

УДК 548.4:534

РАЗМНОЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В УЛЬТРАЗВУКОВОМ ПОЛЕ

О. В. Бубновская, Д. Л. Леготин, Н. А. Тяпунина

(кафедра молекулярной физики и физических измерений)

Методом компьютерного моделирования исследовано размножение дислокаций под действием ультразвука и эволюция генерированных источником дислокационных петель. Определены условия, при которых генерация петель происходит по классическому и по нетрадиционному механизмам. Установлены зависимости критических параметров: длины источника, амплитуды напряжения и интервала напряжений, в пределах которого имеет место новый механизм, от частоты ультразвука и коэффициента динамической вязкости. Определены условия, при которых происходит накопление в кристалле дислокаций, генерированных нетрадиционным способом.

Введение

Под действием ультразвука (УЗ) плотность дислокаций возрастает на несколько порядков. В щелочногалогенидных кристаллах она менялась от 10^4 до 10^8 см⁻² [1]. Ранее [2] было показано, что под действием УЗ размножение дислокаций может происходить по классическому механизму Франка–Рида [3] и отличному от него механизму, возможному лишь при знакопеременных нагрузках [2, 4–6].

Классический механизм в условиях УЗ-воздействия исследован достаточно подробно [4, 5]. Что касается второго механизма, то сначала была высказана гипотеза о его существовании [5], а затем при помощи ЭВМ-моделирования было показано, что этот меха-

низм действительно может реализоваться [2, 6]. Однако остались не исследованными интервалы амплитуд напряжений и частот УЗ, в пределах которых происходит генерация дислокаций, время образования петель, их размеры и условия накопления дислокаций в кристалле при таком механизме размножения. Определению этих условий посвящена данная статья.

Для решения задачи был применен метод ЭВМ-моделирования. Использованные модель и алгоритм приведены в работах [2, 7].

Моделирование проводилось применительно к щелочногалогенидным кристаллам в интервале частот УЗ от 15 до 200 кГц, длина источника варьировалась от 0,5 до 10 мкм.

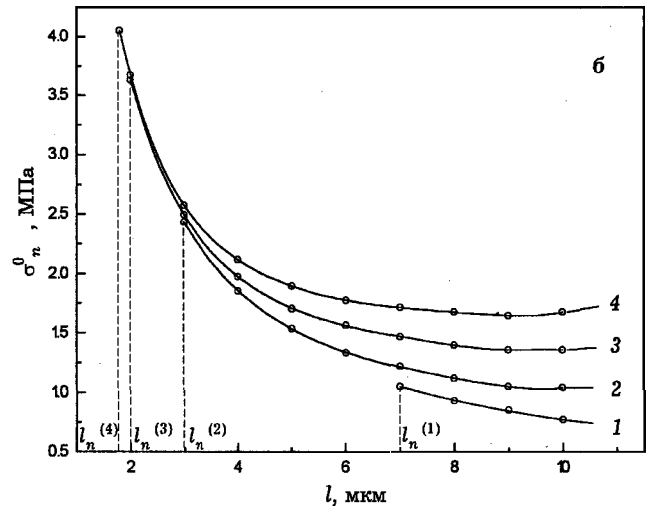
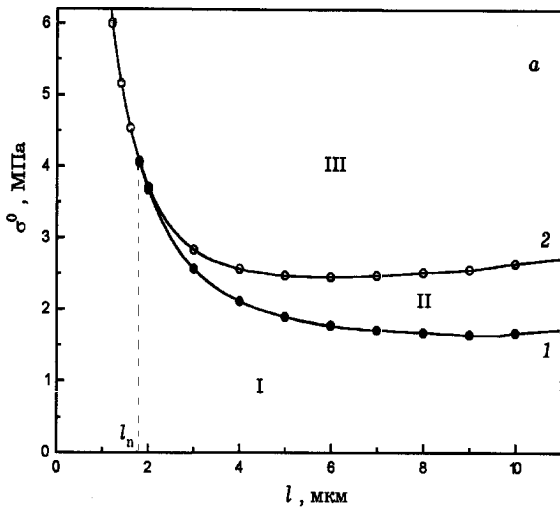


Рис. 1. Зависимости от длины источника l критических напряжений σ_n^0 (1) и σ_f^0 (2) при $f = 180$ кГц и критического напряжения σ_n^0 при $f = 15$ (1), 60 (2), 120 (3) и 180 кГц (4)

1. Зависимости от частоты ультразвука параметров, характеризующих работу дислокационного источника

Замкнутая петля образуется по механизму Франка-Рида при амплитуде напряжения σ_f^0 за время, меньшее половины периода УЗ-колебаний ($t_0 < T/2$) [4, 5]. Генерация дислокаций по нетрадиционному механизму происходит при амплитуде напряжения σ_n^0 , меньшей σ_f^0 . Время образования замкнутой петли $T/2 < t_0 < T$ [6].

Важным параметром, характеризующим процесс размножения дислокаций, является критическая амплитуда напряжения, при которой начинает работать дислокационный источник. Примеры зависимостей σ_n^0 и σ_f^0 от длины источника l для обоих механизмов даны на рис. 1, а.

Кривые $\sigma_n^0(l)$ и $\sigma_f^0(l)$ разграничивают три области. В первой (I) при амплитуде напряжения УЗ $\sigma^0 < \sigma_n^0$ происходят колебания дислокационных сегментов. Во второй (II), где $\sigma_n^0 \leq \sigma^0 \leq \sigma_f^0$, образование петель происходит по нетрадиционному механизму. В области III петли генерируются по механизму Франка-Рида.

Из рис. 1, а видно, что, начиная с некоторого критического значения длины источника l_n , для каждого l существует свой интервал амплитуд $\sigma_f^0 - \sigma_n^0$, в пределах которого работает новый механизм. Появление критерия l_n объясняется тем, что на дислокационный сегмент оказывают конкурирующее влияние сила самодействия и сила вязкости.

Критическая амплитуда σ_n^0 , критическая длина l_n , интервал амплитуд $\sigma_f^0 - \sigma_n^0$ и время образования петли t_0 зависят от частоты УЗ f . Критическая амплитуда σ_n^0 увеличивается с ростом частоты, что видно из рис. 1, где представлены зависимости $\sigma_n^0(l)$ для различных частот. Зависимость критической амплитуды от частоты можно аппроксимировать степенной функцией

$$\sigma_n^0(f) = \sigma_1 + p(f - f_n)^q.$$

Здесь σ_1 , p и q — параметры аппроксимации. Функция $\sigma_n^0(f)$ определена для значений частоты $f \geq f_n$ —

граничная частота, начиная с которой источник заданной длины генерирует дислокации по нетрадиционному механизму). Аналогичная степенная зависимость

$$\sigma_f^0(f) = \sigma_1 + pf^n$$

была получена в работе [4] для $\sigma_f^0(f)$ при моделировании размножения дислокаций по механизму Франка-Рида и еще ранее — на основе данных натуральных экспериментов [8].

Влияние частоты на критическую длину источника l_n можно видеть из рис. 1, (сравнивая значения $l_n^{(1)}$, $l_n^{(2)}$, $l_n^{(3)}$, и $l_n^{(4)}$, соответствующие частотам 15, 60, 120 и 180 кГц).

Интервал амплитуд напряжений $\sigma_f^0 - \sigma_n^0$, в пределах которого реализуется новый механизм, с ростом частоты увеличивается и тем быстрее, чем больше длина источника (рис. 2).

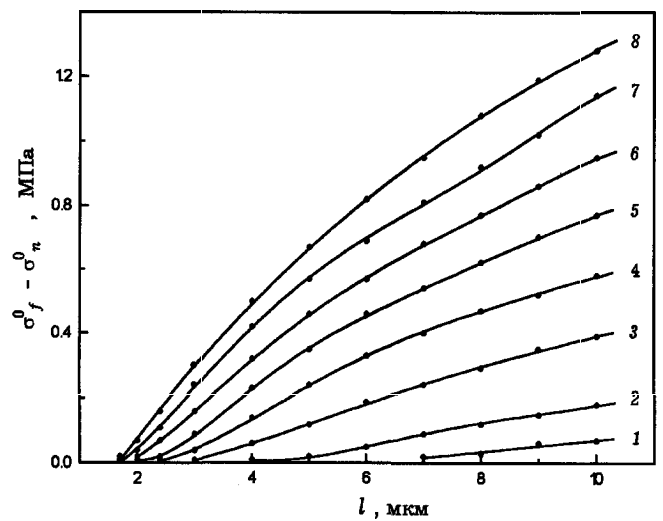


Рис. 2. Зависимость ширины интервала $\sigma_f^0 - \sigma_n^0$ от длины источника l при различных частотах ультразвука: $f = 15$ (1), 30 (2), 60 (3), 90 (4), 120 (5), 150 (6), 180 (7) и 210 кГц (8)

Влияние частоты на все приведенные выше параметры обусловлено существованием характерного времени процесса генерации источником замкнутой петли. Это характерное время тем больше, чем больше длина источника [8].

2. Влияние коэффициента динамической вязкости на параметры, характеризующие работу источника

Моделирование проводилось применительно к кристаллам NaCl, LiF, KCl, KBr, для которых из эксперимента были известны пределы изменения коэффициента динамической вязкости при комнатной температуре [9]. Коэффициент B для идеального кристалла зависит от температуры, для реального — при фиксированной температуре — от дефектной структуры и от состава примесей [9]. Поэтому он может изменяться в определенных пределах для конкретного вещества, и для разных веществ эти пределы различны.

При увеличении коэффициента вязкости критическая длина источника l_n уменьшается. Это означает, что в кристаллах с большим коэффициентом вязкости при заданной частоте реализация нетрадиционного механизма становится возможной для сегментов меньшей длины.

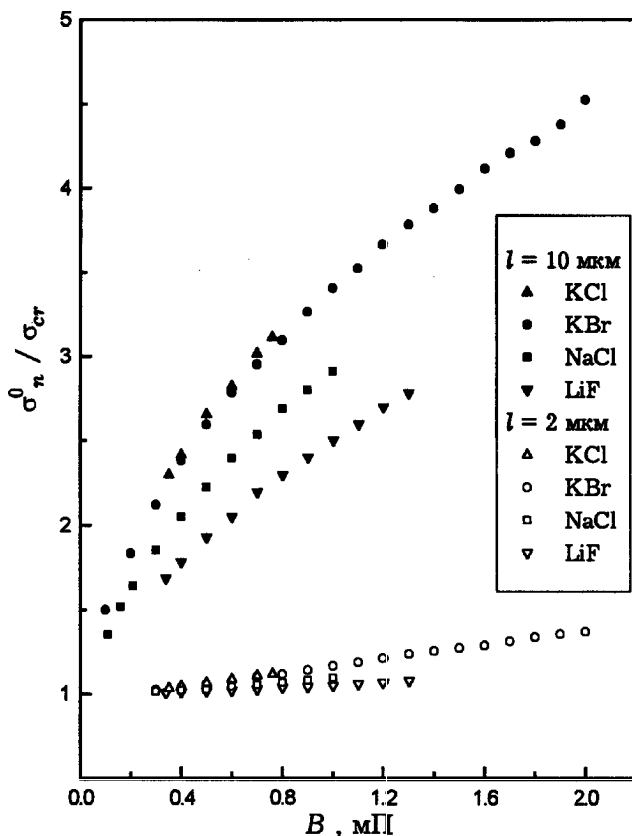


Рис. 3. Влияние коэффициента динамической вязкости B на критическую амплитуду напряжений σ_n^0 для источников длиной $l = 2$ (светлые значки) и 10 мкм (темные)

Зависимости критической амплитуды σ_n^0 / σ_{cr} от коэффициента вязкости B показана на примере источ-

ников длиной $l = 2$ и 10 мкм (рис. 3). Здесь в качестве обезразмеривающего множителя использовано $\sigma_{cr} = Gb/l$ (G — модуль сдвига, b — вектор Бюргерса). С увеличением длины источника влияние вязкости на σ_n^0 возрастает. Так, для источника длиной 2 мкм величина σ_n^0 почти не меняется с ростом B , а для 10 мкм изменения σ_n^0 уже существенны. Как уже было сказано выше, на поведение дислокационного сегмента оказывают конкурирующее влияние сила самодействия и сила вязкости. Для источников малой длины сила самодействия существенно превосходит силу вязкости — отсюда, как следствие, слабая зависимость σ_n^0 от коэффициента B . При увеличении длины источника заматаемая ими площадь увеличивается и роль силы вязкости оказывается значительной.

3. Размеры и время жизни петель, генерированных источником по нетрадиционному механизму

В результате действия механизма Франка–Рида образуется система концентрических окружностей, а при нетрадиционном механизме — цепочка замкнутых петель. Размер петель зависит от длины источника, амплитуды и частоты УЗ, коэффициента динамической вязкости.

Зависимость радиуса петли в момент ее образования R_0 от амплитуды напряжения в пределах определенных выше интервалов $\sigma_f^0 - \sigma_n^0$ показана на рис. 4, а на примере источников длиной $l = 5$ и 10 мкм (кривые 1 и 2). Радиус петель с ростом амплитуды УЗ увеличивается, тогда как для петель, образовавшихся по механизму Франка–Рида, согласно [10], имеет место обратная зависимость.

При увеличении частоты УЗ размер петель, генерированных источником заданной длины, уменьшается. На рис. 4, представлены графики изменения радиусов петель, генерируемых источниками длиной 3, 5 и 10 мкм. Первая точка каждой кривой соответствует частоте УЗ, начиная с которой возможна генерация петель источником данной длины по новому механизму. Из рис. 4, видно, что источники малой длины могут генерировать петли, радиус которых превосходит длину источника, т.е. $R_0/l > 1$ (кривая 1). С увеличением длины источника R_0/l уменьшается и становится меньше 1 (кривые 2 и 3).

Известно, что замкнутые дислокационные петли относятся к числу нестабильных дислокационных конфигураций и аннигилируют. Предположим, что после образования петли УЗ выключили. Стационарное существование петель в кристалле будет обусловлено наличием стартового напряжения σ_{st} . При значении $\sigma_{st} = 0,3$ МПа в кристаллах NaCl петли радиусов $R_0 < 12$ мкм аннигилируют в отсутствие внешней нагрузки и внутренних полей напряжений. Последние оказывают стабилизирующее действие на петли. Так, радиусы петель, генерированных источниками длиной 2–10 мкм, составляют от 1 до 10 мкм, а необходимые для их стабилизации значения напряжения должны быть соответственно от 3,6 до 0,36 МПа.

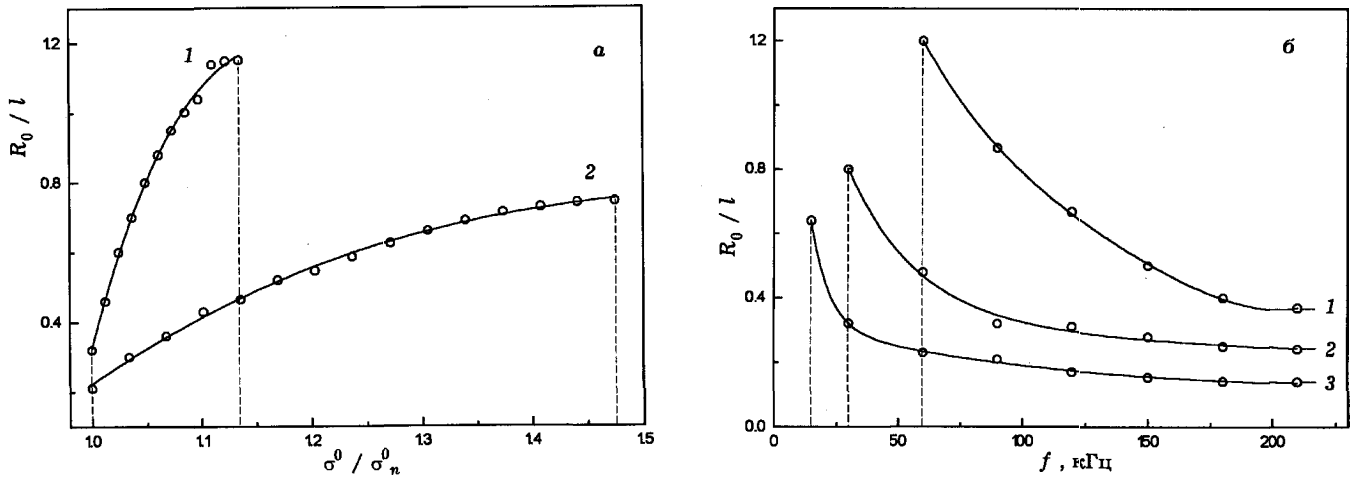


Рис. 4. Зависимость радиуса петли R_0 от амплитуды напряжения при $l = 5$ (1) и 10 мкм (2) — а и от частоты ультразвука f при $l = 3$ (1), 5 (2) и 10 мкм (3) — б

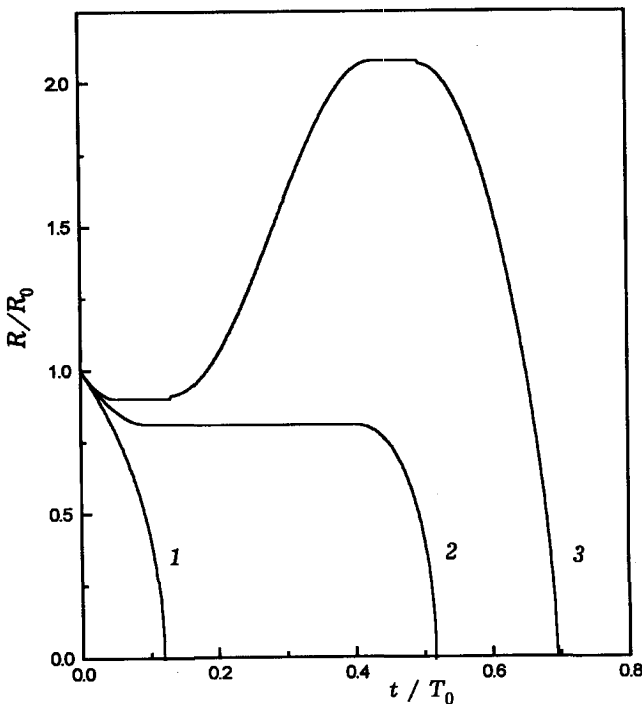


Рис. 5. Изменение радиуса дислокационной петли с течением времени при различных амплитудах ультразвука: $\sigma_0 = 0, 1, 1$ и $1, 5$ МПа

Судьбу замкнутых петель в УЗ-поле рассмотрим, используя рис. 5, где приведены зависимости радиуса петли от времени при различных амплитудах напряжения УЗ. Видно, что петли исчезают, просуществовав в УЗ-поле определенное время. Характер эволюции петли зависит от амплитуды УЗ. При малых амплитудах напряжения петли независимо от их радиуса с течением времени сжимаются и аннигилируют (кривая 1 на рис. 5). С ростом амплитуды напряжения увеличивается время жизни петли, что видно по увеличению длины отрезков, отсекаемых на оси времени (кривые 1–3 рис. 5). Возможна и ситуация, когда петля сначала даже расширяется (кривая 3 рис. 5).

Накопление дислокаций и увеличение их плотности в кристалле только в УЗ-поле не происходит при генерации петель по новому механизму. Можно говорить только об облаке виртуальных дислокационных петель. Последние образуются в течение каждого периода УЗ-колебаний и аннигилируют в течение следующего. Методами прямого наблюдения обнаружить их невозможно. Существование облака виртуальных дислокаций должно проявляться в макроскопических свойствах при неупругом поведении кристаллов, например в особенностях амплитудной зависимости дефекта модуля упругости, что и было обнаружено в работе [6].

Моделирование показало, что при совместном действии УЗ и постоянного напряжения замкнутые петли могут стабилизироваться, расширяться и вносить вклад в накопление дислокаций в кристалле, что согласуется с результатами [11]. Значения постоянных составляющих полей напряжений, необходимые для стабилизации и расширения петель, образовавшихся по новому механизму, оказались значительными (см. таблицу).

Значения постоянного поля напряжений σ_c , необходимого для расширения дислокационных петель, при различных амплитудах УЗ-поля σ^0

R_0 , мкм	σ_c , МПа		
	$\sigma^0 = 1$ МПа	$\sigma^0 = 2$ МПа	$\sigma^0 = 3$ МПа
1	3,30	3,30	3,25
2	2,10	2,10	2,05
3	1,50	1,41	1,30
4	0,85	0,75	0,69
5	0,50	0,40	0,29
6	0,29	0,18	0,13
7	0,23	0,15	0,12
8	0,21	0,13	0,11
9	0,19	0,12	0,10
10	0,17	0,11	0,09

В реальных кристаллах постоянные по времени и неоднородные по пространству поля напряжений существуют всегда из-за присутствия в них структурных дефектов и их ансамблей. Был проведен анализ влияния на

эволюцию петель полей напряжений, создаваемых единичной дислокацией, диполем и стенкой из дислокаций. Влияние таких полей выражается в изменении времени жизни петель и в потере их радиальной симметрии. Но поля напряжений, создаваемые рассмотренными дефектами, оказались недостаточными для стабилизации в УЗ-поле петель указанных выше размеров.

Таким образом, новый механизм размножения дислокаций под действием ультразвука дает вклад в накопление дислокаций в кристалле лишь в тех случаях, когда вблизи работающего источника имеются поля постоянных во времени напряжений, значения которых достаточны для стабилизации петель.

Литература

1. Тяпунина Н.А., Благовецкий В.В., Зиненкова Г.М., Ивашкин Ю.А. // Изв. вузов, Физика. 1982. № 6. С. 118.
2. Благовецкий В.В., Леготин Д.Л., Тяпунина Н.А. // ФММ. 1993. 75, № 5. С. 154.
3. Frank F.C., Read W.T. // Phys. Rev. 1950. 79. P. 722.
4. Тяпунина Н.А., Благоवेशченский В.В. // Phys. Stat. Solidi. (a). 1982. 59. P. 77.
5. Благовецкий В.В. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1982.
6. Леготин Д.Л. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1993.
7. Леготин Д.Л., Бубниовская О.В., Тяпунина Н.А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1996. № 1. С. 58 (Moscow University Phys. Bull. 1996. No.1 P. 46).
8. Тяпунина Н.А. // Физика деформационного упрочнения монокристаллов. Киев, 1972. С. 228.
9. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. // УФН. 1975. 115. С. 39.
10. Ломакин А.Л. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (МГУ), 1987.
11. Кульган И.Н., Тяпунина Н.А. // ЖТФ. 1994. 64. С. 114.

Поступила в редакцию
18.04.97