

9. Федоров В.А., Куранова В.А., Тялин Ю.И., Плужников С.Н. О зарождении микротрещин в вершинах и на границах двойников в ОЦК и ГЦК металлах // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 3. С. 528-530.

10. Тялин Ю.И., Тялина В.А., Федоров В.А., Чемеркина М.В., Бутягин А.А. Залечивание трещин в щелочно-галогидных кристаллах // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. № 9. С. 1614-1617.

11. Федоров В.А., Тялин Ю.И., Тялина В.А., Плужникова Т.Н., Чемеркина М.В. О зарождении трещин на границе свободного упругого двойника в кальците // Изв. РАН. Сер. физическая. 2004. Т. 68. № 10. С. 1484-1487.

12. Федоров В.А., Тялин Ю.И., Тялина В.А. Дислокационные механизмы разрушения двойникующихся материалов. М.: Машиностроение-1, 2004.

13. Tyalin Yu.I., Tyalina V.A., Zolotova D.V., Butyagin A.A. Plastic deformation at the top of a stopped crack // Proc. of SPIE. 2007. V. 6597. P. 6597OU1-6597OU3.

14. Тялин Ю.И., Тялина В.А., Золотова Д.В., Бутягин А.А., Осипова Е.Н. Структура полос скольжения, формируемых в вершине трещины при ее остановке // Деформация и разрушение материалов. 2008. № 3. С. 23-26.

15. Тялин Ю.И. Микромеханизмы разрушения и залечивания трещин в материалах с различной кристаллической структурой: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Белгород, 2004.

УДК 539.3

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛОВ С ЗАРЯЖЕННЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ

© Ю.И. Тялин, В.А. Тялина

Ключевые слова: дислокация; скопление дислокаций; заряд дислокаций; зарождение микротрещин; электрическое поле.

Рассмотрены электрические эффекты в кристаллах с заряженными дислокациями. Показано, что наличие электрического заряда на дислокациях в диэлектрических и полупроводниковых кристаллах может существенно изменять условия зарождения микротрещин в скоплениях дислокаций, а также создавать значительные статические и переменные электрические поля при торможении и движении дислокационных скоплений.

Обычно при анализе процессов пластической деформации рассматривается только упругое взаимодействие дислокаций и создаваемые ими упругие поля напряжений.

В кристаллах с заряженными дислокациями такой подход требует определенного уточнения. В первую очередь это касается полупроводниковых соединений типа A^2B^6 и щелочно-галогидных кристаллов, в которых электрический заряд дислокаций достаточно велик и достигает в пределе одного элементарного на параметр решетки. В этом случае электростатическое взаимодействие сравнимо с упругим и может существенно влиять на равновесные положения дислокаций в скоплениях. Это обстоятельство способно изменить, в частности, критерии зарождения микротрещин в дислокационных скоплениях. Из общих соображений ясно, что наличие электрического заряда на дислокациях должно привести к более жестким условиям их образования, т. е. кулоновское взаимодействие заряженных дислокаций увеличивает силы отталкивания между ними. Помимо этого, скопления заряженных дислокаций будут создавать в кристалле не только упругие, но и электрические поля. Это будут стационарные поля неподвижных скоплений заряженных дислокаций и низкочастотные переменные электрические поля, связанные с движением и перестройкой дислокационных скоплений. Впервые на некоторые особенности проявления

подобных эффектов было обращено внимание в работе [1].

В настоящем сообщении анализируются классические дислокационные схемы зарождения микротрещин с учетом того обстоятельства, что дислокации являются заряженными и приводятся оценки эффекта для экспериментально наблюдаемых значений плотности дислокационных зарядов. Дополнительно рассматриваются электрические поля в окрестности скоплений и оценивается возможность электрического пробоя окружающей атмосферы и материала образца. Приведены также оценки частотного диапазона электрического сигнала, формирующегося при движении скопления в результате разрушения стопора, удерживавшего скопление, а также при образовании линии скольжения в вершине трещины.

1. Будем считать дислокацию равномерно заряженной с линейной плотностью заряда λ . Последнюю можно также выразить через число f элементарных зарядов e , приходящихся на вектор Бюргерса b решетки $\lambda = efb$.

Уравнения равновесия дислокаций в плоском скоплении будут иметь следующий вид:

$$\left(A + \frac{2\lambda^2}{\epsilon b} \right) \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{1}{x_i - x_j} + \tau(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (1)$$

где $A = Gb/2\pi(1-\nu)$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, ε – диэлектрическая постоянная, τ – внешнее напряжение, n – число дислокаций.

В силу одинаковой зависимости упругих напряжений и напряженности электрического поля от расстояния (r^{-1}) уравнения (1) для скопления заряженных дислокаций отличаются от аналогичных уравнений для нейтральных дислокаций только постоянным множителем. Поэтому все рассуждения и результаты, имеющие место при анализе скоплений нейтральных дислокаций, могут быть распространены на случай заряженных дислокаций заменой постоянной взаимодействия A на

$$A^* = A + 2\lambda^2/\varepsilon b = A(1+k),$$

где A^* – константа силового взаимодействия заряженных дислокаций.

Расстояние между головными дислокациями скопления будет теперь зависеть не только от упругих характеристик кристалла, но и от электрических

$$d = 1,84A^*/n\tau. \quad (2)$$

Соответственно изменится и условие зарождения трещины. При силовом варианте зарождения трещина образуется в результате слияния головных дислокаций. Для этого их необходимо сблизить до расстояния $d = b$ (условие Стр). Тогда из (2) получаем следующее выражение для определения критических напряжений τ^* зарождения микротрещины в вершине скопления заряженных дислокаций

$$n\tau^* = 1,84A^*/b.$$

При неизменном числе n дислокаций в скоплении наличие электрического заряда на них приводит к увеличению критических напряжений τ^* , необходимых для зарождения трещины. Эффект упрочнения пропорционален квадрату линейной плотности электрического заряда дислокаций

$$\tau^*/\tau = 1+k = 1 + \frac{4\pi(1-\nu)}{\varepsilon G} \left(\frac{fe}{b^2}\right)^2. \quad (3)$$

Оценки с помощью (3) показывают, что эффект влияния заряда становится заметным при $\lambda > 10^{-3}$ ед. CGSE/см. Вклад электростатического взаимодействия зависит от соотношения упругих и электрических характеристик кристалла. Для материалов типа A^2B^6 , в которых легко достижимы высокие ($\sim 10^{-2}$ ед. CGSE/см) плотности дислокационных зарядов, упрочнение за счет кулоновского взаимодействия дислокаций может превышать 100 %. В щелочно-галоидных кристаллах, для которых значения $\lambda > 10^{-3}$ ед. CGSE/см следует рассматривать как аномально высокие, несколько меньший эффект (10–50 %) будет наблюдаться, очевидно, только при определенных условиях – легировании кристаллов двухвалентным металлом, облучении и т. д.

При термоактивированном механизме образование трещины происходит стадийно по аналогии с движением дислокаций в рельефе Пайерлса, т. е. оно включает

выброс парного перегиба, образование микротрещины на отрезке, равном ширине перегиба, и ее расширение вдоль линии дислокации. В качестве критерия зарождения принимается достижение между головными дислокациями расстояния, для которого энергия образования парного перегиба W на второй дислокации глубиной $d - b$ составляет $W \sim 2$ эВ. Критические напряжения в этом случае находятся по зависимости W от приложенного напряжения. Расчеты показывают, что характер зависимости τ^* от λ сохраняется. Различие состоит лишь в уровне прикладываемых напряжений, поскольку теперь слияние дислокаций имеет место при $d > b$ ($\approx 4b$).

В геометрически более сложных схемах эффект влияния заряда дислокаций проявляется еще более существенно. Рассмотрим для сравнения два симметричных ортогональных скопления под действием однородных сдвиговых напряжений τ . Уравнения равновесия дислокаций запишутся следующим образом

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n \left\{ A \left[\frac{1}{x_i - x_j} + \frac{x_i(x_i^2 - x_j^2)}{(x_i^2 + x_j^2)^2} \right] + \frac{2\lambda^2}{\varepsilon b} \frac{1}{x_i - x_j} \right\} + \frac{2\lambda^2}{\varepsilon b} \sum_{j=1}^n \frac{x_i}{x_i^2 + x_j^2} - \tau = 0, \quad i = 2, 3, \dots, n.$$

Из них следует, что наличие электрического заряда эквивалентно появлению у дислокации винтовой компоненты с вектором Бюргерса $b_s = 4\pi\lambda^2/\varepsilon Gb$. Силы упругого и электрического взаимодействия дислокаций, принадлежащих разным скоплениям, не являются пропорциональными (см. второй член в квадратных скобках и выражение под знаком второй суммы). Поэтому решение задачи может быть получено численным методом.

Расчеты показывают, что наличие заряда на дислокациях заметно изменяет их равновесные положения. Величины координат возрастают, но линейность, характерная для одиночного скопления, не сохраняется. Наибольшие относительные смещения имеют дислокации, расположенные ближе к вершине скопления. Поскольку именно d определяет напряжение зарождения трещины, то зависимость критических напряжений τ^* от плотности заряда в схеме пересекающихся скоплений будет выражена сильнее, чем в случае одиночного заторможенного скопления (\sim в 1,5 раза).

2. С увеличением внешних напряжений и плотности дислокаций в вершине скопления будет расти и напряженность электрического поля, создаваемого заряженными дислокациями. На рис. 1 приведено распределение электрического поля в плоскости дислокационного скопления при напряжениях τ , в два раза превышающих стартовые напряжения. Значения напряженности поля получены путем суммирования напряженностей полей отдельных дислокаций ($n = 50$).

Видно, что в окрестности вершины скопления имеется достаточно протяженная область, в которой уже при умеренных значениях внешних напряжений напряженность электрического поля достаточно велика. Она близка к напряженности, при которой возможен атмосферный пробой. При напряжении τ , близком к

критическому, напряжённость электрического поля в вершине скопления будет возрастать.

Оценим ее величину для одиночного плоского скопления при внешнем напряжении, равном критическому. Распределение электрического поля в вершине скопления описывается выражением [1]

$$E(r) = \frac{2\lambda\tau}{2A(1+k)\epsilon} \left(\frac{L}{r}\right)^{-1/2},$$

где L – длина скопления, равная $L = 2nA^*/\tau$. При $\tau = \tau_k$ длина скопления будет равна $L = 2n^2d_k/1,84$. Выражение для напряженности электрического поля примет следующий вид

$$E(r) = \frac{2\sqrt{3,68}e}{\epsilon b} \frac{f}{\sqrt{rd_k}} = \frac{2\sqrt{3,68}\lambda}{\epsilon} \frac{1}{\sqrt{rd_k}}.$$

Возьмем для верхней оценки $d_k = b$ и $\lambda = 10^{-2}$. Тогда при $r = 10^{-4}$ см, $E = 6 \cdot 10^5$ В/см. Полученное значение по порядку величины совпадает с напряженностью пробойных электрических полей для ионных кристаллов и полупроводников.

Следует ожидать возрастания напряженности электрического поля при торможении не одной линии скольжения, а полосы, состоящей из нескольких линий скольжения. Эффект усиления в этом случае может быть достаточно высок. Поэтому в более сложных и разветвленных дислокационных структурах напряженность поле может достигать значений, достаточных для пробоя атмосферного газа или самого кристалла.

Для ионных кристаллов приведенная оценка должна быть несколько снижена. В данных кристаллах электрические эффекты, связанные с зарядом на дислокациях, будут проявляться полнее. В полупроводниковых материалах типа A^2B^6 электрический пробой может предшествовать разрушению. Реализация каждого из критических событий будет определяться индивидуальным сочетанием электрических и механических свойств кристалла.

3. При изменении внешней нагрузки или разрушении стопоров будет меняться геометрия скопления и создаваемое им электрическое поле.

Соответствующие расчеты были проведены для случая, когда в качестве исходного бралось скопление, заблокированное с обеих сторон на отрезке l_0 . Уравнения движения дислокаций имеют следующий вид:

$$\frac{dx_i}{dt} = \begin{cases} \frac{b}{B} \sigma(x_i), & \sigma(x_i) \geq \tau_s, \\ 0, & \sigma(x_i) < \tau_s, \end{cases} \quad (4)$$

$$\sigma(x_i) = A \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{1}{x_i - x_j}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где B – константа торможения, τ_s – напряжение трения решетки, равное стартовому напряжению движения дислокаций. Уравнения решались численно. В качестве характеристик скопления заряженных дис-

локаций использовались отнесенный к единице длины дислокации электрический момент

$$P(t) = \lambda \sum_{i=2}^n x_i(t),$$

и удельный дислокационный ток

$$I(t) = \frac{dP(t)}{dt} = \lambda \sum_{i=2}^n v_i(t),$$

где v_i – скорость i -й дислокации.

Момент скопления является возрастающей функцией времени во всем интервале движения дислокаций (рис. 2). Связанный с движением скопления дислокационный ток имеет форму резкого выброса, быстро убывающего затем до нулевого уровня в конце движения. Зависимости $P(t)$ и $I(t)$ являются более пологими при малых α (α равно отношению длин релаксированного и исходного скоплений).

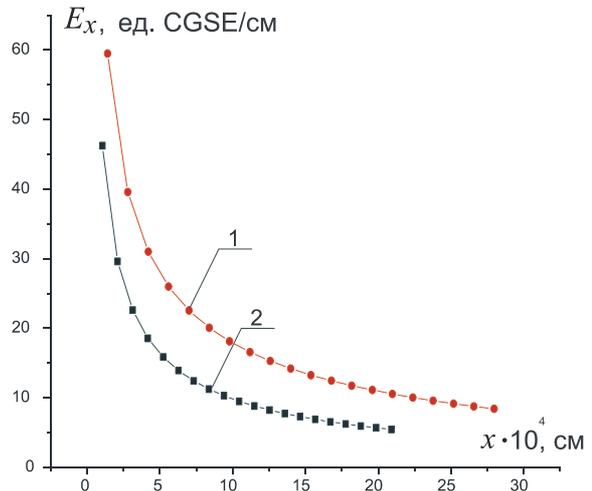


Рис. 1. Напряженность электрического поля одиночного (2) и пересекающихся скоплений (1)

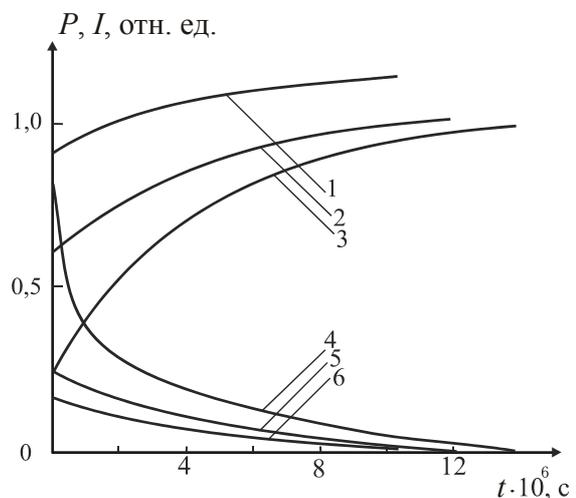


Рис. 2. Изменение во времени электрического момента (кривые 1–3) и дислокационного тока (кривые 4–6) расширяюще-

гося скопления, первоначально заблокированного с обеих сторон. 1, 6 - α = 2; 2, 5 - α = 3; 3, 4 - α = 8

Связано это с тем, что в данном случае движение дислокаций имеет свои особенности. В частности, при t = 0 ненулевое напряжение действует только на крайние дислокации так, что в начальный момент времени начинает двигаться только лидирующая дислокация. Кроме этого, особенно при малых α, не все дислокации участвуют в движении. Доля неподвижных дислокаций в хвостовой части скопления уменьшается с ростом α. При α > 4 все дислокации скопления приходят в движение. В области больших α различия в начальных условиях мало отражаются на динамике скопления и кинетике электромагнитного сигнала.

Общее время релаксации при больших α также перестает зависеть от истории нагружения. В пределе больших α оба рассмотренных случая сводятся к расширению скопления, все дислокации которого при t = 0 находятся в точке x = 0. Время релаксации можно тогда оценить как время, в течение которого головная дислокация удаляется на расстояние l_k. Выполним необходимые оценки.

Воспользовавшись результатами [2] для свободно расширяющегося дислокационного скопления, сконцентрированного в начале движения в точке x = 0, длину скопления можно записать в виде

$$l = \left(\frac{8bA^*n}{3B} \right)^{1/2} \sqrt{2t}.$$

Приравняв l длине релаксированного скопления l_k, получим время релаксации

$$t = \frac{3BnA^*}{4b\tau_s^2}.$$

Для приведенных выше значений постоянных t = 14,4 · 10⁻⁶ с. Точное (численное) решение уравнений (4) дает t = 13,2 · 10⁻⁶ с.

По известной плотности дислокаций ρ(x,t) = ρ(u)/g(t) можно определить электрический момент движущегося скопления

$$P(t) = \frac{\lambda B l^3}{8bA^*} (2t)^{1/2} \quad (5)$$

и дислокационный ток

$$I(t) = \frac{\lambda B l^3}{8bA^*} (2t)^{-1/2}. \quad (6)$$

Выражения (5) и (6) удовлетворительно приближают реальные зависимости момента и тока от времени и могут быть использованы для оценок при высоких уровнях начальной нагрузки на образец или малых напряжениях трения τ_s соответственно.

4. Для определения электрического поля дислокационного скопления в вершине трещины необходимо просуммировать поля отдельных дислокаций

$$\bar{E}(z) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \sum_{i=1}^n \frac{1}{z - x_i},$$

где x_i – координаты дислокаций в линии скольжения, n – число дислокаций в ней.

Процедура расчета динамической конфигурации дислокаций в линии скольжения у вершины трещины описана в [3]. Рассмотрены две стадии формирования дислокационной структуры в вершине трещины – образование линий скольжения в момент остановки трещины (образец остается нагруженным) и их эволюция после разгрузки образца.

Результаты одного из вариантов расчета для нагруженной трещины и после снятия нагрузки приведены на рис. 1 и 2. В расчетах использовались данные для кристаллов LiF.

Видно, что значения напряженности поля E могут быть достаточно велики. На расстоянии ~1 мкм от границы скопления она может достигать значений порядка 2 · 10⁵ В/м. При приближении к границе скопления напряженность поля будет возрастать обратно пропорционально расстоянию от крайней дислокации. Поэтому на меньших расстояниях ее величина может сравниться с напряженностью пробоя атмосферного воздуха. После разгрузки образца значения напряженности поля несколько уменьшаются (до 50 %) за счет выхода части дислокаций на поверхность трещины.

При изменении количества дислокаций в скоплении будет меняться и связанный со скоплением электрический дипольный момент P.

Изменение величины P во времени приведено на рис. 2. Видно, что величина P растет на стадии эмиссии дислокаций до некоторого максимального значения. Затем на второй стадии процесса она незначительно уменьшается в результате выхода части дислокаций на поверхность трещины. Каждая из стадий занимает

~10 мкс. Общее время формирования линии скольжения примерно в два раза больше. Оно будет несколько меняться в зависимости от условий остановки трещины и характеристик кристалла. При этом основная часть электрических сигналов, связанных с образованием линии скольжения в вершине трещины, будет иметь среднюю частоту ~ 5 · 10⁴ с⁻¹.

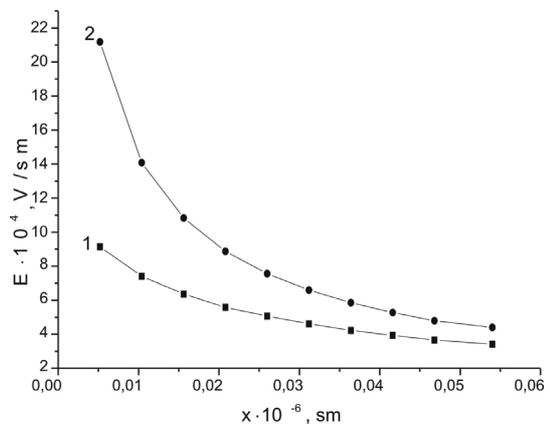


Рис. 1. Изменение электрического поля в плоскости скольжения дислокаций (нагруженный образец): 1 – на продолжении скопления; 2 – в хвостовой части скопления

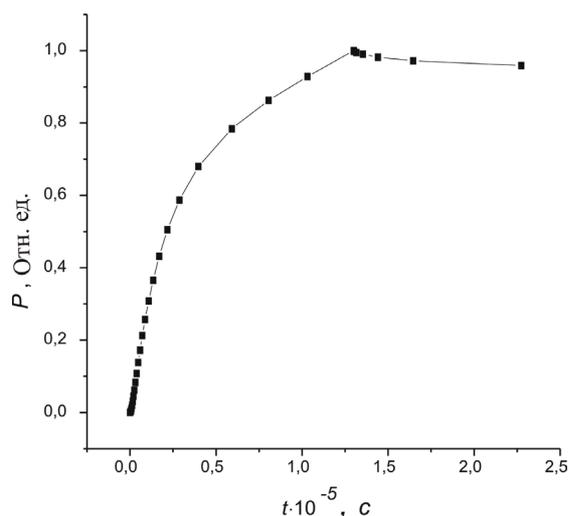


Рис. 2. Зависимость дипольного момента P от времени t

Асимптотическая корневая зависимость длины скопления от времени (4) может использоваться и для оценки временных параметров формирования линии скольжения в вершине трещины.

В кристаллах LiF рассчитана напряженность электрического поля, связанная с эмиссией дислокаций из

вершины трещины. Оценены временные параметры формирования электрического сигнала. Результаты могут быть использованы для интерпретации механо-электрических явлений в кристаллах с заряженными дислокациями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тялин Ю.И., Финкель В.М. Скопления заряженных дислокаций и зарождение трещин в неметаллических кристаллах // Докл. АН СССР. 1984. Т. 279. № 5. С. 1126-1130.
2. Head A.K. Dislocations group dynamics. 1. Similarity solution of the n-body problem // Phil. Mag. 1972. V. 26. № 1. P. 43-53.
3. Тялин Ю.И., Тялина В.А., Буягин А.А. Электрические эффекты при пластической деформации кристаллов с заряженными дислокациями // Деформация и разрушение материалов: сб. ст. по материалам Первой междунар. конф., 13–16 нояб. 2006 г., г. Москва. М., 2006. С. 171-173.

Tyalin Yu.I., Tyalina V.A. Electric effects at plastic deformation crystals with the charged dislocations. Electric effects in crystals with the charged dislocations are considered. It is shown that presence of an electric charge on dislocations in dielectric and semi-conductor crystals can essentially change conditions of static and variable electric fields at braking and movement dislocations congestions.

Key words: dislocations; congestion of dislocations; charge of dislocations; origin of micro-cracks; electric field.



Тялина Валентина Анатольевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики. В университете работает с 1984 г., награждена знаком «Почетный работник высшего профессионального образования РФ».

Научные исследования В.А. Тялиной связаны с изучением физических процессов при деформации и разрушении твердых тел и компьютерным моделиро-

ванием пластической деформации и разрушения двойниющихся материалов.

Является автором более 100 научных работ и изобретений, в т. ч. одной монографии. По результатам научной работы отмечалась персональным грантом Международного научного фонда в области естественных наук. Является соисполнителем НИР, поддержанной грантами РФФИ, Минобразования РФ.

Основные публикации:

1. Механизм и кинетика залечивания упругого канала Розе в кальците // Кристаллография. 1991. Т. 36. Вып. 5.
2. Влияние распределения дислокаций в границах двойника на зарождение микротрещин в его вершине // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 6.
3. О зарождении трещин на границе свободного упругого двойника в кальците // Изв. РАН. 2004. № 9.
4. Дислокационные механизмы разрушения двойниющихся материалов. М.: Машиностроение-1, 2004.
5. Залечивание трещин в щелочно-галоидных кристаллах // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. № 9.
6. Структура полос скольжения, формируемых в вершине трещины при ее остановке // Деформация и разрушение материалов. 2008. № 3.

E-mail: tyalina@tsu.tmb.ru.