

DYSKRETNE MODELE DYSŁOKACJI

ROMUALD KOTOWSKI (WARSZAWA)

1. Wstęp

Dyslokacje są to jednowymiarowe defekty sieci krystalicznej. Są one odpowiedzialne za plastyczne zachowanie się ciał stałych. Istnienie ich zostało potwierdzone eksperymentalnie przy użyciu promieni Roentgena i mikroskopu elektronowego. Teorie opisujące zachowanie się dyslokacji, ich oddziaływanie wzajemne oraz z innymi defektami sieci krystalicznej, np. z defektami punktowymi, ich wpływ na własności mechaniczne ciał są przedmiotem badań od przeszło osiemdziesięciu lat. Stanowią one dział mechaniki ciała stałego. Przez wiele lat dyslokacje z dużym powodzeniem badano w ramach kontynualnej teorii ośrodków ciągłych. Pozwalało to na stosowanie dobrze rozpracowanego aparatu analizy matematycznej. Istnieje jednak wiele takich zagadnień, gdy konieczna jest wiedza na temat szczegółów dyskretnej budowy kryształu, a wtedy powyższe podejście staje się niezadowolające. Jednym z takich problemów jest zagadnienie naprężenia Peierlsa, czyli minimalnego naprężenia, które musi być przyłożone z zewnątrz do kryształu, aby spowodować ruch dyslokacji. Zakłada się, że dyslokacja podczas ruchu pozostaje prostoliniowa. Nie uwzględnia się również wpływu temperatury.

Dyskretne modele dyslokacji mają znaczną niedogodność polegającą na ogromnych trudnościach rachunkowych. Z tego względu stosuje się szereg przybliżeń, co powoduje, że otrzymane wyniki nie zawsze są wiarygodne.

W niniejszej pracy przedstawiono przegląd dyskretnych modeli dyslokacji, w których podjęto próby wyliczenia naprężenia Peierlsa. Zaprezentowano modele Frenkla-Kontorovej, Peierlsa-Nabarro, Maradudina, Sandersa i Roguli oraz wspomniano o półdyskretnych modelach stosowanych w komputerowej symulacji dyslokacji w kryształach.

2. Model Frenkla-Kontorovej

Model zaproponowany przez Frenkla i Kontorową był jednym z pierwszych, w którym starano się oddać dyskretną naturę dyslokacji w kryształach.

W modelu tym kryształ jest podzielony myślowo na dwie części: górną i dolną. Część górna jest zastąpiona przez jednowymiarowy łańcuch punktów materialnych (atomów) połączonych identycznymi sprężynkami o stałej sprężystości k . Oddziaływanie obu półkryształów uwzględnia się przez umieszczenie łańcucha atomów w nieruchomym okresowym potencjale $W(x)$, o okresie równym b , gdzie b jest odległością międzyatomową.

Dyslokację krawędziową wprowadza się dostarczając lub usuwając jeden atom z nieskończonego łańcucha (rys. 1).

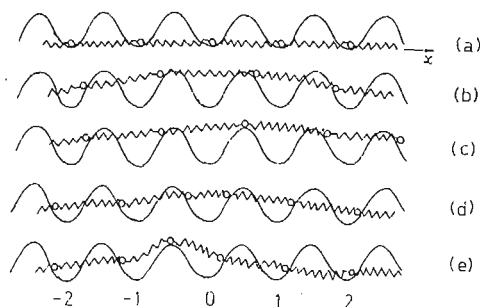
Energia potencjalna kryształu wynosi

$$(2.1) \quad U = \frac{k}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} (\psi_{j+1} - \psi_j)^2 + \sum_{-\infty}^{\infty} W(\psi_j),$$

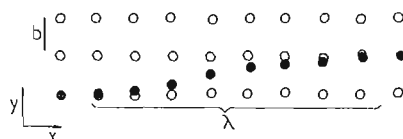
gdzie ψ_j jest wychyleniem atomu o numerze j z j -tego minimum potencjału. Różniczkując (2.1) względem ψ_j , otrzymujemy warunek stanu równowagi j -tego atomu

$$(2.2) \quad k(\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}) - \frac{\partial W(\psi_j)}{\partial \psi_j} = 0,$$

który głosi, że atom znajduje się w stanie równowagi wtedy, gdy siły sprężystości sprężynek są równoważone siłami potencjalnymi związanymi z potencjałem $W(x)$.



Rys. 1. Dyslokacja krawędziowa w modelu Frenkla-Kontorovej; (a) kryształ idealny; gdy minimum potencjałów o 1 więcej niż atomów: (b) konfiguracja stabilna; (c) konfiguracja niestabilna; gdy atomów o 1 więcej niż minimum potencjału: (d) konfiguracja stabilna; (e) konfiguracja niestabilna



Rys. 2. Dyslokacja śrubowa w modelu Frenkla-Kontorovej

● atomy łańcucha, ○ atomy sieci (wg [1])

W oryginalnej pracy Frenkla i Kontorovej, jako potencjał przyjęto następującą funkcję:

$$(2.3) \quad W(\psi_j) = A \left(1 - \cos \frac{2\pi\psi_j}{b} \right)$$

i rozwiązano zagadnienie dynamiczne

$$(2.4) \quad m \frac{d^2\psi_j}{dt^2} = - \frac{2\pi A}{b} \sin \frac{2\pi\psi_j}{b} + k(\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}),$$

kładąc

$$\nabla^2\psi_j = \psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1} \approx \frac{\partial^2\psi_j}{\partial x^2} b^2,$$

gdzie skorzystano z przybliżenia długofalowego [1].

W modelu Frenkla-Kontorovej można badać również dyslokację śrubową. W tym celu należy rozważyć jednowymiarowy łańcuch atomów ruchomych leżący na dwuwymiarowej siatce atomów nieruchomych (rys. 2). Ruch dyslokacji w kierunku x sprowadza się do

kolejnego przemieszczania się atomów łańcucha na odcinku o długości λ w kierunku y na drodze $\Delta y = b$ z jednego prostoliniowego szeregu atomów sieci na następny. Zakłada się, że atomy z łańcucha oddziałują z atomami sieci za pomocą potencjału, np. typu (2.3), a energia oddziaływania atomów z łańcucha między sobą zależy od ich względnego przemieszczenia w kierunku y i wynosi

$$\frac{1}{2} \beta (\eta_{j+1} - \eta_j)^2,$$

gdzie η_j jest przemieszczeniem j -tego atomu z łańcucha. Równanie równowagi dla atomów łańcucha zapisuje się wtedy następująco:

$$\beta (\eta_{j+1} - 2\eta_j + \eta_{j-1}) - A \sin \frac{2\pi\eta_j}{b} = 0$$

i problem sprowadza się do zagadnienia dyslokacji krawędziowej.

Równanie (2.2) z potencjałem (2.3) było rozwiązywane przez różnych autorów, ale przez sprowadzenie równania różnicowego do różniczkowego. Pierwsze dokładne numeryczne rozwiązanie równania różnicowego dla konfiguracji symetrycznych pojedynczej dyslokacji podali HOBART i CELLI [2], otrzymując wyniki w postaci zbieżnych szeregów potęgowych przemieszczeń atomowych.

HOBART w pracy [3] przedstawił metodę obliczenia naprężenia Peierlsa w modelu Frenkla-Kontorovej, korzystając z równania (2.2) zapisanego w postaci

$$(2.5) \quad k(\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}) + \frac{2\pi A}{b} \sin \frac{2\pi\psi_j}{b} = 0.$$

Stałe k i A dadzą się przedstawić za pomocą stałych sprężystych ν , μ i E [3], gdzie ν — współczynnik Poissona, μ — moduł ścinania, a E — moduł Younga, w następujący sposób:

$$(2.6) \quad A = \frac{\mu b^3 c}{4\pi a}, \quad k = \frac{acE}{b(1-\nu^2)},$$

gdzie a jest odległością między płaszczyznami równoległymi do płaszczyzny poślizgu, a abc jest objętością komórki elementarnej. Hobart wykazał, że naprężenie Peierlsa jest proporcjonalne do siły R_{\max} działającej na atom $n = 0$ potrzebnej do utrzymania go w odległości y_0 od położenia równowagi i wynosi

$$(2.7) \quad \sigma_p \cong \frac{aE}{b\mu(1-\nu^2)} \frac{R_{\max}}{w},$$

gdzie $w(s)b$ jest szerokością dyslokacji, gdy znajduje się ona w położeniu sb dla $0 \leq s \leq 1$.

Energia Peierlsa jest równa pracy, jaką musi wykonać owa siła R podczas ciągłego przejścia dyslokacji od jednej konfiguracji równowagi do następnej

$$(2.8) \quad E_p = \frac{1}{2\pi} \int_0^{y_{II}} R(y_0) dy_0.$$

Rachunki można wykonać tylko numerycznie. Metoda jest na tyle ogólna, że może mieć zastosowanie również do innych potencjałów. Hobart wykonał obliczenia dla

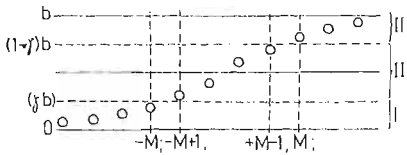
$$(2.9) \quad \frac{dW(\psi_j)}{d\psi_j} = \frac{kb}{2\pi} \left[P \sin \left(\frac{2\pi\psi_j}{b} \right) - Q \sin \left(\frac{4\pi\psi_j}{b} \right) \right]$$

w pracy [4] i dla

$$(2.10) \quad \frac{dW(\psi_j)}{d\psi_j} = \frac{\pi^2 A}{b} \left[\left(\frac{2\psi_j}{b} \right) - \left(\frac{2\psi_j}{b} \right)^3 \right]$$

w pracy [5]. Stwierdzono dla tych wszystkich potencjałów, iż energia Peierlsa maleje wykładniczo wraz ze wzrostem szerokości dyslokacji, mimo oczywistych różnic w wyliczonych wartościach energii. HOBART [6] podał również sposób przybliżonego obliczenia energii Peierlsa przy użyciu metody zmiennej zespolonej. Otrzymane wyniki są w dość dobrej zgodzie z metodą dokładną.

Dokładne analityczne rozwiązanie w modelu Frenkla-Kontorovej można znaleźć, gdy potencjał jest odcinkami paraboliczną funkcją przemieszczenia. Rozwiązanie takie znaleźli KRATOCHVIL i INDENBOM [7] oraz WEINER i SANDERS [8]. Dokładną analizę tego modelu znaleźć można również w pracy ROGULI [9].



Rys. 3. Podział kryształu na strefy w modelu Frenkla-Kontorovej

Kryształ podzielono na trzy strefy (rys. 3), ze względu na wartość przemieszczeń atomów w stosunku do parametru modelu:

$$(2.11) \quad \begin{array}{ll} \text{III:} & (1-\gamma)b \leq \psi_j \leq b, \quad M \leq j < +\infty, \\ \text{II:} & \gamma b \leq \psi_j \leq (1-\gamma)b, \quad -M < j < M, \\ \text{I:} & 0 \leq \psi_j \leq \gamma b, \quad -\infty < j \leq -M. \end{array}$$

W strefie II jest $2M-1$ atomów połączonych tzw. słabymi wiązaniami. Numery atomów przybierają wartości połówkowe, gdy liczba słabych wiązań jest parzysta i całkowite, gdy nieparzysta. Konfiguracja równowagi opisana jest następującymi równaniami dla odpowiednich stref:

$$(2.12) \quad \begin{array}{l} \text{III:} \quad k\nabla^2\psi_j - \mu b(\psi_j - b) = 0, \\ \text{II:} \quad k\nabla^2\psi_j + \frac{2\mu b\gamma}{1-2\gamma} \left(\psi_j - \frac{b}{2} \right) = 0, \\ \text{I:} \quad k\nabla^2\psi_j - \mu b\psi_j = 0. \end{array}$$

Dla danej wartości γ mamy zawsze dwie konfiguracje równowagi o M różniącym się o $1/2$. Gdy M jest połówkowe, to konfiguracja słabych wiązań jest symetryczna względem maximum, a dla M całkowitego jest symetryczna względem minimum potencjału. Stabilna jest ta konfiguracja, która ma mniejszą liczbę słabych wiązań.

Gdy do kryształu przyłożone jest naprężenie ścinające τ , to na każdy atom działa siła $f = -\tau b^2$. Rozwiązania szuka się w postaci

$$(2.13) \quad \eta_j = \psi_j + \varphi_j - \frac{\tau b}{\mu},$$

gdzie φ_j jest rozwiązaniem przy $\tau = 0$, a $-\tau b/\mu$ jest przesunięciem atomu w nieskończoności wywołanym działaniem naprężenia τ . Żąda się, by $\varphi_j \xrightarrow{j \rightarrow \pm\infty} 0$.

Równania na φ_j dadzą się zapisać w postaci

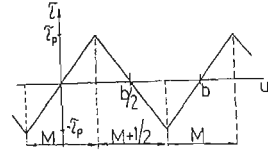
$$(2.14) \quad \begin{aligned} \text{III: } \nabla^2 \varphi_j - P \varphi_j &= 0, \\ \text{II: } \nabla^2 \varphi_j + Q \left(\varphi_j - \frac{\tau b}{2\mu\gamma} \right) &= 0, \\ \text{I: } \nabla^2 \varphi_j - P \varphi_j &= 0, \end{aligned}$$

gdzie $P = \mu b/k$, a $Q = 2\gamma P/(1-2\gamma)$.

W stanie granicznym, gdy atom o numerze M znajduje się na granicy stref II - III, to wtedy $\eta_M = (1-\gamma)b$ i $\tau = \tau_p$ wynosi

$$(2.15) \quad \tau_p = \mu\gamma \frac{\cos M\theta - \beta \cos(M-1)\theta}{\sin M\theta - \beta \sin(M-1)\theta} \frac{\sin M\theta - \delta \sin(M-1)\theta}{\cos M\theta - \delta \cos(M-1)\theta},$$

gdzie $\delta = \beta \frac{1-2\gamma}{\beta-2\gamma}$, $\beta = \frac{1}{2} [2 + P - \sqrt{P^2 + 4P}]$, $\cos \theta = 1 - \frac{Q}{2}$.

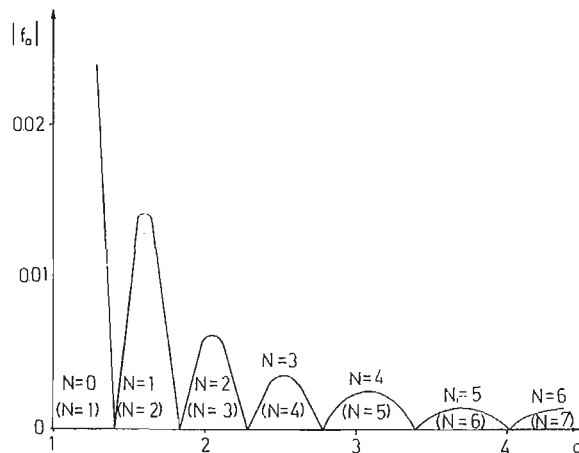


Rys. 4. Zmiany τ_p w czasie ruchu dyslokacji w modelu Frenkla-Kontorovej

Gdy atom o numerze $-M$ znajduje się na granicy stref I - II, to $\eta_{-M} = \gamma b$ i $\tau = -\tau_p$. Dla ustalonych μ, γ, k , a więc i M , w czasie ruchu dyslokacji, np. w prawo, następuje na przemian zmiana liczby słabych wiązań o $+1$ przy przejściu ze strefy II do III i o -1 przy przejściu ze strefy I do II, a

$$(2.16) \quad -\tau_p \leq \tau \leq \tau_p.$$

Możemy więc τ_p utożsamić z naprężeniem Peierlsa. Zmiany τ w czasie ruchu dyslokacji pokazuje rys. 4.

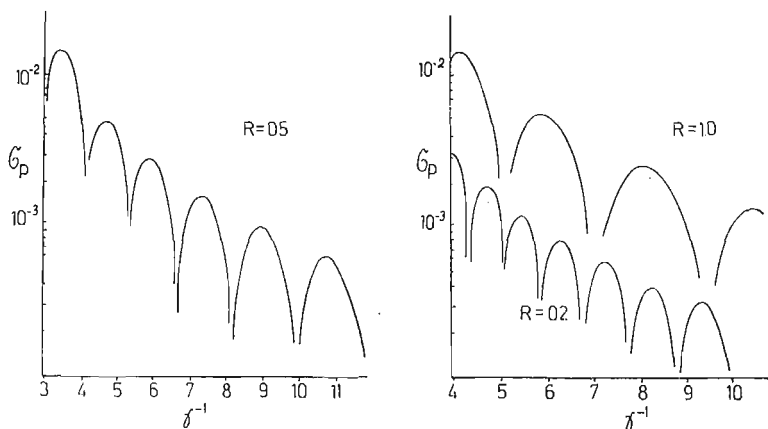


Rys. 5. Wykres $\tau_p(\gamma^{-1})$ wg Kratochvila i Indenboma [7]

N oznacza liczbę atomów w strefie II. Liczby w nawiasach odpowiadają konfiguracjom niestabilnym; $d = 1/(2\gamma)$, $f_0 = \tau_p$

Jeżeli przejścia II - III i I - II występują równocześnie, to $\tau_p = -\tau_p$, czyli $\tau_p \equiv 0$ i dyslokacja może przemieszczać się w kryształach bez przykładania sił zewnętrznych, a liczba słabych wiązań pozostaje bez zmian.

Na rys. 5 i 6 przedstawiono wykresy zmian τ_p w funkcji γ^{-1} otrzymane przez KRATOCHVILA i INDENBOMA [7] oraz WEINERA i SANDERSA [8].



Rys. 6. Wykres $\tau_p(\gamma^{-1})$ wg Weinera i Sandersa [8]

3. Model Peierlsa-Nabarro

Model dyslokacji zasugerowany przez Orowana, a następnie rozwinięty przez Peierlsa i Nabarro wzbudził wielkie zainteresowanie i wywarł duży wpływ na rozwój teorii dyslokacji w kryształach. Właśnie w tym modelu Peierls jako pierwszy oszacował naprężenie potrzebne do przeprowadzenia dyslokacji z komórki do komórki.

Model Peierlsa-Nabarro został zbudowany przy następujących założeniach (rys. 7):

- kryształ składa się z dwu połączonych ze sobą, ciągłych, sprężystych półprzestrzeni;
- wzdłuż płaszczyzny połączenia (ciąćcia) półprzestrzenie mają strukturę atomową;
- oddziaływanie atomów z najniższej warstwy górnej półprzestrzeni z atomami najwyższej warstwy dolnej półprzestrzeni jest typu sinusoidalnego, natomiast w każdej z półprzestrzeni osobno spełnia ono prawo Hooke'a;
- przemieszczenia w kierunku prostopadłym do płaszczyzny poślizgu są zaniedbywalnie małe i nie są brane pod uwagę również wszelkie efekty temperaturowe;
- dyslokacja jest prostoliniowa.

Model ten może być oczywiście modyfikowany, na przykład przez żądanie, aby oddziaływanie atomów wzdłuż płaszczyzny cięćcia było dowolną funkcją okresową (np. LEJČEK [10] i KROUPA, LEJČEK [11]), o okresie równym stałej sieci, byle tylko dla małych względnych przemieszczeń Φ_i zachodził liniowy związek:

$$(3.1) \quad \sigma_{xy} = \frac{\mu}{d} \Phi_x(x) \quad \text{dla dyslokacji krawędziowej,}$$

$$\sigma_{yx} = \frac{\mu}{d} \Phi_z(x) \quad \text{dla dyslokacji śrubowej,}$$

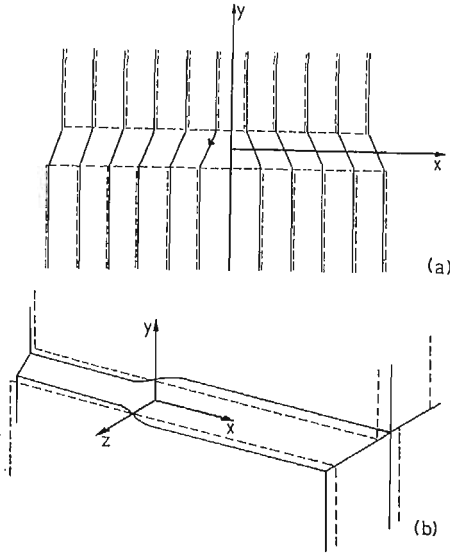
gdzie d jest odległością międzypłaszczyznową. Szczególnie proste wyniki otrzymuje się jednakże wtedy, gdy przyjmie się zależność sinusoidalną.

Początkowo przemieszczenie dolnej półprzestrzeni względem górnej (na rys. 7 linie przerywane) wynosi

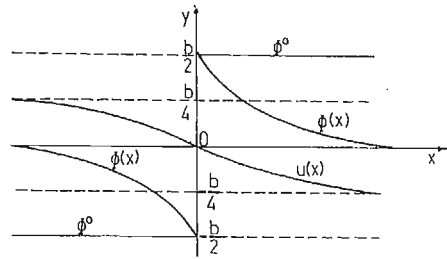
$$(3.2) \quad \Phi_x^0 = \Phi_z^0 = \begin{cases} b/2 & \text{dla } x > 0 \\ -b/2 & \text{dla } x < 0 \end{cases}$$

Po nałożeniu na półprzestrzenie takich przemieszczeń, że tworzy się odpowiednio dyslokacja krawędziowa lub śrubowa:

$$(3.3) \quad \Phi_x = \begin{cases} 2u_x + b/2 & \text{dla } x > 0 \\ 2u_x - b/2 & \text{dla } x < 0 \end{cases}; \quad \Phi_z = \begin{cases} 2u_z + b/2 & \text{dla } x > 0 \\ 2u_z - b/2 & \text{dla } x < 0 \end{cases}$$



Rys. 7. Dyslokacja krawędziowa (a) i śrubowa (b) w modelu Peierlsa-Nabarro (wg [12])



Rys. 8. Wykres przemieszczeń w modelu Peierlsa-Nabarro (wg [12])

Ogólnie, przemieszczenia zachowują się tak, jak pokazano na rys. 8. Z przemieszczeniami związane są siły, wywołane zakłóceniem wiązań w płaszczyźnie $y = 0$. Zgodnie z przyjętymi założeniami, np. dla dyslokacji śrubowej

$$(3.4) \quad \sigma_{yx}(x, 0) = \frac{-\mu b}{2\pi d} \sin \frac{4\pi u_z}{b}$$

Formalna teoria sprężystości, jak również założenie ciągłego rozkładu dyslokacji wzdłuż osi Ox , prowadzi do związku

$$(3.5) \quad \sigma_{yz}(x, 0) = \frac{\mu}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du_z(x')}{dx'} \frac{dx'}{x' - x},$$

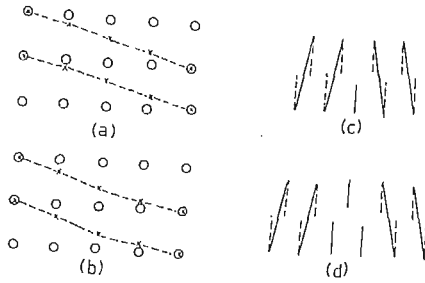
gdzie P oznacza, że całkę należy rozumieć w sensie wartości głównej Cauchy'ego. Przyrównując (3.4) i (3.5) otrzymujemy równanie całkowe, którego rozwiązaniem jest

$$(3.6) \quad u_z = -\frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{x}{\eta},$$

gdzie $\eta = d/2$. Naprężenie wyraża się teraz równaniem

$$(3.7) \quad \sigma_{yz}(x,0) = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + \eta^2}.$$

Ostatni wzór wskazuje na istotną cechę modelu Peierlsa-Nabarro: w zerze, czyli w jądrze dyslokacji, nie ma osobliwości naprężenia, które pojawiało się w modelu kontynualnym. Osobliwość pojawia się teraz w odległości $\pm\eta$ od płaszczyzny poślizgu.



Rys. 9. Symetryczne konfiguracje dyslokacji w modelu Peierlsa-Nabarro (wg [12])

(a), (b) — dyslokacja śrubowa; (c), (d) — dyslokacja krawędziowa; \circ i \times oznaczają atomy odpowiednio nad i pod płaszczyzną poślizgu, a linie przerywane na rysunku dyslokacji krawędziowej — położenie rzędów atomów, gdyby nie było dyslokacji

Podczas ruchu dyslokacji następuje zmiana energii potencjalnej kryształu. Zależność energii potencjalnej od położenia dyslokacji jest funkcją okresową, o okresie równym długości wektora Burgersa b , ze względu na periodyczną budowę kryształu. Aby przejść z jednej konfiguracji symetrycznej do drugiej (rys. 9), dyslokacja musi znaleźć się w konfiguracji niesymetrycznej. Oczekiwano, że ta ostatnia będzie miała energię wyższą, czyli że naprężenie ścinające powodujące zmianę konfiguracji też będzie się zmieniać okresowo. W modelu założono, że podczas ruchu dyslokacji energia sprężysta w obu półprzestrzeniach nie ulega zmianie, zmienia się natomiast tylko energia pochodząca od zmiany względnych przemieszczeń, będąca sumą po wszystkich atomach wzdłuż płaszczyzny cięcia i wynosi

$$(3.8) \quad W(\alpha) = \frac{\mu b^2}{4\pi} + \frac{\mu b^2}{2\pi} \exp\left[-\frac{4\eta\pi}{b}\right] \cos 4\alpha\pi,$$

gdzie αb jest wychyleniem dyslokacji z jednej z konfiguracji symetrycznych. Różniczkując otrzymany wzór po α można znaleźć siłę i naprężenie, jakimi należy działać na dyslokację, aby przesunąć ją z jednego położenia równowagi w następnę:

$$(3.9) \quad F = -\frac{1}{b} \frac{dW(\alpha)}{d\alpha} = 2\mu b \exp\left[-\frac{4\eta\pi}{b}\right] \sin 4\alpha\pi, \quad \sigma_{yx} = \frac{1}{b} F.$$

Energia osiąga maksimum, gdy $\cos 4\alpha\pi = 1$, a minimum, gdy $\cos 4\alpha\pi = -1$. Maksimum mamy więc, gdy $\alpha = 0$ lub $1/2$, a minimum, gdy $\alpha = 1/4$. Wniosek jest niespodziewany i sprzeczny z oczekiwaniami: największą energię mają konfiguracje symetryczne, a konfiguracja niesymetryczna jest obdarzona energią minimalną.

Naprężenie Peierlsa, czyli maksymalne naprężenie potrzebne do przeprowadzenia dyslokacji do następnej komórki, pojawia się wtedy, gdy $\alpha = 1/8$ i wynosi

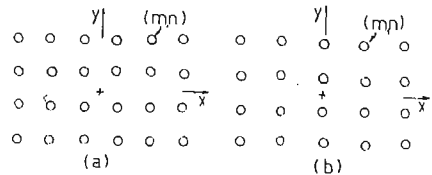
$$(3.10) \quad \sigma_p = 2\mu \exp\left[-\frac{4\eta\pi}{b}\right].$$

HIRTH i LOTHE [12] uważają, że nieoczekiwana postać energii potencjalnej jest częściowo skutkiem sumowania niezależnie po płaszczyznach górnej i dolnej. Metoda ta nie ma

silnego uzasadnienia fizycznego i pociąga za sobą zbytne wygładzenie funkcji w pobliżu jądra dyslokacji. Sugerują, że sumowanie energii pochodzącej od względnych przemieszczeń par rzędów atomów powinno poprawić ten wynik.

4. Model Maradudina

MARADUDIN [13] zaproponował prosty model dyslokacji śrubowej w sieci krystalicznej, w której każdy atom oddziałuje tylko ze swymi najbliższymi czterema współpłaszczyznowymi sąsiadami zgodnie z prawem Hooke'a. Odległości pomiędzy atomami w kierunku prostym do płaszczyzny przekroju są stałe. Maradudin wyliczył przemieszczenia atomów w dwu konfiguracjach dyslokacji śrubowej: w konfiguracji I, gdy dyslokacja znajduje się w środku komórki elementarnej i w konfiguracji II, gdy dyslokacja znajduje się na krawędzi komórki elementarnej (rys. 10). Następnie podał wyrażenia na energie od-



Rys. 10. Konfiguracje dyslokacji śrubowej w modelu Maradudina; (a) konfiguracja I; (b) konfiguracja II

kształcenia powyższych konfiguracji. Różnica tych energii jest energią Peierlsa. Pionowe przemieszczenie atomu o współrzędnych (m, n) oznaczono $w(m, n)$. Jest ono wielowartościową funkcją położenia atomu w tym sensie, że wzrasta o b po zatoczeniu konturu Burgersa wokół linii dyslokacji. Aby uniknąć kłopotów związanych z wielowartościowością pola przemieszczeń wprowadzono cięcie wzdłuż osi $0x$. Położenie tego cięcia jest w ogólności dowolne.

Stan równowagi rzędu atomów o współrzędnych (m, n) jest opisany równaniem

$$(4.1) \quad A(w_{m+1,n} - w_{m-1,n}) + B(w_{m,n+1} - w_{m,n-1}) - (2A + 2B)w_{m,n} = \\ = Bb(\delta_{m,k+1/2} \delta_{n,1/2} - \delta_{m,k+1/2} \delta_{n,-1/2}) \text{ w konfiguracji I,} \\ = Bb(\delta_{m,k} \delta_{n,1/2} - \delta_{m,k} \delta_{n,-1/2}) + Bb/2(\delta_{m,0} \delta_{n,1/2} - \delta_{m,0} \delta_{n,-1/2}) \text{ w konfiguracji II,}$$

gdzie A i B są stałymi siłowymi oddziaływania atomów, odpowiednio w kierunku x i w kierunku y , a $k = 0, 1, 2, 3 \dots$

MARADUDIN [13] rozwiązał równania (4.1) metodą transformacji Fouriera, a BULLOUGH i TEWARY [14] metodą funkcji Greena. Otrzymali oni identyczne wyniki, mianowicie:

dla konfiguracji I

$$(4.2) \quad w_{m,n} = \frac{b}{4} - \frac{b}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin y}{\sin x} \frac{\sin 2mx \sin 2my}{C \sin^2 x + \sin^2 y} dx dy,$$

dla konfiguracji II

$$(4.3) \quad w_{m,n} = \frac{b}{4} - \frac{b}{\pi^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos x \sin 2my}{\sin x} \frac{\sin y \sin 2ny}{C \sin^2 x + \sin^2 y} dx dy,$$

gdzie $C = A/B$. W granicy, gdy $Am^2 + Bn^2$ jest duże, wzory te przechodzą w dobrze znany związek z kontynuualnej teorii dyslokacji

$$(4.4) \quad w_{n,n} = \frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \sqrt{C} \frac{n}{m}.$$

Jest on identyczny dla obu konfiguracji, gdyż w teorii kontynuualnej nie bierze się pod uwagę szczegółów budowy jądra dyslokacji.

Energia odkształcenia została policzona w pracy [13] jako praca wykonana przez siły zewnętrzne na kryształ podczas wprowadzania do niego dyslokacji. Otrzymano następujące wyniki:

$$(4.5) \quad E_I = \frac{b}{4\pi} \sqrt{AB} \left\{ \ln 2\gamma - \frac{1}{2} \ln \frac{1+C}{4} + \frac{1}{4} \ln C + \ln \frac{R}{\sqrt{\zeta\eta}} \right\},$$

$$E_{II} = \frac{b}{4\pi} \sqrt{AB} \left\{ \ln 2\gamma - \frac{1}{2} \ln \frac{1+C}{4} + \frac{1}{\sqrt{C}} \left(\pi - \arcsin \sqrt{\frac{C}{1+C}} \right) + \frac{1}{4} \ln C + \ln \frac{R}{\sqrt{\zeta\eta}} \right\},$$

gdzie γ jest stałą Eulera, $\ln \gamma = 0,57722$, R zewnętrznym promieniem kryształu (przyjmuje się, że kryształ ma kształt walca), ζ , η odległością między sąsiednimi rzędami atomów odpowiednio w kierunku x i y . Tak więc

$$(4.6) \quad E_{II} - E_I = \frac{Bb}{4\pi} \left(\pi - \arcsin \sqrt{\frac{C}{1+C}} \right).$$

Otrzymana w ten sposób różnica energii jest nadmiernie duża. CELLI [15] poprawił wynik Maradudina wprowadzając dla dwu rzędów $(0, 1/2)$ i $(0, -1/2)$ w konfiguracji II potencjał

$$(4.7) \quad \frac{bB}{4\pi^2} \left(1 + \cos \frac{2\pi\Delta w}{b} \right),$$

co dla dyslokacji $[110]$ w NaCl obniżyło wartość energii Peierlsa o rząd wielkości.

HÖLZLER i SIEMS [16] stwierdzili, że jeśli zastosuje się poprawkę Celliego do modelu Maradudina dla dyslokacji $[001]$ w kryształ sześciennym, to różnica $E_{II} - E_I$ staje się ujemna. Jest to spowodowane faktem, że największe względne przemieszczenia będą teraz w konfiguracji I. Zaproponowali więc, aby wprowadzić sinusoidalną zależność sił od przemieszczeń dla wszystkich wiązań, co obniżyłoby względne przemieszczenia również w konfiguracji I i zmniejszyłoby E_I w ten sposób, że różnica energii znów byłaby dodatnia.

5. Model Sandersa

SANDERS [17] zbudował dyskretny model dyslokacji krawędziowej w kryształ o sieci sześcienniej prostej przystosowany do badania wpływu naprężenia ścinającego przyłożonego z zewnątrz na geometrię dyslokacji. Założył on liniowe oddziaływania pomiędzy najbliższymi sąsiadami (oprócz płaszczyzny poślizgu) uwzględniając siły centralne i niecentralne. Rozważane były tylko cztery rzędy atomów najbliższe płaszczyzny poślizgu. Przemieszczenia atomów w tych rzędach dane są następującymi wzorami:

$$(5.1) \quad \begin{aligned} u_{1j} &= u_{1j}^I + u_{1j}^{II} + \varphi'_j, & u_{-1,j} &= u_{-1,j}^I + u_{-1,j}^{II} + \psi'_j, \\ u_{2j} &= u_{2j}^I + u_{2j}^{II} + \bar{\varphi}'_j, & u_{-2,j} &= u_{-2,j}^I + u_{-2,j}^{II} + \bar{\psi}'_j, \end{aligned}$$

gdzie u_{ij} jest poziomym przemieszczeniem atomu w i -tym rzędzie i w j -tej kolumnie, u_{ij}^I jest przemieszczeniem atomu wywołanym jednorodnym naprężeniem ścinającym τ przyłożonym w nieskończoności z zewnątrz do kryształu:

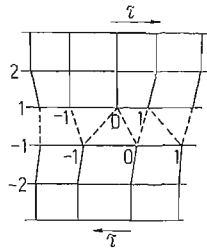
$$(5.2) \quad \begin{aligned} u_{ij}^I &= \frac{\tau b^2}{k_2} (i-1) & i > 0, \\ u_{ij}^I &= \frac{\tau b^2}{k_2} (i+1) & i < 0, \end{aligned}$$

gdzie k_2 jest miarą sił niecentralnych (co wynika z porównania z kontynuualną teorią sprężystości, gdyż $k_2 = c_{44}b = \mu b$), a u_{ij}^I jest odkształceniem potrzebnym do wprowadzenia dyslokacji:

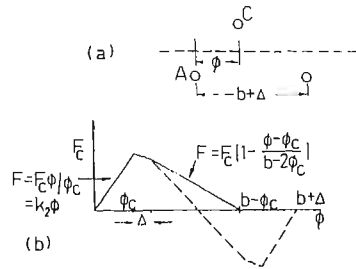
$$(5.3) \quad u_{ij}^{II} = \begin{cases} -b/4 & j > 0 \\ 0 & j = 0; \\ b/4 & j < 0 \end{cases} \quad u_{-1,j}^{II} = \begin{cases} b/4 & j \geq 0 \\ -b/4 & j < 0 \end{cases}$$

Po wprowadzeniu dyslokacji atomy doznają relaksacji i zajmują położenia równowagi, co określają funkcje φ_j^I , $\bar{\varphi}_j^I$, ψ_j^I i $\bar{\psi}_j^I$ zmierzające do zera, gdy $j \rightarrow \infty$.

W pobliżu jądra dyslokacji przemieszczenia są tak duże, że porzucono tutaj założenie o oddziaływaniu tylko najbliższych sąsiadów i uwzględniono oddziaływanie atomów z rzędu 1 z dwoma atomami z rzędu -1 (linie przerywane na rys. 11). Siła oddziaływania jest funkcją poziomej odległości Φ_{ij} pomiędzy oddziaływującymi atomami, gdzie Φ_{ij} jest odległością pomiędzy i -tym atomem z 1 rzędu i j -tym atomem z rzędu -1.



Rys. 11. Dyslokacja krawędziowa w modelu Sandersa



Rys. 12. (a) Trzy typowe atomy w pobliżu płaszczyzny poślizgu; (b) wykres siły działającej na atom C pochodzącej od atomu A (linia ciągła) i od dwu atomów poniżej płaszczyzny poślizgu (linia przerywana); w modelu Sandersa

Równania równowagi zapisują się następująco:

dla atomów usytuowanych daleko od płaszczyzny poślizgu

$$(5.4) \quad k_1(u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 2u_{i,j}) + k_2(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j}) = 0,$$

gdzie k_1 jest miarą sił centralnych;

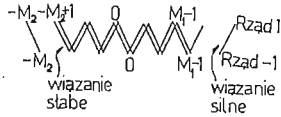
dla atomów z czterech rzędów najbliższych do płaszczyzny poślizgu

$$(5.5) \quad \begin{aligned} k_2(u - u_{1j}) + k_1(u_{1,j+1} + u_{1,j-1} - 2u_{1j}) &= F_{j,j-1} - F_{jj}, \\ k_2(u_{-2,j} - u_{-1,j}) + k_1(u_{-1,j+1} + u_{-1,j-1} - 2u_{-1,j}) &= F_{jj} - F_{j+1,j}. \end{aligned}$$

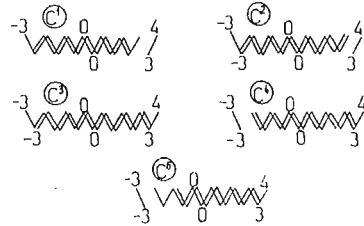
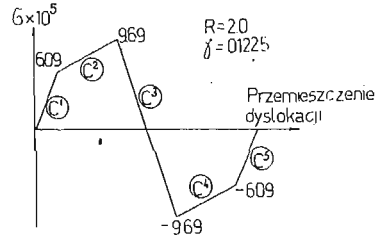
F_{ij} jest siłą oddziaływania i -tego atomu z rzędu 1 z j -tym atomem z rzędu -1 . Założono następujący charakter zależności $F(\Phi)$:

$$(5.6) \quad F/(k_2 b) = \begin{cases} \Phi/b & 0 \leq \Phi/b \leq \gamma, \\ -\alpha\Phi/b + \gamma(1+\alpha), & \gamma \leq \Phi/b \leq 1-\gamma, \\ 0 & \Phi/b \geq 1-\gamma, \end{cases}$$

gdzie $\gamma = \Phi_c/b = F_c/(k_2 b) = \tau_c/b$, $\alpha = \gamma/(1-2\gamma)$, τ_c oznacza krytyczne napięcie ścinające kryształu doskonałego (rys. 12).



Rys. 13. Przykładowy rozkład wiązań wzdłuż płaszczyzny poślizgu w modelu Sandersa. M_1 i M_2 są to numery, liczone od środka, tych atomów, które pierwsze są połączone silnymi wiązaniami



Rys. 14. Przykład zmiany naprężenia zewnętrznego i konfiguracji słabych wiązań w czasie ruchu dyslokacji w modelu Sandersa

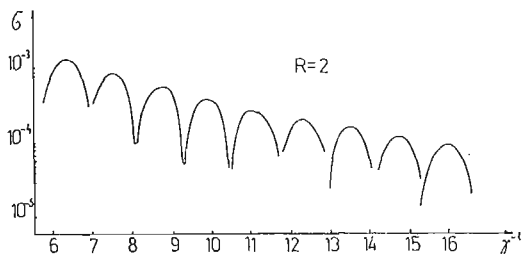
Gdy względna pozioma odległości pomiędzy dwoma atomami z dwu sąsiednich poziomych rzędów jest z przedziału $[0, \gamma]$, to mówimy, że atomy są połączone silnym wiązaniem, a gdy ta odległość jest z przedziału $[\gamma, 1-\gamma]$, to mówimy, że wiązanie jest słabe (rys. 13). Tak więc, płaszczyznę poślizgu można podzielić na trzy części:

$$\begin{aligned} j \leq -M_2, & \quad F_{jj} \text{ silne, } F_{j,j-1} = 0, \\ -M_2 + 1 \leq j \leq M_1 - 1, & \quad F_{jj} \text{ i } F_{j+1,j} \text{ słabe,} \\ j \geq M_1, & \quad F_{j,j-1} \text{ silne, } F_{jj} = 0. \end{aligned}$$

Sanders badał quasi-statyczny ruch dyslokacji (przejście z jednej komórki do następnej) dla $R = 1,0, 2,0, 5,0$ ($R = k_1/k_2$) i dla różnych wartości γ . Typowy przebieg zależności przemieszczenia dyslokacji od przyłożonego naprężenia $\sigma = \tau/b$ pokazuje rys. 14.

Początkowa konfiguracja C^1 jest stabilna (dodatniemu naprężeniu odpowiada dodatnie przemieszczenie), natomiast konfiguracja C^3 jest niestabilna — w ruchu dynamicznym dyslokacja powinna albo skoczyć do przodu, albo powrócić z powrotem do konfiguracji stabilnej. Naprężenie Peierlsa to maksymalne naprężenie występujące w tym cyklu wynoszące $9,65 \times 10^{-5}$.

Oprócz cyklu omówionego powyżej, Sanders zaobserwował również takie, w których konfiguracja początkowa była niestabilna i takie, w których były dwie konfiguracje stabilne w jednym cyklu. Końcowy wynik obliczeń naprężenia Peierlsa pokazuje rys. 15. Uderzającą cechą jest okresowy przebieg τ_p w funkcji γ^{-1} .

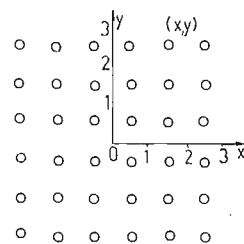


Rys. 15. Zmiana naprężenia Peierlsa w funkcji γ^{-1} w modelu Sandersa

6. Model Roguli

ROGULA [18] zaproponował dynamiczny, atomowy model prostoliniowej dyslokacji śrubowej w sieciach Bravaisa. Wyprowadził on wyrażenia na pola prędkości i dystorsji oraz znalazł zależność prędkości poruszającej się dyslokacji od działającego na kryształ jednorodnego naprężenia zewnętrznego.

Model Roguli przystosowano [19] do quasi-statycznego ruchu dyslokacji, co pozwoliło znaleźć statyczne naprężenie Peierlsa w funkcji parametru modelu γ .



Rys. 16. Przekrój poprzeczny przez sieć sześcienną prostą

Rozpatrzono sześcienną, prostą, prymitywną sieć krystaliczną. Przekrój poprzeczny tworzy sieć kwadratową (rys. 16). Założono, że w nieskończonej sieci znajduje się pojedyncza dyslokacja śrubowa o wektorze Burgersa \mathbf{b} ($|\mathbf{b}| = 1$) równoległym do osi Oz . Dyslokacja może zajmować różne położenia wewnątrz komórki, w której umieszczono początek układu współrzędnych. Ponadto zrobiono następujące założenia:

a) ruch atomów dozwolony jest tylko w kierunku równoległym do osi Oz (równoległe do linii dyslokacji), przy czym odległości między atomami w tym kierunku są stałe (atomy są «nanizane na sztywne pręty», a kółko na rys. 16 oznacza jeden taki pręt);

b) każdy atom oddziałuje tylko ze swymi czterema najbliższymi «współpłaszczyznowymi» sąsiadami;

c) energia oddziaływania atomów jest odcinkami paraboliczną funkcją dystorsji $\beta_k(x, y)$, $k = 1, 2$.

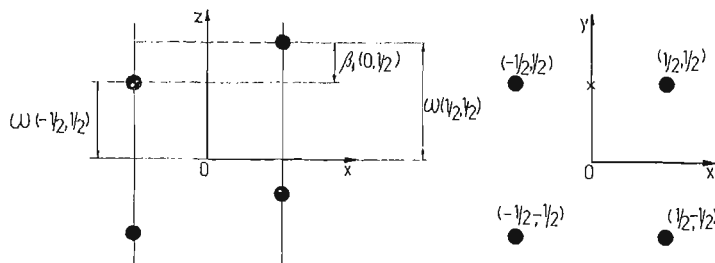
Dystorsją $\beta_k(x, y)$ nazwano wielkość

$$(6.1) \quad \beta_k(x, y) = D_k w(x, y) - n_k,$$

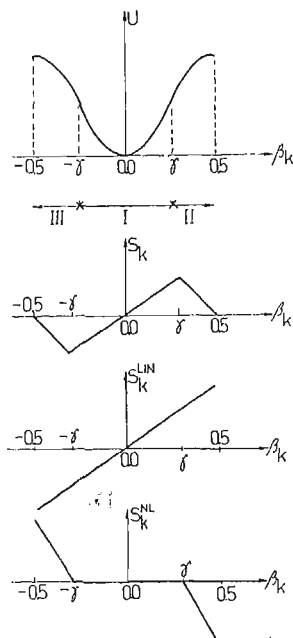
gdzie D_k jest operatorem różnicy centralnej, $w(x, y)$ jest pionowym przemieszczeniem atomu o współrzędnych (x, y) , a n_k są takimi liczbami całkowitymi, by $|\beta_k(x, y)| \leq 0,5$ (rys. 17). Wielkości $\beta_k(x, y) = 0,5$ i $\beta_k(x, y) = -0,5$ są równoważne. Po rozpisaniu wzorów (6.1):

$$(6.2) \quad \begin{aligned} \beta_1(x, y) &= w(x+1/2, y) - w(x-1/2, y) - n_1, \\ \beta_2(x, y) &= w(x, y+1/2) - w(x, y-1/2) - n_2 \end{aligned}$$

widać, że dystorsje określone są w środkach odcinków łączących atomy: $\beta_1(x, y)$ w środkach odcinków poziomych, a $\beta_2(x, y)$ w środkach odcinków pionowych (rys. 16 i 17).



Rys. 17. Dystorsja $\beta_1(0, 1/2)$



Rys. 18. Zależność energii i siły oddziaływania atomów od dystorsji w modelu Roguli. Rozkład siły oddziaływania na część liniową i nieliniową

Na rys. 18 przedstawiono zależność energii U i siły S_k oddziaływania dwu atomów od dystorsji

$$(6.3) \quad S_k = \frac{\partial U(\beta)}{\partial \beta_k}.$$

Wartość dystorsji $\beta_k = \gamma$, będąca parametrem modelu, wyznacza granicę liniowej zależności siły oddziaływania od dystorsji. W związku z tym przedział wartości dystorsji $[-0,5, 0,5]$ podzielono na trzy części (rys. 18): jeśli wartość dystorsji jest z obszaru I to mówimy, że odpowiednie wiązanie jest silne, zaś w przypadku, gdy wartość dystorsji jest z obszaru II lub III, to mówimy że, wiązanie jest słabe. Siłę oddziaływania atomów z sąsiednich rzędów można rozbić na część liniową i nieliniową:

$$(6.4) \quad S_k(x, y) = (S_k^{\text{LIN}} + S_k^{\text{NL}})(x, y).$$

Nieliniową część oddziaływania można wyrazić przez liniową, jeśli wprowadzi się wielkość

$$(6.5) \quad f(x, y) = -D_k S_k^{\text{LIN}}(x, y),$$

gdzie $f(x, y)$ jest wielkością taką, że $\mathbf{b} \cdot f(x, y)$ przedstawia siłę, z jaką należy działać na atom o współrzędnych (x, y) , aby otrzymać taki sam efekt, jaki daje nieliniowa część (6.4).

Sumaryczny wektor Burgersa zdefiniowano następująco:

$$(6.6) \quad \sum_C \beta_k D x_k = \sum_{\text{int} C} R_k \beta_k.$$

Po lewej stronie równania sumowanie odbywa się po odcinkach konturu C (gdyż DQ oznacza przyrost wielkości Q na elementarnym odcinku konturu C), a po prawej stronie równania po komórkach zawartych wewnątrz konturu C . Tutaj

$$(6.7) \quad R_k = \varepsilon_{ik} D_{i, k} \quad \text{i} \quad k = 1, 2,$$

a ε_{ik} jest antysymetrycznym tensorem jednostkowym

$$(6.8) \quad \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = 0, \quad \varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = 1.$$

Wielkość zdefiniowana jako

$$(6.9) \quad R_k \beta_k(x, y) = \alpha(x, y)$$

gra taką samą rolę, jak gęstość dyslokacji, w omawianym przypadku dyslokacji śrubowych, w teorii kontynualnej. Pole $\alpha(x, y)$ jest określone dla całkowitych wartości x i y , a poszczególne jego elementy mogą przyjmować trzy wartości: 0 — gdy w danej komórce nie ma dyslokacji i ± 1 — gdy w komórce znajduje się dyslokacja o wektorze Burgersa równym $\pm \mathbf{b}$.

Układ równań

$$(6.10) \quad \begin{aligned} -D_k S_k^{\text{LIN}}(x, y) &= f(x, y), \\ R_k \beta_k(x, y) &= \alpha(x, y), \end{aligned}$$

po prostych przekształceniach da się sprowadzić do postaci

$$(6.11) \quad -a D_k D_k \beta_l = D_l f - a R_l \alpha,$$

gdzie $a = \mu$ jest modułem ścinania. Równanie to rozwiązano metodą funkcji Greena i znaleziono, że

$$(6.12) \quad \beta(x, y) = \frac{1}{a} D_i G^* f - R_i G^* \alpha,$$

gdzie $*$ oznacza splot dyskretny:

$$(6.13) \quad Q * P = \sum_{x', y'} Q(x - x', y - y') P(x', y'),$$

a G jest funkcją Greena

$$(6.14) \quad G(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(yq_2) (2 - \cos q_2 - \sqrt{(2 - \cos q_2)^2 - 1})^{|x|} - 1}{\sqrt{(2 - \cos q_2)^2 - 1}} dq_2,$$

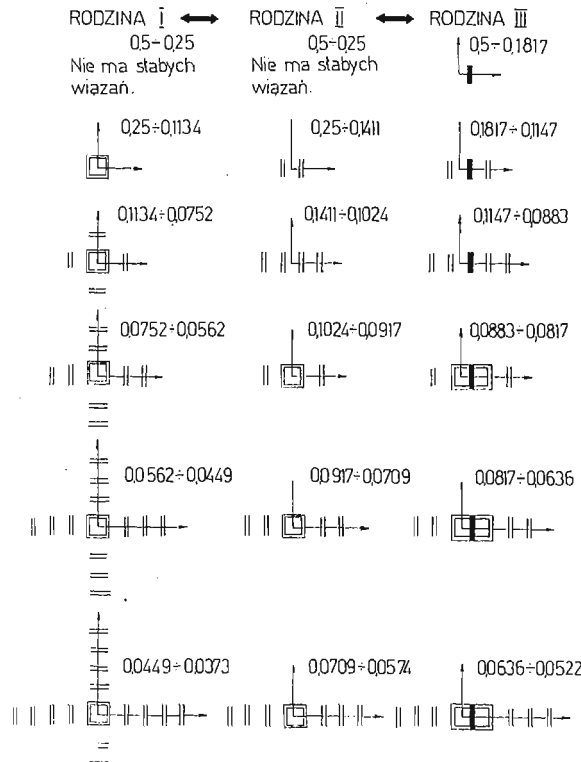
przy czym $G(0,0) = 0,0$.

Ponieważ dyslokacja znajduje się w tej samej komórce, w której jest początek układu współrzędnych, więc

$$(6.15) \quad \alpha(x, y) = \delta_{x0} \delta_{y0},$$

gdzie δ_{ij} jest deltą Kröneckera, a wzory na dystorsje zapisują się następująco:

$$(6.16) \quad \begin{aligned} \beta_1(x, y) &= \frac{1}{a} \sum_{x', y'} [G(x-x'+1/2, y-y') - G(x-x'-1/2, y-y')] f(x', y') + \\ &\quad + G(x, y+1/2) - G(x, y-1/2), \\ \beta_2(x, y) &= \frac{1}{a} \sum_{x', y'} [G(x-x', y-y'+1/2) - G(x-x', y-y'-1/2)] f(x', y') - \\ &\quad - G(x+1/2, y) + G(x-1/2, y). \end{aligned}$$



Rys. 19. Trzy rodziny symetrycznych konfiguracji równowagi słabych wiązań przy $\beta_1 = 0$ w modelu Roguli. Obok każdej konfiguracji podano zakres γ jej ważności; \blacksquare oznacza dystorsję równą 0,5

Wpływ naprężenia zewnętrznego został uwzględniony przez wprowadzenie jednorodnego pola dystorsji β_k . Tak więc całkowita dystorsja jest dana wzorem

$$(6.17) \quad \beta_k(x, y) = \beta_k^D(x, y) + \beta_k^0,$$

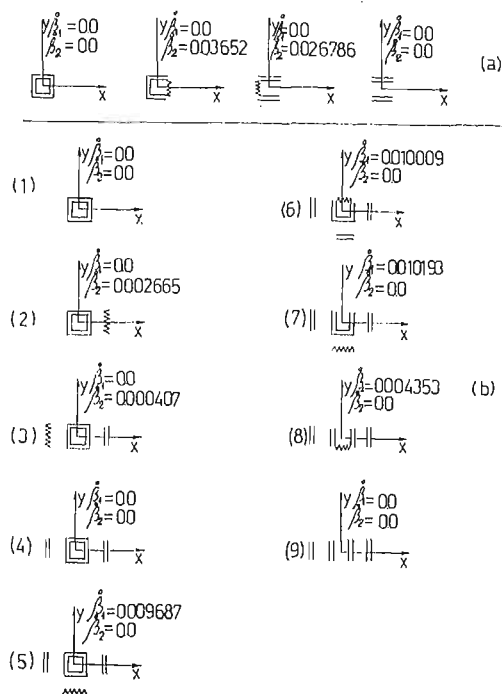
gdzie $\beta_k^p(x, y)$ jest polem dystorsji wywołanym obecnością dyslokacji i dane jest wzorami (6.16).

Zbadane zostały dwa procesy:

- a) proces zmian konfiguracji równowagi słabych wiązań w funkcji γ przy $\beta_k = 0$;
- b) proces zmian konfiguracji słabych wiązań w funkcji β_k przy ustalonym γ .

W procesie drugim maksymalna β_k występująca w quasi-statycznym ruchu dyslokacji poprzez komórkę elementarną jest proporcjonalna do naprężenia Peierlsa.

Śledząc proces pierwszy, stwierdzono istnienie trzech rodzin symetrycznych konfiguracji słabych wiązań (rys. 19). W rodzinie III jedna z dystorsji jest równa $\pm 0,5$, czyli dyslokacja znajduje się na krawędzi komórki. Wybierając dowolną konfigurację z rodziny I, ustalając γ i zmieniając odpowiednio β można dojść tylko do jednej z konfiguracji z rodziny II. Żaden proces tego typu nie wyprowadza dyslokacji na krawędź komórki (rys. 20) (uwaga ta nie dotyczy pierwszej konfiguracji (bez słabych wiązań) z rodziny I). Przy równoczesnej zmianie obu β_k otrzymano ciąg konfiguracji o rosnącej liczbie słabych wiązań (rys. 21), a w ostatniej konfiguracji z tego ciągu dwie dystorsje są równocześnie równe 0,5. Proces ten prowadzi do kruchego zniszczenia kryształu. Tak więc konfiguracje z rodziny I odpowiadają dyslokacjom utwierdzonym.

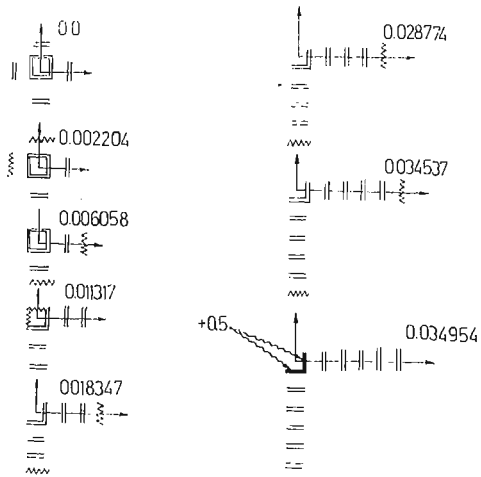


Rys. 20. Przykłady zmian konfiguracji słabych wiązań w funkcji β_k dla (a) $(0,2500, 0,1817) \in \gamma = 0,2$; (b) $(0,1817, 0,1134) \in \gamma = 0,12$ w modelu Roguli

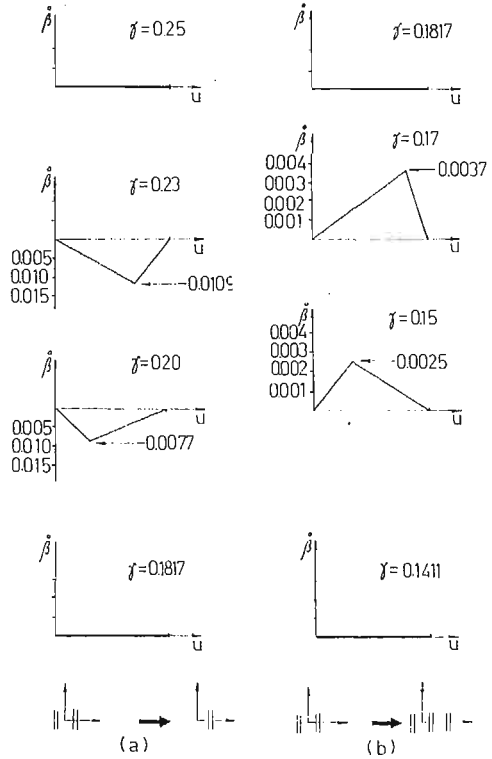
Konfiguracje z rodziny II (oprócz pierwszej) mają ściśle wyznaczoną płaszczyznę • poślizgu dyslokacji. Dyslokacja osiąga konfigurację z rodziny III (a więc jest dyslokacją, ruchomą) tylko wtedy, gdy naprężenie zewnętrzne jest przyłożone do kryształu w taki

sposób, że siła działa na dyslokację równolegle do kierunku, w którym jest najwięcej słabych wiązań. Przykłady takich procesów pokazano na rys. 22.

Na rys. 23 pokazano w funkcji γ (w skali γ^{-1}) zmiany konfiguracji słabych wiązań (z rodziny II i III) w trakcie zmiany położenia dyslokacji u . Gdy $u = \pm 0,5$, to dyslokacja znajduje się na krawędzi komórki, a $u = 0$ jest równoważne $u = 1$. Liniami ukośnymi zakreskowano obszary, w których dana konfiguracja jest stabilna, co odpowiada minimum energetycznemu, a liniami poziomymi obszary niestabilności konfiguracji (maximum energetyczne).



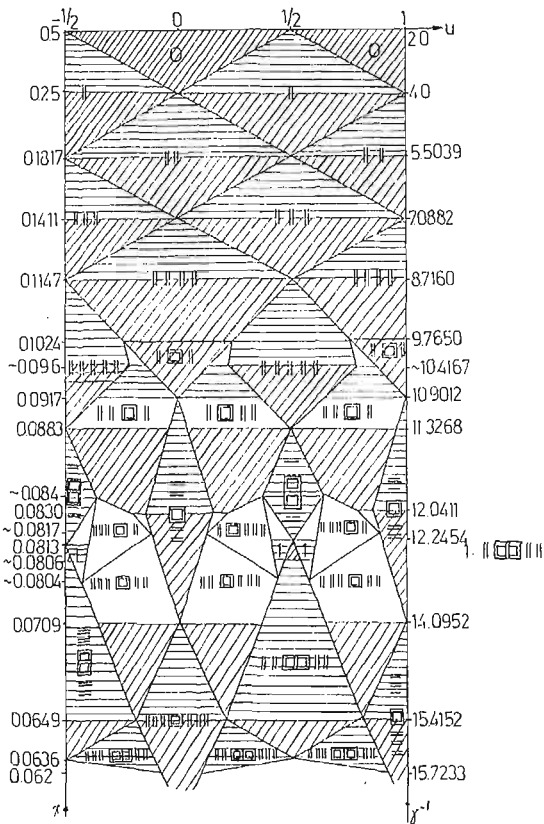
Rys. 21. Ciąg konfiguracji w modelu Roguli dla $\gamma = 0, 095$ przy równoczesnej zmianie β_k , $k = 1, 2$; $\beta_1 = \beta_2$. Przy każdej konfiguracji podano osiągniętą wartość β



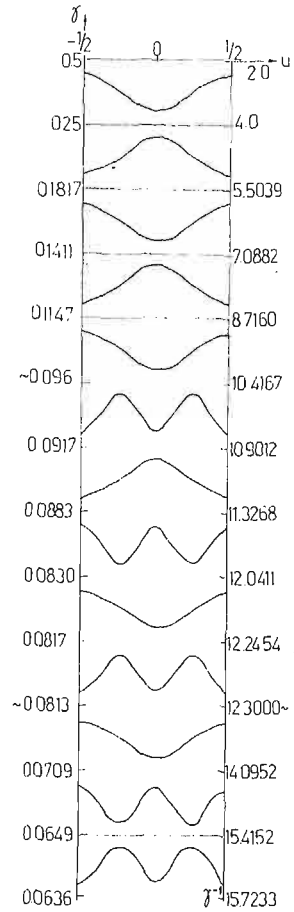
Rys. 22. Zmiany β w funkcji położenia dyslokacji u w modelu Roguli; (a) $\gamma \in [0,1411, 0,1147]$; (b) $\gamma \in [0,1147, 0,1024]$

Na rys. 24 podano schematyczne przekroje powierzchni energii płaszczyzną prostopadłą do płaszczyzny poślizgu dyslokacji. Linie poziome odpowiadają tym wartościom γ , dla których naprężenie Peierlsa jest zerowe. Stwierdzono istnienie niesymetrycznych położów równowagi dyslokacji wewnątrz komórki.

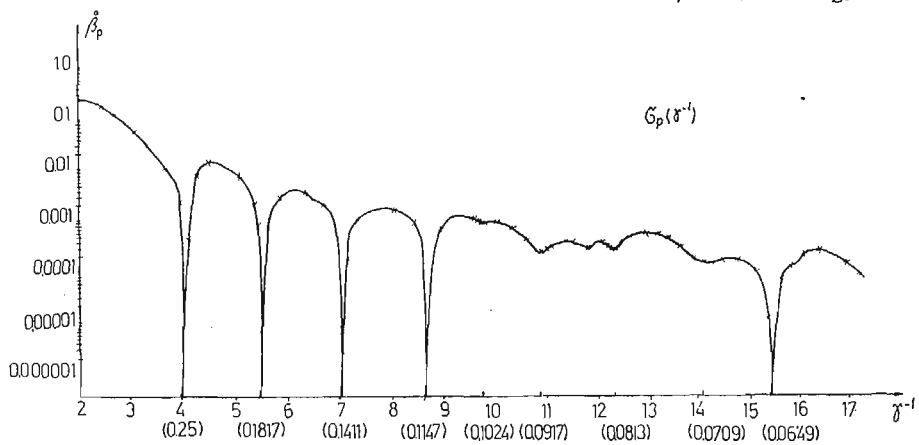
Zależność naprężenia Peierlsa od parametru modelu γ pokazano na rys. 25. Jeśli by nie uwzględniać punktów, w których naprężenie znika, to oprócz zakresu $\gamma \in [0,5, 0,25]$, wraz ze wzrostem γ^{-1} maleje ono wykładniczo.



Rys. 23. Wykres zmian konfiguracji słabych wiązań w modelu Roguli w funkcji γ i u . // — obszary konfiguracji stabilnych; ≡ — obszary konfiguracji niestabilnych



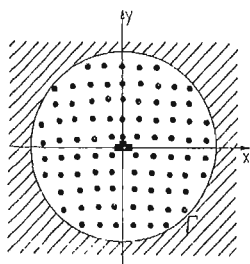
Rys. 24. Schematyczne przekroje powierzchni energii dyslokacji płaszczyzną prostopadłą do płaszczyzny poślizgu w funkcji γ w modelu Roguli



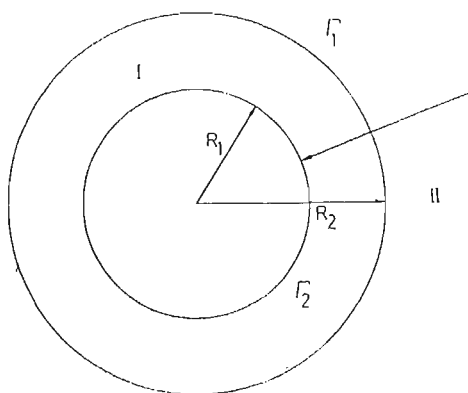
Rys. 25. Wykres zmian naprężenia Peierlsa w funkcji γ^{-1} w modelu Roguli. W nawiasach podano wartości γ dla których następuje zmiana konfiguracji; $\tau_p = a\beta_p$

7. Modele półdyskretne

W ciągu ostatnich kilkunastu lat w związku z postępem w dziedzinie budowy elektronicznych maszyn cyfrowych, które są coraz szybsze i mają coraz większą pamięć, gwałtownie rozwinęła się nowa technika teoretycznego badania własności materiałów, tzw. metoda symulacji komputerowej. Przegląd zagadnień rozwiązywanych tą metodą można znaleźć np. w pracach [20] i [21]. Wiele prac poświęcono dyslokacjom przede wszystkim w strukturach sześciennych centrowanych objętościowo (bcc) [22]. Wspólną cechą wszystkich modeli dyslokacji rozwiązywanych metodą symulacji komputerowej jest podział kryształu na dwie części: w obszarze I uwzględnia się atomową (dyskretną) budowę kryształu, natomiast w obszarze II korzysta się z kontynuualnej teorii sprężystości. Dyslokacja znajduje się oczywiście w obszarze I (rys. 26). W obszarze I rachunki przeprowadza się korzystając z dwuciałowych półempirycznych potencjałów, przy czym uwzględnia się oddziaływanie



Rys. 26. Półdyskretny model dyslokacji wg [23]. Obszar I (zakropkowany), w którym uwzględnia się dyskretną budowę kryształu od obszaru II (zakreskowanego), w którym korzysta się z wyników kontynuualnej teorii sprężystości oddziela sztywna granica Γ



Rys. 27. Półdyskretny model dyslokacji z elastyczną granicą i nakładającymi się obszarami I i II

nie tylko najbliższych, ale i dalszych sąsiadów. Stosuje się w tych modelach zasadniczo dwa podejścia: gdy granica Γ oddzielająca część atomową modelu od ciągłej jest sztywna (*rigid boundary*) i gdy granica ta jest elastyczna (*flexible boundary*). W metodzie pierwszej wylicza się położenia atomów na granicy zgodnie z liniową lub nieliniową [23] teorią sprężystości, izotropową lub anizotropową, a następnie atomy w obszarze I poddaje się procesowi relaksacji. W podejściu drugim (rys. 27) stosuje się proces iteracyjny. W pierwszym kroku przeprowadza się obliczenia w obszarze I ze sztywną granicą Γ_1 . Następnie wykonuje się obliczenia zgodnie z teorią sprężystości w obszarze II biorąc pod uwagę warunki brzegowe na Γ_2 otrzymane na podstawie kroku pierwszego. W trzecim kroku wykonuje się obliczenia w obszarze I z pozycjami atomów na Γ_1 ustalonymi przez drugi krok. Metoda ta ma tę przewagę nad pierwszą, że pozwala uzyskać podobne rezultaty przy dużo mniejszym obszarze I, co z kolei przyczynia się do znacznego zaoszczędzenia czasu

maszyny. Poświęcone tej metodzie są np. prace TEODOSIU i NICOLAE [24] oraz TEODOSIU, NICOLAE i PAVEN [25].

Przy pomocy powyżej zarysowanych metod badano w kryształach między innymi wpływ naprężeń zewnętrznych na geometrię poślizgu dyslokacji, tak śrubowych, jak i krańdziowych. Na przykład, BASIŃSKI, DUESBERY, TAYLOR [26, 27], stwierdzili, że dla dyslokacji śrubowej w sieci bcc sodu naprężenie Peierlsa zależy od orientacji przyłożonego naprężenia zewnętrznego i ma minimalną wartość $0,0105 \mu$ dla poślizgu w kierunku bliźniakowania na płaszczyznach $\{112\}$. W fazie hcp sodu naprężenie to jest co najmniej 25 razy mniejsze. Stwierdzono również, że ruch dyslokacji śrubowej w sieci hcp jest ograniczony tylko do jednej płaszczyzny poślizgu, gdy natomiast w sieci bcc ma miejsce poprzez jednostkową translację po płaszczyznach $\{110\}$ z prawem wyboru, że dwa kolejne przesunięcia nie mogą mieć miejsca na tych samych płaszczyznach poślizgu.

8. Zakończenie

Z przedstawionych modeli widać, że problem naprężenia Peierlsa jest bardzo złożony. Peierls i Nabarro otrzymali wynik sprzeczny z oczekiwaniami: konfiguracje symetryczne, o których sądzono, że mają energię mniejszą okazały się niestabilne. Próby obliczenia naprężenia Peierlsa w jednowymiarowym modelu dyslokacji Frenkla-Kontorovej przez KRATOCHVILA i INDENBOMA [7] oraz WEINERA i SANDERSA [8], w modelu dyslokacji śrubowej SANDERSA [17] oraz w trójwymiarowym modelu dyslokacji śrubowej ROGULI [19], wskazały na jego nową istotną cechę: naprężenie Peierlsa oscyluje wraz ze zmianą parametru modelu γ charakteryzującego materiał, a dla niektórych jego wartości jest równe zeru. Oznacza to, że przewiduje się możliwość istnienia takich kryształów, w których dyslokacje mogą przemieszczać się przy zerowych siłach zewnętrznych. Fakt ten dla wielu badaczy wydaje się być mało prawdopodobny. Modele te potwierdziły również wynik Peierlsa i Nabarro. Stwierdzono mianowicie, iż fakt czy dane położenie równowagi dyslokacji jest stabilne czy też niestabilne zależy od materiału, w którym badano dyslokację.

Dużym zaskoczeniem było stwierdzenie w modelu Roguli, że w sieci sześcienniej prostej istnieją takie konfiguracje słabych wiązań, dla których dyslokacje są utwierdzone. Znaczący to mianowicie tyle, że dyslokacja nie może być przepchnięta do sąsiedniej komórki bez spowodowania zniszczenia kryształu. Są to konfiguracje o najwyższej, czterokrotnej symetrii obrotowej, gdzie słabe wiązania układają się w kształcie krzyża. Dyslokacja staje się ruchoma, tzn. że można ją przeprowadzić do sąsiedniej komórki dopiero wtedy, gdy konfigurację krzyżową słabych wiązań doprowadzi się do konfiguracji w kształcie paska.

We wszystkich dotychczasowych próbach obliczenia naprężenia Peierlsa uwzględniano tylko oddziaływania dwuciałowe. Jest rzeczą prawdopodobną, że przynajmniej w jądrze dyslokacji i jego najbliższym otoczeniu dużą rolę odgrywają oddziaływania wielociałowe. Tak więc, nie będzie można mówić o pełnym sukcesie dopóty, dopóki nie zostanie rozwiązane zadanie oddziaływania wielu ciał. Na obecnym etapie pozostaje tylko nadzieja, że do wygładzenia krzywej $\sigma_p(\gamma)$ być może wystarczy uwzględnienie oddziaływania dalszych sąsiadów.

Literatura cytowana w tekście

1. Ю. И. ФРЕНКЕЛЬ, *Введение в теорию металлов*, Государственное Издательство Физико-Математической Литературы, Москва 1958, стр. 345-358.
2. R. HOBART, V. CELLI, *J. Appl. Physics*, **33**, 60 (1962).
3. R. HOBART, *J. Appl. Physics*, **36**, 1944 (1965).
4. R. HOBART, *J. Appl. Physics*, **36**, 1948 (1965).
5. R. HOBART, *J. Appl. Physics*, **37**, 3573 (1966).
6. R. HOBART, w: *Dislocation Dynamics*, Battelle Institute Material Science Colloquia, May 1-6, 1967, A. R. ROSENFELD, G. T. HAHN, A. L. BEMENT Jr., R. I. JAFFEE, Eds., McGraw-Hill 1968, s. 161-173.
7. J. KRATOCHVIL, V. L. INDENBOM, *Czech. J. Phys.*, **B13**, 844 (1963).
8. J. H. WEINER, W. T. SANDERS, *Phys. Rev.*, **134**, A 1007 (1964).
9. D. ROGULA, w: *Teoria defektów w ośrodkach stałych*, Ossolineum, 1973, s. 260 - 273, 285 - 292.
10. L. LEJČEK, *Czech. J. Phys.*, **B22**, 802 (1972).
11. F. KROUPA, L. LEJČEK, *Czech. J. Phys.* **B22**, 813 (1972).
12. J. P. HIRTH, J. LOTHE, *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill 1968, s. 214 - 224.
13. A. A. MARADUDIN, *J. Phys. Chem. Solids*, **9**, 1 (1959).
14. R. BULLOUGH, V. K. TEWARY, Reprint T. P. 547, Theoretical Physics Division, U.K.A.E.A. Research Group, Harwell (1973).
15. V. CELLI, *J. Phys. Chem. Solids*, **19**, 100 (1961).
16. A. HÖLZLER, R. SIEMS, w: *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, J. A. SIMONS, R. de WIT, R. BULLOUGH, Eds., Nat. Bur. Stand. U.S. Spec. Publ. 317, 1970, tom I, s. 291-298.
17. W. T. SANDERS, *Phys. Rev.*, **128**, 1540 (1962).
18. D. ROGULA, *Biuletyn WAT*, **XVI**, **3**, 175 (1967).
19. R. KOTOWSKI, *Rozprawa doktorska*, IPPT PAN, Warszawa 1976.
20. *Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects*, Battelle Institute Material Science Colloquia, June 14 - 19, 1971, P. R. GEHLEN, J. R. BEELER Jr., R. I. JAFFEE, Eds., Plenum Press. N. Y., 1972.
21. *Машинное моделирование при исследовании материалов*, Сборник переводов под редакцией Д. Б. Позднеева, Мир, Москва 1974.
22. V. VITEK, *Crystal Lattice Defects*, **5**, 1 (1974).
23. C. TEODOSIU, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **4**, L225 (1974).
24. C. TEODOSIU, V. NICOLAE, *Rev. Roum. Sci. Tech.-Mec. Appl.*, **17**, 919 (1972).
25. C. TEODOSIU, V. NICOLAE, P. PAVEN, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **27**, 191 (1975).
26. Z. S. BASIŃSKI, M. S. DUESBERY, R. TAYLOR, *Can. J. Phys.*, **49**, 2160, (1971).
27. Z. S. BASIŃSKI, M. S. DUESBERY, R. TAYLOR, w [20], s. 537 - 551.

Резюме

ДИСКРЕТНЫЕ МОДЕЛИ ДИСЛОКАЦИЙ

В работе рассмотрены дискретные модели дислокаций Френкля-Конторовой, Пайерлса-Набарро, Марадудина, Сандерса и Рогули. Приведен краткий обзор попыток расчета напряжения Пайерлса в этих моделях.

Summary

DISCRETE MODELS OF DISLOCATIONS

The Frenkel-Kontorova, Peierls-Nabarro, Maradudin, Sanders and Rogula discrete models of dislocations are discussed. Attempts to calculate Peierls stress in these models are briefly reviewed.

INSTYTUT PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI PAN
WARSZAWA

Praca została złożona w Redakcji dnia 8 kwietnia 1977 r.