Краткие сообщения

05

Наиболее опасное направление скольжения в ГЦК-кристалле серебра при деформации сдвига (111) $\langle 1\bar{2}1 \rangle$

© С.Н. Бедарев, Д.Д. Рудер

Алтайский государственный университет,
656049 Барнаул, Россия
e-mail: bedarev@law.asu.ru, ddr@asu.ru

(Поступило в Редакцию 10 августа 2009 г.)

Методом компьютерного моделирования исследован механизм разрушения ГЦК-решетки серебра при деформации сдвига (111) $\langle 1\bar{2}1 \rangle$ и определено направление неустойчивого смещения атомов в кристалле при нарушении динамического условия устойчивости. Показано, что наиболее опасное направление движения атомов в кристалле, приводящее к структурной неустойчивости, не полностью совпадает с направлением $\langle 1\bar{2}1 \rangle$, лежащим в плоскости (111), а имеет перпендикулярную составляющую в направлении [111].

Условия устойчивости кристаллической решетки под действием внешних нагрузок были впервые достаточно полно и систематически исследованы Борном [1]. В работе установлено, что общим условием устойчивости решетки являются условия действительности всех частот нормальных колебаний для всех волновых векторов $\mathbf{k}$ внутри зоны Бриллюэна:

$$\omega^2(\mathbf{k}) > 0. \tag{1}$$

Условия (1) можно рассматривать как динамические условия устойчивости кристаллической решетки. В длинноволновом пределе динамические условия устойчивости совпадают с условиями термодинамической устойчивости кристалла при статической однородной деформации.

Анализ динамических условий устойчивости решетки обладает тем несомненным достоинством, что при решении задачи на собственные значения динамической матрицы $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ [2]:

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{k})e_\beta(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k})e_\alpha(\mathbf{k}) \tag{2}$$

можно определить и собственные векторы $e_\alpha(\mathbf{k})$, направление которых совпадает с направлением колебания атомов соответствующей моды колебаний. Следовательно, анализ направления собственного вектора моды колебаний, частота которой при деформации обращается в нуль, позволяет определить направление неустойчивого движения атомов кристалла, приводящее к его разрушению, т. е. исследовать механизм разрушения кристалла.

В настоящей работе эта идея применена для исследования механизма разрушения ГЦК-решетки серебра при деформации сдвига (111) $\langle 1\bar{2}1 \rangle$ и определения направления неустойчивого смещения атомов в кристалле при нарушении динамического условия устойчивости.

Схема расположения атомов и схема моделирования деформации сдвига приведены на рис. 1. Плотноупакованные плоскости (111) ГЦК-решетки в недеформированном состоянии расположены параллельно плоскости $Y = 0$, кристаллографические направления $[1\bar{2}1]$ и $[10\bar{1}]$ ориентированы вдоль осей координат $0X$ и $0Z$ соответственно. Деформация сдвига осуществляется путем наклона кристаллографического направления [111] в сторону оси $0X$, при этом атомные плоскости (111) сдвигаются параллельно вдоль оси $0X$, величина сдвига характеризуется углом сдвига γ между направлением [111] и осью $0Y$.

В качестве модели межатомного взаимодействия использована разработанная авторами модель [3], основанная на методе внедренного атома [4]. В зависимости от угла сдвига γ были рассчитаны фононные спектры для

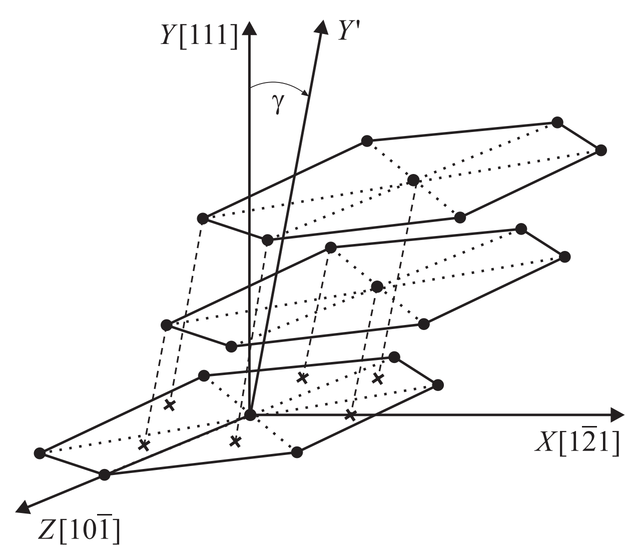

Рис. 1. Схема моделирования сдвига (111) $\langle 1\bar{2}1 \rangle$.

следующих 25 направлений волнового вектора: [001], [010], [100], [110], [1$\bar{1}$0], [101], [10$\bar{1}$], [011], [01$\bar{1}$], [111], [11$\bar{1}$], [1$\bar{1}$1], [$\bar{1}$11], [112], [11$\bar{2}$], [1$\bar{1}$2], [$\bar{1}$12], [121], [12$\bar{1}$], [1$\bar{2}$1], [$\bar{1}$21], [211], [21$\bar{1}$], [2$\bar{1}$1], [$\bar{2}$11]. Анализ фотонных частот в этих направлениях показал, что первыми обращаются в нуль квадраты частот поперечной моды T_2 в направлении [111], независимо от значения модуля волнового вектора (рис. 2, a), критический угол сдвига $\gamma_{\text{crit}} \approx 0.15$.

Для уточнения минимального критического угла сдвига и соответствущего волнового вектора, при котором нарушаются динамические условия устойчивости, были рассчитаны фононные спектры для произвольных направлений волнового вектора в зависимости от сферических координат волнового вектора $\mathbf{k}(k, \vartheta, \varphi)$, где k — модуль волнового вектора, ϑ — угол между вектором $\mathbf{k}$ и осью $0Y$, а φ — угол между проекцией вектора $\mathbf{k}$ на плоскость $X0Z$ и осью $0X$.

Так как нарушение динамических условий устойчивости (1) в данном направлении приосходит одновременно независимо от модуля волнового вектора, то ниже приведены результаты расчета для фиксированного значения модуля волнового вектора $k/k_{\max} = 0.1$.

Результаты расчета фононных спектров для произвольных направлений волнового вектора показали, что первым происходит нарушение динамического условия устойчивости (1) также для моды T_2 вблизи окрестности направления [111]. На рис. 2, b приведены результаты расчета частот фононов для моды T_2 в зависимости от угла θ для волнового вектора $\mathbf{k}$, лежащего в плоскости (10$\bar{1}$) ($\varphi = 0$), для значений угла сдвига $\gamma = 0.1302$, 0.1304 и 0.1306. Из рис. 2, b видно, что критической является деформация сдвига $\gamma = 0.1304$, при которой в нуль обращается частота фононов для направления волнового вектора $\mathbf{k}$ с координатами $\vartheta_{\text{crit}} = -7.2^\circ$ и $\varphi = 0^\circ$. Декартовы координаты собственного вектора $e_{T_2}(\mathbf{k})$ равны (0.98922; 0.14643;0). Таким образом, поскольку Z-координата вектора $e_{T_2}(\mathbf{k})$ равна нулю, то вектор $e_{T_2}(\mathbf{k})$ лежит в кристаллографической плоскости [10$\bar{1}$]. Угол наклона вектора $e_{T_2}(\mathbf{k})$ к плоскости (111) равен 8.42°.

Для того чтобы исследовать условия динамической устойчивости для волнового вектора $\mathbf{k}$, не лежащего в плоскости (10$\bar{1}$), были проведены расчеты значения частоты фононов для моды T_2 в зависимости от угла θ в окрестности критического значения $\vartheta_{\text{crit}} = -7.2^\circ$ для разных значений угла φ. Результаты расчета для значения $\gamma_{\text{crit}} \approx 0.1304$ приведены на рис. 2, c. Из рис. 2, c видно, что для волнового вектора $\mathbf{k}$, не лежащего в плоскости (10$\bar{1}$), нарушение динамических условий устойчивости происходит позже, чем для вектора $\mathbf{k}$, лежащего в плоскости (10$\bar{1}$).

На рис. 3 приведено расположение атомов в плоскости [10$\bar{1}$] при деформации сдвига со значением $\gamma_{\text{crit}} \approx 0.1304$, там же показано направление собственного вектора $e_{T_2}(\mathbf{k})$. Из рис. 3 видно, что направление

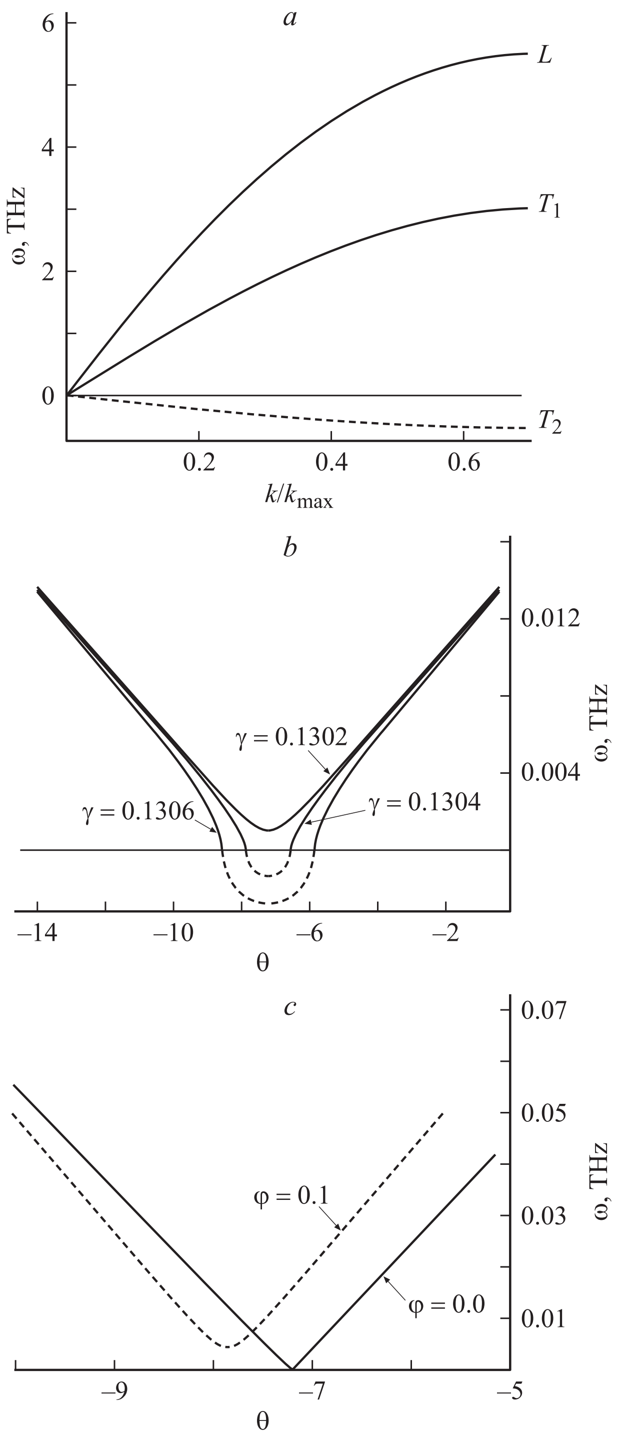

Рис. 2. Фононные спектры Ag: a — для направления волнового вектора [111] при угле сдвига $\gamma_{\text{crit}} \approx 0.15$; b — для моды T_2 в зависимости от угла θ при $\varphi = 0$ для разных значений угла сдвига $\gamma(k/k_{\max} = 0.1)$; c — для моды T_2 в зависимости от угла θ для разных значений угла φ при значении $\gamma_{\text{crit}} \approx 0.1304$.

вектора $e_{T_2}(\mathbf{k})$ с хорошей точностью совпадает с кристаллографическим направлением [2$\bar{3}$2].

Таким образом, наиболее опасное направление движения атомов в кристалле при деформации сдвига (111)

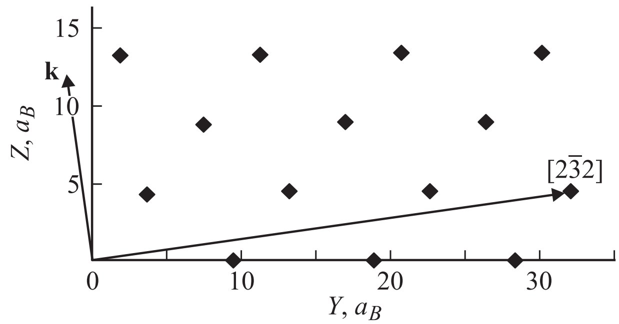

Рис. 3. Наиболее опасное направление сдвига.

$\langle 1\bar{2}1 \rangle$, приводящее к структурной неустойчивости, не полностью совпадает с направлением $\langle 1\bar{2}1 \rangle$, лежащим в плоскости (111), а имеет перпендикулярную составляющую в направлении $[111]$, поэтому при деформации сдвига $(111)\ \langle 1\bar{2}1 \rangle$ должно происходить увеличение межплоскостного расстояния между плотноупакованными плоскостями (111).

Список литературы

[1] *Борн М., Кунь Х.* Динамическая теория кристаллических решеток. М.: ИЛ, 1958. 488 с.

[2] *Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж.* Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М.: Мир, 1965. 383 с.

[3] *Бедарев С.Н., Рудер Д.Д.* // Изв. АлтГУ. 2007. № 1 (43). С. 87–89.

[4] *Daw M.S., Baskes M.I.* // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 29. P. 6443–6453.