

УДК 548.12

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ТРОЙНЫХ ДИСЛОКАЦИОННЫХ УЗЛОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ ПРОТЕКАНИИ ДИСЛОКАЦИОННЫХ РЕАКЦИЙ В ГПУ-КРИСТАЛЛАХ

Г. В. Бушуева, Э. М. Яхшаатова

(кафедра молекулярной физики)

Одним из важных источников деформационного упрочнения являются дислокационные реакции, в результате которых формируются дислокационные отрезки (зоны рекомбинации) с новыми векторами Бюргерса [1—8]. Образование зон рекомбинаций сопровождается формированием тройных дислокационных узлов. Поэтому изучение возможных конфигураций узлов, их структуры, устойчивости, а также условий, обеспечивающих течение дислокационных реакций, представляется весьма важным при анализе вкладов реакций в процессы деформационного упрочнения. Обычно анализ строится на базе критерия «квадрата вектора Бюргерса» (критерий Франка) и простых энергетических соображений, что дает практически лишь качественное понимание соответствующих процессов [9]. Более строгое и последовательное рассмотрение должно проводиться на основе метода моментов [10—13]. В данной работе с помощью метода моментов исследованы особенности структуры и равновесия пространственных дислокационных конструкций, формирующихся в ГПУ-кристаллах в результате реакций:

$$\frac{1}{3} \langle \bar{1}\bar{2}\bar{1}0 \rangle + \frac{1}{3} \langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle \rightarrow \frac{1}{3} \langle \bar{2}110 \rangle, \quad (1)$$

$$\frac{1}{3} \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle + \frac{1}{3} \langle \bar{2}113 \rangle \rightarrow \frac{1}{3} \langle 0003 \rangle, \quad (2)$$

$$\frac{1}{3} \langle \bar{1}\bar{1}23 \rangle + \frac{1}{3} \langle \bar{1}\bar{2}\bar{1}\bar{3} \rangle \rightarrow \langle 0\bar{1}10 \rangle. \quad (3)$$

Дислокационные конфигурации, отвечающие реакциям (1)—(3), приведены на рис. 1. Во всех трех случаях в результате реакций образуются сидячие дислокации. Ориентации дислокационных лучей с векторами Бюргерса b_i будем характеризовать ортами e_i (или углами α_i), а плоскости скольжения — нормальными n_i . Согласно [10], равновесные узловые конфигурации должны определяться из условия равенства нулю сумм моментов, действующих на каждую дислокационную ветвь:

$$M_i = \sum_j M_{ji} = 0, \quad (4)$$

где M_{ji} — момент, действующий на i -ю ветвь при взаимодействии ее с j -й ветвью. К сожалению, практическое использование метода моментов для анизотропного случая [13] сопряжено с большими техническими трудностями. Поэтому анализ равновесных конфигураций дислокационных узлов обычно проводится в изотропном приближении [14—16].

При определении моментов, входящих в (4), можно воспользоваться двумя схемами расчетов [14], которые отвечают локальному [10] и среднему [14] моментам, действующим на дислокационную линию. Для первого случая формулы для расчета моментов приводятся в работе [10]. Во втором случае моменты самодействия M_{ii} и взаимодействия

M_{ji} ($i \neq j$), вращающие дислокационные лучи в плоскостях скольжения, могут быть определены по формулам [16, 17]

$$M_{ii} = \frac{G}{4\pi(1-\nu)} \left(\nu \ln \frac{2L_0}{r_0} - 2\nu - \frac{1}{2} \right) (\mathbf{e}_i \mathbf{b}_i) [\mathbf{e}_i \mathbf{b}_i], \quad (5)$$

$$\begin{aligned} (M_{ji} \mathbf{n}_i) \mathbf{n}_i = & -\frac{G}{4\pi} \left\{ A_{ji} \ln \left(1 + \sqrt{\frac{2}{1+p}} \right) + \right. \\ & + \frac{A_{jlp} - B_{ji}}{1-p^2} (\sqrt{2(1+p)} - 2) + \frac{C_{ji}(3+p^2) - 4D_{jlp}}{3(1-p^2)^2} + \\ & \left. + \frac{D_{ji}(3p+1) - C_{ji}(p+3)}{6(1-p^2)^2} \sqrt{2(1+p)} \right\}, \quad (6) \end{aligned}$$

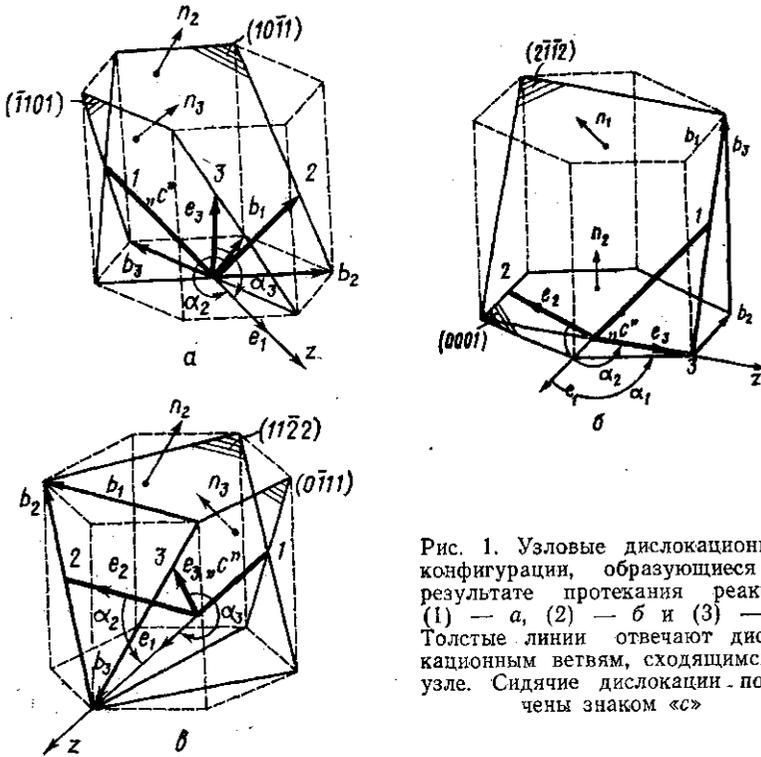


Рис. 1. Узловые дислокационные конфигурации, образующиеся в результате протекания реакций (1) — а, (2) — б и (3) — в. Толстые линии отвечают дислокационным ветвям, сходящимся в узле. Сидячие дислокации помечены знаком «с»

где

$$A_{ji} = \left\{ \frac{\nu}{1-\nu} (\mathbf{b}_i \mathbf{e}_i) ([\mathbf{b}_j \mathbf{e}_i] \mathbf{n}_i) + (\mathbf{b}_j \mathbf{n}_i) (\mathbf{e}_j \mathbf{n}_i) ([\mathbf{b}_i \mathbf{e}_i] \mathbf{n}_i) + (\mathbf{b}_i \mathbf{b}_j) ([\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j] \mathbf{n}_i) \right\} \mathbf{n}_i;$$

$$B_{ji} = \frac{\nu}{1-\nu} \left\{ ([\mathbf{b}_j \mathbf{e}_i] \mathbf{n}_i) (\mathbf{e}_i \mathbf{b}_i) - \left([\mathbf{e}_i \mathbf{b}_j] \cdot \frac{[[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j] \mathbf{n}_i]}{|[[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j] \mathbf{n}_i]|} \right) \left([\mathbf{b}_i \mathbf{e}_j] \cdot \frac{[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j]}{|[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j]|} \right) \right\} \mathbf{n}_i;$$

$$C_{ji} = \frac{3}{1-\nu} (\mathbf{e}_i \mathbf{b}_i) \left([\mathbf{e}_j \mathbf{b}_j] \cdot \frac{[[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j] \mathbf{n}_i]}{|[[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j] \mathbf{n}_i]|} \right) \left([\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j] \cdot \frac{[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j]}{|[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j]|} \right) \mathbf{n}_i;$$

$$D_{ji} = \frac{3}{1-\nu} (\mathbf{e}_i \mathbf{b}_i) \left([\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j] \cdot \frac{[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j]}{|[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j]|} \right) \left([\mathbf{e}_j \mathbf{b}_j] \cdot \frac{[[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j] \mathbf{n}_i]}{|[[\mathbf{n}_i \mathbf{n}_j] \mathbf{n}_i]|} \right) \mathbf{n}_i;$$

$$p = (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j);$$

G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, L_0 — параметр, определяющий степень дальнего действия поля дислокации, r_0 — радиус ядра дислокации.

Из (4) — (6) видно, что нахождение равновесных конфигураций тройных дислокационных узлов в общем случае сводится к решению системы трех трансцендентных уравнений. Однако, поскольку в результате реакций (1) — (3) образуются сидячие дислокации, жестко ориентированные в пространстве, задача сводится к системе двух уравнений. Решение этой системы проводилось на ЭВМ путем построения поля моментов и нахождения совокупности значений α_i , при которых $(M_i n_i)_i$ обращаются в нуль. Построение подобного поля удобно также в том отношении, что позволяет одновременно определить устойчивость данной дислокационной конфигурации, а также выявить области ориентации лучей, когда возможно протекание дислокационных реакций. Численные расчеты проводились при значениях b_i , отвечающих цинку, $\nu=0,3$, и $2L_0/r_0=10^4$.

На рис. 2, *a* сплошные и пунктирные линии отвечают совокупности корней α_{2p} и α_{3p} , определяющих равновесие первого, второго и третьего дислокационных лучей в тройном узле, образующемся при протекании реакции (1). Толстые линии отвечают устойчивым состояниям соответствующих дислокационных лучей, тонкие — неустойчивым. Точки пересечения $(\alpha_{2p}^{(k)}, \alpha_{3p}^{(k)})$ пунктирных кривых определяют равновесные дислокационные конструкции. Штрих-пунктирные линии $\alpha_2 = 180^\circ$ и $\alpha_3 = 180^\circ$ отвечают границам смены знака моментов $(M_2 n_2)$ и $(M_3 n_3)$. При этом для

$$\alpha_2 = 180^\circ \pm \varepsilon \quad (M_2 n_2) \rightarrow \pm \infty, \quad \text{а для } \alpha_3 = 180^\circ \pm \varepsilon \quad (M_3 n_3) \rightarrow \pm \infty$$

$\varepsilon \rightarrow 0$ $\varepsilon \rightarrow 0$

несимметричным образом. В связи с этим линия $\alpha_2 = 180^\circ$ не соответствует линии нулевых значений $(M_2 n_2)$, а $\alpha_3 = 180^\circ$ — линии нулевых значений $(M_3 n_3)$. Это связано с тем, что при $\alpha_2 = 180^\circ$, т. е. при слиянии дислокационных ветвей 1 и 2, на вновь образующуюся дислокацию с вектором Бюргерса b_3 будет действовать отличный от нуля момент со стороны дислокационной ветви 3. Однако при $\alpha_3 = 180^\circ$ конфигурация симметризуется и $(M_2 n_2)$ обращается в нуль. Аналогичная ситуация имеет место для $(M_3 n_3)$ при $\alpha_3 = 180^\circ$: $(M_3 n_3)$ обращается в нуль лишь в точке $(\alpha_3 = \alpha_2 = 180^\circ)$. Таким образом, точка $(\alpha_2 = \alpha_3 = 180^\circ)$ пересечения штрих-пунктирных линий также является корнем системы (4).

Из рис. 2, *a* видно, что для данного случая возможно существование 10 физически неэквивалентных равновесных конфигураций узла. При этом все конфигурации оказываются пространственно симметричными относительно призматической плоскости $\{2\bar{1}10\}$, в которой расположена сидячая дислокация 1. Две из конфигураций являются вырожденными, одна из них $(\alpha_{2p}^{(10)}, \alpha_{3p}^{(10)})$ отвечает аннигиляции всех трех дислокаций, а другая $(\alpha_{2p}^{(9)}, \alpha_{3p}^{(9)})$ — слиянию дислокационных лучей 2 и 3 с образованием прямолинейной краевой дислокации.

Устойчивость узловых конфигураций определялась по изменению знака моментов $(M_2 n_2)$ и $(M_3 n_3)$ в окрестности узловых точек. Так, в окрестности $(\alpha_{2p}^{(1)}, \alpha_{3p}^{(1)})$ на рис. 2, *a* дислокационные лучи, будучи отклонены от равновесной конфигурации, в результате взаимодействия друг с другом должны вернуться в равновесное состояние, т. е. конфигурация $(\alpha_{2p}^{(1)}, \alpha_{3p}^{(1)})$ является устойчивой. Аналогично можно показать, что конфигурация $(\alpha_{2p}^{(6)}, \alpha_{3p}^{(6)})$ оказывается неустойчивой. Конфигурации при $k=2, 3, 4$ следует классифицировать как полустойчивые, поскольку

ку они отвечают устойчивому состоянию одного дислокационного луча и неустойчивому состоянию другого. Для рассматриваемого случая равновесная конфигурация $(\alpha_{2p}^{(1)}, \alpha_{3p}^{(1)})$ является единственной устойчивой конфигурацией тройного узла. Конфигурации тройных узлов $(\alpha_{2p}^{(k)}, \alpha_{3p}^{(k)})$ ($k = 5 - 8$) неустойчивы. Вырожденные конфигурации $(\alpha_{2p}^{(9)}, \alpha_{3p}^{(9)})$ и $(\alpha_{2p}^{(10)}, \alpha_{3p}^{(10)})$ устойчивы.

Поле моментов позволяет очертить области R изменения α_2 и α_3 , при которых имеет место течение дислокационной реакции (1). Эта

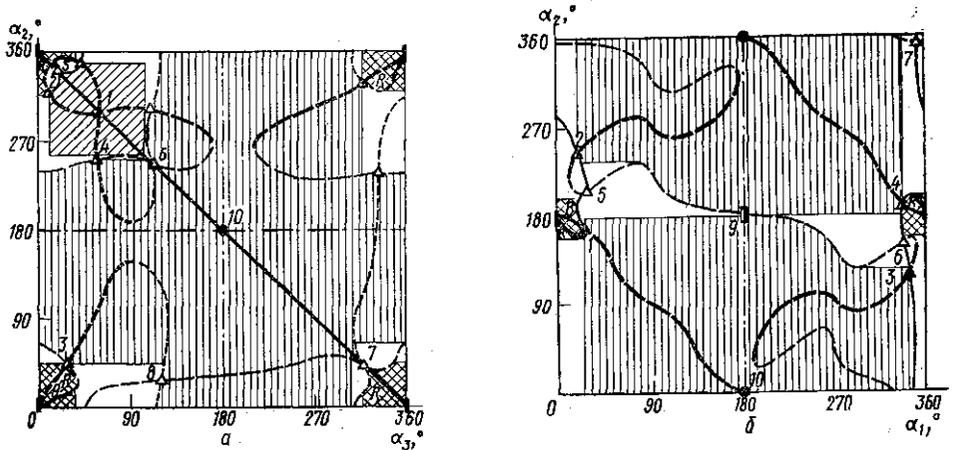


Рис. 2. Поле моментов для реакции (1) — а, (2) — б и (3) — в. $(M_{1n_1})=0$ (сплошные линии), $(M_{2n_2})=0$ (штриховые), $(M_{3n_3})=0$ (пунктир). Толстые линии отвечают устойчивым состояниям ветвей, тонкие — неустойчивым. Треугольниками (черными, черно-белыми, светлыми) обозначены соответственно устойчивые, полуустойчивые и неустойчивые конфигурации тройных дислокационных узлов; прямоугольниками (аналогично) — устойчивые, полуустойчивые и неустойчивые конфигурации прямолинейных дислокаций; ● — аннигиляция дислокаций; R — область гарантированного течения дислокационных реакций; косой штриховкой обозначена область устойчивости пространственных тройных узлов; вертикальной — область аннигиляции дислокаций

область на рис. 2, а заштрихована и охватывает точку $(\alpha_{2p}^{(9)}, \alpha_{3p}^{(9)})$. Аналогичным образом на рис. 2, а можно выделить области устойчивости тройных дислокационных узлов и области аннигиляции всех трех дислокаций.

На рис. 2, б приведено поле моментов для случая дислокационной реакции (2). Сплошные линии соответствуют $(M_{1n_1})=0$, пунктирные — $(M_{2n_2})=0$. Штрих-пунктирная линия отвечает границе смены знака (M_{1n_1}) , на которой, однако, $(M_{1n_1}) \neq 0$. Неравенство нулю момента (M_{1n_1}) на линии $\alpha_1=180^\circ$ не препятствует тому, что точки пересечения $(\alpha_1=180^\circ, \alpha_2=0; 180^\circ)$ прямой $\alpha_1=180^\circ$ с линиями $(M_{2n_2})=0$ являются корнями системы (4). Это связано с тем, что при $\alpha_2=0$ и 180° за счет симметризации конфигурации (M_{1n_1}) обращается в нуль. Таким

образом, в общей сложности для случая (2) возможно существование 10 равновесных конфигураций $(\alpha_{1p}^{(k)}, \alpha_{2p}^{(k)})$, из которых 3 являются вырожденными. Анализ на устойчивость показал, что состояния при $k=5, 6, 7$ отвечают неустойчивым, а при $k=1, 2, 3, 4, 9$ — полуустойчивым конструкциям. Лишь вырожденные состояния $(\alpha_{1p}^{(8)}=0^\circ, \alpha_{2p}^{(8)}=180^\circ)$, $(\alpha_{1p}^{(10)}, \alpha_{2p}^{(10)})$, когда в соответствии с реакцией (2) формируется краевая дислокация с вектором Бюргерса b_3 либо все три дислокации аннигилируют, являются устойчивыми. Заштрихованные участки соответствуют области гарантированного течения этой реакции и области аннигиляции. Следует подчеркнуть, что для оценки возможности протекания дислокационных реакций метод моментов оказывается более продуктивным, чем обычный критерий Франка. Особенно наглядно это можно продемонстрировать на примере взаимодействия двух дислокаций с ортогональными векторами Бюргерса. Известно, что для подобных случаев критерий Франка не может дать однозначного ответа. При использовании метода моментов результат получается вполне определенный. Подобная ситуация возникает при $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$. Если обратиться к рис. 2, б, то можно увидеть, что точка $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ не является решением соответствующих уравнений равновесия. Это означает, что с точки зрения «моментного» критерия дислокационная реакция $b_2 + b_3 \rightarrow b_1$ протекать не должна.

Наконец, на рис. 2, в приведено поле моментов, отвечающее дислокационной реакции (3). Точки пересечения $(\alpha_{2p}^{(k)}, \alpha_{3p}^{(k)})$ пунктирных кривых определяют равновесные дислокационные конструкции. Видно, что в общей сложности возможно существование 12 равновесных конфигураций $(\alpha_{2p}^{(k)}, \alpha_{3p}^{(k)})$, отвечающих тройным узлам ($k=1-10$), прямой дислокации ($k=11$) и аннигиляции ($k=12$). Состояния, отвечающие $k=1, 11, 12$, являются устойчивыми, $k=7-10$ — неустойчивыми, $k=2-6$ — полуустойчивыми. Таким образом, в случае дислокационной реакции (3) возможно существование одного устойчивого пространственного тройного дислокационного узла. На рис. 2, в заштрихованы области устойчивости тройного узла, области гарантированного протекания дислокационной реакции и аннигиляции.

Из приведенных на рис. 2, а, б, в данных следует, что в ГПУ-кристаллах устойчивые тройные пространственные узлы могут образовываться только при взаимодействии дислокаций с равными по модулю векторами Бюргерса. Последний результат является достаточно общим. Как показывает анализ, и в других случаях при взаимодействии дислокаций с различающимися векторами Бюргерса формирование устойчивых пространственных дислокационных узлов невозможно. Обращает на себя внимание также тот факт, что даже тогда, когда формирование устойчивых пространственных тройных узлов возможно, зона их устойчивости оказывается небольшой. Зона гарантированного течения дислокационных реакций также оказывается ограниченной. В противовес этому зона аннигиляции во всех случаях достаточно обширна.

Представляет интерес проведение сравнительного анализа возможных равновесных конфигураций тройных узлов на основе использования представлений о локальных и средних моментах. В связи с этим для дислокационного узла, приведенного на рис. 1, а, были выполнены расчеты на основе локальных моментов по формулам [10]. На рис. 3 представлено изменение момента (M_2n_2) от α_2 при $\alpha_3 = 360^\circ - \alpha_2$, т. е. вдоль разреза $\alpha_3 = 360^\circ - \alpha_2$ на рис. 2, а. Видно, что количество возможных равновесных конфигураций в случае расчета на базе локальных моментов меньше. Однако самое существенное заключается в том, что

в рамках рассмотрения на основе локальных моментов тройные пространственные узлы не могут быть устойчивыми. Это означает, что дислокационные конфигурации с тройными узлами фактически не могут быть реализованы, поскольку если формируется узловая конструкция, то бесконечно большие силы притяжения между ветвями дислокаций должны вызвать неограниченное увеличение зоны рекомбинации или аннигиляции дислокаций. Таким образом, при оценке возможности реализации узловых конфигураций и их устойчивости следует принимать во внимание взаимосвязанность различных участков дислокационных линий, в том числе и действие отдаленных участков дислокационных ветвей.

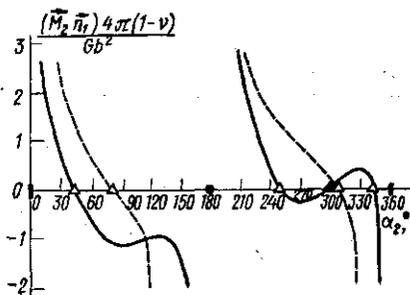


Рис. 3. Зависимость момента (M_{2l_2}) от α_2 при $\alpha_3=360^\circ-\alpha_2$. Пунктирные и сплошные линии соответствуют расчетам на основе локальных и средних моментов

Авторы выражают глубокую благодарность проф. В. Л. Инденбому за обсуждение результатов настоящей работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967. [2] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. [3] Saada G. Acta Metallurg, 1960, 8, N 3, p. 200. [4] Saada G. Acta Metallurg, 1960, 8, N 12, p. 841. [5] Lavrentev F. F., Pokhil Y. A. Phys. Stat. Solidi, 1975, 32a, p. 227. [6] Lavrentev F. F., Zolotukhina I. N. Mat. Sci and Engineering, 1976, 23, p. 69. [7] Лаврентьев Ф. Ф. В кн.: Физика деформации и упрочнения монокристаллов. Киев, 1972, с. 107. [8] Смирнов Б. И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Л.: Наука, 1981. [9] Предводителев А. А. В кн.: Динамика дислокаций. Харьков, 1968, с. 311. [10] Инденбом В. Л., Дубнова Г. Н. ФТТ, 1967, 9, № 4, с. 1171. [11] Дубнова Г. Н. В кн.: Динамика дислокаций. Харьков, 1968, с. 196. [12] Дубнова Г. Н., Штольберг А. А. В кн.: Динамика дислокаций. Харьков, 1968, с. 424. [13] Инденбом В. Л., Орлов С. С. Кристаллография, 1967, 12, № 6, с. 971. [14] Бушуева Г. В., Исса Х. М., Предводителев А. А. Физ. мет. и металловедение, 1978, 45, № 1, с. 184. [15] Бушуева Г. В., Предводителев А. А. и др. Физ. мет. и металловедение, 1979, 48, № 3, с. 647. [16] Бушуева Г. В., Яхшаатова Э. М. Деп. ВИНТИ, № 2335-80 Деп. [17] Бушуева Г. В., Предводителев А. А., Хзарджян С. М. Изв. АН АрмССР, 1974, 9, № 6, с. 506.

Поступила в редакцию
07.04.81

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, т. 24, № 1

УДК 621.385:622

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЕ УСКОРЕНИЕ ПРОМОДУЛИРОВАННОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА

Ю. К. Алексеев, А. И. Костяненко

(кафедра радиофизики СВЧ)

Применение в электронных приборах СВЧ двукратного управления (вначале электростатического, затем динамического) приводит к существенному повышению электронного КПД устройств (особенно на вы-