АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР им. Б.И.ВЕРКИНА

на правах рукописи

СМИРНОВ Сергей Николаевич

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР И ПОДВИЖНОСТЬ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ СО СЛУЧАЙНЫМИ ПОЛЯМИ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ

01.04.07 - физика твердого тела

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Харьков - 1992

Работа выполнена в Физико-техническом институте низких температур им. Б.И. Веркина АН Украины.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Нацик В.Д.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Бакай А.С.
доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник
Ландау А.И.

Ведущая организация: Донецкий физико-технический институт АН Украины

Защита состоится "23" февраля 1993 года в 15 часов на заседании Специализированного совета К 016.27.01 при Физико-техническом институте низких температур им. Б.И.Веркина АН Украины, по адресу: 310164, Харьков-164, пр. Ленина,47.
С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИНТ АН Украины.

Автореферат разослан "22" января 1993 г.

Ученый секретарь
Специализированного совета
кандидат физико-математических наук П.П. Паль-Валь

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Одной из актуальных задач современной физики твердого тела является изучение специфических линейных дефектов кристаллической решетки - дислокаций. Дислокации обладают высокой подвижностью и могут перемещаться в кристалле, проявляя себя в разнообразных физических явлениях. Оказывая определяющее влияние на механические свойства кристаллических материалов, они в той или иной мере влияют и на многие другие физические характеристики: тепловые, электрофизические, магнитные, оптические, способность поглощать и рассеивать различные виды излучения и т.д.

Среди ряда факторов, определяющих динамику дислокаций и их ансамблей, весьма важную роль играют внутренние напряжения в кристаллах. Разнообразие источников внутренних напряжений и неоднородность их расположения неизбежно приводят к существенной пространственной неоднородности полей внутренних напряжений. Кроме того, пространственное распределение создающих внутренние напряжения дефектов имеет, как правило, случайный характер, поэтому и поля внутренних напряжений также являются случайными. По этим причинам изучение динамики дислокаций в неоднородных случайных полях напряжений считается одной из важнейших задач физики дефектов.

Особую роль в динамике дислокаций играет также их взаимодействие с ансамблем локальных (точечных) дефектов кристаллической решетки: вакансиями, междоузельными атомами, примесями, радиационными дефектами и т.д. Важно, что атомные дефекты всегда присутствуют в кристаллах, а их вид и количество можно изменять контролируемым образом. Регулирование плотности и характеристик локальных дефектов путем легирования, радиационных, механических или тепловых воздействий служит основой различных методов управления прочностными и пластическими свойствами современных конструкционных материалов. Хотя влияние примесей и других локальных дефектов на динамику дислокаций давно и широко изучается, в настоящее время это направление еще далеко от завершения и признается одним из наиболее актуальных в физическом материаловедении. Многие аспекты этой проблемы остаются неясными и требуют детального изучения как в экспериментальном так и в теоретическом плане.

Цель работы. Основной задачей диссертации являлось теоретическое исследование движения дислокаций, взаимодействующих с неупорядоченными примесями и испытывающих влияние крупномасштабных пространственно неоднородных и случайных полей внутренних напряжений:

описание поступательного (транспортного) термофлуктуационного движения дислокаций; изучение изменений, вносимых дислокациями в колебательный спектр кристалла; анализ дислокационного вклада в теплоемкость и внутреннее трение кристаллов.

Научная новизна. Развит оригинальный метод вычисления средней скорости поступательного термоактивированного движения дислокации в неоднородных полях внутренних напряжений для случаев, когда характерная длина волны этого поля много больше средней длины дислокационного сегмента, позволивший впервые выяснить физический смысл эффективного противодействующего внутреннего напряжения. В рамках одномерной математической модели при достаточно общих условиях строго доказана самоусредняемость выборочной средней скорости.

Дано строгое и последовательное описание взаимодействия дислокационного сегмента с точечным дефектом с учетом неоднородного поля внутренних напряжений.

Проведено систематическое исследование колебательного спектра дислокации с учетом ее упругого взаимодействия с большим числом точечных дефектов, случайно расположенных в кристалле.

Проанализированы собенности дислокационного амплитудно-независимого внутреннего трения и низкотемпературной теплоемкости, обусловленные взаимодействием дислокаций с системой неупорядоченых точечных дефектов.

Изучены основные особенности колебательных спектров микрокристаллов с дислокациями.

Научная и практическая значимость. Проведенные в диссертации исследования существенно повышают уровень понимания физических механизмов, определяющих свойства реальных кристаллов, содержащих точечные дефекты и дислокации.

Результаты анализа влияния пространственно неоднородных полей внутренних напряжений на взаимодействие дислокации с точечным дефектом и на термически активированное движение дислокаций создают основу для более последовательного и строгого, чем существовавшее ранее, описания динамики дислокаций и дислокационных механизмов пластической деформации в реальных кристаллах. Результаты анализа колебательного спектра кристаллов с дислокациями могут найти применение при описании большой совокупности физических свойств кристаллов, связанных с динамикой решетки и ее колебательным спектром. На основе проведенного в диссертации исследования влияния дислокаций на внутреннее трение и теплоемкость кристаллов сформулированы практические рекомендации по целенаправленной постановке экспериментов, результаты этого исследования можно также использовать для интерпретации экспериментальных данных.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Результаты исследования термически активированного движения дислокаций в слабо неоднородных полях внутренних напряжений, позволившие установить динамическую природу эффективного внутреннего напряжения и выяснить его физический смысл. Эффективное внутреннее напряжение является сложной физической величиной, зависящей как от распределения внутренних напряжений, так и от параметров препятствий и температуры. Расчеты средней скорости дислокаций в случайных гауссовских полях напряжений.

2. Последовательный расчет взаимодействия дислокационного сегмента с точечным дефектом в присутствии пространственно неоднородного поля внутренних напряжений.

3. Новая модель, последовательно учитывающая одновременное упругое взаимодействие дислокации с неупорядоченными точечными дефектами и изученные на ее основе свойства колебательного спектра кристалла с дислокациями. Характерной особенностью влияния примесей на колебания дислокаций является появление щели в частотном спектре и пика спектральной плотности вблизи нее.

4. Вклад дислокаций в низкотемпературную теплоемкость кристаллов обладает рядом нетривиальных особенностей, а его обнаружение требует тщательно подготовленных экспериментов в области температур порядка 0,1 К.

5. Параметры дислокационного амплитудно-независимого внутреннего трения в рамках предложенной модели более слабо зависят от концентрации точечных дефектов, чем предсказывает теория Гранато-Люкке.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на Всесоюзной конференции по элементарным процессам пластической деформации кристаллов (Харьков, 1976 г.), VII Всесоюзном совещании по взаимодействию между дислокациями и атомами примесей и свойствами сплавов (Тула, 1988 г.), школе-семинаре "Аморфные металлы и сплавы" (Донецк, 1988 г.), IV Республиканской и V Всесоюзной школах по физике пластичности и прочности (Харьков, 1987, 1990 гг.), Республиканском семинаре "Пластическая деформация сплавов и порошковых материалов" (Барнаул, 1988 г.).

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в 9 печатных работах, список которых приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, общих выводов, пяти приложений, и списка цитируемой литературы из 191 наименования. Диссертация содержит 12 рисунков и 5 таблиц. Общий объем 180 страниц машинописного текста, из них 134 страницы основного.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи исследования, сформулирована научная новизна и научная и практическая значимость результатов, полученных автором, приведены основные научные положения, выносимые на защиту, кратко изложено содержание работы по главам.

В первой главе дан краткий обзор литературы и приведены необходимые в дальнейшем сведения по изучаемым вопросам: флуктуационное преодоление дислокацией локальных препятствий; средняя скорость поступательного термически активированного движения дислокаций в неоднородных полях внутренних напряжений; особенности колебательного спектра кристаллов, обусловленные дислокациями; влияние дислокаций на теплоемкость и амплитудно-независимое внутреннее трение.

Во второй главе проведено исследование поступательного термически активированного движения дислокации через ансамбль локальных дефектов, случайно расположенных в ее плоскости скольжения XoY, в присутствии слабо неоднородного поля внутренних напряжений $\sigma_i(x,y)$. Условие слабой неоднородности поля σ_i имеет вид

$$|g|^{1/2} \ll (C/b)^{1/2}/L\ ,$$

где g - градиент поля σ_i в плоскости скольжения, b - модуль вектора Бюргерса, C - линейное натяжение дислокации, L - средняя длина дислокационного сегмента. В этом случае в первом приближении можно считать, что процесс преодоления точечного дефекта происходит при постоянном уровне напряжения $\Theta_j=\sigma+(\sigma_i)_j$, где σ - внешнее постоянное и однородное напряжение, а $(\sigma_i)_j$- внутреннее напряжение в месте расположения преодолеваемого j-го локального барьера). Для средней скорости $\bar{v}$ дислокации получено выражение

$$\bar{v}=\left[\int\limits_{\sigma_{i\,min}}^{\sigma_{i\,max}}\frac{\varphi(\sigma_i)d\sigma_i}{\tilde{v}(\sigma+\sigma_i)}\right]^{-1}=\left[\int\limits_{\Theta_{min}}^{\Theta_{max}}\frac{\varphi(\Theta-\sigma)}{\tilde{v}(\Theta)}d\Theta\right]^{-1}, \qquad (1)$$

где $\tilde{v}(\Theta) = \bar{S}/[Lt_0(\Theta)]$ - эффективная локальная скорость дислокации; $\varphi(\sigma_i)$ - плотность распределения внутренних напряжений в местах расположения локальных барьеров, преодоленных дислокацией; $t_0(\Theta)$ -среднее время ожидания отрыва от препятствий в местах расположения которых напряжение, действующее на дислокацию, равно Θ; $\bar{S}$ - средняя площадь, заметаемая дислокацией при единичном флуктуационном отрыве. Показано, что формула (1) определяет $\bar{v}$ для множества пространственных реализаций поля $\sigma_\ell(x,y)$.

Анализ, проведенный в работе, позволил установить динамическую природу эффективного внутреннего напряжения σ_i^*, которое обычно вводится феноменологически (А.Зегер). Показано, что в общем случае величина $\bar{v}$ формируется в широком интервале значений σ_ℓ и эффективное внутреннее напряжение σ_i^*, определяемое формально с помощью соотношения $\tilde{v}(\sigma-\sigma_i^*)=\bar{v}(\sigma)$, не является универсальной однозначной характеристикой поля внутренних напряжений. Строго говоря, это сложная физическая величина, зависящая от $\varphi(\sigma_\ell)$, и от параметров, определяющих $t_0(\Theta)$. Установлено, что в некоторых случаях σ_i^* имеет простой физический смысл: на препятствиях, где $\sigma_\ell \approx \sigma_i^*$, дислокация проводит подавляющую часть времени.

Конкретные расчеты $\bar{v}$ были проведены для полей σ_ℓ, статистики которых описываются гауссовскими распределениями. Для $t_0(\Theta)$ использовалась аррениусовская форма с энергией активаци $H=H_0-\gamma\Theta$. В наиболее общем случае, когда $\varphi(\sigma_\ell)$ является несимметричным двусторонне усеченным нормальным распределением ($\sigma_{\ell_{min}}\le\sigma_\ell\le\sigma_{\ell_{max}}$), получена формула:

$$\bar{v}=\tilde{v}_0\frac{\Phi(\alpha)+\Phi(\beta)}{\Phi(\beta+\gamma D_\ell/\sqrt{2}k_B T)+\Phi(\alpha-\gamma D_\ell/\sqrt{2}k_B T)}\,exp\left[\frac{\gamma\bar{\sigma}_\ell-\gamma^2 D_\ell^2/2k_B T}{k_B T}\right]. \quad (2)$$

Здесь $\tilde{v}_0$= - скорость дислокации в отсутствие внутренних напряжений; $\alpha=(\bar{\sigma}_\ell-\sigma_{\ell_{min}})/\sqrt{2}D_\ell$, $\beta=(\sigma_{\ell_{max}}-\bar{\sigma}_\ell)/\sqrt{2}D_\ell$; $\bar{\sigma}_\ell$ и D_ℓ^2- среднее и дисперсия нормального распределения, которое получается в пределе $\sigma_{\ell_{max}}\to\infty$, $\sigma_{\ell_{min}}\to-\infty$; k_B - постоянная Больцмана; $\Phi(x)$ - интеграл ошибок. Проанализированы также случаи односторонне усеченного ($-\sigma\le\sigma_\ell\le\infty$) и симметрично усеченых ($|\sigma_\ell|\le\sigma_m$) распределений. Показано, что эффективное внутреннее напряжение может явно зависеть от температуры. Так при выполнении условий $\sigma_m\ge 3D_\ell$, $\sigma_m>\gamma D_\ell^2/k_B T$ установлено, что $\sigma_i^*\approx \gamma D_\ell^2/2k_B T \sim 1/T$. Этот результат качественно подтверждается экспериментальными исследованиями (В.И.Доценко, А.И.Ландау, 1976г.).

В рамках одномерной математической модели, сформулированной А.И. Ландау (1968г.) для описания кинетики движения ансамбля выходящих на поверхность кристалла концов дислокационных линий, подробно изучен случай, когда на своем пути дислокация преодолевает конечное число препятствий n, составляющее лишь часть из всех возможных. Найдены статистические характеристики выборочной средней скорости дислокации $\bar{v}_n$: выражения для плотности распределения, математического ожидания и дисперсии. Строго доказано, что $\bar{v}_n$ является самоусредняющейся величиной (стремится к неслучайному пределу) при $n\to\infty$. На ряде примеров показано, что относительные флуктуации выборочных средних убывают асимптотически пропорционально $n^{-1/2}$.

Третья глава посвящена изучению взаимодействия дислокационного сегмента с одиночным локальным дефектом в присутствии неоднородного поля внутренних напряжений. Предложено обобщение модели, которая сформулирована и исследована В.Л. Инденбомом и В.М. Черновым (1968 г.) для случая, когда движение дислокации через дефект происходит в однородном поле напряжений.

Рассматривается участок дислокационной линии, лежащий в плоскости скольжения XoY и жестко закрепленный на своих концах в точках $(-L_1,0,0)$ и $(L_2,0,0)$, который взаимодействует с точечным дефектом, находящимся в точке с координатой $(0,y_0,z_0)$. Действие этого дефекта учитывается в приближении сосредоточенной силы и считается, что силовой закон взаимодействия задан и описывается функцией $\mathcal{F}(y)$.

Рассмотрен класс полей внутренних напряжений

$$\sigma_t(x,y) \approx p(x) + g(x)y\ , \qquad (3)$$

где $p(x)\equiv\sigma_t(x,0)$ – рельеф поля внутренних напряжений вдоль оси oX, $g(x)\equiv(\partial\sigma_t/\partial y)_{y=0}$ -наклон этого поля в направлении движения дислокации. Равновесные конфигурации дислокации $y(x)$ являются решениями краевой задачи

$$y'' + Q(x)y + P(x) = -\mathcal{F}(y)\delta(x)/C\ , \qquad (4)$$
$$y(-L_1)=y(L_2)=0$$

Здесь $P(x)\equiv b[\sigma+p(x)]$, $Q(x)\equiv bg(x)/C$, причем $P(x)>0$. Показано, что решение краевой задачи (4) можно представить в виде

$$y(x,l) = \begin{cases} y(x,l)\equiv l\alpha_-(x) + \beta_-(x) & \text{в } [-L_1,0], \\ y(x,l)\equiv l\alpha_+(x) + \beta_+(x) & \text{в } [0,L_2], \end{cases} \qquad (5)$$

где параметр $l\equiv y(0)$ является вещественным корнем уравнения

$$-\mathcal{F}(l)/C = lD + \Gamma\ . \qquad (6)$$

Здесь $D\equiv\alpha_+'(0)-\alpha_-'(0)$, $\Gamma\equiv\beta_+'(0)-\beta_-'(0)$, а функции $\alpha_+(x)$, $\alpha_-(x)$, $\beta_+(x)$, $\beta_-(x)$ – решения краевых задач, сформулированых в диссертации. Для этих задач доказаны теоремы существования и единственности решений. Получен критерий устойчивого равновесия дислокации: конфигурация (5) при некотором l из (6) будет соответствовать состоянию устойчивого равновесия, если для этого l выполнено неравенство

$$-\mathcal{F}'(l)/C > D\ . \qquad (7)$$

Найдены выражения для энергии активации H и активационного объема γ, обобщающие известные ранее:

$$H = [\mathcal{F}(l_1)+\mathcal{F}(l_2)](l_2-l_1)/2 + \int_{l_2}^{l_1} \mathcal{F}(l)dl = \int_{l_2}^{l_1} [\mathcal{F}(l) + CDl + C\Gamma]dl, \qquad (8)$$

$$\gamma \equiv -(\partial H/\partial \sigma)_{D,p} = C(l_2-l_1)(\partial \Gamma/\partial \sigma) = b(l_2-l_1)\int_{-L_1}^{L_2} a_{\pm}(x)dx \ . \qquad (9)$$

Здесь $l_1<l_2$ - два последовательных корня уравнения (6), l_1 соответствует состоянию устойчивого, а l_2 состоянию неустойчивого равновесия. Интеграл в (9) имеет смысл некоторой эффективной длины $\tilde{L}$ (при $g(x)\equiv 0$ величина $\tilde{L}$ равна $(L_1+L_2)/2$). Показано, что в общем случае значение $\tilde{L}$ может в несколько раз отличаться от этой величины как в большую (если $g(x)>0$), так и в меньшую (если $g(x)<0$) сторону, причем отличие тем сильнее, чем больше L_1 и L_2.

Для энергии активации установлен ряд строгих неравенств, которые можно использовать для ее оценок и приближенных вычислений.

Проведен подробный анализ взаимодействия дислокационного сегмента с точечным препятствием типа центра дилатации. Определена область $O[D,\Gamma;a]$ допустимых при термоактивированном движении значений D и Γ ($a\equiv y_0/|z_0|$). Получено выражение для энергии активации через параметры равновесных конфигураций

$$H = -W\,\frac{(1-\xi_1\xi_2)(\xi_2^2-\xi_1^2)(\xi_2-\xi_1)^2}{(1+\xi_1^2)^2(1+\xi_2^2)^2}\ .$$

Здесь: $\xi_2>\xi_1$, $W<0$ - энергия связи; ξ_1 соответствует устойчивому, а ξ_2 - неустойчивому равновесию; $\xi\equiv(l-y_0)/|z_0|$. Найдена область допустимых значений величин ξ_1 и ξ_2, которая взаимно однозначно связана с областью $O[D,\Gamma;a]$.

Параметр D может иметь любой знак, который определяется свойствами функции $Q(x)$ (если $\sigma_l\equiv 0$, то всегда $D\leq 0$). Вследствие этого барьеры притяжения и отталкивания характеризуются одной и той же совокупностью зависимостей $H(\sigma)$ и $\gamma(\sigma)$.

Проанализировано влияние на активационные параметры слагаемого $g(x)y$ в (3). При $g(x)\equiv g$ показано, что $H(g)$ монотонная функция (при $g>0$ с увеличением g энергия активации уменьшается, а при $g<0$ с увеличением $|g|$ - увеличивается), а зависимость $\gamma(g)$ может иметь максимум. Изменения H и γ тем больше, чем меньше начальная энергия активации и чем больше L_1 и L_2. Эти изменения весьма значительны при $|g| \sim C/(bL^2)$.

Часть математических подробностей изложена в приложениях I-IV.

<u>В четвертой главе</u> проведено исследование колебательных спектров дислокаций, упруго взаимодействующих с неупорядоченными точечными дефектами. Изучены основные особенности колебательных спектров кристаллов конечных размеров, содержащих дислокации.

Предполагается, что колеблющийся сегмент дислокационной сетки длиной L испытывает влияние рельефа Пайерлса и точечных дефектов, случайно расположенных в объеме кристалла (со средней концентрацией $c \ll 1$) и в области ее ядра. Считается, что точечные дефекты, находящиеся в ядре дислокации, не являются жесткими точками закрепления для дислокационной линии, а создают для нее потенциальные ямы конечной глубины, локализованные на атомных расстояниях. Точечные дефекты в объеме кристалла характеризуются безразмерной мощностью q_0, а в ядре дислокации безразмерной мощностью контактного взаимодействия $\langle q \rangle$. Для дислокации используется модель струны с постоянными линейными плотностями эффективной массы M и собственной энергии C. В рамках такой модели изучение свободных колебаний дислокации приводит к исследованию собственных значений одночастичного уравнения Шредингера со случайным потенциалом пуассоновского типа.

Установлены общие свойства частотного спектра: частоты колебаний ω образуют дискретный спектр, который заключен в интервале $\varepsilon_L < \omega^2 < \varepsilon_1$. Нижняя граница является истинной флуктуационной границей. Положение этой границы зависит от L и сдвигается в область более низких частот при возрастании L: $\lim_{L\to\infty} \varepsilon_L = \varepsilon_0 \approx (|q_0| c^{1/2}/\pi^2 + \sigma_P/\mu)\omega_m^2$. Здесь: σ_P - напряжение Пайерлса; μ - модуль сдвига; $\omega_m \approx \pi s/a$ - максимальная частота колебаний полностью свободного сегмента; $s = (C/M)^{1/2}$; a - межатомное расстояние. Верхняя граница спектра ε_1 является истинной устойчивой границей, и не зависит от L. Получено $\varepsilon_1 \approx \omega_m^2$. При $\omega \to \omega_m$ плотность частот стремится к универсальному пределу. Получены явные выражения для спектральной плотности $\nu(\omega)$ (отнесенной к единице обьема кристалла):

а) в случае сильных примесей ($\langle q \rangle \to \infty$):

$$\nu_a(\omega) = \frac{N}{\pi s} \frac{\omega_1^2 \omega}{(\omega^2 - \varepsilon_0)^{3/2}} \frac{exp\left[\frac{\omega}{(\omega - \varepsilon_0)^{1/2}}\right]}{\left\{exp\left[\frac{\omega}{(\omega^2 - \varepsilon_0)^{1/2}}\right] - 1\right\}^2}, \quad \omega_1 = \pi s/l_i . \qquad (10)$$

где N - средняя плотность дислокаций, l_i - среднее расстояние между примесями на линии дислокации. Характер зависимости $\nu_a(\omega)$ определяется величиной параметра $\text{æ} = \varepsilon_0^{1/2}/\omega_1$: существует критическое значение $\text{æ}_c \approx 6^{-1/2}$, такое, что при $\text{æ} < \text{æ}_c$ спектральная плотность $\nu_a(\omega)$ является монотонно возрастающей функцией ω, а при $\text{æ} > \text{æ}_c$, имеет максимум при некотором ω_{extr}. При $\text{æ} \gtrsim 1$ параметр $\omega_{extr} \approx \omega_1(\text{æ}^2 + 0.15)^{1/2}$, а относительная высота максимума дается выражением $(\pi s/N)\nu_a(\omega_{extr}) \approx 1.52\text{æ}$. Даже в кристаллах с малым барьером Пайерлса, функция $\nu_a(\omega)$ должна иметь пик , если концентрация примесей удовлетворяет условию

$$c^{5/6} \leq 6|q_0|/\pi^2 \approx 6(10^{-1} + 10^{-2}) . \qquad (11)$$

б) В случае слабых примесей ($\langle q\rangle \ll 1$)

$$\nu_{б}(\omega) = \frac{N}{\pi s} \frac{\omega}{(\omega^2-\varepsilon_0-\omega_2^2)^{1/2}} , \tag{12}$$

где $\omega_2^2=c^* s^2\langle q\rangle\mu/C \approx c^*\langle q\rangle\omega_m^2/\pi^2$, $c^* \approx c^{\alpha}(2/3\leq\alpha\leq 1)$. Показано, что $\varepsilon_0^{1/2}\geq\omega_2$.

Если выполнено неравенство (11), то и при произвольном значении $\langle q\rangle$ для качественного анализа и оценок удобной аппроксимацией для спектральной плотности является выражение

$$\nu(\omega) = \frac{N}{\pi s} \frac{\omega}{(\omega^2-\varepsilon)^{1/2}} , \tag{13}$$

где ε зависит от параметров задачи. Однако явное выражение для ε получено пока лишь в указанных выше случаях.

Проведено рассмотрение случая, когда в кристалле присутствуют точечные дефекты нескольких сортов. Получено обобщение формул (10), (12), (13) на случаи: все дефекты слабые или все сильные; часть дефектов является слабыми, а часть сильными.

В четвертой главе проанализированы также особенности длинноволновой части колебательного спектра микрокристаллов с дислокациями. Для определенности рассматривается кристалл в форме цилиндра радиусом R и длиной L со слабо изогнутой дислокацией вдоль его оси, положение которой стабилизируется рельефом Пайерлса, точечными дефектами и силами изображения, связанными с наличием поверхности.

Проанализирован спектр собственных колебаний дислокации. Показано, что силы изображения в случае винтовой дислокации ужестчают спектр, увеличивая минимально возможную частоту колебаний дислокации, а в случае краевой дислокации смягчают спектр, уменьшая его нижнюю границу. При $L\gtrsim R$ это изменение мало, но может стать заметным в частицах вытянутой формы, когда $L\gg R$. В случае, когда точечных дефектов достаточно много ($l_i\ll L$), проявляется коллективный характер взаимодействия дислокации с точечными дефектами, что приводит к особенностям колебательного спектра, описанным выше.

В рамках скалярной модели проведено исследование влияния статического упругого поля дислокации на колебательный спектр кристаллов конечных размеров. В бесконечно протяженном кристалле, как было установлено А.М.Косевичем (1978 г.), И.М.Дубровским и А.С.Ковалевым (1976 г.), возникают локализованные вблизи дислокации колебательные состояния, которые описываются бесконечной серией одномерных колебательных ветвей. Проведенный в диссертации анализ влияния граничных условий на поверхности кристалла и в ядре дислокации на возникновение этих колебательных мод показал, что в ограниченном кристалле может существовать лишь конечное число одномерных ветвей, описывающих зоны локализованных колебательных состояний. Показано, что только при специальном выборе граничных условий первая зона возникает в длинноволновой части спектра.

В пятой главе проанализировано изменение низкотемпературной теплоемкости кристалла, связанное с дислокациями и обусловленное тремя основными факторами: собственными колебаниями дислокаций (дислокационными фононами), наличием статического упругого поля дислокаций и возникновением локализованных вблизи дислокаций колебаний кристалла.

Вклад дислокационных фононов $C_1(T)$ вначале проанализирован для случая чистого кристалла. Показано, что в интервале температур $(a/2L)T_D \le T \le T_D/8$ (T_D - температура Дебая) зависимость $C_1(T)$ более точно описывается формулой

$$C_1(T) = \gamma_d T - Nk_B/2L\ , \quad \gamma_d = \pi N k_B^2/3\hbar s,$$

которая отличается от известного результата А.Гранато (1958 г.) наличием дополнительного постоянного слагаемого. Показано, что в случае $L_N N^{1/2} \gg 1$ дислокационный вклад при некоторой температуре T_l может сравниться с теплоемкостью идеальной решетки (L_N-средняя длина дислокационного сегмента). Оценки T_l для ряда веществ показали, что вклад C_1 может быть выявлен при температурах порядка 0,1 К.

Появление щели в спектре дислокационных фононов (обусловленное влиянием примесей и рельефа Пайерлса) приводит к тому, что их вклад в теплоемкость становится меньше при любой конечной температуре и определяется величиной параметра $\Delta \equiv \hbar\varepsilon^{1/2}/k_B T$. Получены аналитические выражения аппроксимирующие $C_1(\Delta)$:

$$\frac{C_1(\Delta)}{\gamma_d T} \approx \frac{\Delta^2 e^{\Delta}}{(e^{\Delta}-1)^2}\ , \qquad \text{при } \Delta \le 2 \tag{14}$$

$$\frac{C_1(\Delta)}{\gamma_d T} = 1{,}18 - 0{,}22\Delta\ , \quad \text{при } 1{,}4 \le \Delta \le 3{,}6 \tag{15}$$

$$\frac{C_1(\Delta)}{\gamma_d T} \approx \frac{3}{\pi^2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} e^{-\Delta}\left[\Delta^{5/2} + \frac{11}{8}\Delta^{3/2} + \frac{225}{128}\Delta^{1/2}\right]\ , \text{ при } \Delta \ge 3{,}5 \tag{16}$$

Формулы (14-16) позволяют получать информацию о щели в частотном спектре дислокаций из калориметрических измерений. Общие закономерности поведения $C_1(T)$ при изменении параметра $\varepsilon^{1/2}$ проанализированы на примере некоторых сверхпроводников: оценки показали, что сверхпроводящие металлы удобны для измерений C_1, поскольку в них достижимы высокие плотности дислокаций, а электронная часть теплоемкости при понижении температуры быстро убывает.

Показано, что изменение теплоемкости $C_2(T)$, обусловленное статическим упругим полем дислокации, пропорционально теплоемкости идеальной решетки. Относительная величина этого вклада в бесконечно протяженном кристалле с плотностью дислокаций N определяется параметром $bN^{1/2}$, а в микрокристаллах отношением b/R. Экспериментально этот эффект должен проявиться в слабом изменении температуры Дебая: по оценкам $\delta T_D/T_D$ может достигать значений $10^{-4}\div10^{-2}$.

Установлено, что температурная зависимость вклада локализованных вблизи дислокации колебаний кристалла $C_3(T)$ в области низких температур имеет вид кривой с максимумом, причем в чистых кристаллах с низким рельефом Пайерлса величина C_3 меньше вклада дислокационных фононов при всех температурах. Реально C_3 может проявиться в кристаллах с высоким рельефом Пайерлса или большой концентрацией примесей.

<u>В шестой главе</u> в рамках сформулированной в четвертой главе модели проведено изучение влияния дислокаций на амплитудно-независимое внутреннее трение (АНВТ).

Получено общее соотношение, выражающее комплексную дислокационную податливость J_d через функцию Грина $G(x,\xi;E)$ стационарных колебаний незадемпфированного дислокационного сегмента:

$$J_d = -\frac{b^2}{V_{кр}C}\sum_L L\int_0^\infty \frac{\alpha(E)}{\mathcal{E}-E}\,dE, \quad \alpha(E)=\frac{1}{\pi L}\iint_{-L/2}^{L/2}\langle G(x,\xi;E-i0)\rangle_v\,dx\,d\xi, \qquad (17)$$

где $\mathcal{E} = [\omega^2 - i\omega B/M - \varepsilon_0]/s^2$; B - коэффициент вязкого торможения дислокации; ω - частота возбуждаемого в кристалле звука.

В рамках фазового формализма дан алгоритм вычисления J_d и подробно исследован практически важный случай, когда $\iota^2\varepsilon_0/s^2 \gg 1$, $\varepsilon_0 \gg \omega^2$. Этот случай реализуется при выполнении условий:

$$\omega \ll (|q_0|c^{1/2}/\pi^2 + \sigma_p/\mu)^{1/2}\omega_m\ , \quad c^{2d} \ll (|q_0|c^{1/2} + \pi^2\sigma_p/\mu)\ ,$$

которым нетрудно удовлетворить даже в случае малых барьеров Пайерлса. Для декремента и дефекта модуля получены следующими выражения:

$$\Delta_d = A_d\,\frac{\mu N b^2}{C}\,\frac{\omega\omega_B}{\varepsilon_0^2+\omega^2\omega_B^2}\ , \qquad \Delta G/G = A_d\,\frac{\mu N b^2}{C}\,\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_0^2+\omega^2\omega_B^2}\ , \qquad (18)$$

где A_d - численный множитель порядка единицы, $\omega_B = B/M$. Из формул (18) следует, что в области $\omega\omega_B \ll \varepsilon_0$, явная зависимость от параметров примесной подсистемы в случае малого барьера Пайерлса и примесей одного сорта определяется следующими выражениями

$$\Delta_d \sim 1/\varepsilon_0^2 \sim q_0^{-2}c^{-1}, \qquad \Delta G/G \sim 1/\varepsilon_0 \sim |q_0|^{-1}c^{-1/2}\ . \qquad (19)$$

Средней длиной свободного дислокационного сегмента в данном случае является величина $\iota = a/c^d$. Из (19) следует, что $\Delta_d \sim \iota^{1/d} \sim \iota^{(1\div3/2)}$ и $\Delta G/G \sim \iota^{1/2d} \sim \iota^{(1/2\div3/4)}$, т.е. обсуждаемые величины гораздо слабее зависят от длины свободного сегмента, чем это предсказывает теория Гранато-Люкке. Этот результат согласуется с выводом теоретической работы В.М.Чернова, А.М.Киризлеева (1982 г.), где аналогичная тенденция была установлена для случая, когда дислокационный сегмент упруго взаимодействует с одним точечным дефектом.

В приближении среднего поля исследовано влияние распределения длин сегментов в дислокационной сетке на параметры АНВТ. Показано, что в общем случае для надежного определения коэффициента трения дислокаций из экспериментов по внутреннему трению кроме средней плотности дислокаций требуется знание высших нечетных моментов распределения дислокационных сегментов по длинам.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Получено выражение, связывающее среднюю скорость термоактивированного движения дислокации в слабо неоднородном поле внутренних напряжений с плотностью распределения внутренних напряжений в местах расположения локальных барьеров (1). Подробно изучена средняя скорость дислокаций в полях напряжений, статистика которых описываются гауссовскими распределениями (формула (2)).

2. Показано, что эффективное внутреннее напряжение, противодействующее движению дислокаций, имеет динамическую природу и в некоторых случаях может явно зависеть от температуры.

3. В рамках одномерной математической модели исследованы флуктуационные эффекты и при достаточно общих условиях строго доказана самоусредняемость выборочной средней скорости.

4. Выделен класс пространственно неоднородных полей напряжений (формула(3)), который можно использовать для аппроксимации реальных полей внутренних напряжений в кристалле и проведен анализ энергетики элементарного процесса термоактивационного преодоления дислокацией упругого поля произвольного точечного дефекта. Получено общее решение задачи о равновесных конфигурациях дислокационного сегмента в поле точечного дефекта, сформулирована и доказана теорема существования и единственности. Установлен критерий реализации устойчивого равновесия дислокации. Показано, что влияние неоднородности поля напряжений на активационные параметры проявляется тем сильнее, чем больше начальная длина дислокационного сегмента и чем меньше энергия активации. Проведено подробное исследование взаимодействия дислокации с точечным препятствием типа центра дилатации.

5. Сформулирована новая модель, последовательно учитывающая одновременное взаимодействие дислокации с большим числом точечных дефектов, случайно расположенных как в объеме кристалла, так и в области ее ядра, без предположения о жестком закреплении точечными дефектами дислокационной линии.

6. Установлены общие свойства частотного спектра дислокации и выполнен анализ спектральной плотности для случаев точечных дефектов одного и нескольких сортов. Главным следствием влияния примесей на колебания дислокаций является появление щели в частотном спектре и пика спектральной плотности вблизи нее (см. (10),(12),(13)).

7. В рамках скалярной модели кристалла проведено исследование влияния статического упругого поля дислокации на колебательный спектр кристаллов конечных размеров. Показано, что в ограниченном кристалле может существовать лишь конечное число одномерных ветвей, описывающих зоны локализованных колебательных состояний.

8. Проанализировано изменение низкотемпературной теплоемкости кристалла, связанное с дислокациями и обусловленное тремя основными факторами: дислокационными фононами, наличием статического упругого поля и локализацией вблизи дислокаций колебаний кристалла. Установлено, что температурная зависимость вклада дислокационных фононов в теплоемкость при наличии барьеров Пайерлса и примесей (формулы (14) - (16)) существенно отличается от таковой для свободных дислокационных сегментов. Для его регистрации требуются эксперименты при температурах порядка 0,1К на специально деформированных образцах, для которых пригодны сверхпроводящие металлы. Изменение теплоемкости, обусловленное статическим упругим полем дислокации экспериментально может проявиться в слабом изменении температуры Дебая. Температурная зависимость вклада локализованных вблизи дислокации колебаний кристалла в области низких температур имеет максимум.

9. Развита новая модель дислокационного АНВТ. Получено соотношение (17), выражающее комплексную дислокационную податливость через усредненную функцию Грина стационарных колебаний незадемпфированного дислокационного сегмента. Найдены и проанализированы выражения (18) для декремента и дефекта модуля. Установлены зависимости этих величин от частоты возбуждаемых в образце колебаний, концентрации и мощности примесей. Показано, что декремент и дефект модуля более слабо зависят от концентрации точечных дефектов, чем предсказывает теория Гранато-Люкке. Установлено, что для надежного определения коэффициента трения дислокаций из экспериментов по ВТ в общем случае требуются детальные сведения о распределении дислокационных сегментов по длинам.

Основное содержание диссертационной работы изложено в следующих публикациях:

1. Смирнов С. Н. Движение дислокаций в неоднородном поле внутренних напряжений. - Препринт, Харьков, изд.-во ФТИНТ АН УССР, 1976. - 42 с.

2. Смирнов С. Н. Средняя … поле напряжений // В кн.: Элементарные процессы пластической деформации кристаллов. - Киев, Наук. думка, 1978. - С. 75-93.

3. Smirmov S. N. Interaction of a dislocation with a point obstacle in the non-uniform stress field // Phys. stat. solidi (a) // 1979.- 55. - P. 51-60.

4. Смирнов С. Н. Взаимодействие дислокации с точечным препятствием в неоднородном поле напряжений // Изв. ВУЗов, Сер. физика - 1980 - №6. - С. 111-112.

5. Нацик В. Д., Смирнов С. Н. Колебательный спектр дислокаций, взаимодействующих с примесями // ФНТ. - 1988. - 14, № 2. - С. 172-180.

6. Нацик В. Д., Смирнов С. Н. Колебательный спектр дислокаций в примесных кристаллах // В сб.: Механизмы упрочнения и свойства металлов. - Тула: ТПИ, 1988. - С. 13-18.

7. Нацик В. Д., Смирнов С. Н. Влияние дислокаций на фононный спектр малых кристаллических частиц // УФЖ. - 1989. - 34, №11. - С. 1741-1747.

8. Нацик В. Д., Смирнов С. Н. О дислокационном вкладе в низкотемпературную теплоемкость кристаллов // ФНТ. - 1992. - 18, № 2. - . 185-194.

9. Нацик В. Д., Смирнов С. Н. О влиянии примесей на амплитудно независимое дислокационное поглощение ультразвука // В сб.: Внутреннее трение и дислокационная структура металлов. - Тула: ТПИ, 1990. - С. 99-103.

Ответственный за выпуск - кандидат физико-математических наук Доценко В.И.

Подписано к печати 5.01.1993г. Объем 1 п.л.
Формат 60х84 1/16. Заказ 16. Тираж 100 экз. Бесплатно.

Ротапринт ФТИНТ АН Украины, Харьков-164, пр. Ленина, 47.