Взаимодействие дефектов в приближении упругой среды

Лекция 5

ПОВЕДЕНИЕ ДЕФЕКТА ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ СМЕЩЕНИЯ.

Дня описания поведения дефекта во внешнем поле воспользуемся уравнением статического равновесия упругой среды $\nabla_k \sigma_{ki} = -f_i$, здесь f_i – плотность объемных сил, действующих внутри образца.

Умножим обе части этого уравнения скалярно на радиус-вектор и проинтегрируем по всему пространству:

$$\int X_i \nabla_k \sigma_{ki} dV = -\int \left(\vec{r}\vec{f} \right) dV$$

Преобразуем левую часть уравнения следующим образом:

$$\int X_i \nabla_k \sigma_{ki} dV = \int \nabla_k \left(\sigma_{ki} X_i \right) dV - \int \sigma_{ki} \nabla_k X_i dV = \oint_S X_i \sigma_{ki} d\vec{S} - \int \sigma_{kk} dV$$

при преобразовании было учтено, что $\nabla_k X_i = \delta_{ki}$. Первый интеграл определяется граничными условиями на поверхности. Во втором интеграле учтем, что $\sigma_{kk} = 3K\varepsilon_{kk}$, где K – модуль объемного сжатия. Следовательно:

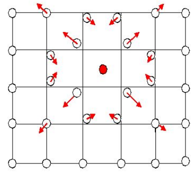
$$3K\Delta V = \int \left(\vec{r}\vec{f} \right) dV + \oint_S X_i \sigma_{ki} dS_k$$

Таким образом, относительное изменение объема кристалла, связанное с действием внутренних сил **f** и сил на поверхности равно:

$$\Delta V = \frac{1}{3K} \left[\int \left(\vec{r}\vec{f} \right) dV + \oint_S X_i \sigma_{ki} dS_k \right]$$

ПЛОТНОСТЬ ВНУТРЕННИХ СИЛ, ЭКВИВАЛЕНТНЫХ ЦЕНТРУ ДИЛАТАЦИИ

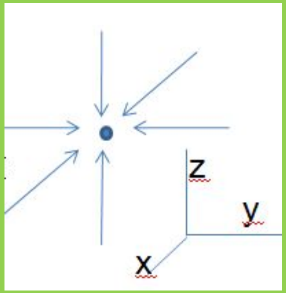
Согласно атомной модели точечного дефекта ближайшие к точечному дефекту атомы испытывают действие дилатационных сил, обладающих симметричным распределением в каждой координационной сфере



Система этих сил, разумеется, обладает результирующей и полным моментом равными нулю. Если вернуться к макроскопическому рассмотрению дефекта, то можно увидеть, что их действие эквивалентно действию трех пар сил равной величины, приложенных к точке расположения междоузельного атома или вакансии и направленных по координатным осям.

Исходя из смещения вдали от дефекта, $U = \frac{A}{r^2}$ найдем вид этих объемных сил.

В векторной записи смещения можно представить как $\vec{U} = -\nabla\left(\frac{A}{r}\right)$.



Тогда получим:

$$\operatorname{div}\vec{U} = \frac{\partial}{\partial X_i} U_i = -\operatorname{div}\operatorname{grad}\left(\frac{A}{r}\right) = -A\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = 4\pi A\delta\left(\vec{r}\right)$$

Следовательно:

$$\operatorname{grad}\operatorname{div}\vec{U} = 4\pi A \cdot \operatorname{grad}\delta\left(\vec{r}\right)$$

подставим эти выражения в уравнение равновесия:

получим:

$$\operatorname{grad}\operatorname{div}\vec{U} - \cancel{\frac{1-2\sigma}{2(1-\sigma)}\operatorname{rot}\operatorname{rot}\vec{U}} = -\vec{f}\,\frac{(1+\sigma)\cdot(1-2\sigma)}{E\cdot(1-\sigma)}$$

Отсюда

$$4\pi A\,\operatorname{grad}\delta(\vec{r}) = -\vec{f}\,\frac{(1+\sigma)}{3K(1-\sigma)},$$

$$\vec{f} = -K4\pi A\gamma\operatorname{grad}\delta\left(\vec{r}\right) = -K\Omega_0\operatorname{grad}\delta\left(\vec{r}\right)$$

где введено обозначение:

$$\Omega_0 = 4\pi A\gamma$$

Таким образом, в теории упругости дефект можно описать δ-функционной плотностью сил. Мощность дефекта характеризуется величиной Ω_0.

Реакция среды на дефект определяется ее модулем сжатия К.

1. Изменение объема для тела с указанным распределением плотности сил составит величину (слайд 1)

$$\Delta V = \frac{1}{3K}\int\left(\vec{r}\vec{f}\right)dV = -\frac{K}{3K}\Omega_0\int\vec{r}\,\nabla\delta(r)dV = \frac{1}{3}\Omega_0\int\delta(r)\cdot\operatorname{div}\vec{r}\,dV = \Omega_0$$

2. Дилатация $\theta = Sp\varepsilon_{lk} = \varepsilon_{ll} = \mathrm{div}\vec{U}(\vec{r}) = -A \cdot \mathrm{div}\,\mathrm{grad}\frac{1}{r} = 0$ равна нулю везде, за исключением начала координат, то есть, как это получалось и раньше, точечный дефект создает только сдвиговую деформацию в окружающей *бесконечной* среде.

Естественно, последний вывод справедлив только лишь тогда, когда среда является упруго изотропной, а точечный дефект эквивалентен центру дилатации.

Иначе, упругое поле точечного дефекта, строго говоря, не является чисто сдвиговым.

Обобщение - в общем случае неизотропной среды, возмущение можно записать:

$$f_i = -K\Omega_{ik}\nabla_k\delta(\vec{r})$$

Как правило, характерный объем дефектов Ω_{ll} для вакансий отрицателен, для междоузлий положителен.

Для простых металлов его величина составляет порядка $0.1\omega_0$ однако, например, для анизотропного графита она достигает больших значений – порядка $5\omega_0$.

В заключении отметим, что введенный здесь способ описания точечных дефектов – через плотность объемных сил подходит и для описания других типов дефектов, например, дислокаций.

Взаимодействие дефектов с внешним упругим полем

Будем считать, что дефект воздействует на кристалл, в котором он находится, тремя способами.

Прежде всего, он вызывает смещение атомов матрицы.

Кроме того, дефект выступает в роли локальной неоднородности, то есть он с одной стороны вносит изменение в массу элементарной ячейки, с другой – дает локальное изменение силовых констант, входящих в закон Гука

$$\lambda'_{iklm} = \lambda^0_{iklm} + \Omega^* \Lambda_{iklm} \delta\left(\vec{r} - \vec{r}_0\right)$$

Пусть кристалл, в котором находится точечный дефект, находится под действием внешней нагрузки.

Рассмотрим некоторую общую задачу: ***дефект в упругом поле смещения, созданном внешней нагрузкой на среду.***

Работа, которую совершает внешнее поле над дефектом при малых смещениях последнего, найдем из работы внешних сил над образцом, содержащим дефект. Последняя равна:

$$\nabla_k \sigma_{ki} = -f_i$$

$$\delta R = \oint_S \sigma_{ik} \cdot \delta U_k dS_i = \int \nabla_i \left(\sigma_{ik} \cdot \delta U_k \right) dV =$$

$$= \int \delta U_k \cdot \nabla_i \sigma_{ik} dV + \int \sigma_{ik} \cdot \delta\varepsilon_{ik} dV = -\int \vec{f} \cdot \delta \vec{U} dV + \int \sigma_{ik} \cdot \delta\varepsilon_{ik} dV$$

Используем теперь явный вид для объемных сил, соответствующих наличию точечного дефекта в кристалле $f_i = -K\Omega_{ik}\nabla_k\delta(\vec{r})$, а для преобразования последнего слагаемого в нашем выражении используем закон Гука

$$\sigma_{ik} = \lambda'_{iklm}\cdot\varepsilon_{lm}$$

$$\lambda'_{iklm} = \lambda^0_{iklm} + \Omega^*\Lambda_{iklm}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$$

$$\delta R = -\left(\int \vec{f}\cdot\delta\vec{U}dV\right) + \int \sigma_{ik}\cdot\delta\varepsilon_{ik}dV =$$

$$K\Omega_{ik}\cdot\int \delta U_i\cdot\nabla_k\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)dV +$$

$$+\Omega^*\cdot\int \Lambda_{iklm}\cdot\varepsilon_{lm}\cdot\delta\varepsilon_{ik}\cdot\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)dV + \int \lambda^0_{iklm}\cdot\varepsilon_{lm}\cdot\delta\varepsilon_{ik}\cdot dV$$

Выполним интегрирование по частям в первом слагаемом, во втором – проведем тривиальное интегрирование, а в третьем учтем симметрию:

$$\delta R = -\left[K\Omega_{ik} - \Omega^*\cdot\Lambda_{iklm}\cdot\varepsilon_{lm}\right]\Big|_{\vec{r}=\vec{r}_0}\cdot\delta\varepsilon_{ik} + \frac{1}{2}\int \lambda^0_{iklm}\cdot\delta\left(\varepsilon_{ik}\varepsilon_{lm}\right)dV$$

T=const, δR=δF

$$F = F_0(T) + \frac{1}{2}\int \lambda^0_{iklm}\cdot\varepsilon_{ik}\cdot\varepsilon_{lm}\cdot dV - K\Omega_{ik}\cdot\varepsilon_{ik}(\vec{r}_0) + \frac{1}{2}\Omega^*\Lambda_{iklm}\varepsilon_{ik}(\vec{r}_0)\varepsilon_{lm}(\vec{r}_0)$$

Последние два слагаемых определяет энергию взаимодействия дефекта с упругим полем:

$$E_{вз} = -K\Omega_{ik} \cdot \varepsilon_{ik}\left(\vec{r_0}\right) + \frac{1}{2}\Omega^* \cdot \Lambda_{iklm} \cdot \varepsilon_{ik}\left(\vec{r_0}\right) \cdot \varepsilon_{lm}\left(\vec{r_0}\right)$$

Пусть дефект, находящийся в точке $\vec{r}_0$

Сдвинем дефект на величину $\delta\vec{r}$

$$\delta\varepsilon_{ik} = \left(\nabla_j \varepsilon_{ik}\right)\delta X_j \qquad \delta E_{вз} = -\vec{F} \cdot \delta\vec{r}$$

$$F_j = \left[K\Omega_{ik} - \Omega^* \cdot \Lambda_{iklm} \cdot \varepsilon_{lm}\right] \cdot \nabla_j \varepsilon_{ik}$$

– сила, с которой упруго деформированный кристалл действует на дефект.

Как видно, точечный дефект взаимодействует с упругим полем двояким образом.

С одной стороны дефект выступает как источник дилатации, это отражено в первом слагаемом линейном по деформациям.

С другой стороны дефект проявляет себя как локальная неоднородность упругих свойств, что передает второе (квадратичное по деформациям) слагаемое.

Первое слагаемое называют ***размерным эффектом***, а второе – ***модульным* эффектом.**

Обычно деформации считают малыми, модульным эффектом (квадратичным по деформациям) пренебрегают и в выражении для энергии и силы оставляют линейное по упругим деформациям слагаемое:

$$E_{вз} = -K\Omega_{ik} \cdot \varepsilon_{ik} \qquad F_j = K\Omega_{ik} \cdot \nabla_j \cdot \varepsilon_{ik}$$

$\Omega_{ik} = \Omega_0 \delta_{ik}$ - простая изотропная среда

Энергия и сила, действующую на центр дилатации, выражается только через среднее гидростатическое давление!!!

$$E_{вз} = -\frac{1}{3}\Omega_0 \sigma_{ll} \equiv \Omega_0 p_0 \qquad \vec{F} = \frac{1}{3}\Omega_0 \cdot grad(\sigma_{kk}) = -\Omega_0 \cdot grad(p_0)$$

Направление силы зависит от типа дефекта.

Для дефекта с отрицательным дилатационным объемом $\Omega_0 < 0$ (вакансии) сила направлена в сторону увеличения давления, то есть эти дефекты смещаются в более сжатые области кристалла.

Сила, действующая на дефекты с положительным дилатационным объемом $\Omega_0 > 0$ (междоузельные атомы), направлена в сторону понижения давления – дефекты смещаются в разреженные области кристалла.

Чисто сдвиговые деформации никак не взаимодействуют с дефектом $\sigma_{kk} = 0$

УПРУГОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ.

Пусть теперь в кристалле имеется два дефекта. Один дефект создает в матрице поле смещения, а другой дефект, воспринимая это смещение, должен взаимодействовать с первым. Именно таким образом в рамках теории упругости удается описать взаимодействие дефектов. Взаимодействия такого рода принято называть деформационными.

Однако, точечный дефект в изотропном приближении создает только сдвиговые напряжения, следовательно, и взаимодействие дефектов отсутствует.

Таким образом, два точечных дефекта в **изотропной бесконечной** среде в линейном приближении не взаимодействуют.

В анизотропных средах мощность точечных дефектов может быть достаточно велика, а упругие поля, создаваемые дефектами не являются чисто сдвиговыми. В таких веществах между дефектами возникает взаимодействие.

Природу деформационного взаимодействия удобно объяснить на приведённой ниже простой аналогии.

Представим упругую горизонтальную поверхность, на которой на различных расстояниях друг от друга размещены небольшие шары (упругая поверхность имитирует плоскую кристаллическую решётку, а шары - дефекты в ней). Очевидно, что если расстояния между шарами велики, то они не будут "чувствовать" друг друга и расположатся каждый в своей лунке на поверхности. Однако стоит двум шарам сблизиться на некоторое минимальное расстояние, определяемое упругими свойствами поверхности и весом шаров, как под действием упругих сил они начнут двигаться на встречу друг другу и в результате "свалятся" в общую лунку. Очевидно, что при соответствующем начальном расположении в лунке может оказаться и большее количество шаров.

На этом простом примере видно, что деформационное взаимодействие обуславливает взаимное притяжение одноимённых дефектов и может являться реальной причиной образования скоплений дефектов.

Так, например, расчет показывает, что в графите – слоистом веществе, обладающем сильными анизотропными свойствами, взаимодействие двух междоузельных атомов, расположенных между одной и той же парой базисных плоскостей графита, на расстояниях меньших величины $r_0 \approx 10$ Å, носит характер притяжения. Причем энергия взаимодействия, величина которой достигает значения порядка 1 эВ, сопоставима с энергией ковалентной связи в базисных плоскостях (4.96 эВ). Подчеркнем, что благодаря анизотропии структуры графита область взаимодействия дефектов значительно превосходит межатомные расстояния – объем зоны, в пределах которой два междоузлия притягиваются друг к другу равен $V_a \approx 40\omega_0$. Деформационный потенциал взаимодействия междоузлий, расположенных между соседними парами базисных плоскостей графита, соответствует отталкиванию дефектов. Величина энергии отталкивания на малых расстояниях достигает значения равного 2 эВ.

Качественная картина взаимодействия междоузельных атомов в графите – слоистом веществе, обладающем сильными анизотропными свойствами.