

УДК 539.37

С.Н. Бедарев, Д.Д. Рудер

Направление скольжения в ГЦК-кристалле при деформации сдвига

Введение. Условия устойчивости кристаллической решетки под действием внешних нагрузок были впервые достаточно полно и систематически исследованы Борном [1]. В работе установлено, что общим условием устойчивости решетки являются условия действительности всех частот нормальных колебаний для всех волновых векторов \vec{k} внутри зоны Бриллюэна:

$$\omega^2(\vec{k}) > 0. \quad (1)$$

Условия (1) можно рассматривать как динамические условия устойчивости кристаллической решетки. В длинноволновом пределе динамические условия устойчивости совпадают с условиями термодинамической устойчивости кристалла при статической однородной деформации.

Анализ динамических условий устойчивости решетки обладает тем несомненным достоинством, что при решении задачи на собственные значения динамической матрицы $D_{\alpha\beta}(\vec{k})$ [2]:

$$D_{\alpha\beta}(\vec{k})e_{\beta}(\vec{k}) = \omega^2(\vec{k})e_{\alpha}(\vec{k}) \quad (2)$$

можно определить и собственные вектора $e_{\alpha}(\vec{k})$, направление которых совпадает с направлением колебания атомов соответствующей моды колебаний. Направление собственного вектора моды колебаний, частота которой при деформации обращается в нуль, определяет направление, вдоль которого при этом происходит смещение атомов при нарушении условий устойчивости, т.е. механизм разрушения решетки.

В данной работе эта идея применена для исследования механизма разрушения ГЦК решетки серебра при деформации сдвига $(111)\langle 1\bar{2}1 \rangle$ и определения направления неустойчивого смещения атомов в кристалле при нарушении динамического условия устойчивости.

Схемы расположения атомов и моделирования деформации сдвига показаны на рисунке 1. Плотнупакованные плоскости (111) ГЦК решетки в недеформированном состоянии расположены параллельно плоскости $Y = 0$, кристаллографические направления $[1\bar{2}1]$ и $[10\bar{1}]$ ориентированы вдоль осей координат OX и OZ соответственно. Деформация сдвига осуществляется путем наклона кристаллографического

направления $[111]$ в сторону оси OX , при этом атомные плоскости (111) сдвигаются параллельно вдоль оси OX , величина сдвига характеризуется углом сдвига γ между направлением $[111]$ и осью OY .

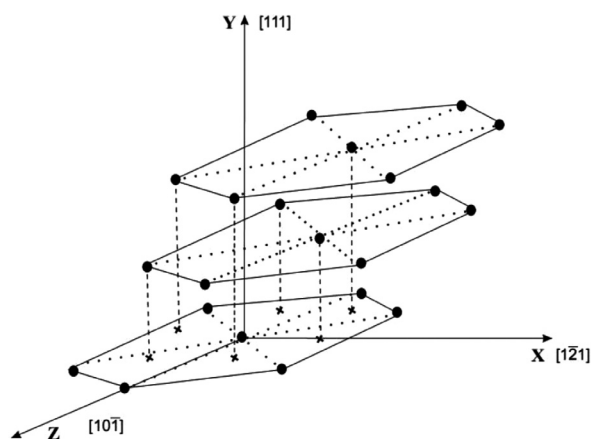


Рис. 1. Схема моделирования сдвига $(111)\langle 1\bar{2}1 \rangle$

В качестве модели межатомного взаимодействия использована разработанная авторами модель [3], основанная на методе внедренного атома [4].

В зависимости от угла сдвига γ были рассчитаны фоновые спектры для следующих 25 направлений волнового вектора: $[001]$, $[010]$, $[100]$, $[110]$, $[1\bar{1}0]$, $[101]$, $[10\bar{1}]$, $[011]$, $[01\bar{1}]$, $[111]$, $[11\bar{1}]$, $[1\bar{1}1]$, $[\bar{1}11]$, $[112]$, $[11\bar{2}]$, $[1\bar{1}2]$, $[\bar{1}12]$, $[121]$, $[12\bar{1}]$, $[1\bar{2}1]$, $[\bar{1}21]$, $[211]$, $[21\bar{1}]$, $[2\bar{1}1]$, $[\bar{2}11]$. Анализ фоновых частот в этих направлениях показал, что первыми обращаются в нуль квадраты частот поперечной моды T_2 в направлении $[111]$, независимо от значения модуля волнового вектора (рис. 2), критический угол сдвига $\gamma_{кр} \approx 0,15$.

Для уточнения минимального критического угла сдвига и соответствующего волнового вектора, при котором нарушаются динамические условия устойчивости, были рассчитаны фоновые спектры для произвольных направлений волнового вектора в зависимости от сферических координат волнового вектора $\vec{k}(k, \vartheta, \phi)$, где k – модуль волнового вектора; ϑ – угол между вектором \vec{k} и осью Oy ; ϕ – угол меж-

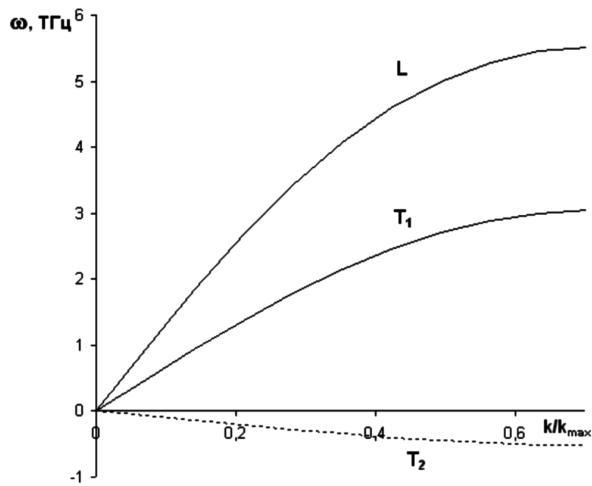


Рис. 2. Фононные спектры Ag для направления волнового вектора [111] при угле сдвига $\gamma_{кр} \approx 0,15$

ду проекцией вектора \vec{k} на плоскость XOZ и осью OX .

Так как нарушение динамических условий устойчивости (1) в данном направлении происходит одновременно независимо от модуля волнового вектора, то ниже приведены результаты расчета для фиксированного значения модуля волнового вектора $k/k_{max} = 0,1$.

Результаты расчета фононных спектров для произвольных направлений волнового вектора показали, что первым происходит нарушение динамического условия устойчивости (1) также для моды T_2 вблизи окрестности направления [111]. На рисунке 3 приведены результаты расчета частот фононов для моды T_2 в зависимости от угла θ для волнового вектора \vec{k} , лежащего в плоскости $(10\bar{1})$ ($\varphi = 0^\circ$), для значений угла сдвига $\gamma = 0,1308$, $\gamma = 0,13085$ и $\gamma = 0,1309$. Из рисунка 3 видно, что критической является деформация сдвига $\gamma = 0,13085$, при которой обращается в нуль частота фононов для направления волнового вектора \vec{k} с координатами $\mathcal{G}_{крит} = -7,0^\circ$ и $\varphi = 0,0^\circ$.

Декартовы координаты собственного вектора $e_{T_2}(\vec{k})$ равны: $(0,98922; 0,14643; 0)$. Таким образом, поскольку Z-координата вектора $e_{T_2}(\vec{k})$ равна нулю, то вектор $e_{T_2}(\vec{k})$ лежит в кристаллографической плоскости $[10\bar{1}]$. Угол наклона вектора $e_{T_2}(\vec{k})$ к плоскости (111) равен $8,42^\circ$.

Для того чтобы исследовать условия динамической устойчивости для волнового вектора \vec{k} , не ле-

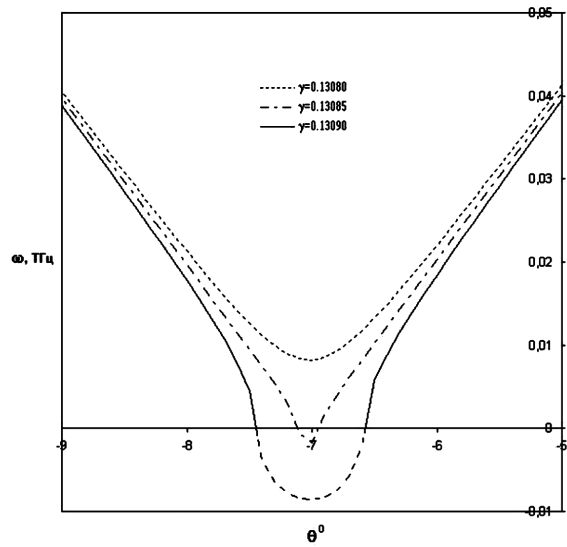


Рис. 3. Частоты фононов для моды T_2 в зависимости от угла θ при $\varphi = 0^\circ$ для разных значений угла сдвига γ ($k/k_{max} = 0,1$)

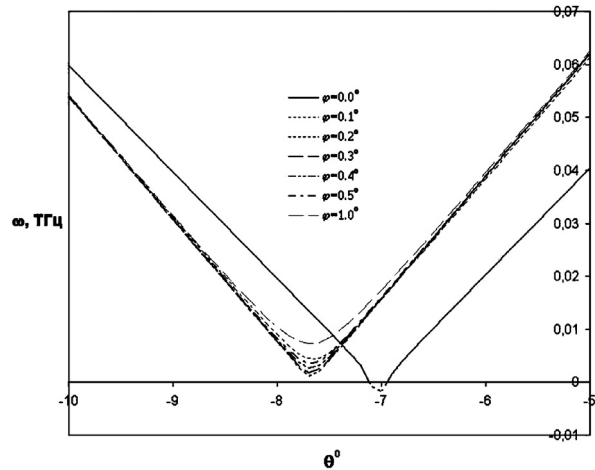


Рис. 4. Частоты фононов для моды T_2 в зависимости от угла θ для разных значений угла φ при значении $\gamma_{кр} \approx 0,13085^\circ$

жащего в плоскости $(10\bar{1})$, были проведены расчеты частот фононов для моды T_2 в зависимости от угла θ в окрестности критического значения $\mathcal{G}_{крит} = -7,0^\circ$ для разных значений угла φ . Результаты расчета для значения $\gamma_{кр} \approx 0,13085$ приведены на рисунке 4. Из рисунка видно, что для волнового вектора \vec{k} , не лежащего в плоскости $(10\bar{1})$, нарушение динамических условий устойчивости происходит позже, чем для вектора \vec{k} , лежащего в плоскости $(10\bar{1})$.

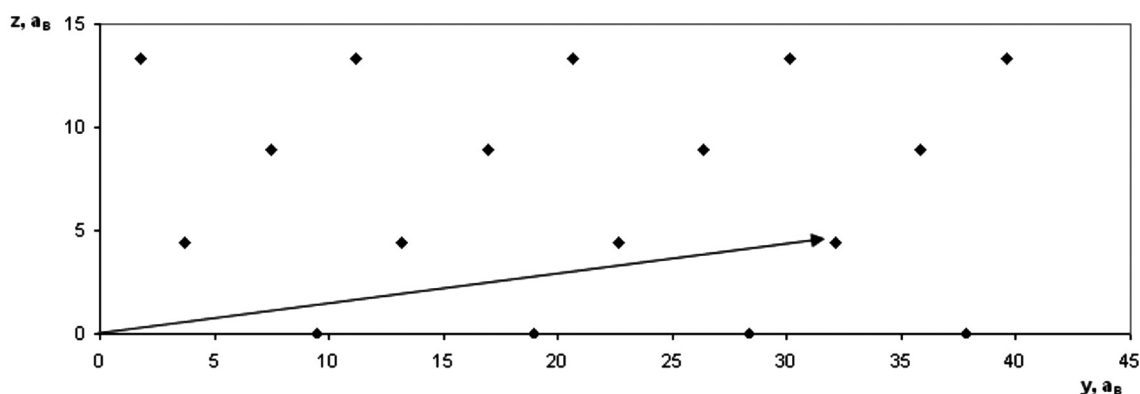


Рис. 5. Расположение атомов в плоскости $[10\bar{1}]$

На рисунке 5 приведено расположение атомов в плоскости $[10\bar{1}]$ при деформации сдвига со значением $\gamma_{кр} \approx 0,13085$, там же показано направление собственного вектора $e_{T_2}(\vec{k})$. На схеме видно, что направление вектора $e_{T_2}(\vec{k})$ с хорошей точностью совпадает с кристаллографическим направлением $[2\bar{3}2]$.

Таким образом, наиболее опасное направление движения атомов в кристалле при деформации сдвига $(111)\langle 1\bar{2}1 \rangle$, приводящее к структурной неустойчивости, не полностью совпадает с направлением $\langle 1\bar{2}1 \rangle$, лежащим в плоскости (111) , а имеет перпендикулярную составляющую в направлении $[111]$, поэтому при деформации сдвига $(111)\langle 1\bar{2}1 \rangle$ должно происходить увеличение межплоскостного расстояния между плотноупакованными плоскостями (111) .

Библиографический список

1. Борн, М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь. – М., 1958.
2. Марадудин, А. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении / Марадудин А., Э. Монтролл, Дж. Вейсс. – М., 1965.
3. Бедарев, С.Н. / С.Н. Бедарев, Д.Д. Рудер // Известия АлтГУ. – 2007. – №1(43).
4. Daw, M.S. / Daw M.S., M.I. Baskes // Phys. Rev. – 1984. – V. B29.