Взаимодействие точечных дефектов с краевой дислокацией в градиентной теории упругости

© Н.М. Власов

Государственный научно-исследовательский институт научно-производственного объединения "Луч",
142100 Подольск, Московская обл., Россия

E-mail: iifedik@podolsk.ru

(Поступила в Редакцию 27 февраля 2001 г.)

Изучен вопрос взаимодействия точечных дефектов с краевой дислокацией в градиентной теории упругости. Получены соотношения для изменения энергии системы при смещении точечного дефекта относительно дислокационной линии. Результаты теоретического анализа привлекаются для описания закрепления краевых дислокаций атомами примеси.

Потенциал взаимодействия атома примеси с краевой дислокацией в классической теории упругости для размерного эффекта хорошо известен [1,2]

$$V = -\beta \frac{\sin\theta}{r}, \quad \beta = \frac{\mu b(1+\nu)\delta\upsilon}{3\pi(1-\nu)}, \tag{1}$$

где r и θ — полярные координаты ($0 \le \theta \le 2\pi$), μ — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, b — модуль вектора Бюргерса дислокации, $\delta\upsilon$ — изменение объема кристалла при размещении атома примеси. Для $\delta\upsilon > 0$ (атом примеси увеличивает объем кристалла) при $\pi \le \theta \le 2\pi$ потенциал V принимает положительное значение. Это соответствует притяжению атома примеси к области дислокации с положительной дилатацией. Расходимость потенциала V при $r \to 0$ исключают путем выделения ядра дислокации с характерным размером в несколько межатомных расстояний. На долю ядра приходится не более 10% упругой энергии в окрестности отдельных дислокаций при разумных значениях их плотности. Такие модели позволяют достаточно корректно решать различные задачи физики твердого тела. Использование градиентной теории упругости для определения полей напряжений структурных несовершенств весьма привлекательно [3–5]. Авторы этих работ получили математически простые и физически наглядные выражения для полей напряжений известных структурных дефектов. Ценность данных соотношений заключается прежде всего в устранении сингулярности на линиях структурных несовершенств. Это влечет за собой изменение потенциала взаимодействия атома примеси с дефектами кристаллической структуры. Поэтому крайне интересно рассмотреть влияние модифицированного потенциала взаимодействия на изменение характера закрепления краевой дислокации примесными атомами.

Компоненты тензора напряжений краевой дислокации в градиентной теории упругости известны [3–5]. Поэтому потенциал взаимодействия получаем довольно легко

$$V = \beta\left[-\frac{1}{r} + \frac{K_1\left(\frac{r}{\sqrt{c}}\right)}{\sqrt{c}}\right]\sin\theta, \tag{2}$$

где $K_1(x)$ — модифицированная функция Бесселя второго рода первого порядка, $\sqrt{c}$ — градиентный коэффициент. Его численное значение принимают из физических соображений. Так, например, для краевой дислокации $\sqrt{c} \approx \frac{a}{4}$, где a — параметр кристаллической решетки. При $r \to 0$ имеем $K_1\left(\frac{r}{\sqrt{c}}\right) \to \frac{\sqrt{c}}{r}$, т.е. исчезает особенность потенциала V в начале координат. С позиции математического формализма необходимо найти функцию, которая при $r \to 0$ изменялась бы по закону $\frac{1}{r}$ с противоположным знаком и стремилась бы к нулю при больших значениях аргумента. Подобная функция исключала бы сингулярность V при $r \to 0$. Несомненным достоинством модифицированного потенциала взаимодействия является то, что искомая функция получена как результат решения задачи в градиентной теории упругости (учитываются вторые производные от тензора деформации в законе Гука). При этом следует особо подчеркнуть, что модель взаимодействия атома примеси с краевой дислокацией в градиентной теории упругости никоим образом не затрагивает атомное строение кристалла. В этом приближении кристалл рассматривают как непрерывный сплошной континуум, краевую дислокацию моделируют дислокационной линией, а точечные дефекты (примеси замещения или внедрения) считают центрами дилатации. Именно при таком подходе возможно непротиворечивое описание взаимодействия атомов примеси с краевой дислокацией в окрестности $0 \le r \le \frac{a}{4}$. Атомные модели на основе теории кристаллической решетки представляют собой самостоятельные ответвления и здесь не затрагиваются.

Пусть точечный дефект расположен под экстраплоскостью краевой дислокации $\left(\theta = \frac{3\pi}{2}\right)$. В этом случае безразмерный потенциал взаимодействия при произвольном значении градиентного коэффициента находится из выражения

$$\frac{V\sqrt{c}}{\beta} = \frac{1}{x} - K_1(x), \quad x = \frac{r}{\sqrt{c}}. \tag{3}$$

Максимальное значение $\frac{V\sqrt{c}}{\beta}$ соответствует корню трансцендентного уравнения

$$K_0(x) + \frac{K_1(x)}{x} - \frac{1}{x^2} = 0, \tag{4}$$

где $K_0(x)$ и $K_1(x)$ — модифицированные функции Бесселя второго рода нулевого и первого порядков. Численные значения этих функций приведены в таблицах [6]. Приближенное значение корня уравнения (4) равно $x_0 \approx 1.115$. Если $\sqrt{c} = \frac{a}{4}$, то максимум V достигается при $\frac{r_0}{a} \approx 0.278$. Это отвечает минимуму энергии системы дислокация–точечный дефект. Изменение положения точечного дефекта по отношению к дислокации сопровождается увеличением энергии системы. Ее приращение при смещении точечного дефекта в ту или иную сторону относительно равновесного положения описывается выражением (на единицу длины)

$$\frac{\Delta W\sqrt{c}}{L\beta} = \frac{1}{x_0} - K_1(x_0) - \frac{1}{x} + K_1(x). \quad (5)$$

Здесь L указывает на то, что приращение энергии относится к единичной длине вдоль дислокационной линии. При $x > x_0$ энергия системы возрастает и появляется сила, стремящаяся вернуть точечный дефект в равновесное положение. Для $x < x_0$ энергия системы увеличивается интенсивнее и той же интенсивности подчиняется возрастающая сила. Математически это обусловлено поведением функции Бесселя при больших и малых значениях аргумента. В самом деле, при $x > x_0$ функция $K_1(x)$ убывает по экспоненциальному закону и при достаточно больших значениях аргумента стремится к нулю. При $x < x_0$ ситуация меняется: функция $K_1(x) \to \frac{1}{x}$. Приращение энергии системы при $x \to 0$ и $x \to \infty$ одинаково и равно $\frac{1}{x_0} - K_0(x)$. Однако по интенсивности приращения энергии два предельных случая сильно отличаются. Поэтому и возращающая сила асимметрична относительно равновесного положения точечного дефекта около дислокационной линии. Физически это означает, что точечный дефект гораздо легче удалить от краевой дислокации, нежели приблизить к ней из равновесного положения. Соответствующая сила, действующая на точечный дефект, определяется как производная от приращения энергии по смещению (на единицу длины)

$$\frac{F\sqrt{c}}{L\beta} = \frac{1}{x^2} - K_0(x) - \frac{K_1(x)}{x}. \quad (6)$$

При $x = x_0$ это выражение равно нулю, так как x_0 является решением трансцендентного уравнения (4). Возвращающая сила также асимметрична относительно равновесного положения точечного дефекта. Такая асимметрия имеет качественные особенности. Они обусловлены поведением функции Бесселя. Если x меняется в интервале от x_0 до ∞, то $\frac{F\sqrt{c}}{L\beta}$ приобретает максимум. Если же x изменяется в интервале от 0 до x_0, то $\frac{F\sqrt{c}}{L\beta}$ неограниченно возрастает. Это обусловлено логарифмической особенностью функции $K_0(x)$ при $x \to 0$. Физически это означает, что точечный дефект всегда можно удалить от дислокационной линии. Для этого достаточно преодолеть максимум возвращающей силы. Однако приблизить точечный дефект к линии дислокации невозможно, поскольку препятствующая сила непрерывно увеличивается и при $x \to 0$ стремится к бесконечности по логарифмическому закону. Эти интересные

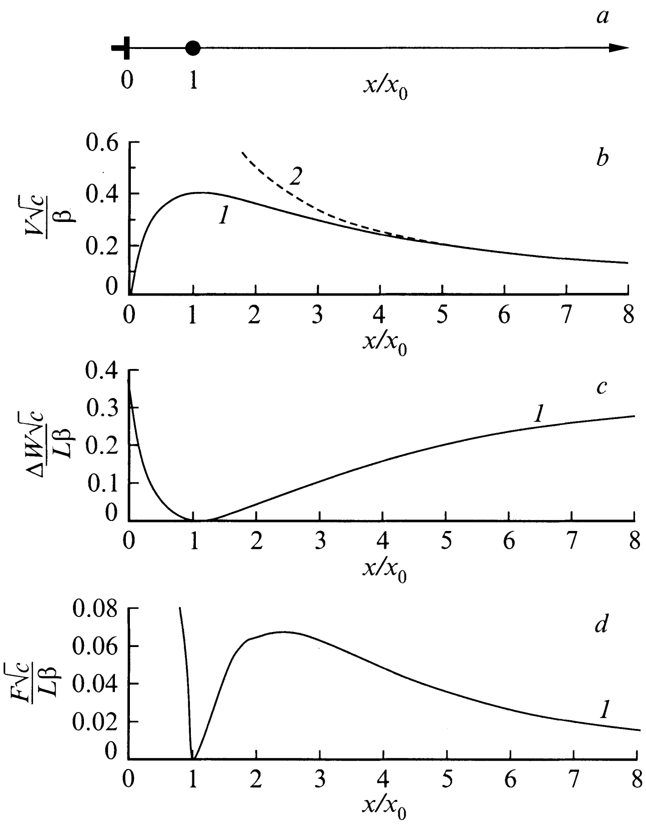

Рис. 1. Взаимодействие краевой дислокации с точечным дефектом в градиентной теории упругости. a — взаимное расположение точечного дефекта и краевой дислокации, b — потенциал взаимодействия точечного дефекта и краевой дислокации, c — приращение энергии системы при смещении точечного дефекта, d — изменение силы, действующей на точечный дефект.

результаты получены при использовании градиентной теории упругости для определения поля напряжений краевой дислокации. Величина x_0 соответствует энергетическому параметру ядра дислокации в классической теории упругости, который ограничен пределами от $b/3$ до $b/4$ (b — модуль вектора Бюргерса дислокации) [7]. В области ядра энергии связи точечного дефекта с дислокацией существенно меньше максимального значения. Поэтому точечные дефекты мигрируют в область с максимальным значением потенциала взаимодействия.

Для иллюстрации полученных соотношений на рис. 1 приведены графические зависимости. Взаимное расположение точечного дефекта и краевой дислокации показано на рис. 1, a. Такая конфигурация отвечает максимуму потенциала взаимодействия (рис. 1, b). На этом же рисунке штриховая кривая показывает изменение потенциала взаимодействия в классической теории упругости (исключается функция $K_1(x)$ в соотношении (3)). Отчетливо видно, что при $x > 4$ эти зависимости совпадают. Такое совпадение обусловлено поведением функций Бесселя при больших значениях аргументов. Существенное отличие имеет место при малых значениях безразмерного смещения. Градиентная теория упругости дает нулевое значение потенциала взаимодействия при $r \to 0$, а классическая теория приводит к бесконечно большому значению последнего. Приращение энергии системы при смещении точечного дефекта показано на рис. 1, *c*. Для $x \to 0$ и $x \to \infty$ максимумы приращения энергии одинаковы. Это приводит к асимметричной графической зависимости кривой относительно равновесного положения точечного дефекта. Если последний выводится из состояния равновесия, то появляется возвращающая сила (рис. 1, *d*). Ее асимметричность относительно $x = x_0$ проявляется наиболее ярко. При этом меняется качественный характер поведения кривой для $x > x_0$ и $x < x_0$. Для первого случая $(x > x_0)$ характерно наличие максимума возвращающей силы. Он соответствует точке перегиба на кривой приращения энергии системы. Во втором случае $(x < x_0)$ такой максимум отсутствует: при $x \to 0$ возвращающая сила неограниченно возрастает. Для $x > x_0$ максимум возвращающей силы достигается при $\frac{x}{x_0} \approx 2.4$. Для $x < x_0$ такая же величина возвращающей силы получается при $\frac{x}{x_0} \approx 0.85$. Другими словами, уже при малом смещении точечного дефекта к линии дислокации из положения равновесия возникает сила, равная максимальному значению при $x > x_0$. Физический смысл этого результата состоит в том, что точечные дефекты не могут находиться на дислокационной линии: потенциал взаимодействия неминуемо переводит их в равновесное положение. Разумно предположить, что и примесные атмосферы из точечных дефектов должны занимать область $x \geq x_0$ в окрестности краевой дислокации. Таким образом, градиентная теория упругости подтверждает корректность физической модели краевой дислокации, когда для исключения сингулярности вводилось ядро с характерным размером в несколько межатомных расстояний. Такая модель принималась для анализа процесса закрепления краевой дислокации примесными атмосферами [8,9].

Далее рассмотрим закрепление краевой дислокации атомами примеси в градиентной теории упругости. Пусть точечный дефект (модель атома примеси) занимает равновесное положение под экстраплоскостью краевой дислокации (рис. 2, *a*). При скольжении дислокации без изменения положения точечного дефекта энергия системы увеличивается. Ее приращение в зависимости от безразмерного смещения определяется соотношением (на единицу длины)

$$\frac{\Delta W_1\sqrt{c}}{L\beta} = \left[\frac{1}{x_0} - K_1(x_0)\right]\sin\theta - \left[\frac{1}{\rho} - K_1(\rho)\right]\sin\varphi, \quad (7)$$

где $\rho = \sqrt{x^2 + x_0^2}$, $|\sin\theta| = 1$, $|\sin\varphi| = \frac{x_0}{\rho}$, $x_0 = \frac{r_0}{\sqrt{c}}$.

После несложных преобразований получим

$$\frac{\Delta W\sqrt{c}}{L\beta} = \frac{x^2}{x^2 + x_0^2} - K_1(x_0) + \frac{x_0 K_1\left(\sqrt{x^2 + x_0^2}\right)}{\sqrt{x^2 + x_0^2}}. \quad (8)$$

Зависимость безразмерного приращения энергии системы от смещения краевой дислокации приведена на

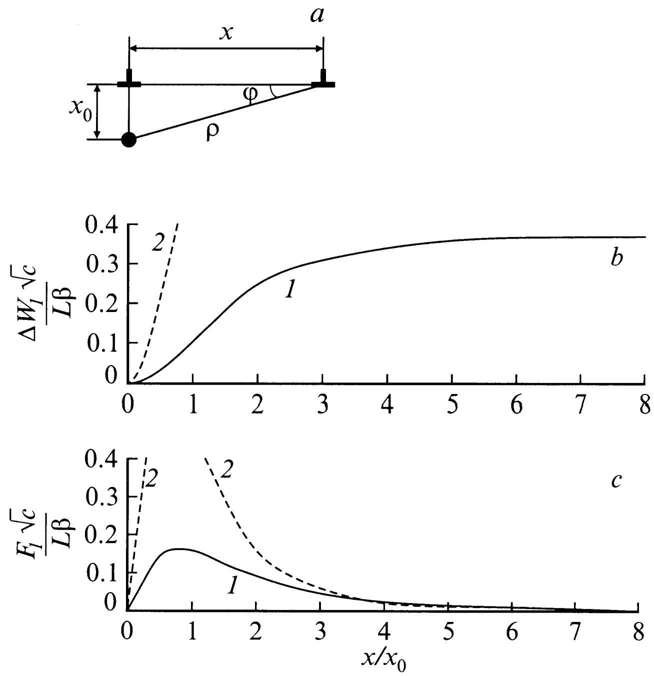

Рис. 2. Закрепление краевой дислокации точечным дефектом. *a* — взаимное расположение точечного дефекта и смещенной дислокации, *b* — приращение энергии системы при смещении дислокации, *c* — сила закрепления краевой дислокации точечным дефектом. *1* — градиентная теория, *2* — классическая теория.

рис. 2, *b*. Сначала точечный дефект находился в равновесном положении на расстоянии x_0 от дислокации. При ее скольжении без изменения положения точечного дефекта появляется сила, действующая на дислокацию. Иными словами, точечный дефект закрепляет краевую дислокацию. Сила закрепления определяется как производная от приращения энергии по смещению дислокации (на единицу длины)

$$\frac{F_1\sqrt{c}}{L\beta} = \frac{2xx_0^2}{(x^2 + x_0^2)^2} - \frac{xx_0}{x^2 + x_0^2} \times \left[K_0\left(\sqrt{x^2 + x_0^2}\right) + \frac{2K_1\left(\sqrt{x^2 + x_0^2}\right)}{\sqrt{x^2 + x_0^2}}\right]. \quad (9)$$

Эта зависимость приведена на рис. 2, *c*. Для сравнения штриховые кривые на рис. 2, *b* и *c* показывают соответствующие зависимости в классической теории упругости (из соотношений (8) и (9) исключаются члены, содержащие функции Бесселя). Видно, что имеется только количественное отличие, качественное поведение этих кривых одинаково. Это непосредственно следует из вида соотношений (8) и (9). В градиентной теории упругости приращение энергии системы и вида закрепления дислокации атомом примеси уменьшены по сравнению с классической теорией. Поэтому использование градиентной теории упругости для анализа процесса закрепления краевой дислокации атомом примеси не приводит к появлению принципиально новых закономерностей. По сути дела описание краевой дислокации в градиентной теории упругости эквивалентно введению характерного размера ядра дислокации в зависимости от градиентного коэффициента. Такой вывод непосредственно следует из основного результата проведенного анализа: точечный дефект невозможно приблизить к линии дислокации из-за неограниченного увеличения возвращающей силы. Поэтому точечные дефекты сосредоточены, как правило, на некотором расстоянии от линии дислокации (равновесное положение точечного дефекта). Это расстояние соответствует энергетическому параметру ядра краевой дислокации в классической теории упругости.

Список литературы

[1] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Пер. с англ. Мир, М. (1972). 595 с.
[2] К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Пер. с англ. Мир, М. (1985). 551 с.
[3] М.Ю. Гуткин, Е.С. Айфантис. ФТТ **41**, *12*, 2158 (1999).
[4] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, Е.С. Айфантис. ФТТ **42**, *9*, 1606 (2000).
[5] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, Е.С. Айфантис. ФТТ **42**, *9*, 1613 (2000).
[6] Л.Н. Кармазина, Э.А. Числова. Таблицы функций Бесселя от мнимого аргумента и интегралов от них. Изд-во АН СССР, М. (1958). 328 с.
[7] Т. Судзуки, Х. Ёсинага, С. Такеути. Динамика дислокаций и пластичность. Пер. с англ. Мир, М. (1989). 294 с.
[8] Н.М. Власов. ФММ **56**, *3*, 583 (1983).
[9] Н.М. Власов, В.А. Зазноба. ФТТ **41**, *3*, 451 (1999).