^{-3}$ ($\rho c_l \sim \mathrm{K} \sim 10^{12}\,\mathrm{erg \cdot cm^{-3}}$, $T \sim 300\,\mathrm{K}$, $\theta_d \sim 10 \sim$eV).

В [1,2] показано, что при условии (11) в системе дефектов, взаимодействующих через упругое поле, возникает неустойчивость, в результате которой образуются кластеры дефектов, автолокализованных в деформационных потенциальных ямах. Размер такого ДД-кластера, полученный в [1], совпадает при условии $l_d \gg l_0$ с радиусом экранировки упругого взаимодействия r_s, задаваемым формулой (6).

Таким образом, при условии $n_{d0} > n_{dc1}$ твердое тело разбивается на независимые области с размером порядка радиуса экранировки r_s, внутри которых упругое взаимодействие между дефектами приводит к образованию ДД-нанокластеров.

При превышении второго порога по концентрации дефектов ($n_{d0} > n_{dc}$) в среде образуются периодические ДД-наноструктуры [1,2]. В [1] показано, что их образование описывается уравнением Ландау–Гинзбурга и происходит как фазовый переход второго рода. При этом радиус экранировки (6) играет роль длины корреляции в области до фазового перехода ($n_{d0} < n_{dc}$). Как видно на (6), при приближении к точке фазового перехода ($n_{d0} \to n_{dc}$) длина корреляции $r_s \to \infty$ в соответствии с ее обычным поведением при фазовых переходах второго рода [5].

Список литературы

[1] В.И. Емельянов, И.М. Панин. ФТТ **39**, *11*, 2029 (1997).
[2] В.И. Емельянов, И.М. Панин. ФТТ **42**, *6*, 1026 (2000).
[3] Дж. Эшелби. Континуальная теория дефектов. ИЛ, М. (1963).
[4] V.I. Emel'yanov, I.M. Panin. SPIE **3734**, 294 (1998).
[5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Ч. 1. Наука, М. (1976).