

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ

В. Г. Барышников, Т. Д. Шермергор

(Москва)

Основываясь на уравнениях несовместности рассчитаны внутренние напряжения в гранецентрированных кубических (ГЦК) монокристаллах, связанные с призматическими дислокационными петлями. Принимая, что вектор Бюргерса каждой петли имеет равновероятные ориентировки, согласованные с системой плоскостей скольжения, а сами петли распределены в пространстве случайно, вычисляются характеристики случайной составляющей внутреннего поля напряжений. Найдены спектральная плотность энергии и бинарная корреляционная функция тензоров внутренних напряжений. Проанализирована тензорная и координатная зависимости корреляционных функций.

Внутренние напряжения оказывают существенное влияние на физические и механические свойства твердых тел. Причиной их возникновения могут быть различные дефекты структуры. Однако основной вклад во внутренние напряжения вносят дислокации.

Дислокационные напряжения определяются плотностью дислокаций и структурой дислокационной сетки. Их исследованию посвящено большое количество экспериментальных работ [1]. Однако теоретический расчет удалось выполнить в ограниченном числе случаев в основном применительно к параллельному расположению линий дислокаций. При этом вычислялись такие интегральные характеристики, как дисперсия и энергия внутренних напряжений [2-4]. Такой подход, хотя и дает определенную информацию о внутренних напряжениях, обладает тем недостатком, что не позволяет судить об их пространственном распределении.

С другой стороны, упругое поле дислокационных скоплений детально исследовано для ряда регулярных дислокационных структур — границ блоков, полигональных стенок, скоплений прямолинейных дислокаций [5]. Очевидным недостатком модельного подхода для интегрального описания поля внутренних напряжений будет, с одной стороны, большое разнообразие дислокационных структур, а с другой — нерегулярность распределения дислокаций.

Исходя из этого, представляет интерес провести расчет внутренних напряжений, связанных с дислокациями, основываясь на теории случайных функций. В качестве интегральной характеристики упругого поля системы дислокаций удобно принять бинарные корреляционные функции внутренних напряжений, откуда могут быть получены такие параметры, как дисперсия и внутренняя энергия. Эти функции описывают также пространственное убывание корреляционных связей случайного поля внутренних напряжений.

1. В континуальной теории дислокаций источники внутренних напряжений характеризуются тензором несовместности η_{mn} , а внутренние напряжения σ_{kl} определяются из решения следующей системы уравнений:

$$\text{Rot}_{nj}^{mi} s_{ijkl} \sigma_{kl} = \eta_{mn}, \quad \nabla_l \sigma_{kl} = 0, \quad \text{Rot}_{nj}^{mi} \equiv \varepsilon_{ipm} \varepsilon_{jqn} \nabla_p \nabla_q \quad (1.1)$$

с соответствующими граничными условиями [6].

Здесь s_{ijkl} — тензор упругих податливостей, ε_{ipm} — единичный антисимметричный тензор, ∇_i означает дифференцирование по соответствующей координате, а по повторяющимся индексам предполагается суммирование.

Распределение дислокаций в реальном кристалле можно характеризовать тензором плотности дислокаций α_{ik} или тензором плотности моментов дислокаций μ_{ik} (дислокационной поляризации), которые связаны

с тензором несовместности соотношениями

$$\eta_{ij} = \nabla_k \varepsilon_{kl(i} \alpha_{j)l}, \quad \alpha_{ji} = \varepsilon_{jmn} \nabla_m \mu_{nl} \quad (1.2)$$

Здесь по индексам, заключенным в круглые скобки, проводится симметризация.

Из однородности тензора податливостей s_{ijkl} следует, что регулярная $\langle \sigma_{kl} \rangle$ и случайная σ_{kl}' составляющие поля напряжений определяются уравнениями

$$\text{Rot}_{nj}^{mi} s_{ijkl} \langle \sigma_{kl} \rangle = \langle \eta_{mn} \rangle, \quad \text{Rot}_{nj}^{mi} s_{ijkl} \sigma_{kl}' = \eta_{mn}' \quad (1.3)$$

Здесь и далее угловые скобки используются для обозначения статистического усреднения, а штрихами обозначены случайные составляющие соответствующих величин.

Будем считать случайные поля плотности дислокаций и дислокационной поляризации статистически однородными. Тогда их средние значения будут постоянными по кристаллу, а средние значения тензоров несовместности и внутренних напряжений будут равны нулю в соответствии с уравнениями (1.1) и (1.2). Бинарные корреляционные функции вследствие статистической однородности будут зависеть лишь от радиус-вектора $\mathbf{r}$, соединяющего две рассматриваемые точки кристалла:

$$M_{ij}^{kl}(\mathbf{r}) = \langle \mu_{ij}'(\mathbf{r}_1) \mu_{kl}'(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}) \rangle, \quad A_{ij}^{kl}(\mathbf{r}) = \langle \alpha_{ij}'(\mathbf{r}_1) \alpha_{kl}'(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}) \rangle \quad (1.4)$$

Корреляционная функция $H_{ij}^{kl}(\mathbf{r})$ тензора несовместности может быть выражена через функции A_{ij}^{kl} и M_{ij}^{kl}

$$H_{ij}^{kl} = -\text{Rot}_{qk}^{(i} A_{l)q}^{j)p} = \text{Rot}_{qk}^{(i} \text{Rot}_{lm}^{j)n} M_{mq}^{np} \quad (1.5)$$

Решение системы (1.1) для неограниченного кристалла представляется в виде интеграла свертки с тензором Грина G_{kl}^{pq} внутренних напряжений

$$\sigma_{kl}(\mathbf{r}) = \int G_{kl}^{pq}(\mathbf{r} - \mathbf{p}) \eta_{pq}(\mathbf{p}) d\mathbf{p}, \quad d\mathbf{p} \equiv d\rho_x d\rho_y d\rho_z \quad (1.6)$$

причем тензор Грина определяется уравнениями [6]

$$\text{Rot}_{nj}^{mi} s_{ijkl} G_{kl}^{pq} = -\frac{1}{8\pi} \text{Rot}_{ns}^{mr} \text{Rot}_{sq}^{rp} r, \quad \nabla_a G_{kl}^{pq} = 0 \quad (1.7)$$

Второе из уравнений (1.7) есть условие бивихревого характера упругих полей внутренних напряжений.

Выражение (1.6) позволяет получить следующее интегральное представление бинарной корреляционной функции тензоров внутренних напряжений Σ_{ij}^{kl} :

$$\Sigma_{ij}^{kl}(\mathbf{r}) = \iint G_{ij}^{pq}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_1) H_{mn}^{pq}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) G_{mn}^{kl}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{p}_2) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2, \quad \mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (1.8)$$

Переходя в выражении (1.8) к трансформантам Фурье, находим

$$\Sigma_{ij}^{kl}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int G_{ij}^{pq}(\mathbf{k}) H_{mn}^{pq}(\mathbf{k}) G_{mn}^{kl}(-\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (1.9)$$

$$\Sigma_{ij}^{kl}(\mathbf{k}) = G_{ij}^{pq}(\mathbf{k}) H_{mn}^{pq}(\mathbf{k}) G_{mn}^{kl}(-\mathbf{k}) \quad (1.10)$$

Здесь использованы интегральное преобразование Фурье и интегральное представление δ -функции

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int G(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k}, \quad \delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (1.11)$$

Выражения (1.9) и (1.10) совместно с соотношениями (1.5) дают общее решение поставленной задачи о связи корреляционной функции тензора внутренних напряжений с корреляционными функциями тензора плотности дислокаций и дислокационной поляризации.

Примем в дальнейшем приближение изотропии упругих модулей [5], однако распределение дислокаций в кристалле будем считать согласованным с кристаллографическими осями. Тогда из (1.7) получаем явный вид трансформанты Фурье тензора Грина [7]

$$G_{ij}^{pq}(\mathbf{k}) = \frac{2G}{k^2} [m\xi_{ij}\xi_{pq} - \xi_{p(i}\xi_{j)q}], \quad m \equiv \frac{2(3K+G)}{3K+4G} \\ \xi_{ij} \equiv \frac{k_i k_j}{k^2} - \delta_{ij} \quad (1.12)$$

что позволяет представить функцию Σ_{ij}^{kl} в следующем виде:

$$\Sigma_{ij}^{kl}(\mathbf{k}) = \frac{4G^2}{k^4} [\xi_{p(i}\xi_{j)q} - m\xi_{ij}\xi_{pq}] [\xi_{k(m}\xi_{n)l} - m\xi_{mn}\xi_{kl}] H_{mn}^{pq}(\mathbf{k}) \quad (1.13)$$

Здесь K и G — соответственно средние модули всестороннего сжатия и сдвига.

2. Применим полученные результаты к монокристаллам, содержащим неперекрывающиеся дислокационные петли. Для определенности рассмотрим ансамбль призматических дислокаций в ГЦК кристаллах. Такие дислокации представляют собой диски вакансий или внедренных атомов [8], толщина которых h по порядку величины совпадает с постоянной решетки. Электронномикроскопические исследования ряда ГЦК кристаллов [8-12] показывают, что призматические дислокации лежат в плоскостях типа $\{110\}$ с векторами Бюргерса $b \approx 1/2\langle 110 \rangle$, ориентированными нормально к плоскости петли.

Распределение дислокационных петель будем характеризовать тензором дислокационной поляризации. Для рассматриваемых призматических дислокационных дисков этот тензор можно представить следующим образом:

$$\mu_{ik} = b_i n_k h^{-1} \delta(V) \quad (2.1)$$

где $\delta(V)$ — δ -функция области V , занимаемой дислокационным диском [13], а n — единичный вектор нормали к его плоскости.

Будем считать, что петли хаотически разбросаны по объему кристалла, а их векторы Бюргерса с равной вероятностью могут иметь любые направления типа $\langle 110 \rangle$. Тогда $\langle \mu_{ik} \rangle = 0$.

Для определения дисперсии $\Delta_{ij}^{kl} \equiv M_{ij}^{kl}(0)$ случайного поля тензора дислокационной поляризации проведем усреднение в два этапа. Вначале найдем среднее арифметическое $\langle \mu_{ij}(\mathbf{r}) \mu_{kl}(\mathbf{r}) \rangle_\omega$. Индекс ω означает усреднение по всем двенадцати ориентациям вектора Бюргерса. В кристаллографической системе координат имеем

$$\langle \mu_{ij}(\mathbf{r}) \mu_{kl}(\mathbf{r}) \rangle_\omega = \frac{b^2}{12 h^2} [\delta_{ij} \delta_{kl} + 2\delta_{i(k} \delta_{l)j} - \sum_{n=1}^3 \delta_{in} \delta_{jn} \delta_{kn} \delta_{ln}] \delta(V) \quad (2.2)$$

Усредним теперь (2.2) по объему кристалла, это дает

$$\Delta_{ij}^{kl} = \frac{\gamma b^2}{12 h^2} [\delta_{ij} \delta_{kl} + 2\delta_{i(k} \delta_{l)j} - \sum_{n=1}^3 \delta_{in} \delta_{jn} \delta_{kn} \delta_{ln}] \quad (2.3)$$

где γ — относительный объем, занятый дислокационными дисками.

Корреляционную функцию M_{ij}^{kl} представим как произведение тензорной Δ_{ij}^{kl} и координатной $\varphi(\mathbf{r})$ составляющих

$$M_{ij}^{kl}(\mathbf{r}) = \Delta_{ij}^{kl} \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

Функция $\varphi(\mathbf{r})$ определяется законом распределения дислокационных петель по объему кристалла. Выражение (2.4) вместе с (1.5) и (1.13) позволяет представить корреляционный тензор внутренних напряжений в виде

$$\Sigma_{ij}^{kl}(\mathbf{r}) = 4G^2 \psi_{ij}^{pq} \psi_{mn}^{kl} \varepsilon_{vam} \varepsilon_{sbp} \varepsilon_{ncl} \varepsilon_{qdr} \Delta_{rs}^{tu} I_{ab}^{cd}(\mathbf{r}), \quad \psi_{mn}^{kl} \equiv m \delta_{mn} \delta_{kl} - \delta_{k(m} \delta_{n)l} \quad (2.5)$$

$$I_{ij}^{kl} \equiv \nabla_i \nabla_j \nabla_k \nabla_l I(\mathbf{r}), \quad I_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \frac{\varphi(\mathbf{k})}{k^4} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (2.6)$$

Вычислим вначале дисперсию внутренних напряжений. Для этого примем во внимание, что $\varphi(0) \equiv 1$, а также соотношения

$$\int_0^\infty \varphi(k) k^2 dk = 2\pi^2 \varphi(0), \quad \int n_i n_j n_k n_l d\Omega = \frac{4\pi}{15} \delta_{ijkl} \quad (2.7)$$

$$\delta_{ijkl} \equiv \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}, \quad n_i \equiv k_i/k$$

Тогда, переходя в (2.6) к сферическим координатам, находим

$$I_{ij}^{kl}(0) = 1/15 \delta_{ijkl} \quad (2.8)$$

Отсюда

$$\Sigma_{ij}^{kl}(0) = \frac{g^2}{45} \left[v \delta_{ij} \delta_{kl} + 14 \delta_{ik} \delta_{jl} - 3 \sum_{n=1}^3 \delta_{in} \delta_{jn} \delta_{kn} \delta_{ln} \right] \quad (2.9)$$

$$g^2 \equiv \frac{\gamma b^2}{h^2} G^2, \quad v \equiv 96 m^2 - 64 m + 7$$

Из (2.9) следует, что автокорреляционный тензор внутренних напряжений обладает кубической симметрией. Переходя от тензорных обозначений к матричным, приведем три независимые компоненты этой величины

$$\Sigma_{11} = \frac{2g^2}{45} (48m^2 - 32m + 9), \quad \Sigma_{12} = \frac{vg^2}{45}, \quad \Sigma_{44} = \frac{7g^2}{45} \quad (2.10)$$

По известной дисперсии внутренних напряжений может быть найдена плотность внутренней энергии, связанной с дислокациями

$$U = 1/2 s_{ijkl} \Sigma_{ij}^{kl}(0) \quad (2.11)$$

Подставляя сюда значение $\Sigma_{ij}^{kl}(0)$ согласно (2.9), получаем

$$U = 1/30 g^2 [v (s_{11} + 2s_{12}) + 11s_{11} + 7s_{44}] \quad (2.12)$$

Энергетической характеристикой неоднородности распределения внутренних напряжений может быть спектральная плотность энергии $E(k)$. Последняя определяется соотношением [14]

$$U = \int_0^\infty E(k) dk \quad (2.13)$$

Величина $E(k)$ следующим образом связана с трансформантой Фурье корреляционного тензора внутренних напряжений

$$E(k) = \frac{k^2}{16\pi^3} s_{ijkl} \int \Sigma_{ijkl}(\mathbf{k}) d\Omega \quad (2.14)$$

Отсюда, используя равенства (2.5) и (2.6), получаем

$$E(k) = \frac{1}{2\pi^2} U k^2 \varphi(k) = \frac{4}{\pi} a^3 U k^2 (1 + a^2 k^2)^{-2} \quad (2.15)$$

где координатная зависимость корреляционного тензора принята экспоненциальной с масштабом корреляции a

$$\varphi(r) = \exp(-r/a), \quad \varphi(k) = 8\pi a^3 (1 + a^2 k^2)^{-2} \quad (2.16)$$

Из выражения (2.15) следует, что для длинных волн $E(k) \sim k^2$, тогда как для коротких $E(k) \sim k^{-2}$. Максимум $E(k)$ приходится на значение $k = a^{-1}$.

Для оценки влияния материала на величины Σ и U введем новые параметры равенствами

$$u = U/\gamma, \quad p_{mn} = (\gamma^{-1} \Sigma_{mn})^{1/2}$$

Значения этих параметров для четырех материалов приведены в таблице. При вычислении u и p_{mn} принималось, что толщина дислокационных дисков равна вектору Бюргерса. Из таблицы видно, что при одинаковой плотности дислокационных петель наибольшей энергией обладает кремний и наименьшей — алюминий.

	$G, 10^{12} \text{ дн/см}^2$	m	$p_{11}, 10^{12} \text{ дн/см}^2$	$p_{12}, 10^{12} \text{ дн/см}^2$	$p_{44}, 10^{12} \text{ дн/см}^2$	$u, 10^{12} \text{ эрг/см}^3$
Al	0.26	1.54	0.46	0.45	0.10	0.23
Cu	0.55	1.48	0.94	0.80	0.22	0.56
Ge	0.56	1.24	0.79	0.74	0.22	0.59
Si	0.68	1.28	0.97	0.92	0.26	0.65

Для оценки параметра γ учтем, что в алюминии и меди диаметр дислокационных петель $\sim 10^2 \text{ \AA}$, их плотность $\sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$ [5]. Отсюда $\gamma \sim 10^{-6}$, что соответствует концентрации закалочных вакансий. Имея это в виду, для алюминия находим

$$\Sigma_{11}^{1/2} = 5 \text{ кГ/мм}^2, \quad \Sigma_{44}^{1/2} = 1 \text{ кГ/мм}^2, \quad U = 2 \cdot 10^5 \text{ эрг/см}^3$$

3. Выше были вычислены дисперсия и внутренняя энергия дислокационных напряжений. Перейдем теперь к нахождению бинарной корреляционной функции дислокационных напряжений.

Вычисление интегралов, введенных равенствами (2.6), при условии (2.16) дает

$$I(r) = a^4 [(1 + 4\rho^{-1}) e^{-\rho} - 4\rho^{-1} (1 + 1/4\rho^2)], \quad \rho \equiv r/a \quad (3.1)$$

$$I_{ij}^{kl}(r) = f_1(\rho) \delta_{ijkl} + f_2(\rho) n_i n_j n_k n_l + f_3(\rho) P_{ijkl} \quad (3.2)$$

$$P_{ijkl} \equiv 2(\delta_{ij} n_k n_l + \delta_{ik} n_j n_l + \delta_{il} n_j n_k)$$

$$\begin{aligned} \rho^5 f_1 &\equiv -12 + \rho^2 + (12 + 12\rho + 5\rho^2 + \rho^3) e^{-\rho} \\ \rho^5 f_2 &\equiv 3(100 - 7\rho^2) - (300 + 300\rho + 129\rho^2 + 29\rho^3 + 2\rho^4 - \rho^5) e^{-\rho} \\ \rho^5 f_3 &\equiv 3(20 - \rho^2) - (60 + 60\rho + 27\rho^2 + 7\rho^3 + \rho^4) e^{-\rho} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Квадратные скобки, использованные в равенстве (3.2), означают симметризацию по парам индексов, например

$$\delta_{[ij} n_k n_l] \equiv 1/2 (\delta_{ij} n_k n_l + \delta_{kl} n_i n_j) \quad (3.4)$$

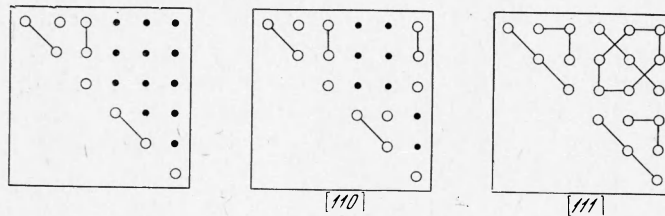
Подставляя найденные выражения (2.3), (3.2) и (3.3) в (2.5), получаем

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij}^{kl}(\mathbf{r}) = & \frac{g^2}{3} \left[\varphi_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + \varphi_2 \delta_{i(k} \delta_{l)j} + \varphi_3 \sum_{n=1}^3 \delta_{in} \delta_{jn} \delta_{kn} \delta_{ln} + \right. \\ & + 2\varphi_4 \delta_{[ij} n_k n_{l]} + \varphi_5 n_{(i} \delta_{j)(k} n_{l)} + 2\varphi_6 \delta_{[ij} \sum_{n=1}^3 \delta_{kn} \delta_{ln} n_n^2 + \\ & + 2\varphi_7 \sum_{n=1}^3 \delta_{[in} \delta_{jn} n_{(k} \delta_{l)n]} n_n + \varphi_8 \sum_{n=1}^3 \delta_{n(k} \delta_{l)(i} \delta_{j)n} n_n^2 + \\ & \left. + \varphi_9 n_i n_j n_k n_l + 2\varphi_{10} \delta_{[ij} \sum_{n=1}^3 n_{(k} \delta_{l)n]} n_n^3 + \varphi_{11} \sum_{n=1}^3 \delta_{n(i} n_j) \delta_{n(k} n_l) n_n^2 \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

где функции $\varphi_i(\rho)$ определяются равенствами

$$\begin{aligned} \varphi_1 & \equiv v f_1 + \left[7m^2 - 6m + 2 - (m-1)^2 \sum_{n=1}^3 n_n^4 \right] f_2 + (64m^2 - 58m + 8) f_3 \\ \varphi_2 & \equiv 2(7f_1 + f_2 + 8f_3), \quad -\varphi_3 \equiv 3f_1 + f_2 + 6f_3 \\ \varphi_4 & \equiv 2[(2m-1)f_2 + (11m-2)f_3], \quad -\varphi_5 \equiv 4(f_2 + f_3) \\ \varphi_6 & \equiv (m-1)(f_2 + f_3) \\ \varphi_7 & \equiv 2(f_2 + 3f_3), \quad -\varphi_8 \equiv 4f_3, \quad \varphi_9 = 4\varphi_{10} = -\varphi_{11} \equiv 4f_2 \end{aligned} \quad (3.6)$$

Из выражения (3.5) следует, что для трех характерных направлений [001], [110] и [111] корреляционная матрица внутренних напряжений имеет вид, представленный на фиг. 1. Здесь кружками обозначены эле-



Фиг. 1

менты матрицы, отличные от нуля, точками — равные нулю, а линией соединены одинаковые элементы. В первом и третьем случаях корреляционная матрица Σ_{mn} характеризуется шестью различными элементами, а во втором — девятью.

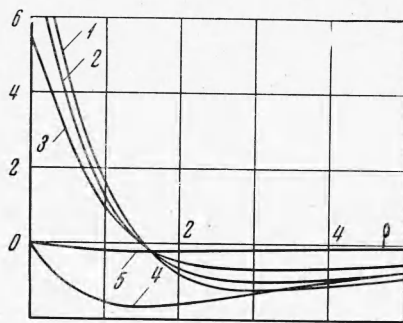
Как и следовало ожидать, симметрия матрицы Σ_{mn} оказывается более низкой, чем кубическая, так как наряду с анизотропным распределением дислокационных петель, согласованным с кубической симметрией среды, корреляционная матрица характеризуется выделенным направлением в пространстве, соединяющим две точки, между которыми имеется корреляционная связь.

Явные значения компонент матрицы Σ_{mn} легко находятся из выражения (3.5). Например, для направления [001] будем иметь

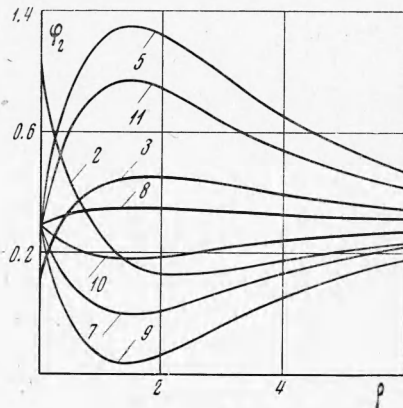
$$\begin{aligned} \Sigma_{11}^{\circ} &= \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3, \quad \Sigma_{33}^{\circ} = \Sigma_{11}^{\circ} + \varphi_5 + \varphi_8 + 2(\varphi_4 + \varphi_6 + \varphi_7 + \varphi_{10}) \\ 2\Sigma_{66}^{\circ} &= \varphi_2, \quad \Sigma_{12}^{\circ} = \varphi_1, \quad 4\Sigma_{44}^{\circ} = 2\varphi_2 + \varphi_5 + \varphi_8, \\ \Sigma_{13}^{\circ} &= \varphi_1 + \varphi_4 + \varphi_6 + \varphi_{10}, \quad \Sigma_{mn}^{\circ} \equiv \frac{3}{g^2} \Sigma_{mn} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Как видно из выражений (3.5) и (3.7), координатная зависимость компонент тензора Σ_{mn} определяется функциями φ_i . Три из них φ_1 , φ_4 , φ_6 зависят от упругих модулей кристалла, кроме того, поведение функции φ_1 зависит от направления, вдоль которого рассматриваются корреляционные связи. Графики этих функций представлены на фиг. 2. Кривые 1, 2, 3 — зависимости $\varphi_1(\rho)$ для алюминия, меди и германия (кремния) соответственно. Функции $\varphi_i(\rho)$, инвариантные относительно упругих свойств и направлений, приведены на фиг. 3. Здесь цифры указывают индекс функции φ_i .

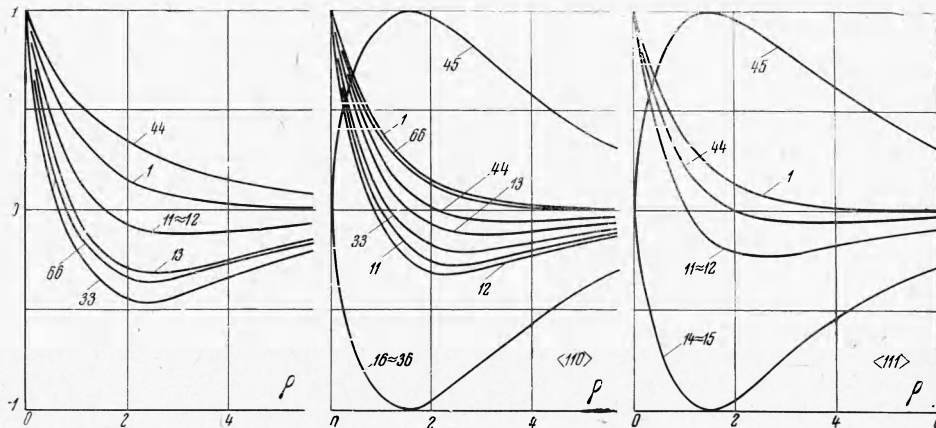
Как видно из фигур, все функции φ_i имеют экстремум при $1.5 \leq \rho \leq 3$, после чего быстро убывают с увеличением расстояния. Угловая зависимость функции φ_1 оказывается слабой. Так, на расстояниях порядка масштаба корреляции различие в функциях φ_1 , вычисленных для направлений $[001]$, $[110]$ и $[111]$ составляет 1%. Зависимость от упругих модулей функции φ_1 оказывается существенной при малых ρ и практически исчезает на расстояниях, превышающих несколько масштабов корреляции, что иллюстрируется кривыми 1—3 на фиг. 2. Для функций $\varphi_4(\rho)$ и $\varphi_6(\rho)$ (кривые 4 и 5) эта зависимость пренебрежимо мала.



Фиг. 2



Фиг. 3



Фиг. 4

Координатные зависимости компонент корреляционной матрицы внутренних напряжений, соответствующие ориентировкам $[001]$, $[110]$ и $[111]$ отрезка, связывающего точки, между которыми устанавливается корреляционная связь, приведены на фиг. 4. Цифрами у кривых указаны индексы безразмерных корреляционных функций S_{mn} , полученных путем деления величины $\Sigma_{mn}(r)$ на $\Sigma_{mn}(0)$ в случае $\Sigma_{mn}(0) \neq 0$ и на абсолютную величину максимума (минимума) $\Sigma_{mn}(r)$, если $\Sigma_{mn}(0) = 0$. Для сравнения на графиках нанесена экспонента (кривая 1), описывающая координатную зависимость бинарной корреляционной функции дислокационной поляризации.

Сопоставляя кривые для направления $[001]$, замечаем, что монотонное убывание имеет место лишь для компоненты S_{44} . Во всех остальных случаях кривые проходят через минимум, имеющий место на расстояниях от $\rho = 2$ до $\rho = 3$.

Как видно из структуры матрицы, приведенной на фиг. 1, для направления [001] переход к кубической симметрии налагает дополнительные условия $S_{33} = S_{11}$, $S_{66} = S_{44}$ и $S_{13} = S_{12}$, причем ни одна из компонент матрицы S_{mn} при этом не обращается в нуль. Напротив, для направления [111], характеризующегося также шестью различными компонентами корреляционной матрицы внутренних напряжений, переход к кубической структуре налагает дополнительные условия $S_{14} = S_{15} = S_{45} = 0$. Соответственно этому три из шести различных компонент матрицы S_{mn} при $r \rightarrow 0$ обращаются в нуль. Направление [111] характерно также тем, что ни одна из компонент S_{mn} не описывается монотонной кривой. Отметим также, что компоненты S_{14} и S_{15} оказываются отрицательными, что означает несовпадение знаков случайных составляющих продольной и сдвиговой составляющих упругих полей. В то же время корреляции различных сдвиговых компонент напряжений, описываемых компонентой S_{45} , будут положительными.

Для направления [110] переход к $r \rightarrow 0$ приводит к обращению в нуль компонент $S_{16} = S_{26}$, S_{36} и S_{45} . При этом функция S_{45} во всей области положительна, тогда как компоненты $S_{16} \approx S_{36}$ отрицательны. Монотонный спад имеет место для компоненты S_{66} , тогда как функции S_{11} , S_{12} , S_{33} , S_{13} и S_{44} переходят в область отрицательных значений на расстояниях порядка одного-двух масштабов корреляций и имеют минимум на расстояниях $2 \leq \rho \leq 3$, после чего наблюдается их асимптотическое приближение к оси абсцисс.

Для сопоставления абсолютных величин корреляционных тензоров внутренних напряжений введем параметр z_{mn} , равный отношению $\Sigma_{mn}(0)$ к значению $\Sigma_{11}(0)$. Тогда, выбирая для определенности алюминий, для всех направлений найдем $z_{12} = 0.92$ и $z_{44} = 0.047$, т. е. корреляция между сдвиговыми составляющими поля оказывается существенно более слабой, чем между продольными.

Для сравнения компонент Σ_{mn} , которые при $r \rightarrow 0$ обращаются в нуль, введем коэффициенты ζ_{mn}^* , определив их как отношение экстремального значения Σ_{mn}^* к наибольшей из величин Σ_{pq}^* при данном ρ^* . Все функции S_{mn} имеют максимум (минимум) при $\rho = 1.5$. Наибольший из максимумов для направления [111] имеет компонента Σ_{14} , а для [110] — Σ_{36} . Соответственно в первом случае находим $\zeta_{15}^{14} = 0.76$, $\zeta_{45}^{14} = 0.045$, а во втором — $\zeta_{16}^{37} = 0.95$, $\zeta_{45}^{36} = 0.18$. Сопоставление значений Σ_{14} для направления [111] и Σ_{36} для [110] в точках минимума ($\rho = 1.5$) с соответствующими величинами $\Sigma_{11}(\rho)$ показывает, что они одного порядка: $\Sigma_{11}(1.5) \approx 2\Sigma_{44}(1.5)$ для направления [111] и $\Sigma_{11}(1.5) \approx 2\Sigma_{36}(1.5)$ для направления [110].

Поступила 23 VI 1970

ЛИТЕРАТУРА

1. Сб. «Напряжения и дислокации в полупроводниках» М., Ин-т кристаллографии АН СССР, 1962.
2. Струнин Б. М. О распределении внутренних напряжений при случайном расположении дислокаций. Физика твердого тела, 1967, т. 9, вып. 3.
3. Кривоглаз М. А., Масюкевич А. М., Рябошапка К. П. Энергия хаотически распределенных дислокаций. В сб.: «Несовершенства кристаллического строения» Киев. «Наукова думка», 1968.
4. Gaal I., Geszti T. Internal stresses and dislocation distribution. Scripta Metallurgica, 1969, vol. 3, No. 3.
5. Фридель Ж. Дислокации. М., «Мир», 1967.
6. Кунин И. А. Тензор Грина для анизотропной упругой среды с источниками внутренних напряжений. Докл. АН СССР, 1964, т. 157, № 6.
7. Фокин А. Г., Шермергор Т. Д. К определению границ эффективных упругих модулей неоднородных твердых тел. ПМТФ, 1968, № 4.
8. Рагимов И. А., Арсентьева И. П., Рожанский В. Н. Природа дефектов, возникающих при распаде твердого раствора мышьяка в германии. Физика твердого тела, 1969, т. 11, вып. 4.
9. Bell W. L., Thomas G. Contrast from large prismatic dislocation loops. Philos. Mag., 1966, vol. 13, No. 2.
10. Амалинкс С. Методы прямого наблюдения дислокаций. М., «Мир», 1968.
11. Кабанов Ю. П., Моргулис Л. М., Осипьян Ю. А. Электронномикроскопическое наблюдение призматических дислокационных петель в Ge. Физика твердого тела, 1968, т. 10, вып. 3.
12. Кабанов Ю. П., Моргулис Л. М., Осипьян Ю. А. Поправка к статье «Электронномикроскопическое наблюдение призматических дислокационных петель в Ge». Физика твердого тела, 1969, т. 11, вып. 4.
13. Кунин И. А. Теория дислокаций. Приложение к книге Схоутена Я. А. «Тензорный анализ для физиков», М., «Наука», 1965.
14. Татарский В. И. Распространение волн в турбулентной атмосфере. М., «Наука», 1967.