

УДК 539.1

## АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ АЛЮМИНИЯ

М.М. АРАКЕЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения

e-mail: marakelyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 28 апреля 2014 г.)

Исследовано движение дислокации Френкеля–Конторовой в монокристаллах алюминия при низких температурах. С использованием синус-уравнения Гордона осуществлено математическое моделирование сравнительного движения дислокаций в кристаллах с учетом барьера Пайерлса и без его учета. Показано, что при учете этого барьера в алюминии дислокация движется в направлении скольжения посредством туннелирования перегибов. Произведена количественная оценка возможности такого эффекта

### 1. Введение

Одним из первых приложений модели Френкеля–Конторовой (ФК) была теория дислокаций в металлах [1]. Как известно, дислокации ответственны за большинство механических свойств твердых тел. Модель ФК была первой моделью, которая позволила получить простые аналитические зависимости, позволяющие моделировать процесс движения дислокаций. В этой модели для краевой дислокации атомы над плоскостью скольжения заменены рядами материальных точек, связанных одинаковыми пружинами, а атомы под плоскостью скольжения заменены подложкой, описываемой синусоидальным потенциалом. При движении дислокаций потенциальная энергия кристалла периодически меняется.

В идеальном бездефектном кристалле действуют только силы, обусловленные стационарным периодическим потенциалом Пайерлса. Эти силы можно рассматривать как минимальную внешнюю нагрузку [2]. Пайерлс и Набарро [2] предсказали вид периодического потенциала смещений, воздействующего на дислокацию. Из экспериментальных данных следует, что энергетический барьер Пайерлса действительно существует и его величина колеблется от  $10^{-4}$   $\mu$  (ковалентные кристаллы) до  $10^{-2}$   $\mu$  (плотноупакованные металлы),  $\mu$  – модуль сдвига [2]. Процесс термического перехода дислокации из одной долины Пайерлса в другую начинается с переброски в соседнюю долину короткого участка дислокации [1]. В алюминии, при малых плотностях дислокаций, дислокации наблюдаются в виде прямых линий вдоль кристаллографических направлений с малыми индексами, указывая на влияние барьера Пайерлса [2]. В [3] было экспериментально показано, что в алюминии при  $t \leq 50$  К приложенное напря-

жение вызывает движение только одиночных перегибов, а термически активированное образование пар перегибов происходит при более высоких температурах. Известно также [4], что перегибы являются переносчиками массы, т.к. они начинают скользить при силе намного меньшей, чем требуется для движения дислокации как целой.

Низкотемпературное движение дислокаций в кристаллах может быть связано с туннелированием конечной части дислокации [4]. В такого рода задачах линейную дислокацию можно представить как упругую струну, лежащую первоначально в одном из локальных минимумов потенциала. Рельеф этого потенциала представляет собой последовательность локальных минимумов, каждый из которых находится ниже другого на величину, зависящую от приложенного к кристаллу напряжения. Движение дислокации сводится к туннелированию в соседний минимум определенного отрезка дислокации с последующим подтягиванием туда оставшейся ее части.

Дислокации ФК в монокристаллах алюминия с учетом потенциала Пайерлса можно считать топологическими солитонами [3]. Известно, что при низких температурах в алюминии имеет место скольжение дислокаций при аномально малых напряжениях. Попытки объяснить это явление классически приводят к несогласованным результатам. В настоящей работе ставится задача объяснить указанный эффект на основе квантового подхода. Моделирование процесса движения с использованием реальных констант дает возможность исследовать характер движения дислокаций в потенциале Пайерлса, выявить его коренное отличие от надбарьерного движения дислокаций.

## 2. Результаты

Для расчетов эффекта туннелирования квантовых систем удобно использовать квазиклассическое представление волновой функции в виде

$$\Psi \sim \exp(iS/h), \quad (1)$$

где  $S$  – классическое действие системы. Для туннельного эффекта существует мнимая часть  $S$ , определяющая затухание волновой функции в классически недоступной области.

Как известно, движение дислокаций в кристаллах с высокими барьерами Пайерлса происходит путем образования перегибов. Это явление при высоких температурах происходит за счет термических флуктуаций. При достаточно низких температурах термические флуктуации сменяются квантовыми, вероятность которых не зависит от температуры [4]. Такое явление носит характер квантового подбарьерного проникновения (туннелирования). Вероятность туннельного перехода задается известной формулой Фейнмана [5]

$$p = \left| \sum \exp(iS/h) \right|^2. \quad (2)$$

В чистых металлах при низких температурах основными препятствиями для движения дислокаций являются барьеры Пайерлса, а их преодоление про-

исходит путем зарождения на дислокациях перегибов. Начальная стадия деформирования обеспечивается перемещениями на сравнительно малые расстояния большого числа мелкомасштабных фрагментов дислокационных линий – перегибов.

Вычислим напряжение Пайерлса для дислокаций в алюминии  $W_p = \mu b^3 / (300d)$  [2], где  $d$  – межплоскостное расстояние,  $\mathbf{b}$  – вектор Бюргерса. Расчеты дают  $10^{-15}$  эрг, что согласуется с данными, полученными в работе [3], где на основании большого числа исследований кинетики дефектов кристаллической структуры было получено, что в образцах алюминия заметной подвижностью могут обладать только перегибы дислокаций. Известно, что перегибы адекватны солитонам, взаимодействующим с периодическим потенциалом решетки [3]. Согласно этой работе, эффективная масса солитонов  $m_s = (0.2–0.5)m_p$ , где  $m_p$  – масса протона. Будем считать  $m_s = 0.3 m_p$ . Тогда  $m_s \approx 4.8 \times 10^{-25}$  г.

Подсчитаем кинетическую энергию перегибов (солитонов) в алюминии. Используя параметры из [2], получим кинетическую энергию солитона  $E_{ks} \approx 0.24 \times 10^{-22}$  эрг.

Как известно из квантовой механики [6], туннельный эффект будет иметь заметное значение, когда

$$\frac{2}{h} \sqrt{2m_s(W_n - E_{ks})} l \approx 1, \quad (3)$$

где  $W_n$  – высота барьера Пайерлса,  $l$  – ширина барьера Пайерлса. Расчеты дают, что для солитонов в алюминии  $2\sqrt{2m_s(W_n - E_{ks})} l / h \approx 0.73$ , что позволяет предположить возможность туннелирования перегибов.

Таким образом, туннельный эффект возможен не только в квантовых системах, состоящих из одной частицы. Низкотемпературное движение дислокаций в кристаллах может быть связано с туннелированием конечной части дислокации, состоящей из многих частиц. Квантовые эффекты в кристаллах наблюдаются тогда, когда волновые функции атомов, находящихся в соседних узлах, перекрываются. Вероятность квантового туннелирования атома в соседний узел решетки характеризуется безразмерным параметром де Бюра [7]

$$\Delta \sim h(mu)^{-1/2} / a, \quad (4)$$

где  $a$  – межатомное расстояние,  $m$  – масса атомов,  $u$  – энергия взаимодействия соседних атомов. Для большинства кристаллов параметр  $\Delta$  очень мал. В квантовых кристаллах  $\Delta \sim 1$ , и эффект делокализации частиц существенен. При этом даже нулевые колебания сильно ангармоничны. Существуют кристаллы, в которых условие малости амплитуды нулевых колебаний может нарушаться для некоторых видов колебаний. Например, это относится к примесным атомам водорода в решетке тяжелых металлов [7], при этом величина амплитуды нулевых колебаний связана с малостью массы примесных атомов. Аналогично из-за малости массы солитонов (перегибов) и их слабого взаимодействия с атомами матрицы солитон может делокализоваться в кристалле, в то время как сами

атомы матрицы ведут себя классическим образом.

Оценим  $\Delta$  для перегибов в алюминии, используя формулу (4). Согласно [2], для перегибов краевой дислокации

$$u = \frac{\mu b^2 a^2 (1-2\nu)}{8\pi L (1-\nu)}, \quad (5)$$

где  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $L$  – расстояние между перегибами. Расчеты показывают, что в алюминии  $u \sim 10^{-14}$  эрг и  $\Delta \approx 0.4$ . Для сравнения, в квантовых кристаллах для  $\text{He}^3$   $\Delta \approx 0.49$ , для неона  $\Delta \approx 0.07$ . Во всех чистых металлах параметр  $\Delta$  ничтожно мал [7]. Таким образом, в алюминии существует возможность квантового туннелирования перегибов. Известно, что энергетический барьер Пайерлса уменьшается при росте температуры (хотя точный вид температурной зависимости не установлен) и с увеличением ширины дислокации. Рассчитаем ширину дислокации в алюминии при этих условиях. Как известно, алюминий имеет ГЦК структуру. Согласно [2], ширина дислокаций определяется формулой

$$\omega = \pi d \left[ \frac{E}{\mu(1-\nu^2)} \right]^{1/2}, \quad (6)$$

где  $E$  – модуль Юнга. Расчеты дают для направления [111] значение ширины дислокации  $\omega = 12.8 \times 10^{-8}$  см, для направления [220] –  $\omega = 7.8 \times 10^{-8}$  см, для ширины перегиба –  $(4-6) \times 10^{-8}$  см.

Таким образом, в рассматриваемом случае имеем узкий перегиб, который при перемещении вдоль линии дислокации преодолевает барьер Пайерлса.

Твердые тела, обычно, описываются сложными моделями с большим числом степеней свободы. Однако, относительно простая модель дислокаций ФК стала универсальным инструментом нелинейной физики [8]. Для континуальной модели ФК была развита математическая теория, которая связала модель ФК с математической теорией солитонов. В рамках этой теории дислокация ФК является топологическим солитоном. В континуальном приближении модель ФК сводится к точно интегрируемому синус–уравнению Гордона, которое нашло свое применение при изучении дислокаций, а также перегибов и бризеров. Оно также применяется в теории слабой сверхпроводимости как нелинейное уравнение, описывающее джозефсоновские контакты [9].

Синус-уравнение Гордона имеет следующий вид [9]:

$$\ddot{\varphi}_n = \frac{2\pi f_0}{ma} \sin \varphi_n + \frac{ka^2}{m} \varphi_n'', \quad (7)$$

где  $\varphi_n$  – смещение  $n$ -го атома от положения равновесия в угловых единицах,  $m$  – масса атома,  $f_0 = m(v_0)^2 a / (2\pi(l_0)^2)$ , где  $l_0$  – параметр, который увеличивается при увеличении жесткости пружины и уменьшении силы со стороны подложки, то есть уменьшается с увеличением барьера Пайерлса,  $v_0$  – скорость звука.

Поскольку  $W_n = 2\pi b f_0 / 300$  [2], то из (7) следует, что синус-уравнение Гордона принимает вид

$$\ddot{\varphi}_n \frac{1}{\omega^2} = \sin \varphi_n + \frac{v_0^2}{\omega^2} \varphi_n'' , \quad (8)$$

где  $\omega^2 = 300W_p / (mab)$  – характерная частота,  $v_0^2 = ka^2 / m$ .

Переходя к безразмерным переменным  $x = (v_0 / \omega) \tilde{x}$  и  $t = \tilde{t}(\omega)$ , получим

$$\ddot{\varphi}_n = \sin \varphi_n + \varphi_n'' . \quad (9)$$

Как указано в работе [2], энергетический барьер периодических смещений Пайерлса для перегибов должен быть меньше, чем барьер Пайерлса для дислокаций.

При расчетах использовались следующие константы:  $v_1 = 10^{-1}$  см/с – скорость дислокации,  $v_0 = 6 \times 10^5$  см/с – скорость звука в алюминии,  $b = 2.57 \times 10^{-8}$  см и  $m = 4.5 \times 10^{-23}$  г – масса атомов алюминия.

Представим сравнительный численный эксперимент при надбарьерном движении полной дислокации и туннелировании посредством перегибов в алюминии.

Как видно из рис.1, одна из дислокаций совершает туннельный переход в направлении скольжения с высоким барьером Пайерлса (жирная линия) ( $W_p \sim 4.14 \times 10^{-15}$  эрг [3]), другая, для сравнения, совершает надбарьерное движение. Дислокация, совершающая туннельный переход, из-за отсутствия трения движется быстрее ( $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ ).

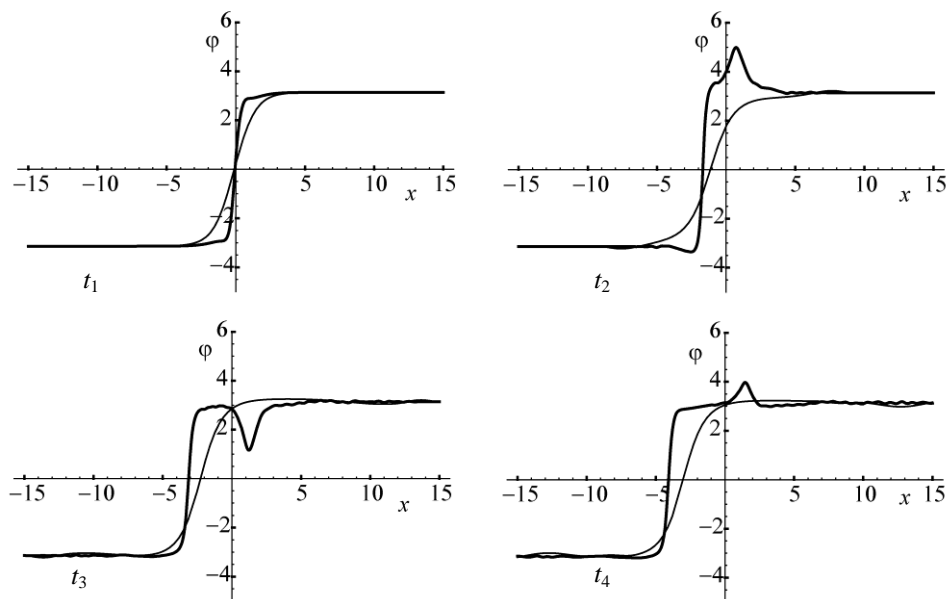


Рис.1. Поле смещений двух дислокаций для разных моментов времени.

Из рис.2 следует, что скорость дислокации, совершающей надбарьерное движение, в процессе скольжения знака не меняет, оставаясь постоянной по модулю.

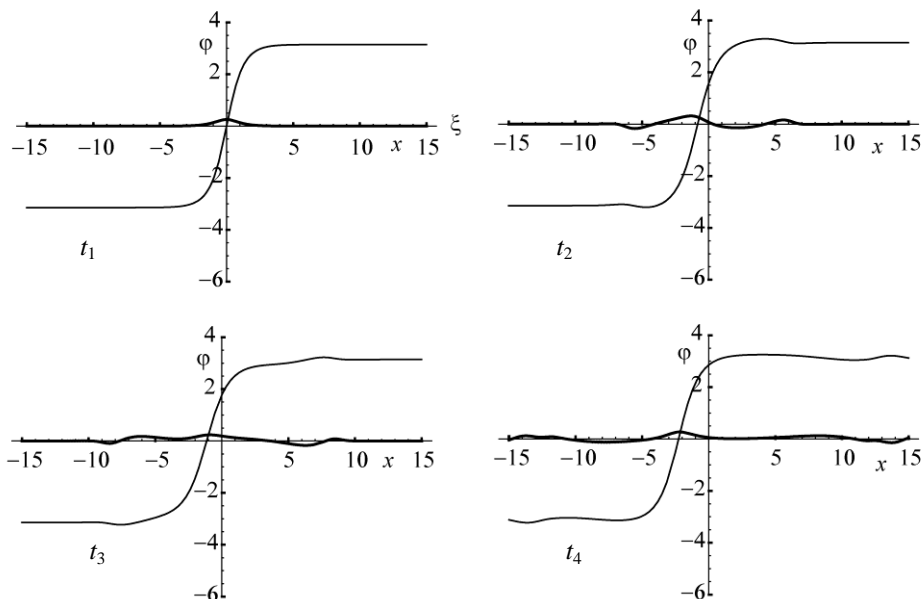


Рис.2. Поле смещений дислокации, совершающей надбарьерное движение, и распределение скоростей той же дислокации по координате для разных моментов времени (жирная линия).

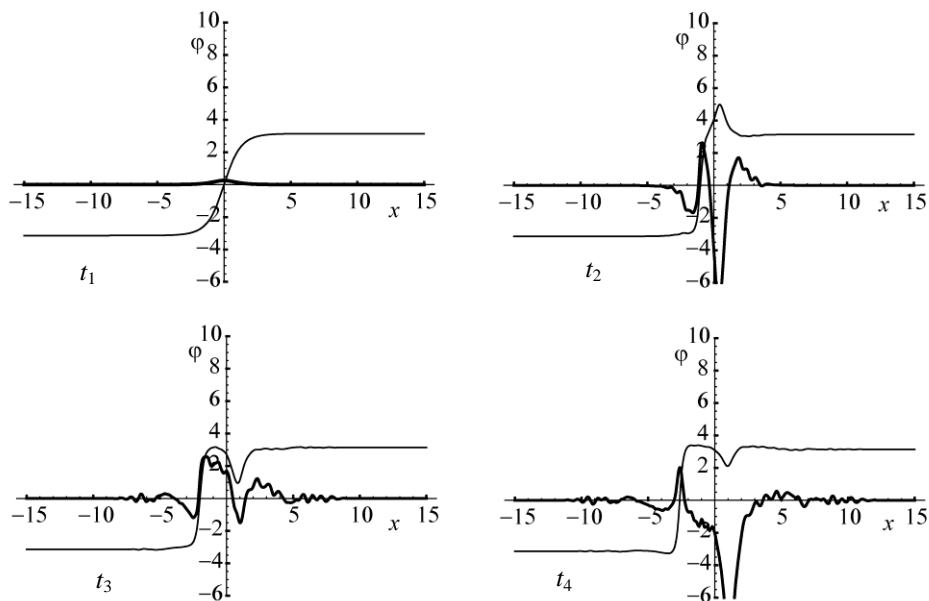


Рис.3. Поле смещений дислокации, движущейся посредством туннелирования перегибов, и распределение скоростей той же дислокации по координате для разных моментов времени.

Из рис.3 видно, что скорость отдельных фрагментов дислокации (перегибов) при туннелировании различна и меняет знак в процессе скольжения, дислокация движется скачкообразно, совершает колебания в направлении скольжения. Полученный результат находится в согласии с результатами работы [10], где показано, что при низких температурах в меди и алюминии деформация приобретает скачкообразный характер.

Отметим, что экспериментально наблюдаемая низкотемпературная скачкообразная деформация в алюминии описана также в обзоре [11]. В работе [12] дана интерпретация низкотемпературных аномалий движения дислокаций с динамическими перегибами в чистых металлах. Показано, что отжиг образца, приводящий к исчезновению перегибов, вызывает подавление указанных особенностей.

### 3. Заключение

Таким образом, проведенный нами теоретический расчет и математическое моделирование позволяют заключить, что в алюминии, с учетом барьера Пайерлса, дислокация ФК движется посредством туннелирования перегибов. Сделана теоретическая оценка возможности такого эффекта. Моделирование полей смещений и скоростей при движении дислокации демонстрирует туннелирование дислокаций.

Полученный результат объясняет аномальное уменьшение напряжения пластического течения и рост деформационного упрочнения в алюминии при низких температурах [10,13].

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Т. Судзуки, Х. Есиага, Ц. Такеути.** Динамика дислокаций и пластичность. М., Атомиздат, 1972.
2. **Дж. Хирт, И. Лоте.** Теория дислокаций. М., Атомиздат, 1972.
3. **В.А. Мелик-Шахназаров, И.И. Мирзоева, И.А. Наскидашвили.** Письма в ЖЭТФ, **43**, 247 (1986).
4. **Б.В. Петухов, В.Л. Покровский.** ЖЭТФ, **63**, 634 (1972).
5. **Р. Фейнман, А. Хибс.** Квантовая механика и интегралы по траекториям. М., Мир, 1968.
6. **Д.И. Блохинцев.** Основы квантовой механики. М., Высшая школа, 1961.
7. **Ф. Андреев.** УФН, **118**, 251 (1976).
8. **О.М. Браун, Ю.Ц. Кившарь.** Модель Френкеля–Конторовой. Концепции, методы и приложения. Physics – Monograph (Ed. W.Beigbock), 2008.
9. Солитоны в действии. Под ред. К.Лонгрена, Э.Скотта. М., Мир, 1981.
10. **В.В. Пустовалов, Н.В. Исаев и др.** Физика низких температур, **34**, 842 (2008).
11. **В.В. Пустовалов.** Физика низких температур, **26**, 515 (2000).
12. **Л.П. Межев-Деглин, С.И. Мухин.** Физика низких температур, **37**, 1011 (2011).
13. **Т.А. Parkhomenko, V.V. Pustovalow.** Phys. stat. sol.(a), **74**, 11 (1982).

ԱԼՅՈՒՄԻՆԻՒՄԻ ՄԻԱԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԴԻՍԼՈՎԱՑԻԱՆՆԵՐԻ ՇԱՐԺՄԱՆ  
ՎԵՐԼՈՒԾՈՒԹՅՈՒՆԸ ԵՎ ՄԱԹԵՄԱՏԻԿԱԿԱՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ

Մ.Մ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ

Հետազոտված է ցածր ջերմաստիճաններում այլումինիումի միաբյուրեղում Ֆրենկել-Կոնտորովայի դիսլոկացիայի շարժումը: Մինուս-Գորդոնի հավասարման օգտագործմամբ կատարված է դիսլոկացիաների համեմատական շարժման մաթեմատիկական մոդելավորում, մի դեպքում հաշվի առնելով  $\kappa$ , մյուս դեպքում, հաշվի չառնելով Պայերլսի պատնեշը: Ցույց է տրված, որ Պայերլսի պատնեշը հաշվի առնելու դեպքում դիսլոկացիան սահքի ուղղությամբ շարժվում է ծովածքների թունելավորման միջոցով: Կատարված է նշված երևույթի քանակական գնահատումը:

ANALYSIS AND MATHEMATICAL MODELING OF DISLOCATIONS  
MOTION IN ALUMINUM SINGLE CRYSTALS

M.M. ARAKELYAN

Motion of a Frenkel–Kontorova dislocation in aluminum monocrystals at low temperatures is studied. Comparative mathematical modeling of dislocations motion in a Peierls potential relief and without it is performed by using the sine-Gordon equation. It is shown that in a Peierls relief dislocations transitions are of the quantum tunneling type. Quantitative estimate of the possibility of such effect is made.