

538.911

**ЗАРЯЖЕННЫЕ ДИСЛОКАЦИИ И СВОЙСТВА
ЩЕЛОЧНОГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛОВ*****Н. А. Тяпунина, Э. П. Белозерова*****СОДЕРЖАНИЕ**

| | |
|---|-----|
| 1. Введение | 683 |
| 2. Теория заряженных дислокаций | 684 |
| 2.1. Тонкая структура дислокаций в ЩГК. Влияние примесей на заряд дислокаций. 2.2. Теоретические модели стационарных заряженных дислокаций. 2.3. Влияние электрического поля на элементарные акты пластической деформации. Особенности движения заряженных дислокаций. 2.4. Прямой и обратный дислокационные пьезоэффекты. Электроакустическая петля. | |
| 3. Экспериментальные данные о поведении заряженных дислокаций и их влиянии на свойства ЩГК | 705 |
| 3.1. Исследование электрических эффектов при приложении механической нагрузки. 3.2. Исследование дислокационной деформации в ЩГК при приложении электрического поля. 3.3. Совместное влияние электрического поля и механической нагрузки. 3.4. Влияние электрического поля на механические свойства ЩГК. | |
| 4. Заключение | 714 |
| Список литературы | 715 |

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что способность кристаллов к пластической деформации во многом обусловлена подвижными дислокациями. Движение и взаимодействие дислокаций определяют не только изменение формы, но и реальную атомную структуру и многие физические свойства кристаллов. Динамика дислокаций поэтому в настоящее время относится к наиболее интенсивно развивающимся разделам физики твердого тела. Закономерности динамики дислокаций определяются характером межатомных сил связи в твердых телах. В кристаллах с гетерополярной связью, к которым относятся и кристаллы щелочных галоидов (ЩГК), дефекты, в том числе и дислокации, несут электрический заряд. Это вносит особенности в движение и взаимодействие дислокаций и приводит к появлению «перекрестных» эффектов, таких как перенос заряда при приложении механических нагрузок и пластическое течение под действием электрического поля. Эти эффекты, открытие которых связано с именами А. Ф. Иоффе¹, А. В. Степанова^{2,3} и Дюлаи и Хартли⁴, привлекают пристальное внимание исследователей в связи с широким использованием ЩГК в инфракрасной и лазерной технике, изготовлением на их основе твердотельных аккумуляторов и т.д.

Прогресс в изучении и объяснении электрических явлений в ЩГК во многом связан с успехами, достигнутыми за последние годы в исследовании заряженных дислокаций. В предлагаемом обзоре дается последовательное изложение теоретических и экспериментальных работ по заряженным ди-

сложениям, проводимых как в нашей стране, так и за рубежом. Основное внимание уделено фундаментальным работам, выполненным в последние годы. Обзоры более ранних работ появлялись в 1958^{5,6}, 1968⁷, 1974⁸ и 1975⁹ гг.

2. ТЕОРИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЙ

2.1. Тонкая структура дислокаций в ЩГК. Влияние примесей на заряд дислокаций. Ионные кристаллы состоят из разноименных заряженных ионов. Появление дефектов в таком кристалле (точечные дефекты, дислокации, границы блоков и т. д.) нарушает зарядовое равновесие, поэтому дефекты, в том числе и дислокации, приобретают электрический заряд. Заряд на краевой дислокации переносится при

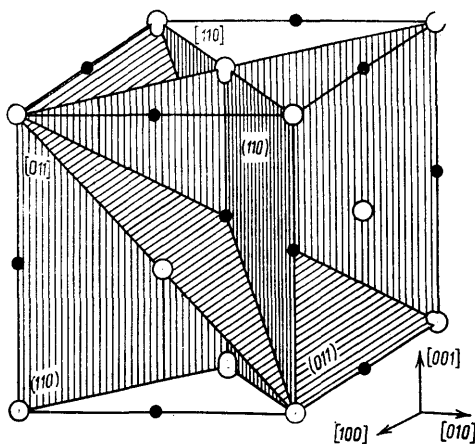


Рис. 1. Системы легкого скольжения в ЩГК.
Плоскости спайности $\{100\}$

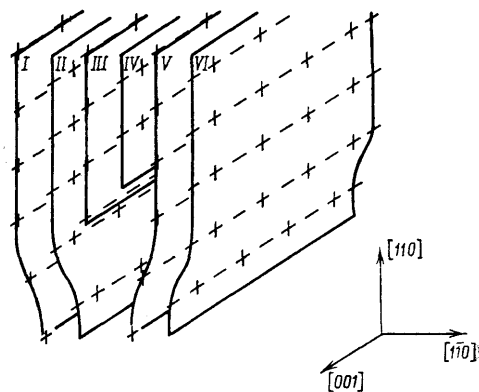


Рис. 2. Краевая дислокация с $\Delta l = [001]$ и $b = (a/2) [\bar{1}10]$ в ЩГК.

Ионная решетка образована совокупностью плоскостей $\{110\}$. Видны две полуплоскости $\{110\}$, с помощью которых образована дислокация. Плоскость спайности $\{001\}$ перпендикулярна дислокации

ее движении, винтовые дислокации не переносят заряд. Основное внимание в обзоре уделено динамическим эффектам, поэтому винтовые дислокации в дальнейшем рассматриваться не будут.

Плоскостями легкого скольжения, в которых преимущественно движутся краевые дислокации в ЩГК, являются плоскости $\{110\}$. Эти плоскости представлены на рис. 1. Направление краевой дислокации задается единичным вектором $\Delta l \langle 100 \rangle$, ее вектор Бюргерса $b = \left(\frac{a}{2}\right) [\bar{1}10]$ (a — период решетки) не является наименьшим вектором трансляции. Это объясняется тем, что направление вектора b в ЩГК определяется не только из условия минимума энергии дислокации, но и из условия электронейтральности. Условие электронейтральности накладывает определенные требования и на геометрию краевой дислокации. Ее можно создать введением двух дополнительных полуплоскостей $\{110\}$ или одной полуплоскости $\{100\}$. Край лишней полуплоскостей $\{110\}$ располагаются на разных уровнях⁶. На рис. 2 представлена прямолинейная краевая дислокация в структуре NaCl с вектором $\Delta l = [001]$ и вектором Бюргерса $b = \left(\frac{a}{2}\right) [\bar{1}10]$. Ионная решетка изображена совокупностью плоскостей $\{110\}$. Плоскость спайности $\{001\}$ перпендикулярна дислокации. Расположение ионов в ядре дислокации системы скольжения $\{110\} \langle 1\bar{1}0 \rangle$ и энергия ядра в NaCl впервые были рассчитаны в¹⁰. Границы

лишних полуплоскостей, из которых составлена дислокация, представляют цепочку диполей; если чередование зарядов в цепочке не нарушается, дислокация не заряжена. Нарушение периодичности может быть обусловлено ступеньками, т. е. короткими участками краевой дислокации, с помощью которых она переходит в соседние, параллельные плоскости скольжения^{11,12}. Существует два типа ступенек. Первый тип отвечает излому на обеих полуплоскостях, с помощью которых представляется дислокация. Высота такой ступеньки равна $a\sqrt{2}/2$. Поскольку такая ступенька (называемая полной ступенькой) производит две инверсии зарядов противоположного знака, она оказывается нейтральной. Второй тип соответствует излому только на одной полуплоскости и называется «полуступенькой», ее высота равна $a\sqrt{2}/4$.

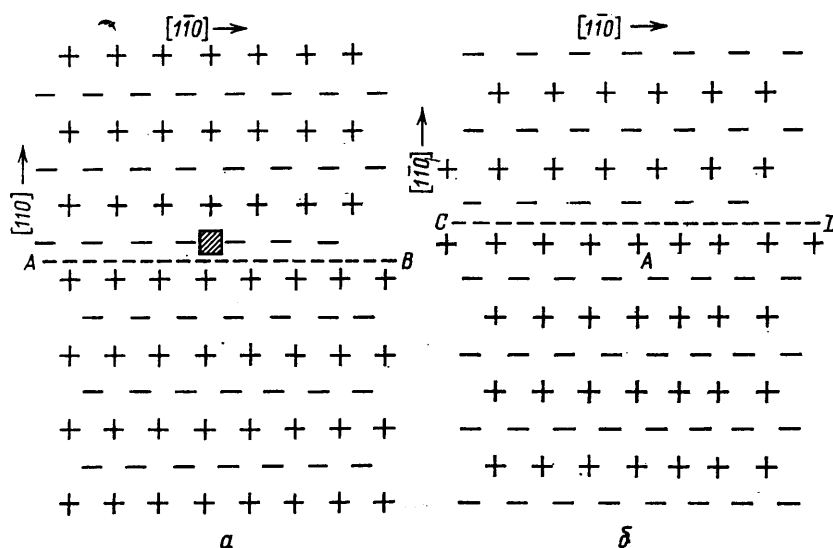


Рис. 3. Расположение ионов в соседних плоскостях (100) в ШГК при переходе краевой дислокации в соседнюю плоскость скольжения с помощью заряженной «полуступеньки»

На рис. 3, а, б показано расположение ионов в двух соседних плоскостях (100) там, где дислокация содержит полуступеньку. Плоскость рисунка соответствует (100). Плоскость скольжения перпендикулярна направлению [110]. Она также претерпевает излом (следы плоскостей скольжения АВ и CD). Линия дислокации перпендикулярна плоскости чертежа, направление скольжения [110]. Как видно из рис. 3,а, в определенной точке дислокации появляется «дефект», который можно назвать «зарождающейся» вакансией, он представлен заштрихованным квадратом. В соседней плоскости (100) (см. рис. 3,б) напротив него располагается положительный ион А. Случай на рис. 3 отвечает «зарождению» анионной вакансии и появлению положительного заряда у полуступеньки. Аналогично вблизи «дефекта», отвечающего «зарождению» катионной вакансии, располагается отрицательный заряд. Заряды у «зарождающихся» вакансий обоих типов равны по величине и противоположны по знаку; пусть значения этих зарядов $\pm q$. Добавление иона противоположного знака к полуступеньке изменяет знак ее заряда, т. е. тип «зарождающейся» вакансии, так что

$$\pm q \mp e = \mp q.$$

Отсюда следует, что заряд полуступеньки равен $\pm e/2$, т. е. половине заряда электрона. Ступеньки на краевых дислокациях в ШГК могут возникать за счет термической активации или при пересечении дислокаций. Возможные типы ступенек, возникающих при пересечении дислокаций, рассмотрены в¹³. Избыток полуступенек одного знака делает дислокацию заряженной.

Заряд дислокации может изменяться за счет диффузии ионов к полуступеньке. Бассани и Томсон¹⁴ показали, что заряд на краевой дислокации в ЩГК может быть обусловлен также излишком вакансий одного знака в ее ядре. Это имеет место, например, при введении в кристалл атомов двухвалентных примесей. Атомы двухвалентных металлов занимают катионные узлы решетки, и для сохранения нейтральности необходимо создание одной катионной вакансии на каждый примесной ион. В таком примесном кристалле число катионных вакансий превосходит число анионных вакансий в ядре краевой дислокации примесного кристалла определяет ее заряд. Заряд дислокации изменяется при изменении количества заряженных «дефектов» в ее ядре. Поскольку энергия создания вакансии в ядре дислокации отличается от энергии образования пары самостоятельных полуступенек одного знака, вакансии и полуступеньки выделяют в самостоятельные типы «дефектов».

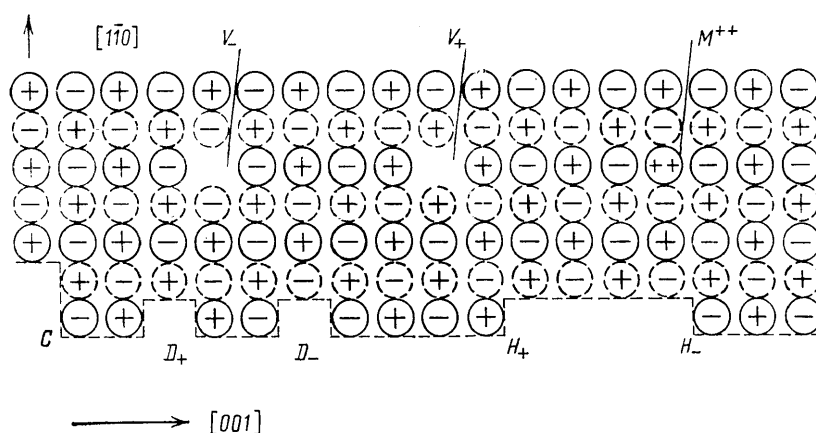


Рис. 4. Тонкая структура края экстраплоскости (110) краевой дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = (a/2) [110]$.

Сплошные кружки — ионы, расположенные в плоскости бумаги, штриховые — лежащие на $b/2$ ниже этой плоскости. Представлены также дефекты в объеме, окружающем дислокацию

На рис. 4 представлена проекция экстраплоскости (110) краевой дислокации с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = (a/2) [110]$ на плоскость рисунка. Ионы, расположенные в плоскости бумаги, обозначены сплошными кружками, пунктиром показаны ионы, лежащие на расстоянии $b/2$ ниже плоскости рисунка. «Дефекты» на дислокации определяют тонкую структуру края экстраплоскости. К их числу относятся: полная, незаряженная ступенька С, положительно и отрицательно заряженные ступеньки H_+ и H_- , анионная вакансия D_+ , несущая положительный заряд, и катионная вакансия D_- , заряженная отрицательно. Здесь же представлены дефекты вдали от дислокации: M^{++} — ион двухвалентной примеси, V_+ и V_- — анионная и катионная вакансии.

2.2. Теоретические модели стационарных заряженных дислокаций. Поверхность щелочно-галогидного кристалла, так же как и краевая дислокация, может нести электрический заряд. Исторически теории заряженных дислокаций в ЩГК предшествовали исследования зарядов на его поверхности.

2.2.1. Распределение заряда у плоской поверхности ЩГК. Впервые распределение заряда и потенциала у плоской поверхности ЩГК было рассмотрено Леховском¹⁵. Леховек исходил из предположения, что катионные и анионные вакансии в кристалле могут появляться независимо друг от друга и энергии их образования различны¹⁶. Равновесное количество вакансий каждого сорта в единице объема кристалла $n_{1,2}$ определяется из условия ми-

нимума термодинамического потенциала \mathcal{G} , при этом допускается его варьирование отдельно по n_1 и n_2 . Согласно¹⁷ для вырывания катиона из узла решетки требуется меньшая энергия, поэтому возникает избыток катионных вакансий и для сохранения электрической нейтральности в объеме часть вакансий должна перейти к поверхности кристалла, т. е. она оказывается заряженной. У поверхности возникает пространственный заряженный слой. Концентрации катионных и анионных вакансий в таком слое оказываются различными. Распределение потенциала в заряженном слое определяют из решения уравнения Пуассона. Задача о нахождении потенциала имеет точное аналитическое решение¹⁵.

И. М. Лифшицем и Я. Е. Гегузиным показано, что предположения, положенные в основу расчета¹⁵, некорректны¹⁸. Лишено смысла говорить о выходе на поверхность кристалла вакансий одного сорта, так как это привело бы к появлению макроскопического слоя ионов одного сорта. Нельзя также вводить раздельно понятия об энергиях активации вакансий каждого сорта и термодинамический потенциал не может варьироваться самостоятельно по n_1 и n_2 . Согласно¹⁸, число узлов в решетке $2N$ считается независимым внутренним параметром, причем учитывается, что в упорядоченной структуре

$$n_1 + N_1 = n_2 + N_2; \quad (2.1)$$

здесь $N_{1,2}$ — число атомов каждого сорта в единице объема. Термодинамический потенциал системы

$$\mathcal{G}(N_1, N_2, N) = \mu_0 N - kT \ln w_1 - kT \ln w_2 - n_1 g_1 - n_2 g_2;$$

здесь μ_0 — химический потенциал пары разноименных атомов, $g_{1,2}$ — характерная энергия дефекта, $k \ln w_{1,2}$ — вклад катионных и анионных вакансий в конфигурационную энтропию. Для случая слабого раствора ($n_{1,2} \ll N_{1,2}$) термодинамическая вероятность

$$w_{1,2} = n_{1,2} \ln \frac{n_{1,2}}{eN}, \quad (2.2)$$

e — основание натурального логарифма. Из условия равновесия системы

$$\left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial N} \right)_{N_1, N_2} = 0 \quad (2.3)$$

следует выражение для «произведения растворимостей»

$$\alpha_1(\infty) \alpha_2(\infty) = e^{-U/kT} = \alpha_0^2; \quad (2.4)$$

здесь

$$U = \mu_0 - (g_1 + g_2),$$

$$\alpha_1(\infty) = \frac{n_1}{N}, \quad (2.5)$$

$$\alpha_2(\infty) = \frac{n_2}{N}. \quad (2.6)$$

U — энергия создания пары Шоттки за счет удаления одного аниона и одного катиона из нормальных узлов решетки и помещения их в новые узлы на поверхности кристалла. Из «произведения растворимостей» следует, что вакансии могут рождаться только парами, и поэтому заряд на поверхности кристалла не может возникнуть. Появление заряда у поверхности ШГК, согласно¹⁸, обусловлено тем, что в тонком поверхностном слое порядка нескольких межатомных расстояний (в дальнейшем называемом собственным поверхностным слоем) энергия взаимодействия ионов иная, чем в объеме кристалла. Вследствие этого равновесная концентрация вакансий каждого сорта у поверхности будет отличаться от концентрации в объеме. Это приводит к образованию электрического заряда на поверхности, появлению

электрического поля и перераспределению вакансий в приповерхностном слое толщиной дебаевского радиуса экранирования.

Химические потенциалы дефектов в объеме

$$\mu_1(\infty) = \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial N_1} \right)_{N, N_2} = kT \ln \alpha_1(\infty) + g_1, \quad (2.7)$$

$$\mu_2(\infty) = \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial N_2} \right)_{N, N_1} = kT \ln \alpha_2(\infty) + g_2. \quad (2.8)$$

Химические потенциалы в собственно поверхностном слое

$$\mu_{1,2} = kT \ln \alpha_{1,2}(x) \pm e\varphi(x) \pm g_{1,2} - \Delta g_{1,2}(x);$$

здесь x — координата, отсчитываемая от поверхности в глубь кристалла, $\Delta g_{1,2}(x)$ — изменение характерной энергии дефекта в собственно поверхностном слое, $\Delta g_{1,2}(x) = 0$ при $x \gg a$, $\varphi(x)$ — электрический потенциал. Условие постоянства химического потенциала вблизи поверхности и в объеме кристалла

$$\mu(x) = \mu(\infty) \quad (2.9)$$

приводит к следующему равновесному значению концентрации вакансий в собственно поверхностном слое:

$$\alpha_{1,2}(x) = \alpha_0 e^{\pm \chi} (1 + aF_{1,2}^* \delta(x)); \quad (2.10)$$

здесь α_0 определяется формулой (2.4),

$$\chi = -\frac{e}{kT} (\varphi(x) - \varphi(\infty)),$$

$$\begin{aligned} \delta(x) &= 1, \quad x \leq a, \\ &= 0, \quad x > a. \end{aligned}$$

Функция $F_{1,2}^*$ определяется соотношением

$$aF_{1,2}^* = \int_0^\infty \exp\left(\frac{\Delta g_{1,2}}{kT} - 1\right) dx.$$

В кристалле возникает распределение заряда

$$\rho(x) = \frac{2e\alpha_0}{\Omega} \left[\operatorname{sh} \chi + \frac{a}{2} (F_1^* - F_2^*) \right] \delta(x),$$

$\Omega = a^3$ — атомный объем. Распределение электрического потенциала находят из решения уравнения Пуассона с граничными условиями

$$\chi(\infty) = 0, \quad \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} \right)_\infty = 0.$$

Расчет показывает, что вблизи поверхности кристалла образуется двойной электрический слой, причем заряд собственно поверхностного слоя компенсируется зарядом у поверхности.

Таким образом, из теории Лифшица и Гегузина следует, что заряд и потенциал поверхности ЩГК определяется не только объемными свойствами, но и свойствами поверхности.

2.2.2. Модель дислокации в виде заряженной нити. Первым теоретическим исследованием заряженных дислокаций явилась работа Эшелби и др.¹⁹. В¹⁹ дислокация рассматривается как бесконечная заряженная нить, окруженная непрерывно распределенным зарядовым облаком. Для устранения бесконечности потенциала у самой нити она окружается цилиндрической поверхностью радиуса r_0 и нахождение потенциала у дислокации заменяется задачей определения потенциала у этой поверхности. Механизм образования заряда у дислокации в¹⁹ аналогичен образованию заряда у свободной поверх-

ности ЩГК в¹⁵. Эшелби и др. не учитывают энергию связи дефектов с линией дислокации, поэтому дислокация, так же как и свободная поверхность в¹⁵, является непрерывным источником (стоком) вакансий. Несмотря на некорректность этих положений, работа Эшелби и др. сыграла большую роль в развитии теории заряженных дислокаций, явившись отправным пунктом для последующих теорий. Для приближения к реальной модели в¹⁹ в кристалл включены подвижные атомы двухвалентных примесей. Сохранение электрической нейтральности требует создания одной катионной вакансии на каждый примесный ион, так что $\alpha_1(\infty) = \alpha_2(\infty) + C$, здесь C — концентрация атомов двухвалентных примесей. Как показано в²⁰, в примесном кристалле выполняется формула (2.4), так что

$$\alpha_1(\infty)(\alpha_1(\infty) - c) = \exp\left(-\frac{g_1 + g_2}{kT}\right) = \alpha_0^2.$$

Компенсирующее зарядовое облако состоит из подвижных катионных и анионных вакансий и атомов двухвалентных примесей, его плотность

$$\rho = e(n_M(r) + n_2(r) - n_1(r)), \quad (2.11)$$

$n_M(r)$ — число атомов примеси в единице объема.

Определение равновесного числа дефектов на линии дислокации и в зарядовом облаке должно проводиться с помощью минимизации термодинамического потенциала. В общем случае термодинамический потенциал можно представить в виде суммы трех членов

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_d + \mathcal{G}_c + W; \quad (2.12)$$

\mathcal{G}_d включает энергию образования и энтропийный член для дефектов на дислокации, \mathcal{G}_c — для зарядового облака; W — энергия электростатического взаимодействия системы дислокация — зарядовое облако. В W входят потенциальная энергия электростатического взаимодействия дислокации W_d и зарядового облака W_c . Согласно¹⁹, уравнение (2.12) сводится к $\mathcal{G} = \mathcal{G}_c + W$, причем

$$\mathcal{G}_c = \int_0^R g_{1,2} n_{1,2}(r) \cdot 2\pi r dr - kT \ln w_{1,2} - kT \ln w_M.$$

Первый член правой части \mathcal{G}_c есть энергия образования дефектов в облаке, второй и третий — энтропийные члены, рассчитываемые в приближении слабого раствора (см. (2.2)). W сводится к W_c , включающей энергию электростатического взаимодействия зарядов облака между собой $W_{c,c}$ и с дислокационной линией $W_{c,d}$, так что

$$W = W_c = W_{c,c} + W_{c,d} = \int_{r_0}^R \rho \varphi(r) \cdot 2\pi r dr,$$

потенциал $\varphi(r)$ обусловлен зарядами облака и дислокации, R — радиус цилиндра, достаточно удаленного от дислокации. Интегрирование проводится по всему объему цилиндра, за исключением области радиуса r_0 , окружающей дислокационную линию. Общий заряд внутри рассматриваемого объема равен нулю. Решение вариационной задачи с учетом электронейтральности системы и условием сохранения общего количества двухвалентных примесей позволяет определить концентрацию вакансий и двухвалентных примесей в зарядовом облаке¹⁹. Уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon \epsilon_0} \quad (2.13)$$

(ϵ_0 — электрическая постоянная, ϵ — диэлектрическая проницаемость вещества) можно привести к виду

$$\nabla^2 p = - \text{Sh} p \cdot \Lambda^{-1}, \quad (2.14)$$

$$p = \frac{e\varphi}{kT}, \quad \Lambda = \left(\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{2\alpha_1(\infty) Ne^2} \right)^{1/2} \quad (2.15)$$

— радиус облака. Уравнение (2.14) представляется в цилиндрических координатах; точное решение его возможно лишь при $p \ll 1$, т. е. $\text{Sh} p \approx p$. Оно имеет вид

$$p = AK_0 \left(\frac{r}{\Lambda} \right) + BI_0 \left(\frac{r}{\Lambda} \right);$$

K_0 и I_0 — модифицированные функции Бесселя нулевого порядка мнимого аргумента. Так как I_0 не имеет конечного предела на бесконечности, ее отбрасывают. Потенциал в зарядовом облаке равен

$$\varphi(r) = A \frac{kT}{e} K_0 \left(\frac{r}{\Lambda} \right).$$

Для нахождения A используют тот факт, что при $r \rightarrow r_0$ потенциал становится равным потенциалу бесконечно длинной заряженной нити. Окончательно

$$\varphi(r) = \frac{Q_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0} K_0 \left(\frac{r}{\Lambda} \right), \quad (2.16)$$

Q_l — заряд на единицу длины дислокационной линии.

Хотя теория Эшелби и др. была развита лишь для случая $e\varphi \ll kT$, не реализуемого уже при комнатной температуре, и рассматривала дислокацию как бесконечный сток вакансий, тем не менее она стимулировала теоретические и экспериментальные исследования по заряженным дислокациям. Большой резонанс имело обнаружение предсказанных в ⁹ изоэлектрических точек, т. е. таких температур T_i , при которых заряд Q_l обращается в нуль. При $T > T_i$, Q_l изменяет знак. Эксперименты, в которых обнаружены изоэлектрические точки, впервые осуществлены Дэвиджем ²¹. Косевич, Маргвелашвили и Саралидзе ^{22,23} решили задачу о распределении заряда и потенциала вокруг краевой дислокации в ЦГК с учетом энергии упругого взаимодействия катионных и анионных вакансий с дислокацией $W_{1,2}$. При рассмотрении возникновения заряда на дислокации авторы используют модель Лифшица и Гегузина ¹⁸, представляя дислокацию как выделенную поверхность, вблизи которой энергия образования дефектов иная, чем в объеме кристалла. Равновесные концентрации вакансий имеют вид

$$\alpha_{1,2} = \alpha_0 \left(\exp \frac{\pm e\varphi - W_{1,2}}{kT} \right) [1 + aF_{1,2}^* \delta(r - r_0)].$$

Безразмерная функция $F_{1,2}^*$ имеет тот же смысл, что и в формуле (2.10), т. е. она связана с изменением характерной энергии вакансий у поверхности радиуса r_0 , окружающей дислокации. При определении $W_{1,2}$ вакансии моделируются как центры дилатации, вызывающие неупругое изменение объема среды. Энергия упругого взаимодействия такого дефекта с краевой дислокацией ²⁴

$$W_{1,2} = \frac{A_{1,2} \sin \psi}{r}, \quad A_{1,2} = -\Delta V_{1,2} \frac{Gb(1+\nu)}{3\pi(1-\nu)};$$

здесь ψ — угол, отсчитываемый от вектора Бюргера в плоскости, перпендикулярной линии дислокации, r — расстояние от оси дислокации до рассматриваемой точки, G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, $\Delta V_{1,2}$ — изменение объема среды в месте нахождения вакансии. Решение

уравнения Пуассона при условии $e\varphi \ll kT$, $W_{1,2} \ll kT$ показывает, что учет упругого взаимодействия приводит к перераспределению заряда в объеме и к нарушению аксиально-симметричного распределения потенциала. Аналогичные результаты были получены Коломийцевым²⁵, который показал также, что на малых расстояниях от оси краевой дислокации (до $\sim 30 \text{ \AA}$) на распределение потенциала и заряда значительное влияние оказывает модульный эффект, обусловленный различием упругих модулей дефектов и матрицы²⁶.

2.2.3. Учет тонкой структуры заряженной дислокации. Идеи о связи тонкой структуры краевой дислокации с ее зарядом^{11,12,14} получили дальнейшее развитие в работах Уитворта^{27,28}. В²⁷ полагается, что заряд дислокации обусловлен заряженными ступеньками и вакансиями (см. рис. 4), которые для краткости будут называться «дефектами» на дислокации. Зарядовое облако, как и в¹⁹, состоит из подвижных катионных и анионных вакансий и подвижных атомов двухвалентных примесей. При расчете заряда и потенциала у линии дислокации вводятся следующие характерные параметры: $\gamma_{1,2}$ — количество отрицательно и положительно заряженных ступенек на единицу длины дислокации; $\beta_{1,2}$ — количество отрицательно и положительно заряженных вакансий на единицу длины дислокации; $\Gamma = 1/a$ — количество атомных плоскостей на единицу длины; $\pm q$ — заряд ступеньки или вакансии, J — энергия создания пары заряженных ступенек противоположного знака; g_1 — энергия создания катионной вакансии за счет перезарядки отрицательно заряженной ступеньки; g_2 — энергия создания анионной вакансии за счет перезарядки положительно заряженной ступеньки; $(g_1 + g_2)$ — энергия создания пары Шоттки в объеме кристалла; B_1 — энергия ассоциации дислокации и катионной вакансии; B_2 — энергия ассоциации дислокации и анионной вакансии; $\mathcal{L} = (g_1 + g_2) - (B_1 + B_2)$ — энергия создания пары Шоттки у линии дислокации. В рассматриваемой модели дислокации уже не являются бесконечными источниками (стоками) вакансий. В выражении для термодинамического потенциала (2.12) член \mathcal{G}_c имеет такой же вид, как и в¹⁹. При определении \mathcal{G}_d предполагается, что ступеньки и вакансии вдоль дислокации распределены равномерно и их вклад в конфигурационную энтропию может быть записан в приближении слабого раствора, так что

$$\mathcal{G}_d = \frac{1}{2} J (\gamma_1 + \gamma_2) + (g_{1,2} - B_{1,2}) \beta_{1,2} - kT \gamma_{1,2} \ln \frac{e\Gamma}{\gamma_{1,2}} - kT \gamma_{1,2} \ln 2 - kT \frac{e\Gamma}{\beta_{1,2}}.$$

Энергия $W = W_c + W_d$, W_c записывается так же, как и в¹⁹, $W_d = Q_l \Phi_0$ — потенциальная энергия заряженной дислокации, обусловленная взаимодействием ее зарядов между собой и с зарядовым облаком. Здесь Φ_0 — потенциал у линии дислокации,

$$Q_l = \frac{1}{2} e (\gamma_2 - \gamma_1) + e (\beta_2 - \beta_1). \quad (2.17)$$

Определяя $\gamma_{1,2}$ и $\beta_{1,2}$ из решения вариационной задачи для термодинамического потенциала и подставляя в (2.17), Уитворт²⁷ находит

$$Q_l = 2e\Gamma \left\{ e^{-J/2kT} \operatorname{sh} \left[\frac{(\Delta g/2) - e\Phi_0}{kT} - \frac{1}{2} \eta \right] + e^{-L/2kT} \operatorname{sh} \left[\frac{(\Delta B/2) - e\Phi_0}{kT} - \eta \right] \right\}; \quad (2.18)$$

здесь

$$\Delta g = g_2 - g_1, \quad \Delta B = B_2 - B_1, \quad \eta = \ln \frac{\alpha_1(\infty)}{\alpha_0}.$$

Первый член формулы обусловлен заряженными ступеньками, второй — вакансиями на дислокации. Для определения Φ_0 дислокация окружается выделенной поверхностью, радиус которой r_l выбирается так, что $l \ll r_l \ll \Lambda$,

l — расстояние между соседними дефектами на дислокации. При $r < r_1$ электрическое поле создается только зарядами на линии дислокации, при $r > r_1$ учитывается также влияние зарядового облака. Φ_0 отличается от потенциала в ¹⁹ поправкой на дискретность в распределении зарядов на дислокационной линии, т. е.

$$\Phi_0 = \frac{Q_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0} K_0\left(\frac{r_1}{\Lambda}\right) + (\psi_2 - \psi_1);$$

здесь ψ_1 — потенциал у выделенной поверхности, рассчитываемый в предположении, что дислокационная линия включает $2M$ зарядов, распределенных вдоль нее равномерно со средней линейной плотностью Q_l . При $x \gg r_1$

$$\psi_1 = \frac{Q_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \ln \frac{2Ml}{r_1}. \quad (2.19)$$

При определении ψ_2 считается, что радиус r_1 стремится к нулю и заряды на дислокации распределены дискретно. ψ_2 полагается равным $(\psi_{2\max} + \psi_{2\min})/2$; здесь $\psi_{2\min}$ есть потенциал в центре зазора длины $2l$ между дискретными зарядами, так что

$$\psi_{2\min} = \frac{Q_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \sum_{n=1}^M \frac{1}{n}. \quad (2.20)$$

Для определения $\psi_{2\max}$ пробный заряд q помещается в точку между двумя соседними зарядами на дислокационной линии. Для равномерного распределения зарядов система должна отрелаксировать, т. е. каждый ее заряд сместится на $l/2$, так что

$$\psi_{2\max} = \frac{Q_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \left(\sum_{n=1}^{2M} \frac{2}{n} - \sum_{n=1}^M \frac{1}{n} \right). \quad (2.21)$$

Используя (2.20) и (2.21), находят ψ_2 , которое для больших M записывается в виде

$$\psi_2 = \frac{Q_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0} (\ln M + \ln 2 + C), \quad (2.22)$$

где $C = 0,5772$ — константа Эйлера. С учетом (2.19) и (2.22) при $r \ll \Lambda$

$$\Phi_0 = \frac{Q_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \left(K_0\left(\frac{q}{\Lambda Q_l}\right) + C \right). \quad (2.23)$$

Q_l и Φ_0 определяются из графического решения уравнений (2.18) и (2.23), задавая значения J , g_1 , g_2 , B_1 , B_2 , η , Λ . Оценка Φ_0 с помощью (2.18) по экспериментальным данным Q_l ²⁹ для NaCl при комнатной температуре ($\alpha, (\infty) = 5 \cdot 10^{-5}$, $Q_l = -2 \cdot 10^{-11}$ Кл м⁻¹ ²⁹) в предположении, что Q_l обусловлен только катионными вакансиями и с учетом $B_1 = 6,4 \cdot 10^{-20}$ Дж¹⁴ и $\Gamma = 3,55 \cdot 10^9$ м⁻¹, дает $\Phi_0 = 0,24$ В. Следовательно, условие $e\Phi_0 \ll kT$, необходимое для линеализации уравнения (2.13), не удовлетворяется.

В работе ²⁸ рассмотрена более общая форма зарядового облака, отличающаяся от ²⁷ тем, что кроме подвижных катионных вакансий введены неподвижные двухвалентные примеси, они могут быть как в свободном состоянии, так и образовывать электрические диполи с катионными вакансиями. Тонкая структура дислокации представлена в виде одного типа заряженных «дефектов», которые взаимодействуют между собой. В ²⁸ учтено парное электростатическое взаимодействие дефектов. Предложенная в ²⁸ модель позволяет рассматривать не только ионные кристаллы, но и полупроводники. Пусть n_0 — общее количество двухвалентных примесей в единице объема, оно одинаково и в зарядовом облаке, и за его пределами; $n_1(\infty)$ — количество катионных вакансий в единице объема вдали от облака, $\tilde{n}_M(\infty)$ и $(n_0 -$

— $\tilde{n}_M(\infty)$) — соответственно количество свободных примесей и диполей. При описании зарядового облака вводятся следующие параметры:

\tilde{n}_M — количество примесей в свободном состоянии; $(n_0 - \tilde{n}_M(r))$ — количество диполей в единице объема;

$n_1(r)$ — количество подвижных катионных вакансий в единице объема определяется из решения вариационной задачи¹⁹ и выражается формулой

$$n_1(r) = n_1(\infty) e^{-\Phi(r)/kT}. \quad (2.24)$$

Согласно условию электронейтральности

$$n_1(\infty) = \tilde{n}_M(\infty). \quad (2.25)$$

Концентрации ассоциированных и свободных дефектов связаны законом «действующих масс»²⁰, на основании которого

$$\frac{n_1(r) \tilde{n}_M(r)}{n_0 - \tilde{n}_M(r)} = \frac{n_1(\infty) \tilde{n}_M(\infty)}{n_0 - \tilde{n}_M(\infty)}. \quad (2.26)$$

Используя (2.24), (2.25) и (2.26), Уитворт²⁸ выражает n_M в виде

$$n_M = \frac{n_1(\infty) \exp(-e\Phi(r)/kT)}{1 + h [\exp(-e\Phi(r)/kT) - 1]}. \quad (2.27)$$

Плотность зарядов в облаке

$$\rho = e(\tilde{n}_M(r) - n_1(r))$$

с учетом (2.27) ρ принимает вид

$$\rho = en_1(\infty) \left\{ \frac{\exp(-e\Phi(r)/kT)}{1 + h [\exp(-e\Phi(r)/kT) - 1]} - \exp \frac{e\Phi(r)}{kT} \right\}; \quad (2.28)$$

здесь $h = \tilde{n}_M(\infty)/n_0$.

Определение потенциала внутри облака проводится без линеализации уравнения Пуассона

$$\frac{d^2 p}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dp}{dr} = \frac{1}{\Lambda^2 (2-h)} \left[e^p - \frac{e^{-p}}{1+h(e^{-p}-1)} \right] \quad (2.29)$$

численными методами с использованием двух граничных условий. Первое граничное условие записывается в форме теоремы Гаусса:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(r \frac{dp}{dr} \right) = \frac{eQ_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0 kT}, \quad (2.30)$$

и учитывается, что при $r \rightarrow 0$ потенциал создается только зарядами дислокации. При рассмотрении процессов внутри облака дислокация принимается за заряженную нить. Второе условие исходит из того, что при $p \ll 1$ и $r \rightarrow \infty$ решение уравнения (2.29) принимает вид $p = AK_0(r/\Lambda)$. Введя безразмерную переменную $s = \ln(r/\Lambda)$, автор²⁸ приводит уравнение (2.29) к виду

$$\frac{d^2 p}{ds^2} = e^{2s} \frac{1}{2-h} \left[e^p - \frac{e^{-p}}{1+h(e^{-p}-1)} \right], \quad (2.31)$$

а граничное условие (2.30) принимает вид

$$\lim_{s \rightarrow -\infty} \frac{dp}{ds} = -\frac{eQ_l}{2\pi\epsilon\epsilon_0 kT} = -H, \quad (2.32)$$

так что при $s \rightarrow -\infty$ кривые $p(s)$ имеют асимптоты, наклон которых при постоянной температуре одинаков для разных h . Значение s_0 , при котором начинает выполняться граничное условие (2.32), зависит от величины h . Уравнение (2.29) решается методом прогонки³⁰.

При рассмотрении дислокации считается³⁰, что она содержит только один тип заряженных дефектов. Пусть M — число таких дефектов на единице длины дислокации. В области примесной проводимости M есть количество катионных вакансий или отрицательно заряженных ступенек; в области собственной проводимости — число анионных вакансий или положительно заряженных ступенек. Поскольку дефекты на дислокации взаимодействуют парами, вводится величина $j = 1, 2, 3 \dots$, так что ja определяет расстояние между дефектами пары. Пусть m_j есть число взаимодействующих пар дефектов с заданным j . Количество способов размещения дефектов такими парами³¹

$$w = \frac{M!}{\prod_j m_j!}. \quad (2.33)$$

Функция

$$f = \frac{M}{N} = \sum_{j=1}^{\infty} m_j \left(\sum_{j=1}^{\infty} j m_j \right)^{-1} \quad (2.34)$$

задает долю мест на дислокации, занятых дефектами; здесь N — общее количество узлов на единицу длины дислокации. Зная f , определяют заряд дислокации

$$Q_l = \frac{q}{a} f. \quad (2.35)$$

Для нахождения равновесного значения f используется условие постоянства химического потенциала у дислокации μ_d и в объеме кристалла $\mu_l(\infty)$:

$$\mu_d = \left(\frac{\partial \mathcal{G}_M}{\partial M} \right)_{n_i(r)}; \quad (2.36)$$

\mathcal{G}_M включает зависящие от M члены термодинамического потенциала в формуле (2.12). Такими членами являются \mathcal{G}_d , W_d и энергия электростатического взаимодействия зарядового облака с дислокацией $W_{c,d}$.

Пусть g_d — характерная энергия одного дефекта; с учетом (2.33) для больших M получаем

$$\mathcal{G}_d = M g_d - k T M \ln \frac{M}{e} + K T \sum_{j=0}^{\infty} m_j \ln \frac{m_j}{e}. \quad (2.37)$$

W_d включает энергию электростатического взаимодействия зарядов дислокации между собой $W_{d,d}$ и с зарядовым облаком $W_{d,c}$:

$$W_d = W_{d,d} + W_{d,c}.$$

При определении W_d сначала предполагается, что дефекты на дислокации распределены равномерно, и находится соответствующая энергия W_u , затем вводится поправка ΔW на парное взаимодействие дефектов, так что

$$W_d = W_u + \Delta W;$$

здесь

$$W_u = \frac{1}{2} M q (\varphi_d + \varphi_c(0)). \quad (2.38)$$

Потенциал φ_d создается зарядами дислокации, $\varphi_c(0)$ — зарядовым облаком. По теореме взаимности Грина³²

$$W_{c,d} = W_{d,c} = \frac{1}{2} M q \varphi_c(0),$$

так что

$$W_u + W_{c,d} = \frac{1}{2} M q \varphi_d + M q \varphi_c(0). \quad (2.39)$$

Энергия ΔW согласно ²⁸ представляет собой энергию парного взаимодействия

$$W_p = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{q^2 m_j}{4\pi\epsilon\epsilon_0 a \cdot j}$$

без учета собственной энергии дефектов

$$W_0 = \frac{Mq^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 l};$$

здесь $l = a/f$ — расстояние между соседними дефектами на дислокации, так что

$$\Delta W = \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 a} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{m_j}{j} - Mf \right). \quad (2.40)$$

Представляя

$$\mathcal{G}_M = \mathcal{G}_M^{(1)} + \mathcal{G}_M^{(2)}, \quad (2.41)$$

где $\mathcal{G}_M^{(1)}$ выражено правой частью формулы (2.39), а $\mathcal{G}_M^{(2)}$ есть сумма правых частей (2.37) и (2.40), записывают

$$\mu_d = \left(\frac{\partial \mathcal{G}_M^{(1)}}{\partial M} \right)_{n_1(r)} + \left(\frac{\partial \mathcal{G}_M^{(2)}}{\partial M} \right)_{n_1(r)}. \quad (2.42)$$

Для нахождения $(\partial \mathcal{G}_M^{(1)} / \partial M)_{n_1(r)}$ необходимо выразить φ_d и $\varphi_c(0)$ в формуле (2.39). За φ_d принимается потенциал, создаваемый зарядами дислокации у поверхности достаточно малого радиуса, при котором удовлетворяется условие (2.32) для потенциала в зарядовом облаке, где кривая $p(s)$ имеет асимптоту с наклоном H . φ_d представляется в виде суммы потенциала бесконечно длинной заряженной нити φ_H и поправки $\Delta\varphi_d$ на дискретность в распределении зарядов на дислокации. $\Delta\varphi_d$ находится как разность потенциалов, выражаемых уравнениями (2.20) и (2.19), так что

$$\varphi_d = \frac{qf}{2\pi\epsilon\epsilon_0 a} \ln \frac{Rf}{2a} + C; \quad (2.43)$$

здесь R — радиус поверхности, достаточно удаленной от зарядового облака, относительно которой рассматривается потенциал. Потенциал зарядового облака у линии дислокации $\varphi_c(0)$ также заменяется потенциалом у поверхности радиуса r_0 . Он представляется в виде разности потенциала $\varphi(r_0)$, получаемого в результате решения уравнения Пуассона (2.31), и потенциала дислокационной линии, представляемой в виде заряженной нити, так что

$$\varphi_c(0) = \varphi(r_0) - \frac{Ql}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (2.44)$$

С использованием (2.43) и (2.44) после несложных преобразований получаем

$$\frac{\partial \mathcal{G}_M^{(1)}}{\partial M} = \frac{p_0 q k T}{e}; \quad (2.45)$$

здесь

$$p_0 = H \ln \frac{\Lambda f}{a} + P,$$

причем

$$\frac{P}{H} = \left(s_0 + C - \ln 2 + \frac{1}{2} \right) + \frac{p(s_0)}{H}.$$

При записи формулы использованы ранее принятые обозначения, т. е.

$$s_0 = \ln \frac{r_0}{\Lambda}, \quad p(s_0) = \frac{e\varphi(r_0)}{kT}.$$

Величина P/H как функция H при различных h представляется графически²⁸. Величина H зависит от f (см. (2.32) и (2.35)), поэтому p_0 является сложной функцией f . Для определения второго члена μ_d (см. (2.42)) находят равновесное число пар m_j . С этой целью из правых частей (2.37) и (2.40) выделяют зависящие от m_j члены и решают вариационную задачу с использованием двух дополнительных условий, выражающих постоянство числа узлов и числа дефектов на дислокации. Решение приводит к выражению

$$m_j = A \exp \left(-\mathcal{H}j - \frac{Q}{j} \right); \quad (2.46)$$

здесь

$$Q = \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 kTa},$$

A и \mathcal{H} — постоянные величины. Используя (2.46), находим

$$\left(\frac{\partial \mathcal{G}_M^{(2)}}{\partial M} \right)_{n_i(r)} = g_d + kT \ln \zeta; \quad (2.47)$$

здесь

$$\ln \zeta = - \ln \sum_{j=1}^{\infty} \exp \left(-\mathcal{H}j - \frac{Q}{j} \right) - 2fQ$$

является функцией f . Таким образом, используя (2.45) и (2.47), автор²⁹ получает

$$\mu_d = \frac{qp_0 kT}{e} + g_d + kT \ln \zeta.$$

Условие равновесия системы принимает вид

$$\frac{\mu_1(\infty) - g_d}{kT} = \ln \zeta + \frac{qp_0}{e},$$

или, с учетом (2.7) и (2.8),

$$p_0 \frac{q}{e} = - \ln \zeta + \left(\frac{\Delta g}{kT} + \ln \alpha_i(\infty) \right); \quad (2.48)$$

здесь $\Delta g = g_i - g_d$ есть энергия ассоциации дефекта у дислокации. Если известно Δg , уравнение (2.48) позволяет графическим способом с использованием зависимости p_0 и $\ln \zeta$ от f найти равновесное значение f , отвечающее определенной концентрации $\alpha_i(\infty)$ при данной температуре. Последовательность операций для нахождения f описана в²⁸. Представляет интерес сравнить значение f , найденное этим способом, с значением, полученным без учета электростатического взаимодействия дефектов на дислокации. Применяя предложенную схему, Уитворт, используя Δg как параметр, определил соответствующие значения f для трех кристаллов NaCl с различной общей концентрацией двухвалентных примесей «с», с различной концентрацией свободных вакансий $\alpha_i(\infty)$ и разными h ²⁸. Характеристики использованных кристаллов представлены в табл. I. Расчет произведен для значения $Q = 16,5$, это соответствует заряду $q = e$ при комнатной температуре. На рис. 5 показана зависимость f от Δg для этих кристаллов в полулогарифмическом масштабе. Штриховая кривая построена для кристалла В без учета взаимодействия между дефектами на дислокации. Видно, что учет электростатического взаимодействия играет большую роль в оценке f , а следовательно, и Q_i .

Таблица I. Характеристики кристаллов, отвечающих кривым рис. 5, $T = 293$ К (область примесной проводимости)

| Кристалл | А | В | С |
|--|-------------------|-------------------|-----------|
| Общая концентрация двухвалентных примесей c | $2 \cdot 10^{-7}$ | $2 \cdot 10^{-5}$ | 10^{-4} |
| Концентрация свободных катионных вакансий $\alpha(\infty)$ | $2 \cdot 10^{-9}$ | $2 \cdot 10^{-8}$ | 10^{-7} |
| Доля свободных примесей в объеме h | 10^{-2} | 10^{-3} | 10^{-3} |
| Отношение радиуса зарядового облака к постоянной решетки Λ | 550 | 174 | 78 |

Зейтц¹¹ и Бассани и Томсон¹⁴ впервые указали на возможность появления заряда на краевой дислокации в ШГК, связав его со ступеньками и вакансиями на дислокации. Вначале теории заряженных дислокаций развивались параллельно теории заряда на поверхности ШГК. В теории Леховека¹⁵ возникновение заряда на поверхности объяснялось различием, в энергиях образования катионных и анионных вакансий в объеме кристалла.

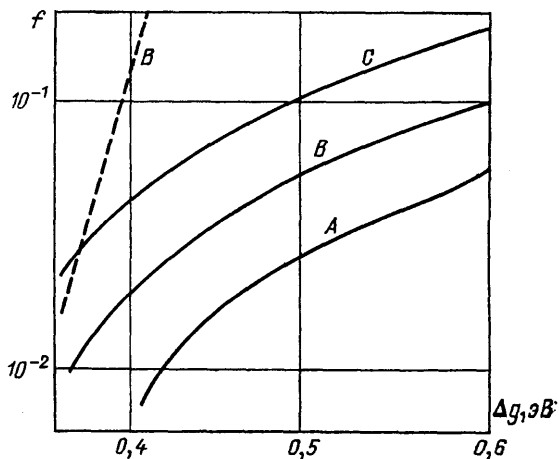


Рис. 5. Зависимость доли мест на дислокационной линии, занятых дефектами от энергии их ассоциации $f(\Delta g)$ для трех образцов.

Характеристики образцов указаны в табл. I. Штриховая кривая построена для кристалла В без учета парного взаимодействия между дефектами

Эшелби и др.,¹⁹ используя модель¹⁵, создают первую теорию заряженных дислокаций, рассматривая дислокацию как заряженную нить. Лифшиц и Гегузин¹⁸ внесли коррективы в¹⁵, показав, что заряд на поверхности ШГК обусловлен не только их объемными свойствами, но и свойствами самой поверхности. Косевич, Маргвелашвили и Саралидзе^{22,23} указывают на возможность перенесения представлений¹⁸ на краевые дислокации в ШГК. Наконец, Уитворт²⁷ получает формулу для заряда на краевой дислокации, связав его с характерными энергиями «дефектов» на дислокации. От заряженной нити к изучению тонкой структуры дислокации — таков тридцатилетний путь, приведший к созданию модели стационарной заряженной дислокации.

2.3. Влияние электрического поля на элементарные акты пластической деформации. Особенности движения заряженных дислокаций. 2.3.1. Силы, действующие на дислокацию. Келером, Моттом и Набарро было введено понятие силы, действующей на дислокацию³³⁻³⁵. Это позволило описывать движение дислокации как протяженного механического объекта. Различают силу самодействия, возникающую при изменении длины или формы дислокации; силу взаимодействия ее с другими дислокациями; силу, возникающую

при приложении внешней механической нагрузки. Согласно формуле Пича — Кёлера сила на единицу длины дислокации $\mathbf{F} = [(\hat{\tau}\mathbf{b}) \Delta\mathbf{l}]$, $\hat{\tau}$ — тензор напряжений. Отсюда сила, действующая на дислокацию в плоскости скольжения, равна

$$F = ((\hat{\tau}\mathbf{b}) \mathbf{n}) [\Delta\mathbf{l}, \mathbf{n}], \quad (2.49)$$

где

$$\mathbf{n} = \frac{[\mathbf{b} \Delta\mathbf{l}]}{|\mathbf{b} \Delta\mathbf{l}|}$$

— единичный вектор нормали к плоскости скольжения. На дислокации в ЩГК действуют силы и за счет присутствия электрического заряда. Если в кристалле создано электрическое поле, то на дислокацию в ее плоскости скольжения действует сила³⁶

$$\mathbf{F} = (Q_l \Delta\mathbf{l}, \mathbf{E}) \mathbf{n} [\Delta\mathbf{l} \mathbf{n}]. \quad (2.50)$$

Действие поля не адекватно влиянию механической нагрузки, так как оно воздействует не только на дислокацию, но и на окружающее ее зарядовое облако и заряженные центры закрепления, вызывая их переориентацию и изменяя их связь с дислокацией.

2.3.2. *Влияние электрического поля на напряжение течения ЩГК.* Для создания механического напряжения, близкого к напряжению течения в ЩГК, требуются электрические поля напряженностью в несколько десятков МВ·м⁻¹. Исследование действия таких высоких полей сопряжено с большими экспериментальными трудностями, поэтому часто прибегают к изучению совместного воздействия механической нагрузки и электрического поля.

Пусть в кристалле, выколоте по плоскостям спайности {100} (рис. 1), создано электрическое поле вдоль направления [010] и приложена механическая нагрузка в направлении [001]. На краевые дислокации с векторами Бюргерса $(a/2) [011]$ и $(a/2) [0\bar{1}1]$, расположенные в плоскостях (011) и $(0\bar{1}1)$, действуют силы, обусловленные как механической нагрузкой, так и электрическим полем. Величина результирующей силы различна для дислокаций разных механических знаков, она может быть записана в виде³⁷

$$\mathbf{F} = \mathbf{b}\tau^* \pm \frac{Q_l \mathbf{E}}{\sqrt{2}}; \quad (2.51)$$

здесь τ^* — эффективное напряжение, под действием которого происходит термически активируемое преодоление препятствий в присутствии электрического поля. Определяемая ими скорость термически активируемого движения дислокации³⁸

$$v = A e^{-\mathcal{G}(\mathbf{F})/kT}, \quad (2.52)$$

где A — постоянная при данной температуре, $\mathcal{G}(\mathbf{F})$ — значение термодинамического потенциала, связанное с преодолением препятствия. Поскольку поле влияет на напряжение старта, например за счет воздействия на центры закрепления дислокаций, то

$$\tau^* = \tau_0^* + \Delta\tau,$$

где τ_0^* — стартовое напряжение при действии только механической нагрузки. Сила, необходимая для преодоления препятствия и начала поступательного движения дислокации в отсутствие поля, есть

$$\mathbf{F}_0 = \mathbf{b}\tau_0^*,$$

дополнительная сила, действующая на дислокации разных механических знаков при создании поля, равна

$$\Delta F = b \Delta \tau \pm \frac{Q_l E}{\sqrt{2}}. \quad (2.53)$$

Термодинамический потенциал $\mathcal{G}(F_0 + \Delta F)$ при наличии электрического поля можно разложить в ряд Тейлора. При подстановке его в (2.52) скорость v окажется зависимой от ряда параметров, связанных с $\mathcal{G}'(F_0)$, $\mathcal{G}''(F_0)$ и т.д. При этом

$$\mathcal{G}'(F_0) = -\frac{m^* k T}{F_0};$$

m^* может быть определена в опытах со ступенчатым нагружением или в экспериментах по ползучести³⁸. Ограничиваясь линейными членами разложения, можно представить скорость дислокаций разных механических знаков в присутствии электрического поля в виде

$$v = v_0 \exp \left[\frac{m^*}{b \tau_0^*} \left(b \Delta \tau \pm \frac{Q_l E}{\sqrt{2}} \right) \right], \quad (2.54)$$

v_0 — скорость в отсутствие поля. Видно, что v является функцией лишь одного контролируемого параметра m^* . Скорость деформации в отсутствие поля при условии, что движутся только краевые дислокации, равна $\dot{\epsilon}_0 = \frac{1}{2} K b v_0$, K — плотность дислокаций. Если количество дислокаций разных механических знаков одинаково и равно $K/2$, скорость деформации в электрическом поле может быть представлена как

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{2} K b v_0 e^{m^* \Delta \tau / \tau_0^*} \operatorname{ch} \frac{m^* Q_l E}{b \tau_0^* \sqrt{2}}. \quad (2.55)$$

Из (2.55) следует, что при поддержании скорости деформации $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0$ наблюдается уменьшение напряжения течения в электрическом поле:

$$\Delta \tau = -\frac{\tau_0^*}{m} \ln \operatorname{ch} \frac{m^* Q_l E}{b \tau_0^* \sqrt{2}}. \quad (2.56)$$

Из (2.56) следует, что при малых полях $E \ll b \tau_0^* \sqrt{2} / m^* Q_l$

$$\Delta \tau = -\frac{1}{4} \frac{m^* Q_l^2 E^2}{\tau_0^* b^2}, \quad (2.57)$$

т.е. напряжение течения изменяется пропорционально квадрату напряженности электрического поля. В случае больших полей

$$\Delta \tau = \frac{\tau_0^*}{m^*} \ln 2 - \frac{Q_l E}{\sqrt{2} b}, \quad (2.58)$$

т.е. убывает с ростом E по линейному закону.

2.3.3. *Влияние зарядового облака на колеблющуюся дислокацию.* При анализе влияния зарядового облака на колеблющуюся дислокацию переходят от термофлуктуационного механизма преодоления препятствий к надбарьерному движению дислокаций. Различают два предельных случая — подвижного и неподвижного облака. В случае неподвижного облака на смещающуюся дислокацию действует возвращающая сила F_b , обусловленная как упругим, так и электростатическим взаимодействиями дислокации и облака. При учете только электростатического взаимодействия

$$F_b = -Q_l \frac{d\varphi_c}{d\xi} \quad (\xi — смещение дислокации).$$

Эта сила может быть представлена как

$$F_b = -K_F \left(\frac{\xi}{\Lambda} \right) \frac{Q_l^2}{2\pi\epsilon\epsilon_0\Lambda};$$

$K_F (\xi/\Lambda)$ — безразмерный параметр. При $\xi \ll \Lambda$, $K_F = K_0 \xi/\Lambda$, K_0 лежит в интервале 1,8—4⁹, так что F_b пропорциональна смещению,

$$F_b = -L\xi, \quad L = K_0 \frac{Q_l^2}{2\pi\epsilon\epsilon_0\Lambda^2}. \quad (2.59)$$

Рассмотрим закрепленный в точках $\pm l/2$ дислокационный сегмент, лежащий в плоскости x, y . Пусть к сегменту приложено напряжение $\tau = \tau_0 e^{i\omega t}$, ω — круговая частота. Дифференциальное уравнение, описывающее движение сегмента, есть

$$A \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} + B \frac{\partial \xi}{\partial t} - T \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + L\xi = b\tau_0 e^{i\omega t}. \quad (2.60)$$

Первый член правой части (2.60) представляет силу инерции ($A = \pi\rho b^2$ — эффективная масса на единицу длины); второй — силу трения, третий член является приближенным выражением для силы самодействия

$$T = \frac{Gb^2}{\pi(1-\nu)},$$

четвертый есть сила со стороны зарядового облака. В области килогерц частота колебаний внешней силы мала по сравнению с резонансной частотой сегмента, поэтому инерционным членом можно пренебречь³⁹. Полагая для простоты силу трения равной нулю, получают решение уравнения:

$$\xi = \frac{\tau b}{L} \left[1 - \frac{\text{ch}(\gamma y)}{\text{ch}(\gamma l/2)} \right], \quad \gamma = \left(\frac{L}{T} \right)^{1/2}. \quad (2.61)$$

Из (2.61) следует, что при $\frac{1}{2}\gamma l \ll 1$, т.е. в случаях малых l , дислокация выгибается наподобие упругой нити, причем ее максимальное смещение $\xi(0) = \tau b l^2 / 8T$. При $\frac{1}{2}\gamma l \gg 1$, т.е. при больших l , $\xi = \tau b / L$, и зарядовое облако играет определяющую роль в ограничении колебательного движения заряженной дислокации. Влияние неподвижного облака может быть изучено методами внутреннего трения при малых амплитудах относительной деформации ϵ_0 при комнатной температуре⁴⁰.

Подвижное облако следует за дислокацией, и протекающие диффузионные процессы приводят к диссипации энергии. Торможение в случае электростатического взаимодействия дислокации с диффузионно подвижным зарядовым облаком впервые рассмотрено Брауном⁴¹. Значение электрического потенциала φ_c , необходимого для определения силы, действующей на дислокацию, определяется из совместного решения уравнения Пуассона (2.13) и уравнения диффузии

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \nabla \left(D \nabla n + n \frac{qD}{kT} \nabla \varphi_c \right) = 0, \quad (2.62)$$

при его написании использовано соотношение Нернста — Эйнштейна между коэффициентом диффузии D и проводимостью σ . Однако решение Брауна строго применимо лишь для случая малых частот колебаний дислокационного сегмента ω . В более общем случае влияние зарядового облака рассмотрено Танибайяши⁴². Он полагает, что облако состоит из двух типов заряженных дефектов противоположного знака. Время релаксации облака

$$\theta = \frac{\Lambda^2}{D}, \quad D = \frac{2D_1 D_2}{D_1 + D_2},$$

D_1 и D_2 — коэффициенты диффузии дефектов каждого типа. Действие облака вызывает силу, зависящую как от смещения, так и от скорости колеблющейся дислокации. При $\omega\theta \gg 1$ облако можно считать неподвижным и действующую со стороны облака силу можно считать состоящей из двух сил, одна из которых пропорциональна смещению,

$$F_b = \frac{Q_{I\zeta}^2}{8\pi\epsilon\epsilon_0\Lambda^2} \ln(2\omega\theta), \quad (2.63)$$

а другая — скорости колеблющейся дислокации,

$$F_m = - \frac{Q_{I\nu}^2}{16\pi\epsilon\epsilon_0\Lambda^2\omega}. \quad (2.64)$$

Возвращающая сила F_b зависит от частоты. Однако, согласно ⁹ F_b , для неподвижного облака не должна зависеть от ω (см. 2.59). Полученное в ⁴² общее выражение для силы, действующей со стороны зарядового облака на колеблющуюся дислокацию, использовано для определения декремента затухания δ . Ранее влияние облака на затухание в ШГК было рассмотрено Робинсоном и Таллоном ^{43–45}. Однако в ^{43–45} при решении уравнения колебаний дислокационного сегмента использованы формулы, подобные (2.63) и (2.64), которые применимы лишь для $\omega\theta \gg 1$. Согласно ⁴², зарядовое облако оказывает наибольшее влияние на затухание при наличии длинных дислокационных петель. На кривой частотной зависимости $\delta(\omega)$ предсказан несимметричный максимум при частоте $\omega_m \approx \frac{D}{\Lambda^2}$.

Таким образом, зарядовое облако играет определенную роль в ограничении колебательного движения заряженных дислокаций. Исследование влияния облака проводится методом внутреннего трения при отсутствии отрыва дислокаций от слабых центров. Температурные исследования затухания позволяют обнаруживать изоэлектрические точки по изменению δ , вызванного прекращением взаимодействия дислокаций с зарядовым облаком.

2.3.4. Перенос заряда движущимися дислокациями. В экспериментах по исследованию дислокационного заряда используют динамические методы и имеют дело с движущимися дислокациями. Заряд на движущейся дислокации изменяется за счет «заметания» вакансий. Идея «заметания» вакансий движущейся дислокацией принадлежит Пратту ⁴⁶. Опытные данные об уменьшении заряда при остановке дислокации указывают, что переносимый ею заряд не является равновесным. До настоящего времени не создана строгая теория, описывающая этот неравновесный заряд. Феноменологические модели предлагают два механизма переноса заряда движущимися дислокациями. Согласно ⁴⁷, дислокация при своем движении захватывает встречающиеся на ее пути катионные вакансии, она может также уносить вакансии от диполей примесь — вакансии и более сложных агрегатов при благоприятном расположении их по отношению к движущейся дислокации. С другой стороны, ионы двухвалентных примесей, диполи и агрегаты диполей при соответствующем расположении относительно проходящей дислокации могут действовать как «ловушки» для вакансий. На рис. 6 ⁴⁷ показаны две симметричные конфигурации ионов в плоскости (001), перпендикулярной краевой дислокации с вектором Бюргерса $(1/2) [110]$ в кристалле NaCl. Большие кружки отвечают радиусам Гольдшмидта для ионов хлора, кружки меньшего радиуса — для ионов натрия. Положения ионов определены на основании расчетов ¹⁰. Вакансия в точке А связана с дислокацией. После сдвига на величину $b/2$ конфигурация I переходит в конфигурацию II. Наименьшая потенциальная энергия в конфигурации II соответствует либо вакансии в положении А, либо иону в положении С с вакантными узлами А и В. В первом случае место А остается вакантным и расположение ионов перестает быть симметричным. При дальнейшем продвижении вправо вакансия остается позади дислокации. Для переноса вакансии необходимо перемещение иона из В в А при

движении дислокации вправо. Подобный перескок требует термической активации. Поэтому дислокация при низких температурах не сможет переносить заряд. Во втором случае в положении II положительный ион находится в симметричном положении С, а положения А и В пусты. При дальнейшем движении дислокации вправо ион из С переходит в А, при этом опять возникает конфигурация I и в ядре вновь оказывается вакансия. Этот процесс не требует термической активации, поэтому дислокация в случае II сможет переносить заряд при любой температуре. Из этих двух возможных вариантов реализуется тот, который отвечает меньшей потенциальной энергии.

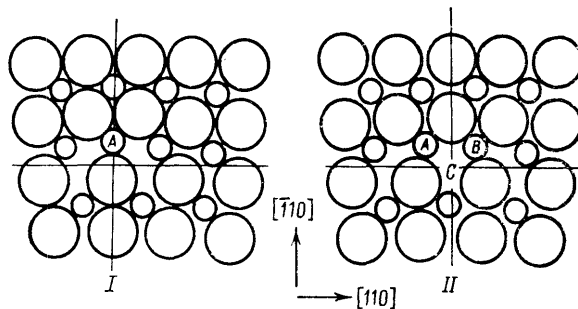


Рис. 6. Расположение ионов в плоскостях (001), перпендикулярных линии краевой дислокации в NaCl при ее движении.

Состояние II отвечает дислокации, сместившейся на $b/2$. Позиции А и В отвечают катионным вакансиям

Качественные энергетические соображения показывают⁴⁸, что максимальный заряд Q_l^{\max} , приобретаемый дислокацией при ее движении, соответствует одной вакансии на два положительных узла, т.е. в два раза ниже очевидного предела — одна вакансия на один узел.

Второй механизм переноса заряда движущейся дислокацией наряду с захватом вакансий включает и их диффузию^{49,50}, т.е. предполагает термическую активацию. Характер температурной зависимости переносимого заряда определяется не только диффузионными параметрами, но и скоростью самой дислокации. Величина динамически равновесного заряда на движущейся дислокации лимитируется процессами испускания и поглощения вакансий и, согласно⁴⁹, равна

$$Q_l = \frac{Q_0 + Q_\infty (v/v_0)}{1 + (v/v_0)}, \quad Q_0 = \frac{en_t}{w_t}, \quad Q_\infty = \frac{en_l}{w_l}, \quad v_0 = \frac{w_t}{w_l}. \quad (2.65)$$

Здесь n_l — количество вакансий, оседающих на единице длины дислокации в единицу времени в результате диффузии из объема, n_t — количество вакансий, застревающих единицей длины дислокации на единице пути, w_t — вероятность потери вакансий дислокацией за счет термической активации, w_l — вероятность потери вакансий в результате их захвата «ловушками», которые встречает дислокация при движении. При низких скоростях ($v \ll v_0$) вакансии успевают мигрировать к дислокации из объема, а преобладающий механизм оттока связан со спонтанной эмиссией. При больших скоростях происходит переход движения дислокации от термически активированного к вязкому, эффективность заметания вакансий сильно понижается и величина Q_l стремится к не зависящему от температуры пределу Q_0 . Механизм транспортировки заряда, действующий в этой области скоростей, не требует тепловой активации. Природа этого механизма является дискуссионной. Величины n_t , n_l , w_t , w_l в формуле (2.65) неизвестны, поэтому предлагаемая модель не позволяет получать количественные оценки. Однако ценной является уже сама идея о диффузионном механизме переноса заряда движущейся дислокацией. Предложенная модель хорошо объясняет обнаруженные⁴⁹ экспериментальные зависимости заряда на дислокации от скорости ее движения и температуры.

Модель диффузионного переноса заряда движущейся дислокацией получила дальнейшее развитие в работах венгерских физиков^{51,52}. В⁵¹ рассмотрен перенос вакансий в упругом и электрическом поле дислокации. Заряд

женная дислокация рассматривается как ряд дискретных равномерно распределенных зарядов²⁷. Разработанный авторами метод вычисления на ЭВМ позволил рассчитать влияние различных факторов на величину заряда, переносимого дислокацией. Исследовано установление динамически равновесного заряда в процессе движения первоначально не заряженной дислокации. Показано, что при формировании дислокационного заряда вакансии собираются в точках, ближайших к линии дислокации. С другой стороны, согласно^{53,54}, часть переносимого заряда не связана с ядром дислокации. Движущиеся дислокации не только переносят заряды, принадлежащие их ядру, но и увлекают своим упругим полем вакансии, вызывая их направленный дрейф — «вакансионный ветер». Вопрос дрейфа вакансий остается дискуссионным⁹.

Заметаемый дислокацией заряд первоначально не окружен облаком заряженных дефектов противоположного знака. Зарядовое облако формируется в результате диффузии заряженных частиц в электрическом поле дислокации, причем основными носителями являются подвижные катионные вакансии. Время, требуемое для установления зарядового равновесия, равно $t = \varepsilon\varepsilon_0/\sigma$.

2.4. Прямой и обратный дислокационные пьезоэлектрические эффекты. Электроакустическая петля. Поляризация в упругом поле известна как прямой пьезоэффект:

$$\mathcal{P}_i = d_{ijk}\tau_{jk}. \quad (2.66)$$

Деформация в электрическом поле — как обратный пьезоэффект:

$$e_{ij} = d_{ijk}E_k; \quad (2.67)$$

d_{ijk} — пьезоэлектрический модуль⁵⁵. В кристаллах с центром симметрии, к числу которых относятся ШГК, пьезоэффекты отсутствуют. Если ШГК содержит подвижные дислокации, то в упругом и электрическом полях обнаруживаются явления, получившие название прямого и обратного дислокационных пьезоэффектов. Смещение заряженных дислокаций в упругом поле приводит к дополнительной поляризации

$$\Delta\mathcal{P}_i = \Delta d_{imn}\tau_{mn}. \quad (2.68)$$

Это явление по аналогии с (2.66) называется прямым дислокационным пьезоэффектом. Дислокационный пьезомодуль Δd_{imn} выражается через характеристики дислокации. Смещение дислокаций в упругом поле вызывает также дислокационную деформацию и, следовательно, вносит добавочный вклад в упругую податливость. В электрическом поле возникает дислокационная деформация, пропорциональная напряженности электрического поля:

$$\Delta e_{kl} = \Delta d'_{klj}E_j. \quad (2.69)$$

Это явление известно как обратный дислокационный пьезоэффект. В общем случае пьезомодули прямого и обратного эффектов не совпадают. Смещение заряженных дислокаций вызывает также добавочную поляризацию и, следовательно, вносит добавочный вклад в диэлектрическую восприимчивость.

Связь электрических и упругих свойств ШГК, содержащих подвижные заряженные дислокации, выражается электроакустической петлей, представленной на рис. 7. Видно, что благодаря присутствию заряженных дислокаций электрическое поле вызывает не только поляризацию, но и деформацию ШГК. В свою очередь, упругое поле не только деформирует, но и поляризует кристалл. В отсутствие дислокаций упругие и электрические свойства ШГК уже не связаны между собой.

Вклад подвижных заряженных дислокаций в диэлектрическую восприимчивость χ_{ij} , упругую податливость S_{klmn} и дислокационные пьезомодули Δd_{imn} и $\Delta d'_{klj}$ теоретически впервые были рассчитаны Братлеем и Бауэром³⁶.

Авторы рассматривают условие равновесия закрепленного на концах дислокационного сегмента при приложении упругой или электрической силы без учета влияния зарядового облака. Сила самодействия берется в приближении линейного натяжения и считается равной T/R , R — радиус кривизны

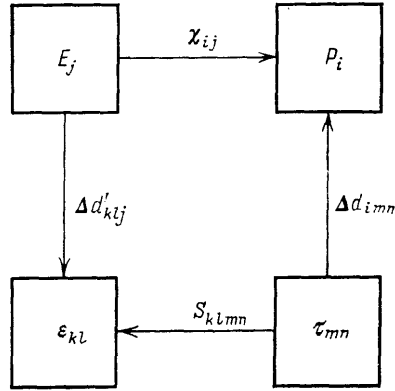


Рис. 7. Электроакустическая петля в ионном кристалле, содержащем подвижные заряженные дислокации. Δd_{imn} и $\Delta d'_{klj}$ — коэффициенты прямого и обратного дислокационных пьезоэффектов

сегмента. В случае упругого поля вдоль $[100]$ вклад дислокаций в упругую податливость³⁶

$$\Delta S_{1111} = \frac{Kb^2l^2}{48T}.$$

Прямой и обратный дислокационные пьезомодули оказываются одинаковыми. Для электрического поля в направлении $[001]$

$$\Delta d'_{311} = K \frac{Ql^2b}{24\sqrt{2}T}$$

и вклад дислокаций в диэлектрическую восприимчивость

$$\Delta \chi_{33} = \frac{KQl^2}{24T\epsilon_0}.$$

В⁵⁶ Братлей и Бауэр рассматривают динамические эффекты, возникающие при приложении акустического и переменного электрических полей. Как и в³⁶, длины дислокационных сегментов считаются одинаковыми, влияние зарядового облака по-прежнему не учитывается. Дифференциальное уравнение вынужденных колебаний дислокационного сегмента при приложении электрической силы $F = QlE_0 \exp(i\omega t)$ записывается в форме (2.60) без учета возвращающей силы $F_b = -L\xi$. Определив ξ , можно найти дислокационную поляризацию $\Delta \mathcal{P}_k$ и изменения, вносимые дислокациями в диэлектрическую восприимчивость. Согласно⁵⁶,

$$\Delta \chi_{33} = \Delta \chi_{33}^{(1)} + i \Delta \chi_{33}^{(2)}.$$

Величина

$$\Delta \chi_{33}^{(1)} = \frac{8Ql^2}{\epsilon_0} \frac{K(\omega_0^2 - \omega^2)A}{\pi^2 A^2 (\omega_0^2 - \omega^2)^2 + B^2 \omega^2}$$

определяет вклад в диэлектрическую восприимчивость, а

$$\Delta \chi_{33}^{(2)} = \frac{8Ql^2 B K \omega}{\pi^2 \epsilon_0 A^2 (\omega_0^2 - \omega^2)^2 + B^2 \omega^2}$$

— в диэлектрические потери; здесь $\omega_0 = (\pi/l)(T/A)^{1/2}$ — резонансная частота колебаний сегмента. Если в образце, подвергнутом действию переменного электрического поля, создано еще и акустическое поле той же частоты, возникнут дополнительные вклады в $\Delta \chi_{ij}^{(1)}$ и $\Delta \chi_{ij}^{(2)}$, зависящие от разности фаз между полями.

В случае действия только акустического поля решение дано Кёлером⁵⁷ и Гранато-Люкке³⁹, рассчитавшими вклад дислокаций в дефект упругой податливости $\Delta S_{klmn}/S_{klmn}$ и декремент затухания δ . Выражение для дислокационного пьезомодуля дано Робинсоном⁵⁸:

$$\Delta d_{311} = \frac{V\sqrt{2}S_{1111}Q_l}{4b} \left(\frac{\Delta S_{1111}}{S_{1111}} - i\delta \right). \quad (2.70)$$

Создание переменного электрического поля в том же образце приводит к дополнительным вкладам в δ и $\Delta S_{1111}/S_{1111}$, зависящим от разности фаз между электрическим и акустическим полями. Расчет пьезомодулей прямого и обратного дислокационных пьезоэффектов с учетом влияния зарядового облака проводится в^{59,60}. В дифференциальные уравнения колебаний дислокационного сегмента в акустическом и переменном электрических полях включена сила, действующая со стороны зарядового облака. В случае электрического поля учитывается его непосредственное действие на заряды облака, состоящего из одного⁵⁹ и двух типов заряженных дефектов противоположного знака⁶⁰. Это действие вызывает смещение зарядов в электрическом поле и изменяет силу, действующую на дислокацию со стороны облака. Этот эффект приводит к тому, что при частотах $\omega \ll (D_1 + D_2)/\Lambda^2$, когда зарядовое облако подвижно, дислокационные пьезомодули Δd и $\Delta d'$ не совпадают. Предсказанные в^{59, 60} явления требуют постановки новых экспериментов по исследованию прямого и обратного дислокационных пьезоэффектов при различных частотах в широкой области температур.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ О ЗАРЯЖЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЯХ И ИХ ВЛИЯНИИ НА СВОЙСТВА ЦГК

Обзоры экспериментальных работ по заряженным дислокациям в ЦГК до 1975 года даны в⁷⁻⁹. Прогресс, достигнутый за последние 10—15 лет в теоретическом исследовании заряженных дислокаций и связанных с ними эффектов, стимулировал постановку большого количества новых экспериментальных работ (табл. II). Исследования по заряженным дислокациям в ЦГК посвящены широкому кругу проблем, таких, как возникновение разности потенциалов между различными точками образца при приложении статической или знакопеременной нагрузки, деформация образца в электрическом поле, влияние электрического поля на механические свойства, связанные с присутствием заряда на дислокации (внутреннее трение, дефект упругой податливости, ползучесть, предел текучести и т.д.), влияние электрического поля на движение и размножение дислокаций в ЦГК, деформируемых ультразвуком и т.д.

3.1. Исследование электрических эффектов при приложении механической нагрузки. Начало исследований было положено А. В. Степановым^{2,3}, который в 1933 г. установил названный впоследствии его именем эффект появления электрического заряда на поверхности кристалла каменной соли при макроскопической деформации одноосным сжатием. Каффин и Гудфеллоу⁶¹ связали обнаруженный Степановым заряд со свойствами дислокаций и провели серию экспериментов по его наблюдению. В дальнейшем возникновение заряда было обнаружено при других способах деформации (изгиб, действие сосредоточенной силы, знакопеременные нагрузки) и различном расположении электродов в образце⁹. Появление заряда на поверхности ЦГК при макроскопической деформации объясняется тем, что дислокации, двигаясь по плоскостям скольжения, выносят свой заряд на поверхность. Дальнейшее развитие предложенного А. В. Степановым метода одноосного сжатия позволило получить количественные данные о заряде на дислокации в ЦГК и его зависимости от приложенного напряжения, скорости деформации, количества катионных

Таблица II. Значение электрического заряда на единицу длины Q_l дислокации в ЩГК по имеющимся в литературе данным

| Кристалл | Содержание двухвалентных примесей, молевые части | T, K | Q_l , Кл·м ⁻¹ | Литература |
|----------|---|-------------------|---|------------|
| LiF | Общая концентрация 10^{-5} | 77 | $-8,1 \cdot 10^{-13}$ | 44 |
| | 10^{-5} | 298 | $-1,1 \cdot 10^{-12}$ | 44 |
| | — | Комнатная (293 K) | $-1,0 \cdot 10^{-12}$ | 63 |
| | Mg ⁺⁺ , $7 \cdot 10^{-5}$ | » | $-2,2 \cdot 10^{-12}$ | 78 |
| | Mg ⁺⁺ , $1 \cdot 10^{-4}$ | » | $-3,1 \cdot 10^{-12}$ | 78 |
| | — | » | $+2,2 \cdot 10^{-12} \dots +2,9 \cdot 10^{-12}$ | 84 |
| | — | 300 | $-1,2 \cdot 10^{-11} \dots -2,1 \cdot 10^{-11}$ | 76 |
| | Избыток катионных вакансий | Комнатная | $-3 \cdot 10^{-14} \dots -1,3 \cdot 10^{-10}$ | 49 |
| | — | » | $-2 \cdot 10^{-13} \dots -1,7 \cdot 10^{-12}$ | 44 |
| | — | 78 | $-1,7 \cdot 10^{-13} \dots -3,7 \cdot 10^{-13}$ | 110 |
| NaCl | Ca ⁺⁺ , $2 \cdot 10^{-5}$ | 296 | $-7 \cdot 10^{-12}$ | 115 |
| | Ca ⁺⁺ , $2 \cdot 10^{-5}$ | 321 | $-2,5 \cdot 10^{-12}$ | 115 |
| | — | 300 | $-2 \cdot 10^{-13} \dots -1,7 \cdot 10^{-12}$ | 76 |
| | — | Комнатная | $-2 \cdot 10^{-11}$ | 36 |
| | Mn ⁺⁺ , $2 \cdot 10^{-5}$ | » | $-2,5 \cdot 10^{-11}$ | 106 |
| | Ca ⁺⁺ до $4,5 \cdot 10^{-5}$, Mg ⁺⁺ $7 \cdot 10^{-6}$ | » | $-2 \cdot 10^{-11} \dots -4 \cdot 10^{-11}$ | 27 |
| | Mn ⁺⁺ , $1,4 \cdot 10^{-5}$ | — | До $-1,1 \cdot 10^{-10}$ | 48 |
| | — | 300 | $-1,5 \cdot 10^{-14} \dots -2,4 \cdot 10^{-11}$ | 76 |
| | — | Комнатная | $-1,0 \cdot 10^{-12}$ | 116 |
| | Общая концентрация $2 \cdot 10^{-5}$ | » | $-2,7 \cdot 10^{-12} \dots -7,5 \cdot 10^{-12}$ | 58 |
| KCl | 10^{-5} | 298 | $-3,1 \cdot 10^{-12}$ | 43 |
| | Ca ⁺⁺ , $1,5 \cdot 10^{-4}$ | Комнатная | $-4 \cdot 10^{-11} \dots -9,5 \cdot 10^{-11}$ | 105 |
| | Ca ⁺⁺ , — | » | $-7 \cdot 10^{-11}$ | 87 |
| | Общая концентрация 10^{-6} | » | $-8 \cdot 10^{-12} \dots -2,2 \cdot 10^{-11}$ | 75 |

и анионных вакансий, температуры и т. д. ^{53,54,62,63,65,66}. В ^{62,63} заряд на краевой дислокации Q_l определялся по измерению тока I в цепи между электродами и скорости деформации $\dot{\epsilon}$: $Q_l = \sqrt{2bI/S\dot{\epsilon}}$, S — площадь электрода. Протекание тока обусловлено выбеганием на каждый из электродов разного количества краевых дислокаций. В ⁶² деформация осуществлялась по двум, в ⁶³ — по одной системе кристаллографических плоскостей легкого скольжения. Интересным фактом явилось изменение знака сигнала при деформации по одной системе скольжения ⁶³, ранее приписываемое изменению действующих систем скольжения в процессе активного нагружения образца ⁷. Смена знака наблюдалась еще до достижения предела текучести. После инверсии сигнал возрастал, достигая максимального значения на площадке текучести, а затем быстро убывал при дальнейшем нагружении. Убывание сигнала после прохождения площадки текучести можно объяснить зависимостью заряда на дислокациях от скорости их движения, которая, в свою очередь, достигает максимального значения на площадке текучести ⁶⁴. В ^{53,54,65,66} исследован заряд, выносимый на поверхность ЩГК при одноосном сжатии. В экспериментах ^{53,54} использовались кристаллы NaCl с катионной или анионной примесью. Деформация осуществлялась по двум системам скольжения при температурах от комнатной до 600 °C. Электрический заряд, выносимый на боковую грань образца, измерялся с помощью электрометра. Линейная плотность заряда на дислокации Q_l определялась по величине выносимого заряда и количеству дислокаций ΔK , вышедших на боковую грань в процессе деформации, ΔK находилось по величине ступеньки сдвига, измеренной интерференционным методом. Однако заряд, рассчитанный таким способом,

при температурах свыше 500 °C оказался больше предельной величины Q_l^{\max} . Для объяснения этого факта авторы^{53,54} привлекают идею о направленном дрейфе вакансий, увлекаемых упругим полем дислокации. Для подтверждения этой идеи требуются дальнейшие эксперименты. В^{65,66} детально исследовано явление инверсии знака сигнала в образцах NaCl с контролируемым количеством катионных и анионных вакансий. Установлено, что на начальной стадии деформации знак выносимого заряда противоположен знаку заряда на дислокациях в исследуемых кристаллах. Этот «неосновной» сигнал достигает максимального значения при нагрузке, отвечающей пределу текучести. Значение деформации ε_i , отвечающей точке инверсии, а также величина сигнала до и после инверсии заметно возрастали с ростом скорости деформации. Одно из возможных объяснений смены знака выносимого заряда состоит в том, что вначале он связан с зарядом на поверхности, и только после

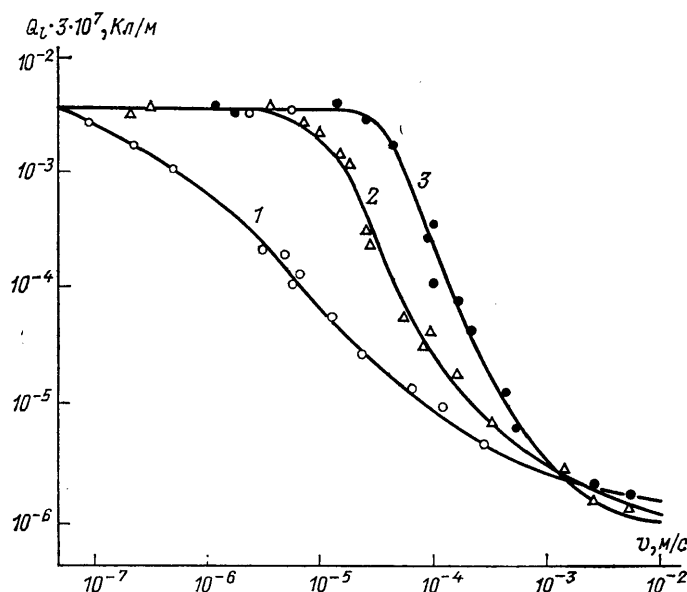


Рис. 8. Зависимость заряда на дислокации в LiF от скорости ее движения⁴⁹.
Кривая 1 отвечает 20 °C, 2 — 100 °C, 3 — 150 °C

прохождения точки инверсии имеет дислокационную природу. Для окончательного выявления механизма инверсии знака заряда требуются дальнейшие эксперименты на образцах с контролируемым состоянием поверхности. Электрический сигнал при деформировании сосредоточенной нагрузкой впервые наблюдали Фишбах и Новик⁶⁷. Качественные исследования показали⁶⁸, что сигнал значительно возрос после предварительного изгиба образца и введения двухвалентных примесей. Дальнейшая модернизация метода⁶⁹⁻⁷¹ позволила использовать его для определения заряда на краевой дислокации. В^{49,50} метод индентирования был использован для исследования формирования динамически равновесного заряда на движущейся дислокации в кристаллах LiF. Исследование знака потенциала, возникающего при вдавлении индентором, показало, что дислокации в кристаллах с двухвалентными катионными примесями заряжены отрицательно, с анионными — положительно. На рис. 8 показана зависимость заряда от скорости движения дислокации для кристалла LiF с примесью Mg (10^{-5} молевых частей) при трех различных температурах⁴⁹. Зависимость Q_l от скорости указывает на термически активированный характер механизма переноса заряда. Видно, что при больших скоростях величина заряда уменьшается на несколько порядков, стремясь к не зависящему от скорости пределу Q_0 . Феноменологи-

ческая схема, предложенная в ⁵⁰ для объяснения зависимости $Q_l(v)$, описана в п. 2.3.3. Для выявления механизма переноса заряда Q_0 требуются дальнейшие исследования.

Появление электрического сигнала при циклической деформации наблюдается как в области низких ⁷²⁻⁷⁵, так и ультразвуковых частот ^{58,76-79}. При малых деформациях эффект обусловлен обратимым смещением заряженной дислокации относительно облака Дебая — Хюккеля. При больших амплитудах вибрации дислокации проходят большие расстояния, увеличивая свой заряд за счет захвата вакансий. Развитие метода позволило произвести количественные оценки заряда на дислокации. В работах Уитворта ^{47,48,74} предварительно изогнутые образцы NaCl подвергались деформации растяжение — сжатие на частоте 0,04 Гц. Если нагружение происходило вдоль направления [100], а электрическое напряжение измерялось между гранями (001),

$$Q_l = \frac{Ub(C+C_s)\eta}{\sqrt{2}\epsilon_0^p S}.$$

Здесь ϵ_0^p — амплитуда пластической деформации, равная разности общей и упругой деформаций, C — емкость между электродами, C_s — емкость электрометра, $\eta = (K_1 + K_2)/(K_1 - K_2)$, K_1 — плотность дислокаций необходимого механического знака для создания изгиба, определяется по формуле Ная ⁸⁰, $K_1 + K_2$ — общая плотность дислокаций, рассчитывается по фигурам травления. Установлено, что заряд Q_l возрастает при увеличении амплитуды нагружения, стремясь к максимальному пределу Q_l^{\max} , отвечающему заряду электрона e на два одноименных иона на линии дислокации. Выдержка образца при максимальных используемых в ⁴³ амплитудах приводила к уменьшению Q_l , т.е. приобретаемый движущейся дислокацией заряд не является равновесным. В ⁷⁵ метод Уитворта был использован для исследования электрического сигнала в КВг при вибрации как на низких (0,02 Гц), так и на звуковых частотах. При интерпретации результатов, полученных на различных этапах циклического нагружения, сделана попытка разделить электрические эффекты за счет смещения колеблющейся дислокации относительно зарядового облака и эффекты, обусловленные возрастанием Q_l вследствие захвата вакансий движущейся дислокацией. Необходимы новые эксперименты по исследованию вклада этих двух эффектов в величину измеряемого электрического сигнала при различных амплитудах и частотах вибрации. В ^{58,76} определялись пьезомодуль прямого Δd и обратного $\Delta d'$ дислокационных пьезоэффектов, затухание δ и дефект упругой податливости $\Delta S_{1111}/S_{1111}$ предварительно изогнутых образцов LiF, NaCl, KCl на частоте 40 кГц и с помощью (2.70) рассчитывался заряд дислокации Q_l . В пределах использованных в работе амплитуд ϵ_0 величины Δd и $\Delta d'$ оказались одинаковыми. На рис. 9 показаны амплитудные зависимости $\Delta d_{311}(\epsilon_0)$, $(\Delta S_{1111}/S_{1111})(\epsilon_0)$, $\delta(\epsilon_0)$ и $Q_l(\epsilon_0)$ образца KCl при комнатной температуре. Из рисунка видно, что при отсутствии амплитудной зависимости затухания заряд на дислокации не изменяется с ростом ϵ_0 . В ⁷⁷⁻⁷⁹ проведено с использованием ⁸¹ совместное изучение прямого и обратного дислокационных пьезоэффектов, внутреннего трения и электрического напряжения U между электродами на поверхности образцов LiF и NaCl на частоте 100 кГц. Установлено, что прямой и обратный дислокационные пьезоэффекты наблюдались лишь для образцов, подвергнутых предварительной пластической деформации изгибом, пьезомодули обоих эффектов оказались одинаковыми. Амплитудная зависимость электрического сигнала $U(\epsilon_0)$ при малых ϵ_0 является линейной, так что заряд на краевой дислокации при малых ϵ_0 не изменяется при ее движении ⁷⁹. Амплитудные зависимости внутреннего трения и дислокационного пьезомодуля оказались качественно подобными. Характерно, что линейная зависимость $U(\epsilon_0)$ сохраняется в некоторой области ϵ_0 , где $\delta(\epsilon_0)$ уже обнаруживает амплитудную зависимость. Несмотря на то, что исследование амплитуд-

ных зависимостей затухания и дислокационного пьезомодуля в экспериментах^{58,7} и⁷⁷⁻⁷⁹ проводились в одной и той же области амплитуд ϵ_0 и полученные результаты качественно подобны, интерпретация этих результатов разная. В^{58,76} привлекается разработанная авторами модель взаимодействия колеблющейся дислокации с зарядовым облаком⁴³⁻⁴⁵. Увеличение затухания с ростом ϵ_0 связывается с выходом колеблющейся дислокации за пределы облака. В процессе колебаний за пределами облака дислокация «заметает» встречающиеся вакансии, увеличивая заряд. Расчет среднего смещения дислокации $\bar{\xi}$ при амплитуде ϵ_0 , отвечающей началу амплитудной зависимости $\delta(\epsilon_0)$, показал, что $\bar{\xi}$ и радиус облака Дебая — Хюккеля Λ имеют близкие

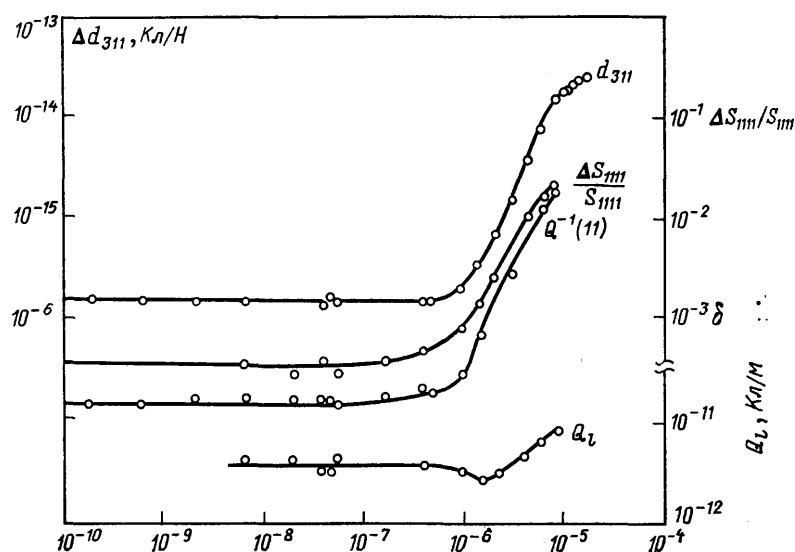


Рис. 9. Амплитудная зависимость дислокационного пьезомодуля Δd_{311} , дефекта упругой податливости $\Delta s_{111}/s_{111}$, затухания δ и заряда Q_l на дислокации в КС⁵⁸

значения. В модели, предлагаемой в⁷⁹, привлекается идея термофлуктуационного отрыва краевых и винтовых дислокаций от центров закрепления^{82,83}, краевая дислокация рассматривается как заряженная струна. Требуются дополнительные данные о том, при каких условиях преобладает каждый из предложенных выше механизмов.

3.2. Исследование дислокационной деформации в ШГК при приложении электрического поля. Деформация образцов ШГК, обусловленная движением заряженных дислокаций в электрическом поле, впервые установлена Спруллом⁸⁴. При подведении электрического напряжения к электродам на двух противоположных поверхностях предварительно изогнутого образца LiF происходило изменение стрелы прогиба, оно фиксировалось с помощью специального электромеханического преобразователя. Деформация оказалась нечетной функцией напряженности электрического поля, т.е. была отлична от электрострикции и обуславливалась смещением заряженных дислокаций. Поступательное движение заряженных дислокаций в электрическом поле наблюдали Швидковский, Тяпунина, Белозерова⁸⁵, использовавшие метод избирательного травления. Эти эксперименты были продолжены Загоруйко⁸⁶, обнаружившим изменение направления движения краевой дислокации при переключении поля. В движении принимали участие только краевые дислокации. Установлено существование порогового поля, при котором начиналось движение. В экспериментах с NaCl это поле составило $8 \cdot 10^5 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$. Изменение направления движения краевой дислокации при многократном переключении

электрического поля в опытах⁸⁶ показано на рис. 10. Движение краевых дислокаций в лучах дислокационной розетки от отпечатка индентора в КС1 в электрическом поле наблюдалось в⁸⁷. Движение также начиналось при достижении некоторой пороговой напряженности электрического поля. Полагая, что действие порогового электрического поля, вызывающего движение дислокаций, эквивалентно действию силы при механическом нагружении, в⁸⁷ по данным для критического напряжения сдвига и пороговой напряженности E_n рассчитывался заряд Q_c . Он составил 58 % от максимального

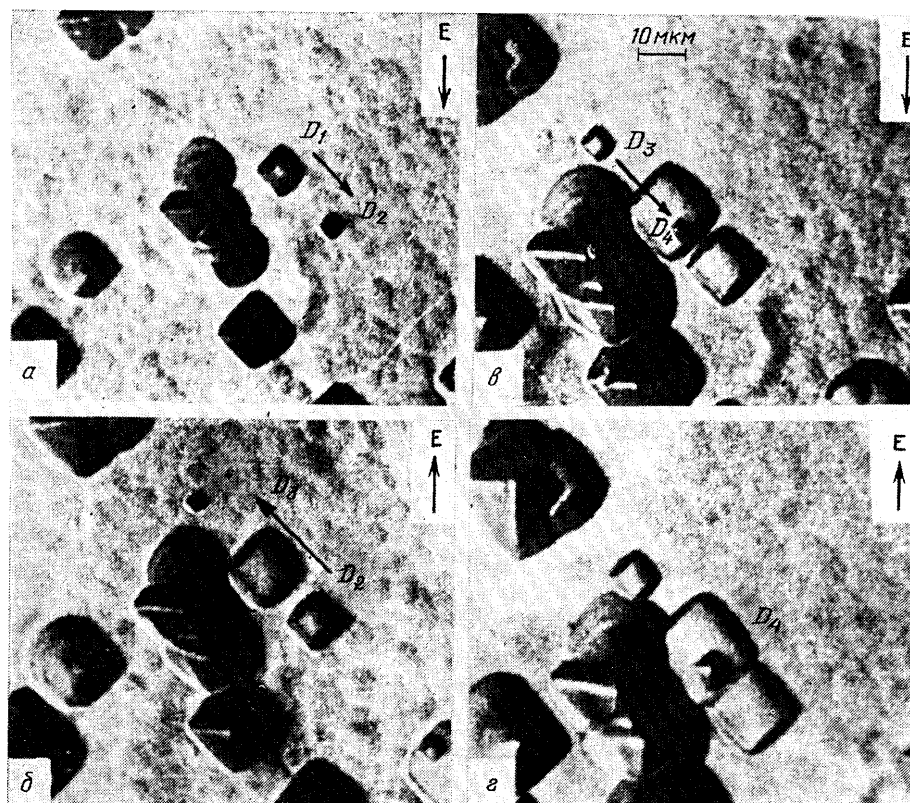


Рис. 10. Изменение направления движения краевой дислокации при переключении электрического поля ($E = 1,5 \cdot 10^6 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$)⁸⁶

заряда Q_l^{max} . В серии работ^{88–91} наблюдалось движение дислокационных стенок из краевых дислокаций в ЩГК в электрическом поле. Поле было направлено перпендикулярно границе. Движение обнаружено лишь при температурах выше комнатной, оно начиналось при достижении некоторой пороговой напряженности поля^{88,89}. Величина смещения дислокационной стенки зависела от напряженности и времени выдержки в электрическом поле, в экспериментах^{88,89} это время составляло 11–90 часов. Экспериментальные данные^{88–91} не дают однозначного ответа о знаке заряда дислокационной стенки в ЩГК. По данным^{88,89} заряд стенки в ЩГК отрицателен при температуре ниже 620°C и положителен выше 640°C . Согласно⁹⁰ при температурах $500\text{--}700^\circ\text{C}$ дислокационная стенка в NaCl заряжена отрицательно. В⁹¹ дислокационные стенки из краевых дислокаций в NaCl при $300\text{--}440^\circ\text{C}$ смещались в направлении напряженности электрического поля, т.е. были заряжены положительно. При комнатной температуре вблизи таких стенок в электрическом поле наблюдалось перераспределение катионных

вакансий⁹¹. Это приводило к изменению микротвердости по обеим сторонам границы. Микротвердость возрастала в зоне накопления отрицательного заряда и уменьшалась в зоне разупрочнения, расположенной по другую сторону стенки. Величина скачка микротвердости зависела от напряженности и времени выдержки в электрическом поле. В 1966 г. Дрияев и др.^{92,93} обнаружили колебания образцов LiF в переменном электрическом поле. Исследуемые образцы представляли собой одноволновые вибраторы на изгибных колебаниях. В условиях резонанса колебания образца отставали от электрического поля на $\pi/2$, т.е. поле было синфазно с эффективной электрической силой, раскачивающей кристалл. Согласно^{92,93}, переменное электрическое поле вызывает колебания заряженных дислокационных сегментов. Прогиб дислокаций создает микропластическую деформацию и приводит к появлению эффективной силы, возбуждающей колебания кристалла.

3.3. Совместное влияние электрического поля и механической нагрузки. Рассмотрим эксперименты, в которых электрическое поле создавалось одновременно с механическим нагружением образца. Использовались статические⁹⁴, импульсные^{95–99} и знакопеременные нагрузки^{100,101}. Совместное воздействие на образец механической нагрузки и электрического поля не эквивалентно их последовательному действию. Наряду с непосредственным действием на заряженные дислокации электрическое поле вызывает перераспределение заряженных ступенек, переориентирует центры закрепления, образованные диполями примесей — вакансия и агрегатами диполей, перераспределяет заряженные дефекты в границах блоков и у поверхности кристалла.

Влияние электрического поля на стартовые напряжения и длину пробега дислокаций в образцах NaCl, подвергаемых одноосному сжатию, исследовано в⁹⁴. Наблюдалось уменьшение стартовых напряжений и увеличение средней длины свободного пробега дислокаций в электрическом поле. Расчет заряда Q_l по изменению напряжения старта при учете лишь непосредственного воздействия электрического поля на заряженную дислокацию дает значения, большие Q_l^{\max} . По мнению авторов⁹⁴, электрическое поле действует не только на дислокации, но и на дипольные центры закрепления, вызывая их переориентацию и ослабляя их связь с дислокациями. Влияние импульса напряжения сдвига и импульса электрического поля на подвижность краевых и винтовых дислокаций в кристаллах NaCl исследовано в^{95–99}. Увеличение подвижности краевых дислокаций при приложении электрического импульса в процессе механического воздействия интерпретируется как результат действия электрического поля на заряд дислокации. Резкое увеличение подвижности винтовых дислокаций после предварительного импульсного воздействия электрического поля связывается с перераспределением заряженных ступенек вдоль дислокации. В⁹³ изучено совместное действие переменной механической силы, возбуждающей изгибные колебания кристалла LiF, и переменного электрического поля той же частоты. Исследования проводились на двух типах кристаллов — с положительно и отрицательно заряженными дислокациями. Амплитуда колебаний кристалла зависела от разности фаз φ между механической и электрической силами. Эта зависимость показана на рис. 11. Видно, что для кристаллов с отрицательно заряженными дислокациями амплитуда A максимальна при $\varphi = 0$ (кривая 1), в случае же положительно заряженных дислокаций A достигает максимального значения при $\varphi = \pi$ (кривая 2). Теоретическая формула для амплитуды A получена в результате совместного решения дифференциального уравнения изгибных колебаний образца и уравнения колебаний дислокационного сегмента при приложении механической и электрической силы, действующей на дислокацию как заряженную нить¹⁰⁰. Согласно¹⁰⁰,

$$A = K (F_{0\tau}^2 + F_{0E}^2 + 2F_{0\tau}F_{0E} \cos \varphi)^{1/2};$$

здесь $F_{0\tau}$ — амплитуда колебаний механической, F_{0E} — электрической силы, действующей на кристалл посредством заряженных дислокаций, ее направление зависит от знака заряда дислокации. Рассчитанные по этой формуле значения A отвечают экспериментальным кривым рис. 11. Влияние электростатического поля на поступательное движение краевых дислокаций

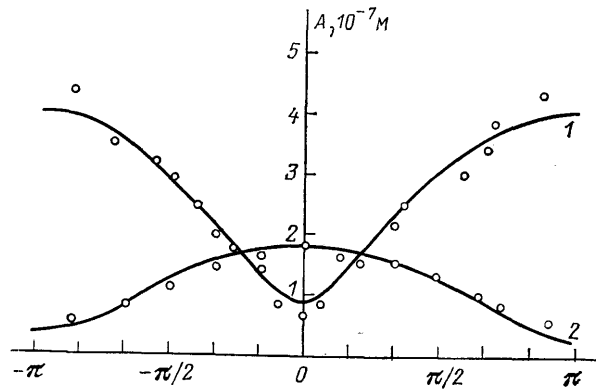


Рис. 11. Зависимость амплитуды изгибных колебаний образца при одновременном действии механической силы и электрического поля от разности фаз между ними.
Кривая 1 отвечает образцу с положительно заряженными, 2 — с отрицательно заряженными дислокациями

в лучах дислокационной розетки в КС1 при высокочастотной вибрации обнаружено в ¹⁰¹. Основной эффект действия поля состоит в увеличении длины пробега и числа сместившихся дислокаций. Влияние поля проявлялось и тогда, когда вектор напряженности E был параллелен линиям краевых дислокаций, в этом случае поле не должно влиять непосредственно на заряженную дислокацию. Согласно ¹⁰¹, электрическое поле действует не только

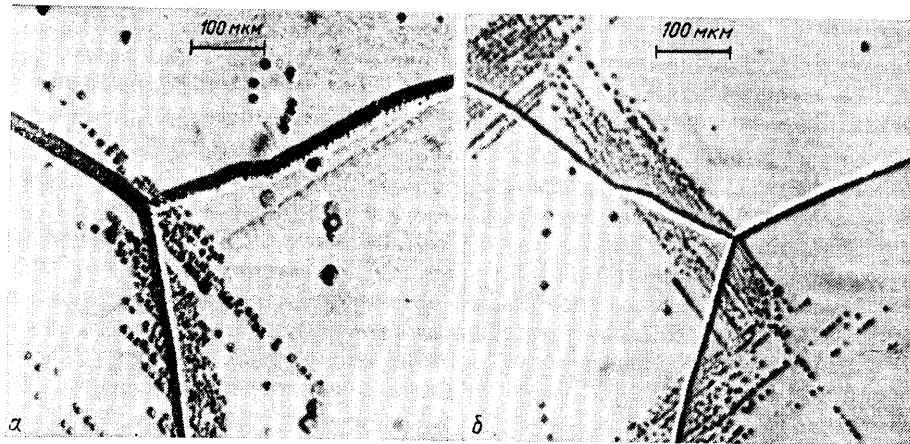


Рис. 12. Влияние электрического поля на деформацию кристаллов КС1 при облучении ультразвуком.

Результат травления поверхности образца после вибрации в электрическом поле (б) и зеркальный скол того же образца в отсутствие поля при том же режиме ультразвукового воздействия (а). $\tau_0 = 7,8$ МПа, $f_p = 73$ кГц, $E = 0,3$ МВ·м⁻¹

на заряженные дислокации, но и на дипольные центры закрепления. При больших амплитудах ультразвуковой вибрации электрическое поле облегчает инициированное ультразвуком размножение дислокаций в ШГК¹⁰². На рис. 12, а, б представлены результаты травления зеркальных сколов двух образцов КС1, находившихся в одном и том же режиме ультразвукового воздействия, но один образец был испытан в электрическом поле (рис. 12, а). Из сравнения рис. 12, а и б видно, что электрическое поле активизирует новые источники в границах блоков, не работающие в его отсутствие. Характерно, что для тех кристаллов, в которых в отсутствие электрического поля

источники в границах блоков не работали, при создании поля пластическая деформация начиналась с работы таких источников. Электрическое поле активизирует также источники, расположенные вблизи поверхности кристалла. Роль поля состоит в изменении электрического состояния поверхности или межблочной границы. Это приводит к перераспределению заряженных дефектов и увеличивает вероятность появления источников оптимальной длины \tilde{L} , генерирующих при действии ультразвука заданной частоты¹⁰³. Дальнейшее исследование описанных в этом разделе явлений важно для изучения процессов пластификации материалов под влиянием электрического поля.

3.4. Влияние электрического поля на механические свойства ЩГК. Электрическое поле вызывает изменение механических свойств ЩГК, связанных с присутствием заряженных дислокаций (ползучесть, напряжение течения, дефект упругой податливости и внутреннее трение и т.д.).

Влияние электрического поля на кривые ползучести ЩГК, т.е. на медленное течение кристаллов при постоянной нагрузке, впервые наблюдали авторы¹⁰⁴. При наложении поля происходило ускорение течения и на кривых ползучести наблюдались небольшие деформационные скачки. Обнаружено значительное возрастание плотности дислокаций в образце, т.е. электрическое поле облегчает протекание пластической деформации; для выявления механизма его действия требуются дополнительные данные. В работах^{105–108} исследовано влияние электрического поля на напряжение течения ЩГК при механическом нагружении (электропластический эффект). Создание поля уменьшало напряжение, требуемое для поддержания постоянной деформации. Метод позволяет дать количественную оценку заряда на дислокации Q_L (см. (2.56) — (2.58)). Согласно¹⁰⁸, величина заряда оказалась выше Q_L^{\max} . Одна из возможных причин этого, по мнению¹⁰⁸, состоит в изменении электрического состояния поверхности под влиянием поля. Электрическое поле оказывает влияние на затухание и дефект упругой податливости ЩГК. Такое влияние обнаружено как в амплитудно-независимой^{109,110,111,113,114}, так и в амплитудно-зависимой области^{111,113}. В¹⁰⁹ увеличение амплитудно-независимого затухания в электрическом поле обнаружено как в герцевом, так и в килогерцевом диапазоне частот. Согласно¹⁰⁹, поле способствует откреплению дислокаций от компенсирующего облака точечных дефектов. Влияние электростатического поля на амплитудно-независимый декремент δ и дефект упругой податливости $\Delta S_{1111}/S_{1111}$ при амплитудах ϵ_0 10^{-8} — 10^{-7} на частоте 80 кГц было обнаружено в¹¹⁰. Создание поля вызывало увеличение $\delta(t)$ и $(\Delta S_{1111}/S_{1111})(t)$. При выключении поля декремент сначала возрастал, а затем начинал уменьшаться, достигая значений, близких к первоначальному. Для объяснения наблюдаемого эффекта выдвигается модель термически активируемого отрыва сегментов заряженных дислокаций от облаков Дебая — Хюккеля и последующей перестройки этих облаков. В отсутствие поля сегменты заряженных дислокаций колеблются симметрично в пределах зарядового облака. При создании поля действующая с его стороны сила смещает сегмент, и его колебания относительно облака становятся асимметричными. При высоких полях дислокация оказывается в области с низкой концентрацией дефектов, это приводит к увеличению декремента и дефекта упругой податливости. В результате последующей перестройки облако принимает симметричную форму относительно нового положения дислокации, это приводит к уменьшению затухания. При выключении поля дислокационный сегмент возвращается в исходное положение и совершает колебания в области, свободной от дефектов. Поэтому сразу же после выключения поля затухание возрастает, а затем за счет перестройки облака релаксирует к своему первоначальному значению. В¹¹¹ обнаружена амплитудная зависимость

затухания и дефекта модуля Юнга $\Delta M/M$ в ЩГК при амплитудах ε_0 , лежащих в той же области, что и в ⁷⁶. Оценка смещения колеблющейся дислокации по формуле Бейкера¹¹²

$$\bar{\xi} = \frac{2(\Delta M/M)\varepsilon_0}{Kb}$$

показала, что $\bar{\xi}$ близко к значению радиуса зарядового облака, рассчитанного по формуле (2.15). Причиной амплитудной зависимости согласно ¹¹¹ является выход колеблющегося дислокационного сегмента за пределы облака. При

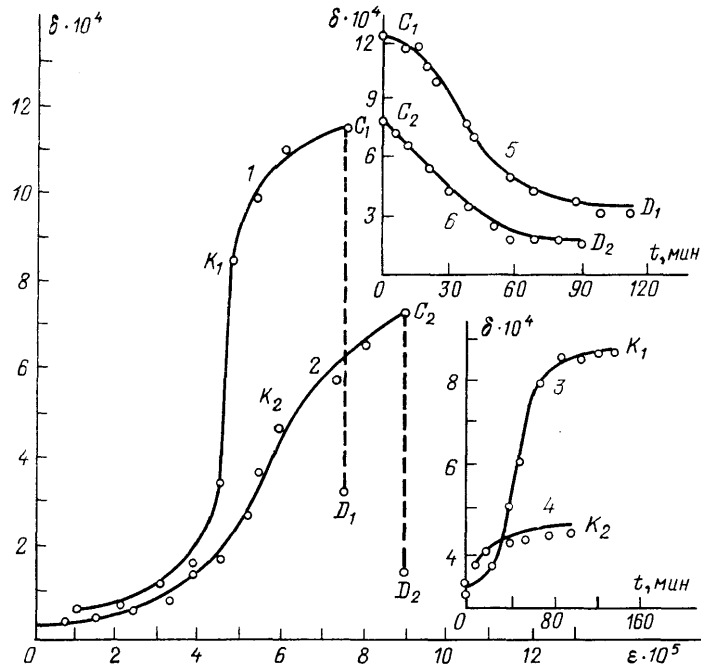


Рис. 13. Влияние электрического поля на амплитудную зависимость затухания¹¹⁴.

Кривая 1 отвечает образцу в электрическом поле, 2 — контрольному образцу. Кривые 3, 4 показывают установление стационарного затухания для точек K_1 и K_2 . Уменьшение затухания при больших ε_0 (5 и 6) связано с закреплением дислокаций, контролируемым объемной диффузией KCl. $f_p = 73$ кГц, $E = 1,6 \cdot 10^5$ В·м⁻¹

создании электрического поля начало амплитудной зависимости $\delta(\varepsilon_0)$ и $(\Delta M/M)(\varepsilon_0)$ смещалось в область меньших ε_0 . Влияние поля на затухание и дефект модуля при амплитудах ε_0 в области отрыва дислокаций от слабых центров закрепления исследовалось в ^{113,114}. На рис. 13 показано влияние поля на амплитудную зависимость $\delta(\varepsilon_0)$ образца KCl на частоте 73 кГц по данным ¹¹⁴. Видно, что амплитудная зависимость $\delta(\varepsilon_0)$ для образца в электрическом поле начинается при меньших ε_0 , чем для контрольного образца. В литературе отсутствуют данные о влиянии поля на затухание в ЩГК в области размножения дислокаций. Исследование влияния электрического поля на пластификацию кристаллов, содержащих заряженные дислокации, к числу которых относятся и полупроводниковые материалы, представляет не только научный, но и практический интерес. Внутреннее трение — удобный и чувствительный метод для такого исследования.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Немногим более тридцати лет прошло с момента появления первых работ по заряженным дислокациям. В настоящее время эти исследования ведутся широким фронтом, они выявляют новые данные о влиянии заряженных дисло-

каций на механические и электрические свойства ШГК. Эти данные необходимы для получения материалов со строго заданными характеристиками, используемых во многих областях науки и техники и для прогнозирования поведения материалов при различных условиях испытания. Авторы благодарны И. А. Яковлеву за интерес к работе и ценные советы.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Joffe A., Zechnowitzer E.//Zs. Phys. 1926. Bd 35. S. 446.
2. Stepanow A. W.//Phys. Zs. Sowjetunion. 1933. Bd 4. S. 609.
3. Stepanow A. W.//Zs. Phys. 1933. Bd 81. S. 560.
4. Gyulai Z., Hartly D.//Ibidem. 1928. Bd 51. S. 378.
5. Pratt P. L.//Vacancies and Other Point Defects in Metals and Alloys. — 1958. — P. 99. — (Inst. Metals Monograph and Report. Ser. 23).
6. Amelinckx S.//Nuovo Chimento Suppl. 1958. V. 7. P. 569.
7. Урусовская А. А.//УФН. 1968. Т. 96. С. 39.
8. Menezes R. A., Nix W. D.//Mater. Sci. and Engng. 1974. V. 16. P. 57.
9. Whitworth R. W.//Adv. Phys. 1975. V. 24. P. 203.
10. Huntington H. B., Dickey J. E., Thomson R. //Phys. Rev. 1955. V. 100. P. 1117.
11. Seitz F.//Ibidem. 1950. V. 80. P. 239.
12. Seitz F.//Rev. Mod. Phys. 1951. V. 1. P. 328.
13. Brantley W. A., Bauer Ch. L.//Phys. Stat. Sol. 1966. V. 18. P. 465.
14. Bassani F., Thompson R.//Phys. Rev. 1957. V. 102. P. 1264.
15. Lehovics K.//J. Chem. Phys. 1953. V. 21. P. 1123.
16. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. — М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1945.
17. Mott N. F., Littleton M. J.//Trans. Farad. Soc. 1938. V. 34. P. 485.
18. Лифшиц И. М., Герузин Я. Е.//ФТТ. 1965. Т. 7. С. 62.
19. Eshelby J. D., Newey C. W. A., Pratt P. L., Lidiard A. B.//Phil. Mag. 1958. V. 3. P. 75.
20. Хладик Дж. Физика электролитов: Процессы переноса в твердых электролитах и электродах. — М.: Мир, 1978.
21. Davidge R. W.//Phys. Stat. Sol. 1963. V. 3. P. 1851.
22. Маргвелашвили И. Г., Саралидзе З. Г.//ФТТ. 1969. Т. 11. С. 2296.
23. Косевич А. М., Маргвелашвили И. Г., Саралидзе З. К.//ФТТ. 1965. Т. 7. С. 464.
24. Коттрелл А. Теория дислокаций. — М.: Мир, 1969. — С. 69.
25. Коломийцев А. И.//Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3 «Физика. Астрономия». 1971. Т. 6. С. 542.
26. Коломийцев А. И. Влияние дефектов кристаллической структуры на электрические свойства щелочногалогенных кристаллов: Автореферат диссертации... кандидата физ.-матем. наук. — Москва, 1972.
27. Whitworth R. W.//Phil. Mag. 1968. V. 17. P. 1207.
28. Whitworth R. W.//Phys. Stat. Sol. Ser. b. 1972. V. 54. P. 537.
29. Whitworth R. W.//Phil. Mag. 1967. V. 15. P. 305.
30. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. — М.: Физматгиз, 1962. — Т. 2. С. 388.
31. Broudy R. M., McClure J. M.//J. Appl. Phys. 1960. V. 31. P. 1511.
32. Jeans J. H. The Mathematical Theory of Electricity and Magnetism. — Cambridge: University Press, 1927. — P. 92.
33. Koehler J. E.//Phys. Rev. 1952. V. 86. P. 52.
34. Mott N. F., Nabarro F. R. N.//Report of a Conference on Strength of Solids. — 1948. — P. 1.
35. Nabarro F. R. N.//Adv. Phys. 1952. V. 1. P. 269.
36. Brantley W. A., Bauer Ch. L.//Mater. Sci. and Eng. 1969. V. 40. P. 29.
37. Whitworth R. W.//Phys. Stat. Sol. Ser. a. 1976. V. 38. P. 299.
38. Ивенс А., Роулингс Р.//Термически активированные процессы в кристаллах. — М.: Мир, 1973. — С. 172.
39. Гранато А., Люкке К.//Ультразвуковые методы исследования дислокаций. — М.: ИИ, 1963. — С. 35.
40. Robinson W.//Rad. Eff. 1983. V. 74. P. 4; Europhys. Topic Conference on Lattice Defects Ionic Crystals. — Dublin, 1982. — Pt C. P. 339.

41. Brown L. M. // *Phys. Stat. Sol.* 1961. V. 1. P. 585.
42. Tanibayashi M. // *Phil. Mag. Ser. A.* 1981. V. 44. P. 141.
43. Robinson W. H., Birnbaum H. K. // *J. Appl. Phys.* 1966. V. 37. P. 3754.
44. Robinson W. H. // *J. Mater. Sci.* 1972. V. 7. P. 115.
45. Tallon J. L., Robinson W. H. // *Phil. Mag.* 1973. V. 27. P. 985.
46. Whitworth R. W. // *Ibidem.* 1965. V. 11. P. 83.
47. Whitworth R. W. // *Ibidem.* 1967. V. 15. P. 305.
48. Huddart A., Whitworth R. W. // *Ibidem.* 1973. V. 27. P. 107.
49. Галусташвили В. М. Формирование заряда на дислокации в кристаллах фтористого лития: Автореферат диссертации... кандидата физ.-мат. наук.— Тбилиси, 1975.
50. Альшиц В. И., Галусташвили М. В., Паперно И. М. // *Кристаллография.* 1975. Т. 20. С. 1113.
51. Toth A., Keszthelyi T., Sarközi J. // *Acta Phys. Hungar.* 1980. V. 49. P. 415.
52. Toth A., Keszthelyi T., Kalman P., Sarközi J. // *Phys. Stat. Sol. Ser. b.* 1984. V. 122. P. 501.
53. Тяпунина Н. А., Коломийцев А. И. // *Кристаллография.* 1973. Т. 18. С. 868.
54. Тяпунина Н. А., Коломийцев А. И. // *Изв. АН СССР. Сер. физ.* 1973. Т. 37. С. 2443.
55. Най Дж. Физические свойства кристаллов.— М.: ИЛ, 1960.
56. Bauer Ch. L., Brantley W. A. // *Mater. Sci. and Eng.* 1970. V. 5. P. 296.
57. Koehler J. S. Imperfections in Nearly Perfect Crystals.— New York, 1952.— P. 196—216.
58. Robinson W. H. // *Phil. Mag.* 1972. V. 25. P. 355.
59. Tanibayashi M., Tsuda M. // *J. Phys. Soc. Japan.* 1981. V. 50. P. 2054.
60. Tanibayashi M., Tsuda M. // *Ibidem.* 1982. V. 51. P. 244.
61. Caffyn J. E., Goodfellow T. L. // *Nature.* 1955. V. 176. P. 878.
62. Галусташвили М. В., Паперно И. М. Электронные и ионные процессы в твердых телах. VII.— Тбилиси: Мецниереба, 1974.
63. Смирнов Б. И., Куличенко А. Н. // *ФТТ.* 1980. Т. 22. С. 948.
64. Осипьян Ю. А., Петренко В. Ф. // *Проблемы прочности и пластичности твердых тел.*— Л.: Наука, 1979.— С. 118.
65. Цаль Н. А., Спитковский И. М., Струк Я. А. // *ФТТ.* 1982. Т. 24. С. 2166.
66. Цаль Н. А., Спитковский И. М., Струк Я. А. // *ФТТ.* 1983. Т. 25. С. 2038.
67. Fishbach D. B., Nowick A. J. // *Phys. Rev.* 1955. V. 99. P. 1333.
68. Rueda F., Dekeyser W. // *Phil. Mag.* 1961. V. 6. P. 359.
69. McGowan W. C. Ph. D. Thesis.— University of North Carolina at Chapel Hill, 1965.
70. Де Батист Р., Ван Дингенен Е., Мартышев Ю. Н., Сильвестрова И. М., Урусовская А. А. // *Кристаллография.* 1967. Т. 12. С. 1012.
71. Toth A., Sarközi J. // *Phys. Stat. Sol. Ser. a.* 1975. V. 28. P. 93.
72. Amelinckx S., Vennik J., Remaut G. // *J. Phys. and Chem. Sol.* 1959. V. 11. P. 171.
73. Remaut G., Vennik J., Amelinckx S. // *Phys. Chem. Sol.* 1960. V. 16. P. 158.
74. Turner R. M., Whitworth R. W. // *Phil. Mag.* 1970. V. 21. P. 1187.
75. Van Dingenen E. // *Ibidem.* 1975. V. 31. P. 1263.
76. Robinson W. H., Glover A. J., Wolfenden A. // *Phys. Stat. Sol. Ser. a.* 1978. V. 48. P. 156.
77. Кардашев Б. К., Никаноров С. П., Воинова О. А. // *ФТТ.* 1974. Т. 16. С. 1068.
78. Воинова О. А., Кардашев Б. К., Никаноров С. П. // *ФТТ.* 1981. Т. 23. С. 2933.
79. Никаноров С. П., Кардашев Б. К. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов.— М.: Наука, 1985.
80. Nye J. F. // *Acta Met.* 1953. V. 1. P. 153.
81. Marx J. // *Rev. Sci. Instrum.* 1951. V. 22. P. 503.
82. Инденбом В. Л., Чернов В. М. // *Механизмы релаксационных явлений в твердых телах.*— М.: Наука, 1972.— С. 87.
83. Indenbom V. L., Chernov V. M. // *Phys. Stat. Sol. Ser. a.* 1972. V. 14. P. 347.
84. Sproull R. L. // *Phil. Mag.* 1960. V. 56. P. 845.
85. Швидковский Е. Г., Тяпунина Н. А., Белозерова Э. П. // *Кристаллография.* 1962. Т. 3. С. 471.

86. Загоруйко Н. В.//Кристаллография. 1965. Т. 10. С. 81.
87. Colombo L., Kataoka T., Li J. C. M.//Phil. Mag. Ser. A. 1982. V. 46. P. 211.
88. Schwensfeier R. J., Elbaum C.//J. Phys. and Chem. Sol. 1965. V. 26. P. 781.
89. Schwensfeier R. L., Elbaum C.//Ibidem. 1967. V. 28. P. 597.
90. Kingery W. D.//J. Am. Ceram. Soc. 1974. V. 57. P. 1.
91. Зуев Л. В., Дорошенко Н. К., Масловская З. А., Шарафутдинов Р. Ф.//ФТТ. 1981. Т. 23. С. 1160.
92. Дрияев Д. Г., Мелик-Шахназаров В. А.//ФТТ. 1966. Т. 8. С. 3280.
93. Дрияев Д. Г., Мелик-Шахназаров В. А., Буджпашвили Д. М. Электронные и ионные процессы в твердых телах. — Тбилиси: Мецниереба, 1973. — С. 15.
94. Тяпунина Н. А., Коломийцев А. И.//Кристаллография, 1972. Т. 17. С. 1258.
95. Сергеев В. П., Зуев Л. Б.//ФТТ. 1980. Т. 22. С. 1766.
96. Сергеев В. П., Зуев Л. Б.//Изв. вузов СССР. Сер. «Физика». 1980. № 10. С. 10.
97. Зуев Л. Б., Сергеев В. П., Рябченко Н. Н.//Ibidem. 1979. № 3. С. 71.
98. Сергеев В. П., Зуев Л. Б.//ФТТ. 1983. Т. 25. С. 966.
99. Сергеев В. П., Зуев Л. Б.//Кристаллография. 1985. Т. 30. С. 195.
100. Альшиц В. И., Дрияев Д. Г., Мелик-Шахназаров В. А.//Электронные и ионные процессы в твердых телах. VI — Тбилиси: Мецниереба, 1973. — С. 68.
101. Тяпунина Н. А., Светашов А. А.//Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3 «Физика. Астрономия». 1981. Т. 22. С. 15.
102. Белозерова Э. П., Светашов А. А., Тяпунина Н. А.//Кристаллография. 1983. Т. 28. С. 1176.
103. Зпенкова Т. М., Тяпунина Н. А.//Моделирование на ЭВМ кинетики дефектов в кристаллах. — Ленинград, 1985. — С. 52.
104. Загоруйко Н. В., Щукин Е. Д.//Кристаллография. 1968. Т. 13. С. 908.
105. Катаока Т., Sakamoto M., Yamada T.//Japan. J. Appl. Phys. 1976. V. 14. P. 1609.
106. Brissenden S., Gardner J. M., Illingworth J., Kovacevic I., Whitworth R. W.//Phys. Stat. Sol. Ser. a. 1979. V. 51. P. 521.
107. Куличенко А. Н., Смирнов Б. И.//ФТТ. 1981. Т. 23. С. 1029.
108. Куличенко А. Н., Смирнов Б. И.//ФТТ. 1983. Т. 25. С. 1523.
109. Сойфер Я. М. Исследование характера взаимодействия дислокаций с точечными дефектами в полных кристаллах методом внутреннего трения: Автореферат диссертации... кандидата физ.-мат. наук. — Москва, 1968.
110. Brantley W. A., Bauer Ch. L.//Phil. Mag. 1969. V. 20. P. 441.
111. Белозерова Э. П., Тяпунина Н. А., Светашов А. А.//Кристаллография. 1975. Т. 20. С. 788.
112. Vasker G. S.//J. Appl. Phys. 1962. V. 33. P. 1730.
113. Белозерова Э. П., Светашов А. А., Тяпунина Н. А.//Внутреннее трение в металлах, полупроводниках, диэлектриках и ферромагнетиках. — М.: Наука, 1978. — С. 152.
114. Белозерова Э. П., Светашов А. А.//ФТТ. 1985. Т. 27. С. 1996.
115. Anderson A. R., Pollard H. F.//J. Appl. Phys. 1979. V. 50. P. 5262.
116. Robinson W. H., Tallon J. L., Sutter P. H.//Phil. Mag. 1977. V. 36. P. 1405.