

УДК 620.187:621.375.826

М. С. Чернолевський

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Критична швидкість перенесення атомів рухомою дислокацією

Надійшла до редакції 01.09.06

Запропоновано розрахунок критичної швидкості при дислокаційно-міжвузельному механізмі масопереносу у рамках моделі Френкеля—Конторової, що враховує рух у кристалі комплексу «дислокація + міжвузельний атом». Пружне поле дислокації створює для міжвузельного атома потенційну яму поблизу ядра дислокації, що зв'язує його з рухомою дислокацією. Стійкість такого комплексу визначається як початковими швидкостями руху дислокації й атома, так і величиною взаємодії. Критична швидкість, при якій зникає ефект масопереносу в рамках запропонованого механізму, залежить від різниці початкових швидкостей дислокації і міжвузельного атома.

ВСТУП

Процеси масопереносу у кристалах, що піддаються зовнішнім імпульсним впливам з високою швидкістю деформації ($\dot{\epsilon} \geq 1 \text{ с}^{-1}$), характеризуються великою глибиною (від десятків до сотень мікрометрів) проникнення атомів з поверхні у зразок [3]. У практичному плані такі процеси можуть бути використані для модифікації приповерхневих шарів кристалів для надання їм бажаних властивостей. Прикладом таких матеріалів, які знаходять широке застосування у промисловості, зокрема у космічній галузі, є антикорозійні та термостійкі покриття, покриття, стійкі до впливу агресивних середовищ, наприклад при контакті з ракетним паливом.

При зовнішніх імпульсних діях найімовірнішими переміщувачами маси на такі великі глибини за досить короткі часи впливу ($10^{-8} \dots 10^{-6} \text{ с}$) є міжвузельні атоми [5]. Однак цей тип дефектів термодинамічно нестійкий і не

може існувати самостійно досить тривалий час, що міг би бути порівнянним навіть з малими часами імпульсного впливу, а тим більше з часами протікання релаксаційних процесів у реальних кристалах [4]. Реалізація релаксаційних процесів, викликана виникненням термічних напруг [1], здійснювалася як за рахунок утворення дислокацій [2] і їхніх комплексів, так і точкових дефектів, що генеруються при взаємодії рухомих дислокацій [10]. Взаємодія фронту хвилі термічних напруг із пружним полем дислокацій може приводити до руху дислокацій від поверхні всередину кристала, їхнього накопичення і перебудови в комірчастій структурі [2, 7].

Цілком природно, що пояснення цього явища потребує нового підходу до опису адекватного механізму масопереносу: атоми захоплюються рухомими дислокаціями і переносяться у глибину кристалу [12]. Це дало можливість запропонувати механізм, що дозволив описати експериментально виявлені глибини масопереносу, що

характеризують імпульсну деформацію кристала. Ключовим моментом цього механізму є стійкий рух комплексу «дислокація + міжвузельний атом» у поле механічних напруг, що поширюються від збудженої імпульсом поверхні всередину кристала. Цей механізм передбачає перенесення атомів у заданому напрямку рухомою дислокацією на глибини, обумовлені часом існування комплексу «дислокація + міжвузельний атом». Розпад такого комплексу, що просувається у глибину кристалу, можливий як при досягненні ним деякої критичної швидкості, так і внаслідок відходу міжвузельного атома на стоки, зокрема на вакансії [11].

Оцінки [11, 12, 6] показали адекватність запропонованого механізму. Тому наступним етапом, що дозволив би розглядати дислокаційно-міжвузельний механізм як найімовірніший механізм так званого [3] аномального масопереносу, є доказ стійкості стану комплексу «дислокація + міжвузельний атом». При русі дислокації із швидкістю, більшою ніж певна критична V_c , ефект масопереносу не спостерігається. Одним з найважливіших аспектів є питання про значення V_c . У роботі [6] розглядалось питання про значення V_c для випадку однакових початкових швидкостей дислокації і міжвузельного атома. Випадку різних початкових швидкостей присвячена дана робота.

ТЕОРІЯ І РЕЗУЛЬТАТИ

Формування рухомої дислокації відбувається під дією зовнішніх напруг. Вважаючи, що такий стан реалізувався в результаті дії зовнішнього навантаження, будемо розглядати рухому дислокацію і рухому міжвузельний атом (МА), що спочатку знаходиться в ядрі цієї дислокації. Вважається, що зовнішні впливи визначають початкові умови, а саме — задають швидкість дислокації і МА (різні), що дозволяє не враховувати явно зовнішні впливи.

Розглянемо рух дислокації і МА в кристалі. Пружне поле дислокації діє на МА, що здобуває прискорення. У певних випадках виникає можливість зв'язаного стану і руху комплексу, що сформувався, як цілого, аж до його руйнування. Руйнування такого комплексу може відбуватися в результаті рекомбінації МА на вакансіях та

інших дефектах кристалічних ґраток, що є для нього стоками. Дислокація при цьому продовжує рух до зупинки на перешкодах, що властиві реальному кристалу.

Кінетика крайової дислокації досить добре описується одновимірною моделлю Френкеля—Конторової [9] (далі -- модель ФК). У нашому випадку для розрахунку динаміки МА врахуємо також вплив пружної сили рухомої дислокації. Поле деформацій при цьому для МА є зовнішнім, тому що МА є точковим об'єктом, у той час як дислокація — лінійним. Як відомо з теорії пружності, пружна сила пропорційна модулю Юнга і другій похідній від зсуву. Тому можна записати рівняння руху МА у наступному вигляді:

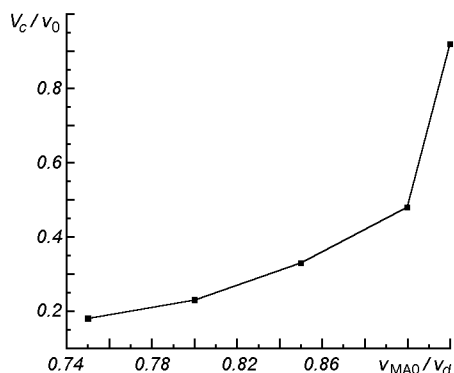
$$\ddot{x} = -\frac{\sigma}{2\pi\beta} \sin(2\pi x) + \frac{\tilde{E}}{\beta} \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} + \frac{s}{\beta} \frac{\partial^2 x}{\partial \zeta^2}, \quad (1)$$

$$u = 1 - \frac{2}{\pi} \arctg[\exp(\gamma(\zeta - t))], \quad (2)$$

де x та u — відповідно зсуви міжвузельного атома та атомів ланцюжка в одиницях постійної ґратки a , s — відношення коефіцієнтів пружності між МА й атомом ланцюжка, у якому розглядається рух дислокації, і між сусідніми атомами цього ланцюжка, ζ — просторова координата атомів ланцюжка, у якому розглядається рух дислокації, в одиницях постійної ґратки, t — час в одиницях a/v_d , β — відношення квадрата швидкості дислокації v_d до квадрата швидкості звуку v_0 , $\beta = v_d^2/v_0^2$, $\sigma = 2\pi(f_0/ak)$ — відношення напруження Пайерлса f_0 до коефіцієнта k пружності матриці, $\gamma \equiv \sqrt{\sigma/(1-\beta)}$, \tilde{E} — коефіцієнт взаємодії між міжвузельним атомом і пружним полем дислокації, пропорційний модулю Юнга.

Рівняння (2) являє собою відомий вигляд розв'язку для дислокації ФК у континуальному наближенні. Перший член у виразі (1) описує вплив на міжвузельний атом сусідніх шарів атомів, другий — пружну силу, створювану рухомою дислокацією, а останній — вплив сусідніх атомів ланцюжка, у якому розглядається рух дислокації.

У реальних кристалах величина напруження Пайерлса змінюється в широких межах ($10^{-4} \dots 10^{-2}$) ak , тому σ визначається в межах



Критична швидкість V_c дислокації (в одиницях швидкості звуку v_0) в залежності від відношення v_{MA0}/v_d початкових швидкостей МА і дислокації, розрахована для значень параметрів $s = 0.04$, $E = 1.0$, $\sigma = 10^{-3}$

$10^{-4} \dots 10^{-2}$. У розрахунках вважатимемо $\sigma = 10^{-3}$. Величина s звичайно менша за одиницю (сусідні атоми ланцюжка сильніше зв'язані один з одним, ніж з МА). У розрахунках вважатимемо $s = 0.04$ (слабкий зв'язок МА з атомами ланцюжка). Значення β в кристалах порядку $0.1^2 \dots 0.5^2$ (швидкість дислокації зазвичай складає десять частки швидкості звуку [10]).

Значення розрахованої критичної швидкості дислокації в залежності від відношення початкових швидкостей міжвузельного атома та дислокації представлено на рисунку.

З отриманих результатів випливає, що чим більша різниця початкових швидкостей дислокації і МА, тим при меншій швидкості дислокації може утворитись зв'язаний стан «дислокація + МА». При порівняно низьких швидкостях дислокації, достатніх для її взаємодії з МА, на МА діє пружне поле з боку дислокації, він здобуває прискорення і через певний час (порядку 1 нс) утворює з дислокацією зв'язаний стан. При більшій швидкості дислокації МА не встигає з нею провзаємодіяти, не здобуває достатнього прискорення, і комплекс «дислокація + МА» не утворюється. Залежність, наведена на рисунку, нелінійна. При несуттєвій різниці початкових швидкостей дислокації і МА (< 0.1) утворення стійкої конфігурації можливе при швидкостях дислокації, близьких до швидкості звуку.

ВИСНОВКИ

Отримані в роботі результати свідчать про принципову можливість здійснення переносу маси в кристалі комплексом «дислокація + МА». Реалізація цього механізму здійснюється в широкому інтервалі швидкостей дислокації за рахунок утворення стійкого зв'язаного стану міжвузельного атома і рухомої дислокації, при їхніх різних початкових швидкостях. Критична швидкість V_c залежить від різниці початкових швидкостей дислокації і міжвузельного атома нелінійно. Практичне використання отриманих відомостей поширює можливість створення наукової бази, необхідної для промислового виробництва нових матеріалів методом імпульсного опромінення матеріалів з властивостями термостійкості, антикорозійності, стійкості до впливу агресивних середовищ, в тому числі для потреб космічної галузі, наприклад поверхонь, які контактують з ракетними паливами.

1. Аполлонов В. В., Барчуков А. И., Карпов Н. В. и др. Металлическое лазерное зеркало с охлаждаемой оптической поверхностью // Квантовая электроника.— 1975.—2, № 2.—С. 380—385.
2. Волосевич П. Ю., Погорелов А. Е. Особенности структурных изменений в армо-железе после воздействия докритических потоков импульсного излучения ОКГ. Поверхность. Физика, химия, механика // Поверхня. Фізика, хімія, механіка.—1986.—9.—С. 126—130.
3. Герцирикен Д. С., Мазанко В. Ф., Фальченко В. М. Импульсная обработка и массоперенос в металлах при низких температурах. — Киев: Наук. думка, 1991.— 230 с.
4. Гуревич М. Е., Журавлев А. Ф., Корнюшин Ю. В., Погорелов А. Е. О природе массопереноса в металлах при лазерном облучении // Металлофизика.—1985.—7, № 2.—С. 113—114.
5. Гуревич М. Е., Лариков Л. Н., Мазанко В. Ф. и др. Влияние лазерного облучения на подвижность атомов железа // ФиХОМ.—1977.—№ 2.—С. 7—9.
6. Карнаухов И. Н., Погорелов А. Е., Чернолевский М. С. Безактивационный механизм массопереноса движущимися дислокациями // Металлофизика.—2006.—28, № 6.—С. 827—835.
7. Лариков Л. Н., Максименко Е. А., Погорелов А. Е. Влияние лазерного облучения на перенос атомов в железе и алюминии // Металлофизика.—1985.—7, № 2.—С. 116—120.
8. Погорелов А. Е. Направленный перенос атомов в железе и алюминии при импульсном лазерном воздействии: Дис. ... кандидата физ.-мат. наук. — Киев: Ин-т металлофизики АН УССР, 1985.—172 с.—Машинопись.

9. Френкель Я. И., Конторова Т. О теории пластической деформации и двойственности // Журн. эксперим. и теорет. физ.—1938.—8, № 1.—С. 89—97.
10. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. — М.: Атомиздат, 1970.—599 с.
11. Pogorelov A. E., Ryaboshapka K. P., Zhuravlev A. F. Mass transfer mechanism in real crystals by pulsed laser irradiation // J. Appl. Phys.—2002.—92.—P. 5766—5771.
12. Pogorelov A., Zhuravlev A. Mass transfer by laser-generated dislocations. Defect and diffusion forum // Switzerland, Scitec Public.—2001.—194—199.—P. 1247—1252.

CRITICAL VELOCITY FOR ATOM TRANSFER BY MOVING DISLOCATION

M. S. Chernolevskii

We propose a method of the critical velocity calculation for dislocation and internode mass transfer mechanism in the framework of the Frenkel-Kontorova model which takes into account the motion in a crystal of the dislocation + internode atom complex. Elastic dislocation field forms for an internode atom the potential pit near the dislocation nucleus which relates it to the moving dislocation. The stability of the complex is determined both by initial velocities of the dislocation and atom motions and by the interaction value. The critical velocity at which the mass transfer effect disappears in the framework of the mechanism proposed depend on the difference between initial velocities of the dislocation and internode atom.