

# Влияние дискретных бризеров на пластичность и прочность кристаллов

Дубинко В.И.<sup>1†</sup>, Дубинко А.В.<sup>2</sup>, Дмитриев С.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ННЦ “Харьковский физико-технический институт”, Харьков 61108, Украина

<sup>2</sup>Институт Электрофизики и Радиационных Технологий НАНУ, Харьков 61002, Украина

<sup>3</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, 450001 Уфа

<sup>†</sup>vdubinko@mail.ru

## Effect of discrete breathers on plasticity and strength of crystals

Dubinko V.I.<sup>1</sup>, Dubinko A.V.<sup>2</sup>, Dmitriev S.V.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> National Science Center “Kharkov Physical-Technical Institute”, Kharkov 61108, Ukraine

<sup>2</sup> Institute of Electrophysics and Radiation Technologies NASU, Kharkov 61002, Ukraine

<sup>3</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems RAS, Khalturin St. 39, 450001 Ufa

Рассмотрены модели взаимодействия дислокаций с дискретными бризерами. Атомные колебания большой амплитуды вызывают модуляцию энергии активации отрыва дислокаций от стопоров, что может значительно ускорять пластическую деформацию в условиях достаточно высокой концентрации бризеров. Такие условия могут реализоваться при облучении кристаллов быстрыми частицами или при достаточно высоких температурах. Проведено сравнение моделей с экспериментальными данными для ряда металлов. Обсуждается возможная роль дискретных бризеров в процессе термоактивированного разрушения растянутого графена.

**Ключевые слова:** дискретные бризеры, дислокации, пластическая деформация, графен, разрушение.

Models of the dislocation interaction with discrete breathers (DB) are considered. Large amplitude oscillations of atoms about their equilibrium positions in the lattice cause time-periodic modulations of the potential barriers for the dislocation unpinning from obstacles, which can facilitate plastic deformation severely under sufficiently high DB concentration. Such conditions can be realized under irradiation of crystals with swift particles or under sufficiently high temperatures. The models are compared with experimental data on several metals. Possible role of discrete breathers in thermally activated fracture of graphene under tensile load is discussed.

**Keywords:** discrete breathers, dislocations, plastic strain, graphene, fracture.

### 1. Введение

Хорошо известно, что дефекты, создаваемые облучением в объеме металлов, действуют как дополнительные центры закрепления дислокаций, что приводит к явлению радиационного упрочнения, которое интенсивно изучается [1,2]. Однако, возникает все больше экспериментальных свидетельств того, что механические свойства металлов в процессе облучения отличаются от таковых после облучения [3-12]. Еще в 60–70-е гг. прошлого столетия были выполнены пионерские работы по изучению влияния облучения на деформацию некоторых ГПУ-кристаллов [3,4]. Было обнаружено повышение пластичности при низкотемпературном облучении монокристаллов цинка электронами и  $\gamma$ -квантами с энергией ниже порога выбивания атомов при условии совпадения направления пучка с базисной плоскостью кристалла. Последующие исследования показали, что аналогичный эффект наблюдается при пропускании через ГПУ и ГЦК металлы импульсов электрического

тока плотностью порядка  $10^5$  A/cm<sup>2</sup>, длительностью  $\sim 100$   $\mu$ s и частотой следования  $\sim 1$  Hz [4]. Такие методы обработки были названы электронно-пластической деформацией (ЭПД) [4-6]. Прямые механические испытания при облучении нейтронами в ядерном реакторе [3] показали снижение *эффективного* модуля сдвига железа и его сплавов. Эффект был обратимым, то есть пластичность увеличилась до исходного уровня после прекращения облучения. В работах [9-11] было показано, что облучение ГЦК металлов (Al, Al-3Mg, Cu) электронным пучком с энергией  $0.5$  MeV и плотностью потока  $\varphi = (0.5 \div 5) \times 10^{17}$  m<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> при деформации растяжения со скоростью  $10^{-4}$  s<sup>-1</sup> приводит к обратимому снижению текучести и повышению предельной деформации до разрушения. То есть металл при облучении мгновенно становится менее жестким и менее хрупким по сравнению с состоянием до и после облучения. В работе [12] исследована пластическая деформация железа технической чистоты (ОЦК структура) со скоростью

$2 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  при облучении электронным пучком с энергией  $0.5 \text{ MeV}$  и плотностью потока  $\varphi = 2.4 \times 10^{17} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ . Предел текучести железа при облучении снизился также как и его устойчивость к разрушению. Таким образом, в этом случае материал при облучении стал одновременно и менее жестким и более хрупким. Эти результаты означают, что динамика дислокаций может быть изменена вследствие их взаимодействия с радиационными возбуждениями.

Попытки объяснить ЭПД при облучении взаимодействием дислокаций с термическими всплесками (ТВ) успеха не имели, т.к. интенсивность и время жизни ТВ недостаточно велики для получения ощутимого эффекта [13]. В работе [14] предложен фокусонный механизм ЭПД, обусловленный неравновесными флуктуациями энергетических состояний атомов дислокаций, при рассеянии на них радиационно-индуцированных возбуждений атомной структуры металла – фокусоннов. Эффективность этого механизма в сильной степени определяется длиной сводного пробега фокусоннов, которая может достигать нескольких десятков атомных расстояний при достаточно низких температурах. Однако фокусонны рассеиваются на фононах и потому они термически нестабильны в области повышенных температур ( $>20^\circ\text{C}$ ), в которой эффект ЭПД наблюдается экспериментально.

Несмотря на широкое применение и большое количество работ по изучению ЭПД при пропускании электрического тока, управляющий механизм этого явления не вполне ясен до сих пор [7]. Так, наиболее популярный механизм «электронного ветра» предсказывает возникновение дополнительной силы, действующей на дислокации за счет увлечения электронным потоком. Однако, возникающая сила на два порядка меньше, чем сила, обусловленная внешней нагрузкой, что не может объяснить наблюдаемых эффектов. Кроме того, плотность тока при электронном облучении, приводящем к эффекту ЭПД, на 10 порядков меньше, чем при обработке импульсным током, т.е. сила «электронного ветра» при этом ничтожна. Теплообмен между «горячими» электронами и дислокационными фононами приводит к перенормировке эффективной температуры, которая играет важную роль в пластичности металлов [15,16]. Однако средняя энергия фононной системы при типичных параметрах ЭПД существенно не меняется (по сравнению с обычным джоулевым нагревом), и соответственно, существенного увеличения эффективной температуры дислокационных фононов не происходит.

В данном обзоре рассмотрены модели ЭПД, которые строятся в рамках принципиально новой концепции – взаимодействия дислокаций с дискретными бризерами. Дискретные бризеры (DB – от английского Discrete Breather) – это локализованные в пространстве и периодические во времени возбуждения большой амплитуды, широко распространенные в нелинейных дискретных системах [17-20]. Они имеют частоты выше или ниже фононной зоны; поэтому DB практически не взаимодействуют с фононами, и их времена жизни велики по сравнению с фононными. В кристаллах с достаточной степенью ангармоничности могут возникать как «сидя-

чие» DB (при остывании термических всплесков под облучением [10,21] или при рассеянии «горячих» электронов на атомах решетки под действием электрического тока [16]), так и мобильные DB – так называемые куддоны. Куддоны получают энергию и импульс от налетающих частиц, и передают их вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений с суб-звуковыми скоростями [22,23]. В недавних теоретических работах гипотеза мобильных DB была подтверждена теоретическими расчетами и MD моделированием, которое продемонстрировало существование сидячих DB в Nb и Ni [24], а также подвижных DB в Fe [25].

Во второй части обзора рассмотрены физические следствия термически-активированного образования DB при достаточно высоких температурах в термодинамически равновесных условиях. Механизм термически-активированного образования DB рассматривался для объяснения аномально быстрых фазовых переходов в слоистых силикатах [20,21]. В данном обзоре он анализируется с точки зрения влияния на высокотемпературную прочность таких технологически важных материалов как уран и графен.

## 2. Термофлуктуационный механизм генерации DB под облучением

Одним из классических механизмов радиационного воздействия на структурные характеристики материалов является механизм радиационно-индуцированных термических всплесков (ТВ) [27]. При электронном облучении основная доля энергии тратится на возбуждение электронной подсистемы металла, которая передает энергию кристаллической решетке (и структурным дефектам) посредством электрон-фононного взаимодействия. Это может приводить к повышению энергии колебаний дислокационных сегментов, что помогает им отрываться от локальных препятствий. Теория ТВ-индуцированного ускорения скоростей реакций с последовательным учетом электрон-фононного взаимодействия [13] показывает, что интенсивность ТВ при электронном облучении недостаточно велика для ощутимого ускорения реакций. Однако, как показано в работе [21], повышение пластичности металлов может быть следствием образования DB при остывании радиационно-индуцированных ТВ, которое было продемонстрировано методом МД моделирования [19]. Рассмотрим вначале основные экспериментальные результаты.

Воздействие электронного пучка с энергией  $0.5 \text{ MeV}$  и плотностью потока электронов  $\varphi = (0.5 \div 5) \times 10^{17} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  на пластическое течение металла при растягивающих деформациях со скоростью  $10^{-4} \text{ s}^{-1}$  при комнатной температуре исследовалось в режимах: (1) циклического включения электронного облучения на время от 10 до 100 s (дифференциальный режим) и (2) непрерывного облучения. На рис. 1 приведен участок кривой нагружения поликристаллического алюминия с изменениями, вызванными воздействием электронного потока  $\varphi$  при разных временах экспозиции в диапазоне от 5 до 60 s.

Видно, что при включении электронного пучка происходит почти мгновенное снижение уровня деформирующего напряжения на  $\delta P_\phi$ . При временах облучения более 10 с наблюдается также стадия линейного во времени снижения действующей нагрузки. Прохождение электронного потока через образец всегда приводит к снижению скорости деформационного упрочнения:  $\theta > \theta_\phi$ . После выключения электронного пучка ( $\phi = 0$ ) происходит восстановление уровня деформирующего усилия на  $\delta P_\phi$  и дальнейшее его увеличение со скоростью  $\theta$ . В дальнейшем зависимость  $P(t)$  пересчитывалась в кривую деформационного упрочнения металла  $\sigma(\epsilon)$  ( $\sigma$  - напряжение,  $\epsilon$  - деформация), из которой определялись динамические характеристики ЭПД -  $\delta\sigma_\phi$  и  $\theta = d\sigma/d\epsilon$ .

Особый интерес представляет поведение начального (обратимого) скачка деформирующего напряжения  $\delta\sigma_\phi$  на различных участках диаграммы деформирования. На рис.2 приведена зависимость величины скачка  $\delta\sigma_\phi$  от относительной деформации  $\epsilon$  образцов меди и алюминия различной толщины. Характерным является линейное нарастание  $\delta\sigma_\phi$  с ростом  $\epsilon$  до достижения предела прочности материала.

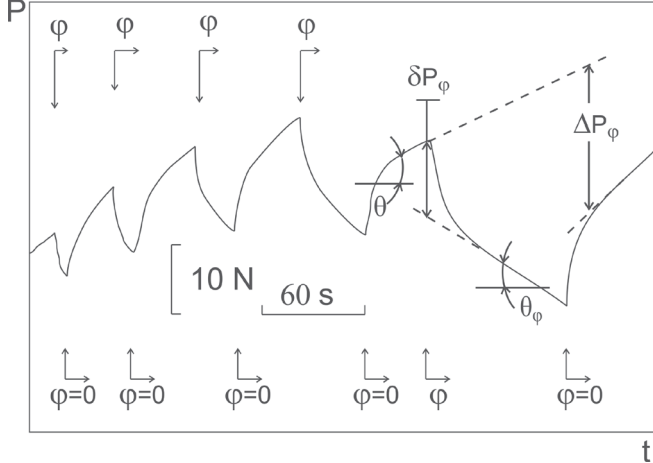


Рис.1. Скачки нагрузки в процессе деформации образца алюминия при разных временах экспозиции электронного потока  $\phi$ .

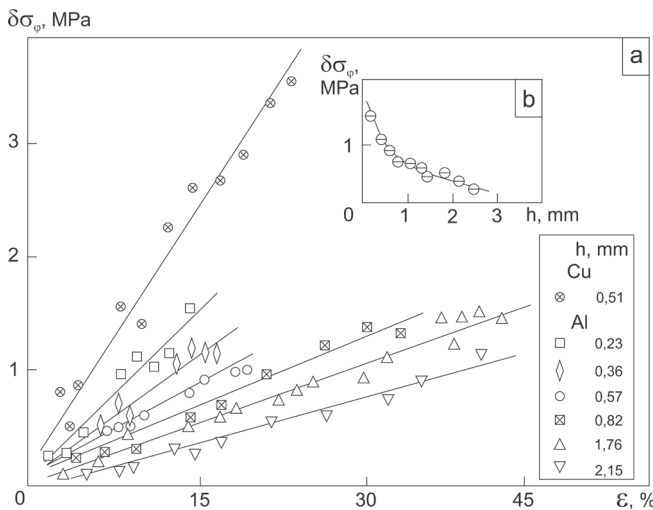


Рис.2. (а) Изменение радиационно-индуцированного скачка разупрочнения  $\delta\sigma_\phi$  как функция степени относительного удлинения  $\epsilon$  для образцов меди и алюминия разной толщины  $h$ . На вставке (б) показана зависимость  $\delta\sigma_\phi$  ( $\epsilon = 15\%$ ) от толщины алюминиевого образца  $h$  в направлении электронного потока.

Практически мгновенный обратимый скачок  $\delta\sigma_\phi$  характеризует атермический отклик имеющейся дислокационной структуры на облучение, поскольку температура и дислокационная структура не успевают измениться за время скачка. Его величина убывает, когда толщина образцов превышает толщину облучаемого слоя (см. рис. 2,б), что подтверждает его радиационную природу. Величина  $\delta\sigma_\phi$  больше для меди, чем для алюминия, и возрастает линейно с ростом уровня деформации во всех исследованных металлах (см. рис. 2,а). При уровне деформации  $\epsilon = 15\%$ ,  $\delta\sigma_\phi \approx 2.5 \text{ MPa}$  в меди, и порядка  $1 \text{ MPa}$  в алюминии, что соответствует примерно одинаковой относительной величине скачка,  $\delta\sigma_\phi / \sigma \approx 1\%$ . Последнее обстоятельство указывает на возможную зависимость эффекта от упругих модулей материала.

Согласно [21], электроны  $\text{MeV}$ -ных энергий генерируют в материале ТВ в электронной и ионной подсистемах, при остывании которых флуктуационно зарождаются долгоживущие ДВ, которые взаимодействуют с дислокациями и способствуют их освобождению от препятствий (стопоров). Для иллюстрации этой идеи использована модель дислокационной «струны», в рамках которой ранее проводился анализ ЭПД при импульсном пропускании электрического тока [16]. В этой модели, скорость термически активированной деформации  $\dot{\epsilon}_T$  имеет хорошо известный вид:

$$\dot{\epsilon}_T = \dot{\epsilon}_0 \exp \left\{ -\frac{E_a(\sigma)}{k_B T} \right\}, \quad \dot{\epsilon}_0 = b l_d \rho_d \omega_d,$$

$$\omega_d \approx \frac{2}{\pi b x_{cr}} \sqrt{\frac{H_0 \omega_D b}{\rho v_s}}, \quad (1)$$

где  $b$  - величина вектора Бюргерса,  $\rho_d$  - плотность подвижных дислокаций,  $l_d$  - среднее расстояние между стопорами,  $\omega_D$  - частота Дебая,  $\omega_d$  - частотный множитель, определяющий частоту «попыток» преодоления стопора,  $\rho$  - плотность материала,  $v_s$  - скорость звука,  $x_{cr}$  и  $E_a(\sigma)$  - критическое расстояние и активационная энергия, необходимые для отрыва дислокации от стопора при заданном внешнем напряжении,  $\sigma$ :

$$E_a(\sigma) = H_0 \left( 1 - \frac{\sigma_{eff}}{\sigma_c} \right)^2, \quad \sigma_{eff} = \sigma - \sigma_{in},$$

$$\sigma_c = \kappa \sqrt{c_I}, \quad \sigma_{in} = \frac{\mu b}{2\pi} \sqrt{\rho_d}. \quad (2)$$

Здесь  $H_0$  - активационная энергия преодоления стопора при нулевом эффективном напряжении,  $\sigma_{eff}$ , и  $\sigma_c$  - критическое напряжение срыва дислокации при нулевой температуре (в отсутствие квантовых осцилляций),  $\sigma_{in}$  - внутренние напряжения, создаваемые дислокационной структурой,  $\mu$  модуль сдвига,  $\kappa$  - феноменологический коэффициент, пропорциональный модулю сдвига. Среднее расстояние между стопорами,  $l_d$ , определяется плотностью дислокаций и концентрацией «примесных» центров закрепления,  $c_I$ :

$$l_d(\rho_d, c_l) = \left( \sqrt{\rho_d} + \frac{1}{b} \sqrt{c_l} \right)^{-1} \quad (3)$$

Для вычисления напряжения течения при постоянной скорости деформации, необходимо решить уравнение (1) относительно  $\sigma$ , что приводит к известной зависимости деформационного упрочнения от скорости деформации,  $\dot{\varepsilon}_{ex}$ :

$$\sigma_T = \sigma_{in} + \sigma_c \left( 1 - \sqrt{\frac{k_B T}{H_0} \ln \left( \frac{\dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}_{ex}} \right)} \right) \quad (4)$$

Учет радиационного образования ТВ приводит к перенормировке скорости деформации, которая становится зависящей от плотности потока налетающих частиц,  $\Phi$ , и суммарной энергии,  $\varepsilon_a$ , передаваемой частицей в область ее трека длиной  $L$  [21]:

$$\langle \dot{\varepsilon} \rangle_{TB} \approx 2 \dot{\varepsilon}_0 \left( \frac{k_B T_a^*}{E_a(\sigma)} \right)^2, \quad (5)$$

$$T_a^*(\varphi) \equiv \sqrt{\frac{1}{16\pi} \left( \frac{\varepsilon_a}{L} \right)^2 \frac{\varphi}{\chi_a c_a^2}}, \quad (6)$$

$$\chi_a \equiv (\chi_e c_e + \chi_p c_p) / c_a, \quad (7)$$

где  $c_{e,p}$  и  $\chi_{e,p}$  - теплоемкость и теплопроводность электронной и ионной подсистем, соответственно;  $c_a \equiv c_e + c_p$ , откуда и следует выражение для перенормированного напряжения течения:

$$\sigma_{TB} = \sigma_{in} + \sigma_c \left( 1 - \left( \frac{2 \dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}_{ex}} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{k_B T_a^*(\varphi)}{H_0}} \right) \quad (8)$$

Учет флуктуационного образования DB в радиационно-индуцированных ТВ приводит к дополнительному коэффициенту ускорения реакций срыва дислокаций  $\langle A \rangle_{DB}$ , который зависит от скорости генерации, времени жизни DB и энергии активации [21]:

$$\langle \dot{\varepsilon} \rangle_{DB} = \langle A \rangle_{DB} \langle \dot{\varepsilon} \rangle_{TB}, \quad \langle A \rangle_{DB} \approx A_{DB}^0 E_a^{3/2}, \quad (9)$$

где  $A_{DB}^0$  - перенормированный коэффициент ускорения, зависящий только от параметров DB.

С учетом (9), получаем из (8) и (5) выражение для перенормированного напряжения течения:

$$\sigma_{DB} = \sigma_{in} + \sigma_c \left( 1 - A_{DB}^0 \left( \frac{2 \dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}_{ex}} \right) \frac{[k_B T_a^*(\varphi)]^2}{\sqrt{H_0}} \right). \quad (10)$$

Полученные выражения напряжения течения справедливы для монокристаллов. Для описания деформации поликристаллов их следует умножить на коэффициент Тейлора,  $M = 2.75$  для кубических металлов.

В зависимости от механизма, величина обратимого скачка напряжения течения  $\delta\sigma_\varphi$  определяется разностью выражений для напряжения течения (4), (8), (10)

при нулевом и ненулевом значении  $\Phi$ . Соответственно, классическое выражение (4), не зависящее от  $\Phi$ , дает нулевой ЭПД эффект:  $[\delta\sigma_\varphi]_T = 0$ , в то время как учет ТВ и DB приводит к следующим результатам, показанным на рис. 3:

$$|\delta\sigma_\varphi|_{TB} = M \sigma_c \left( \frac{2 \dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}_{ex}} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{k_B T_a^*(\varphi)}{H_0}}, \quad (11)$$

$$|\delta\sigma_\varphi|_{DB} = M \sigma_c A_{DB}^0 \left( \frac{2 \dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}_{ex}} \right) \frac{[k_B T_a^*(\varphi)]^2}{\sqrt{H_0}}. \quad (12)$$

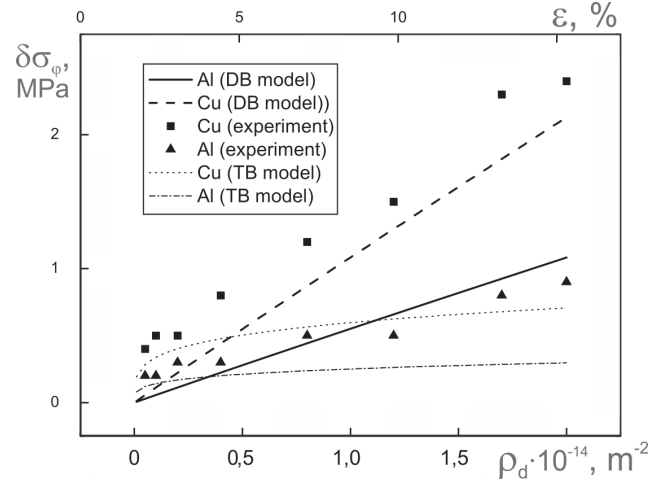


Рис.3. Обратимый скачок напряжения течения  $\delta\sigma_\varphi$  как функция плотности дислокаций и уровня пластической деформации  $\varepsilon$  согласно модели ЭПД [21] по механизмам ТВ (11) и DB (12). Символы показывают экспериментальные данные для образцов Al и Cu с толщиной  $h = 0.51$  mm.

Отметим пропорциональность величины  $\delta\sigma_\varphi$  модулю сдвига материала ( $\sigma_c \propto \kappa \propto \mu$ ) и ее независимость от температуры, что согласуется с экспериментальными наблюдениями. В то же время, зависимость  $\delta\sigma_\varphi$  от плотности потока электронов и плотности дислокаций по механизмам ТВ и DB качественно различна. Первый предсказывает насыщение  $\delta\sigma_\varphi$ , а второй – линейный рост. Согласно классической модели Тейлора, плотность дислокаций пропорциональна уровню пластической деформации [21]:

$$\varepsilon = b \rho_d L_{eff}, \quad (13)$$

где  $L_{eff}$  - среднее расстояние, проходимое дислокациями до остановки в дислокационном «лесу», имеет порядок микрона (см. таблицу). Соответственно, оба механизма предсказывают увеличение эффекта ЭПД с ростом деформации, что согласуется с экспериментом (см. рис. 2,а). Более детальное сравнение показывает (рис. 3), что вклад прямого механизма ТВ может быть замечен только на начальном уровне деформаций, с ростом которого начинает доминировать механизм DB. Он предсказывает линейную зависимость  $\delta\sigma_\varphi$  от уровня пластической деформации, наблюдаемую экспериментально во всех исследованных материалах.

Следует отметить, что уравнение (5), лежащее в основе последующих расчетов, справедливо при условии



достаточно быстрой теплопередачи между электронами и решеткой. Физически это обеспечивает достаточно мощные ТВ в ионной подсистеме. Формально это требует достаточно большого коэффициента электрон-фононного взаимодействия  $\alpha_{ep}$ , который в этом случае не входит в конечные выражения [13]. Расчетные значения  $\alpha_{ep}$  не удовлетворяют этому критерию, что оставляет вопрос о механизме образования DB открытым. В следующем разделе мы рассмотрим альтернативный механизм образования DB в результате атом - атомных столкновений, инициированных налетающими частицами.

### 3. Фокусонный механизм генерации DB под облучением

Долгое время считалось, что смягчение атомных связей с увеличением амплитуды колебаний является общим свойством кристаллов, и, поэтому, DB с частотами выше верхней частоты фононов не образуются. Тем не менее, в работе [24] представлен новый взгляд на эту проблему, показывающий, что металлы в этом аспекте очень отличаются от изоляторов. Дело в том, что существенный вклад в экранирование атомных взаимодействий в металлах происходит от свободных электронов на поверхности Ферми. Как следствие, сила ион-ионного взаимодействия может приобрести немонотонную зависимость от атомного расстояния и может быть повышена с увеличением амплитуды колебаний. Этот эффект противодействует смягчению «голых» потенциалов с увеличением колебательной амплитуды, что позволяет существование DB с частотами выше фононного спектра. В результате, в некоторых металлах, DB могут существовать с частотой выше верхней частоты фононного спектра. Моделирование нелинейной динамики методами молекулярной динамики с известными парными потенциалами Ni и Nb показало, что высокочастотные DB могут существовать в этих металлах, и соответствующие энергии DB могут быть относительно небольшими, начиная с энергии 0.2 eV [24]. Недавно в Fe были промоделированы бризеры, движущиеся вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений со скоростью порядка 1000 m/s [25]. Движение и условие самофокусировки краудионов в 2D и 3D никеле изучены в работе [26]. Эти результаты позволяют предположить [23], что подвижные DB (квудоны) могут возникать в результате атом - атомных столкновений, инициированных налетающими частицами, так же как фокусированные столкновения (фокусоны), известные с середины прошлого столетия (см. напр.[14]). В отличие от фокусонов, квудоны почти не теряют энергию в идеальном кристалле, поскольку очень слабо взаимодействуют с фононами, но, также как и фокусоны, могут передавать энергию структурным дефектам.

Предположим [28], что квудоны могут передавать энергию структурным дефектам (таким как центры закрепления дислокаций), создавая DB, локализованные на дефектах- TDB (от английского Trapped Discrete Breather), что приводит к ускорению реакций отрыва дислокаций от стопоров. Этот механизм аналогичен механизму, рассмотренному в предыдущем разделе для опи-

сания ЭПД металлов вследствие образования сидячих DB в термических вспышках [21].

Основная идея ускорения основана на модуляции энергии активации реакции во времени вследствие периодического изменения расстояний между атомами в области TDB, амплитуда которого пропорциональна энергии TDB. Скорость термически-активированной реакции (Kramers rate [21])  $\dot{R}_K$ , усредненная по времени, превосходящем период модуляции, возрастает, согласно выражению:

$$\langle \dot{R} \rangle_m = \dot{R}_K I_0 \left( \frac{E_m}{k_B T} \right) \dot{R}_K = \omega_0 \exp \left( -\frac{E_a}{k_B T} \right), \quad (14)$$

где фактор ускорения реакции,  $I_0(x)$  - модифицированная функция Бесселя первого рода, не зависит от частоты модуляции и высоты барьера, а определяется только отношением амплитуды модуляции к температуре. Даже при относительно малых амплитудах ( $E_m < E_a$ ), ускорение реакции может быть очень велико, как показано, на рис. 4, вследствие практически эк-

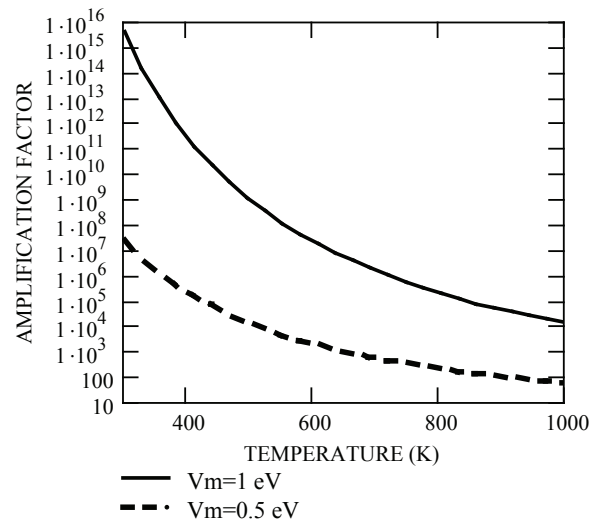


Рис.4. Зависимость фактора ускорения реакции,  $I_0(V_m/k_B T)$ , от температуры и амплитуды модуляции энергии активации.

споненциального вида функции Бесселя.

Так как время жизни TDB много больше периода атомных осцилляций, можно принять амплитуду модуляции энергии активации постоянной и равной энергии TDB:  $V_m \approx E_{TDB}$ , что соответствует микроскопическому ускорению одной реакции (в нашем случае – откреплению дислокации от одного стопора).

В феноменологической теории термоактивированного движения дислокаций частота откреплений дислокаций от стопора определяется следующим выражением:

$$\omega_T = \omega_d \exp \left( -\frac{E_a - V^* \sigma}{k_B T} \right), \quad (15)$$

где  $E_a$  - активационная энергия отрыва,  $\sigma$  - внешнее напряжение, которое уменьшает активационную энергию пропорционально величине активационного объ-

ема  $V^*$ ,  $\omega_d$  - частота осцилляций дислокационного сегмента. Соответственно, скорость пластической деформации  $\dot{\epsilon}_T$ , имеет вид

$$\dot{\epsilon}_T = \dot{\epsilon}_0 \exp \left\{ -\frac{E_a - V^* \sigma}{k_b T} \right\}, \quad \dot{\epsilon}_0 = b l_d \rho_d \omega_d, \quad (16)$$

который отличается от выражений, (1, 2), полученных в модели струны, зависимостью от активационного объема. Преимуществом феноменологической модели является меньшее количество свободных параметров и возможность экспериментального измерения активационного объема, который пропорционален расстоянию между стопорами и уменьшается с ростом плотности дислокаций.

Для вычисления напряжения течения при постоянной скорости деформации  $\dot{\epsilon}_{ex}$  необходимо решить у-е (16) по отношению к  $\sigma$ :

$$\sigma_T = \frac{E_a}{V^*} - \frac{k_b T}{V^*} \ln \left( \frac{\dot{\epsilon}_0}{\dot{\epsilon}_{ex}} \right) \quad (17)$$

Для получения макроскопической скорости деформации с учетом TDB, следует усреднить (16) по временам и объемам, включающим много препятствий и TDB. В результате, получим следующее выражение

$$\langle \dot{\epsilon}_{TDB} \rangle_{macro} = \dot{\epsilon}_T + \dot{\epsilon}_T \left\langle I_0 \left( \frac{E_{TDB}}{k_b T} \right) \right\rangle \omega_{TDB} \tau_{TDB}, \quad (18)$$

где  $\omega_{TDB}$  - средняя частота столкновений DB со стопором, приводящих к образованию TDB,  $\tau_{TDB}$  - среднее время жизни TDB, в течение которого отрыв от стопора облегчается.

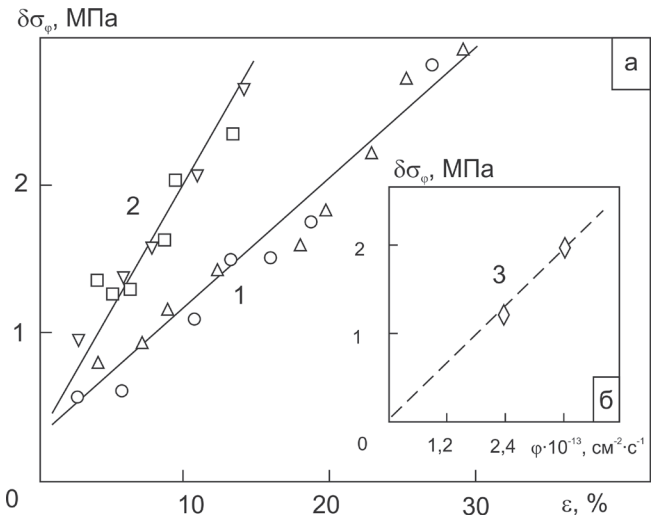
На глубине образца, не превышающей длину пробега DB, средняя частота столкновений DB со стопором определяется просто как произведение потока DB -  $\Phi_{DB}$  на площадь сечения  $\omega_{TDB} = \Phi_{DB} \pi R^2$ , где  $R \approx b$  - радиус стопора. Поток DB пропорционален потоку налетающих частиц (у нас - электронов) и отношению энергии частицы к энергии DB (в предположении о DB как основной промежуточной форме релаксации энергии быстрых частиц [23]):

$$\omega_{TDB} = \Phi_{DB} \pi R^2, \quad \Phi_{DB} = \varphi \frac{E_e}{E_{DB}}, \quad (19)$$

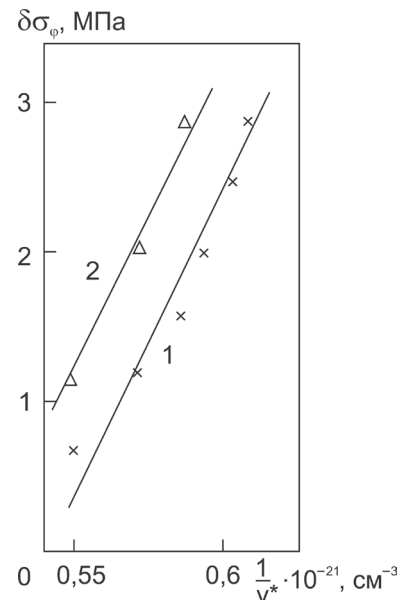
С учетом (19) получим из (18) напряжение течения под облучением, которое, в отличие от (17) явно зависит от потока электронов:

$$\sigma_{DB} = \frac{E_a}{V^*} - \frac{k_b T}{V^*} \ln \left( \frac{\dot{\epsilon}_0}{\dot{\epsilon}_{ex}} \left( 1 + I_0 \left( \frac{E_{TDB}}{k_b T} \right) \omega_{TDB} \tau_{TDB} \right) \right) \quad (20)$$

Для поликристаллов следует умножить выражения (17) и (20) на фактор Тэйлора М.



**Рис.5.** Изменение величины скачка разупрочнения  $\Delta\sigma_\phi$  от степени деформации  $\epsilon$  для железа с  $T_{отж} = 900^\circ\text{C}$  при значениях  $\varphi = 2,4 \times 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  (1) и  $3,6 \times 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  (2) (а). Чувствительность значения  $\Delta\sigma_\phi$  к изменению плотности электронного потока  $\varphi$  (б). [12].



**Рис.6.** Величина скачка разупрочнения  $\Delta\sigma_\phi$  как функция  $V^*$  для образца железа толщиной  $h = 0.52 \text{ mm}$  при облучении электронами с энергией  $E = 0.8 \text{ MeV}$  и плотностью потока  $\varphi = 2,4 \times 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  (1);  $3,6 \times 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  (2). [12].

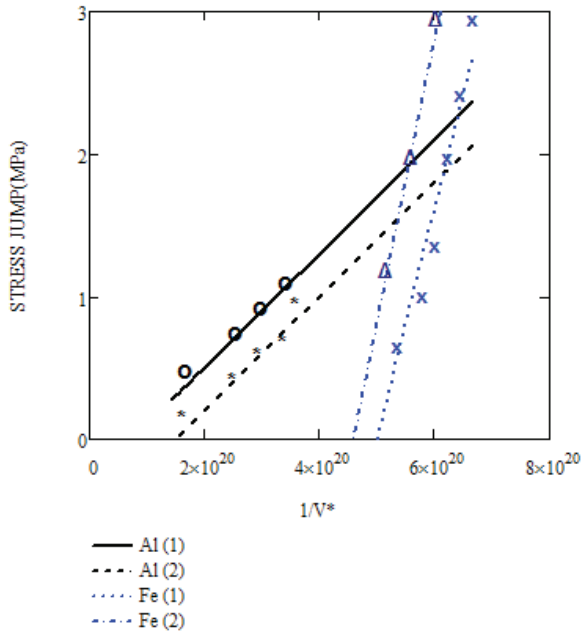
Как отмечалось в предыдущем разделе, практически мгновенный обратимый скачок  $\Delta\sigma_\phi$  характеризует атермический отклик имеющейся дислокационной структуры на облучение, поскольку температура и дислокационная структура не успевают измениться за время скачка. Результаты работы [12], в которой изучался ЭПД в железе, показывают, что величина  $\Delta\sigma_\phi$  растет с увеличением плотности потока электронов и уровня деформации (Рис. 5).

Важным наблюдением является то что величина  $\Delta\sigma_\phi$  обратно пропорциональна величине активационного объема  $V^*$  (Рис. 6), что однозначно указывает на то что облучение каким-то образом активирует процесс открепления дислокаций от стопоров.

Величина  $|\Delta\sigma_\phi|$  определяется разностью выражений (17) или (20) при наличии и в отсутствие облучения. Поскольку скачок напряжения при включении/выключении

чении облучения происходит мгновенно, температура и активационный объем деформации не успевают измениться. Поэтому разность (17) равна нулю,  $|\delta\sigma_\phi|_T = 0$ , а разность (20) приводит к следующему выражению для величины скачка напряжения (ЭПД эффекта):

$$|\delta\sigma_\phi|_{DB} = M \frac{k_b T}{V^*} \ln \left( 1 + I_0 \left( \frac{E_{TDB}}{k_b T} \right) \omega_{TDB} \tau_{TDB} \right) \quad (21)$$



**Рис.7.** Зависимость скачка напряжения от  $1/V^*$ , согласно (21), в сравнении с экспериментальными данными [12] для Al толщиной  $h = 0.58$  mm (o); 1.28 mm (\*) при  $E = 0.5$  MeV,  $\phi = 5 \times 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> и для Fe ( $h = 0.53$  mm) при  $E = 0.8$  MeV,  $\phi = 2.4 \times 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> (x);  $3.6 \times 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> ( $\Delta$ ). Материальные параметры представлены в Табл. 1.

Отметим, что величина  $|\delta\sigma_\phi|_{DB}$  обратно пропорциональна величине активационного объема  $V^*$ , в полном согласии с экспериментом, что позволяет оценить параметры DB из количественного сравнения модели с экспериментальными данными, показанного на Рис. 7.

Сплошная черная линия соответствует у-ю (21) для параметров алюминия толщиной 0.58 mm, энергии TDB 0.43 eV, и времени жизни  $10^{-11}$ , из которого была вычтена константа 0.3 МПа для соответствия положения линии на оси абсцисс экспериментальным данным. Черный пунктир получен вычитанием из (21) константы 0.6 МПа, что согласуется с экспериментальными данными для Al толщиной 1.28 mm. Это означает, что увеличение толщины образца за пределы проникновения электронов (0.6 mm для  $E = 0.5$  MeV) не влияет на параметры DB (угол наклона линии) но уменьшает величину ЭПД эффекта.

Синие (серые) линии и символы соответствуют Fe при  $E = 0.8$  MeV,  $\phi = 2.4 \times 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>;  $3.6 \times 10^{13}$  cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>. Энергия TDB 0.49 eV соответствует более резкой экспериментальной зависимости  $\delta\sigma_\phi(V^*)$ , а положение на оси абсцисс задается вычитанием из (21) констант 8 и 9 МПа, соответственно. Более высокие значения энергии TDB в железе по сравнению с алюминием согласуются с недавними результатами MD моделирования [25], со-

гласно которым движущиеся DB легче генерируются в Fe чем в Al, и соответственно, могут передавать большую энергию дефектам. Различие в константах, определяющих положение линий на оси абсцисс (8-9 МПа в Fe и 0.3-0.6 МПа в Al) по-видимому, связано с различием в толщине и микроструктуре образцов и требует дополнительных исследований.

Из полученных значений  $\delta\sigma_\phi$  следует, что выражение (21) можно упростить, разложив логарифм в ряд по малому параметру:

$$|\delta\sigma_\phi|_{DB} \approx M \frac{k_b T}{V^*} I_0 \left( \frac{E_{TDB}}{k_b T} \right) \omega_{TDB} \tau_{TDB} \propto \phi, \quad (22)$$

**Таблица 1.**

Параметр	Значение
Атомное расстояние, $b$ (m)	$3.23 \times 10^{-10}$
Средняя энергия DB, $E_{DB}$ (eV)	1
Средняя энергия TDB, $E_{TDB}$ (eV)	0.43 (Al); 0.49 (Fe)
Среднее время жизни TDB, $\tau_{TDB}$ , s	$10^{-11}$

из которого следует, что  $\delta\sigma_\phi$  пропорционально потоку электронов (что согласуется с Рис. 5б) с коэффициентом, обратно пропорциональным  $V^*$ , который определяется параметрами DB.

Заметим, что значения энергий и времени жизни дискретных бризеров, рассчитанные из количественного сравнения модели с экспериментальными данными (Табл. 1), могут быть полезными для сравнения с результатами будущего MD моделирования [28].

#### 4.Термофлуктуационный механизм возникновения DB в равновесных условиях

Выше были проанализированы механизмы генерации DB облучением, которое создает для этого оптимальные условия, смещая атомы из положений равновесия. Однако, как было показано в ряде работ, термофлуктуационное возникновение DB также возможно при достаточно высоких температурах [18-21, 28-30]. С точки зрения влияния на прочность кристаллов, весьма интересным является отмеченный в [18] переход от хрупкого типа разрушения урана к вязкому при температуре  $> 473$  K, которая совпадает с температурой обнаружения DB в спектрах рассеяния нейтронов. Механизм пластификации при этом аналогичен механизму, рассмотренному выше в разделе 2.

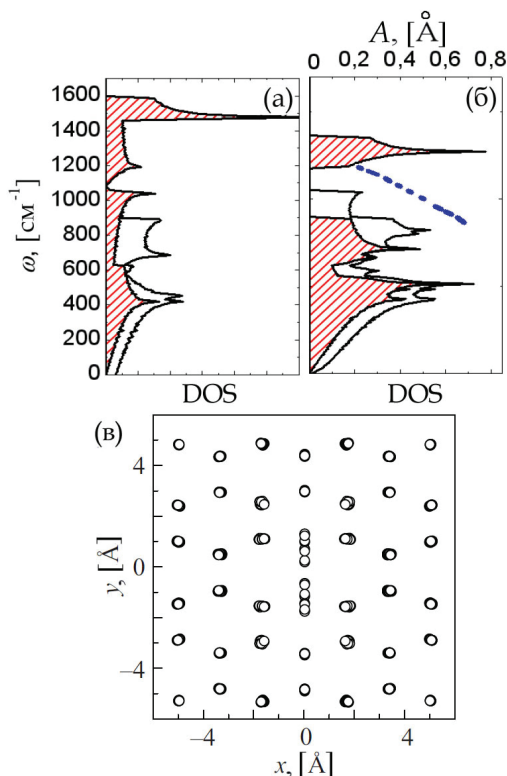
#### 5.Возможная роль DB в термоактивированном разрушении растянутого графена

Другой аспект проблемы связан с прочностью растянутого графена при повышенных температурах.

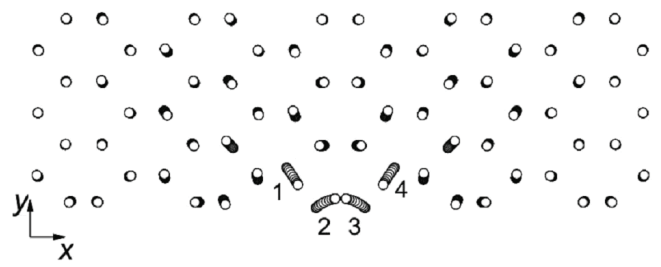
Известно, что фононный спектр графена является сплошным, но щель в спектре может быть индуцирована

упругим растяжением графена. Наличие запрещенной зоны в спектре растянутого графена приводит к возможности существования щелевых ДБ большой амплитуды [31-33]. На рис.8 а представлена плотность фоновых состояний (DOS) для недеформированного графена. Заштрихованные DOS включают в себя колебания в плоскости листа графена, в то время как незаштрихованные DOS соответствуют колебаниям из плоскости. На рис 8б представлены DOS графена при деформации  $\epsilon_{yy} = -0.1$ ,  $\epsilon_{xx} = 0.3$  и  $\epsilon_{xy} = 0$ . Отметим появление щели в спектре деформированного графена. Штриховая линия показывает зависимость частоты щелевого ДБ от его амплитуды. На (в) представлена стробоскопическая картина движения атомов в окрестности щелевого ДБ в графене, подвергнутом упругой деформации  $\epsilon_{yy} = -0.1$ ,  $\epsilon_{xx} = 0.3$  и  $\epsilon_{xy} = 0$ . ДБ имеет два атома, колеблющихся в противофазе с большой амплитудой вдоль оси  $y$ , в то время как  $x$  и  $z$  компоненты перемещений имеют значительно меньшие амплитуды.

Подобная ситуация наблюдается и в графеновых нанолентах, где на краю наноленты ориентации «кресло» может быть возбужден щелевой ДБ [34,35]. Щель в спектре появляется при приложении одноосной деформации в направлении кресло. На рис. 9 показана стробоскопическая картина атомных смещений вблизи ДБ, возбужденного на краю графеновой наноленты «кресло». Смещения увеличены в 3 раза. ДБ в данном случае представляет собой четыре атома с номерами 1-4 на краю наноленты, имеющие значительные амплитуды



**Рис. 8.** Плотности фоновых состояний (DOS) (а) недеформированного и (б) деформированного графена при  $\epsilon_{yy} = -0.1$ ,  $\epsilon_{xx} = 0.3$  и  $\epsilon_{xy} = 0$ . Заштрихованные DOS включают колебания в плоскости, в то время как незаштрихованные DOS соответствуют колебаниям из плоскости графена. Штриховая линия на (б) показывает зависимость частоты ДБ от его амплитуды. (в) Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ в графене, подвергнутом упругой деформации  $\epsilon_{yy} = -0.1$ ,  $\epsilon_{xx} = 0.3$  и  $\epsilon_{xy} = 0$ . Смещения атомов увеличены в 2 раза.



**Рис.9.** Стробоскопическая картина атомных смещений вблизи ДБ, возбужденного на краю растянутой графеновой наноленты ориентации «кресло» ( $\epsilon_{xx} = 0.2$ ). Смещения увеличены в 3 раза.

Как было отмечено в разделе 4 данного обзора, ДБ могут спонтанно возбуждаться термофлуктуационно в условиях теплового равновесия. Можно предположить, что локализация энергии на ДБ может инициировать процесс разрыва связей и разрушение растянутого графена при повышенных температурах.

Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ в графене, подвергнутом упругой деформации  $\epsilon_{yy} = -0.1$ ,  $\epsilon_{xx} = 0.3$  и  $\epsilon_{xy} = 0$ . Смещения атомов увеличены в 2 раза.

Работа была поддержана грантом УНТЦ-НАНУ № 5497, грантом РФФИ 11-08-97057-р\_поволжье\_a.

## Литература

1. D. Terentyev, L. Malerba, D.J. Bacon, Yu.N. Osetsky. J Phys: Condens. Matter 19, 456211 (2007).
2. V.I. Dubinko, S.A. Kotrechko, V.F. Klepikov. Radiation Effects & Defects in Solids 164, 647 (2009).
3. O.A. Troitskij, V.I. Likhtman. Dokl. Akad. Nauk S.S.S.R 148, 332 (1963). (in Russian)
4. O.A. Troitskii, V.I. Spitsyn, Metallofizika, 51, 18 (1974) (in Russian).
5. Столяров В.В. Письма о материалах 2013 Т. 3. № 2. С. 137-140.
6. Столяров В.В. Письма о материалах 2011. Т. 1. № 2. С. 75-77.
7. O.A. Troitskii, Yu.V. Baranov, Yu.S. Avramov, A.D. Shlyapin. Physical foundations and technologies of processing modern materials. Moscow-Izhevsk. (2004). 590 p. (in Russian)
8. V.S. Karasev, E.U. Grinnik, Atomnaya Energia, 54(3), 177 (1983). (in Russian)
9. V.I. Dubinko, A.N. Dovbnya, V.A. Kushnir, V.V. Mitrochenko, I.V. Khodak, V.P. Lebedev, V.S. Krylovsky, V.F. Klepikov, Questions of Atomic Science and Techniques (VANT) in Series: "Nuclear-Physical Research", №3/54 (2010) 145-149 (in Russian).
10. V.I. Dubinko, A.N. Dovbnya, V.A. Kushnir, I.V. Hodak, V.P. Lebedev, V.S. Krylovskiy, S.V. Lebedev, V.F. Klepikov, P.N. Ostapchuk. Fiz. Tverd. Tela 54, 2314 (2012).
11. V.I. Dubinko, A.N. Dovbnya, V.A. Kushnir, I.V. Hodak, V.M. Gritsina, V.P. Lebedev, V.S. Krylovskiy, S.V. Lebedev, V.F. Klepikov, P.N. Ostapchuk, A.V. Dubinko. Radiation-induced softening of metals: Experiment and the model. Proc. XX International Conference on Physics of



- Radiation Phenomena and Radiation Material Science , Alushta Sept. 10-15 (2012).
12. V.I. Dubinko, A.N. Dovbnya, V.A. Kushnir, I.V. Hodak, V.P. Lebedev, V.S. Krylovskiy, S.V. Lebedev, V.F. Klepikov, V. Hizhnyakov, D. Terentyev. Radiation-induced softening of Fe alloys under neutron and electron irradiation. Proc. XXIII International Workshop on Charged Particle Accelerators, Alushta Sept. 8-14 (2013).
13. V.I. Dubinko, V.F. Klepikov, V.E. Noviokv, P.N. Ostapchuk, A.A. Soroka, L.V. Tanatarov, I.V. Tanatarov. Questions of Atomic Science and Techniques (VANT) in Series: "Physics of Radiation Damage and RadiationMaterial Science", 90 (2), 48 (2007) (in Russian).
14. V.I. Dubinko, V.F. Klepikov. J. Nuclear Materials 362, 146 (2007).
15. V.I. Dubinko, V.F. Klepikov. Kinetic Mechanism of the Electroplastic Effect in Metals, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 72, No. 9, 1188 2008.
16. P.N. Ostapchuk, V.I. Dubinko, V.I. Karas, V.F. Klepikov, Questions of Atomic Science and Techniques (VANT) in Series: "Physics of radiation damage and material science" 1(65), 49 (2010). (in Russian)
17. S. Flach and A.V. Gorbach, Phys. Rep. 467, 1 (2008).
- 18 M.E. Manley, Acta Materialia, 58 p.2926 (2010)
19. M.V. Ivanchenko, O.I. Kanakov, V.D. Shalfeev, S. Flach. Physica D 198, 120 (2004).
20. J.F.R. Archilla, J. Cuevas, M.D. Alba, M. Naranjo, J.M. Trillo. J. Phys. Chem. B 110, 24112 (2006).
21. V.I. Dubinko, P.A. Selyshchev, and J.F.R. Archilla. Phys. Rev. E 83, 041124 (2011).
22. V.I. Dubinko. DCDS-S, 4, No 5, 1119 (2011).
23. V. I. Dubinko, A. V. Dubinko. Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B 303, 133 (2013).
24. M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A. J. Sievers. Phys. Rev. B 84, 14430 (2011).
25. V. Hizhnyakov, private communication.
26. A.M. Iskandarov, N.N. Medvedev, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev. Computational Materials Science. 2009. V. 47. N. 2. P. 429-431.
27. I.M. Lifshits, M.I. Kaganov, L.V. Tanatarov, On the theory of radiation-induced changes in metals, Atomic Energy 6, 391 (1959) (in Russian).
28. V.I. Dubinko, A.V. Dubinko, D. Terentyev, V. Hizhnyakov, S.V. Dmitriev, to be published.
29. L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev. Phys. Rev. B 84, 144304 (2011).
30. A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev. Phys. Solid. State 54, 1648 (2012). [A.A. Кистанов, С.В. Дмитриев. Физика твердого тела. 54 (8), 1545(2012)]
31. С.В. Дмитриев, Письма о материалах. 1 (2), 78 (2011).
32. Л. З. Хадеева, С. В. Дмитриев, Ю. С. Кившарь. JETP Letters, 94 (2011) 539.
33. J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, K. Zhou. Europhys. Lett., 100, 36005 (2012).
34. E. A. Korznikova, A.V. Savin, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, R.R. Mulyukov, JETP Lett. 96, 222 (2012). [Е.А. Корзникова, А.В. Савин, Ю.А. Баимова, С.В. Дмитриев, Р.Р. Мулюков. Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96. № 4. С. 238.]
35. E.A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev. Europhys. Lett., 102 (2013) 60004.