6. *Bellissent-Funel M.-C.* Water near hydrophilic surfaces // J. of Molecular Liquids. – 2002. – P. 287–304.
7. *Volger E. A.* Structure and reactivity of water at biomaterial surfaces // Advances in Colloid and Interface Sci. – 1998. – **74**, No 1–3. – P. 69–117.
8. *Булавін Л. А., Слісенко В. І., Васильkевич О. А. та ін.* Динаміка молекул водно-спиртових розчинів малої концентрації // Зб. наукових праць "Сучасні проблеми молекулярної фізики". – Київ: ВПЦ "Київ. ун-т". – 2006. – С. 73–78.

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев
Институт коллоидной химии и химии воды им. А. В. Думанского НАН Украины, Киев
Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко

Поступило в редакцию 12.06.2007

УДК 530.1;534.2;539.2

Академик НАН Украины **В. М. Локтев, Ю. Н. Халак**

К теории акустоэмиссии при неконсервативном движении ступеньки на винтовой дислокации

The attempt is made to find a solution of the equations of motion for a continuous medium describing the driven displacement of a screw dislocation with jog in a crystal under the action of an ultrasonic wave. As a result, the sequence and the shape of acoustic emission pulses which can be studied experimentally are determined.

1. Динамическое нагружение кристаллов ультразвуковым возмущением приводит к возникновению целого ряда интересных явлений, многие из которых имеют резко выраженный пороговый характер по амплитуде ультразвуковой волны. Среди последних следует упомянуть акустолюминесценцию [1], акусто- и акустофотопроводимость [1, 2], растворение дефектных кластеров [3], амплитудно-зависимое внутреннее трение [2], размножение дислокаций [4], генерацию оптически активных и электрически заряженных точечных дефектов [5] и т. п. Важное место в этом ряду занимает и явление акустической эмиссии [6].

Ввиду возможности использования акустической эмиссии для неразрушающего контроля структуры твердых тел, имеется достаточное количество работ (например, [7–9]), посвященных теоретическому и экспериментальному изучению именно этого типа испускания. При этом традиционно роль основных источников акустоэмиссии отводится неравномерному (ускоренному) движению дислокаций в процессе их отрыва от стопоров[1], фазовые превращения I рода, вызывающие скачкообразные изменения в кристаллической решетке, а также двойникование либо трещинообразование.

[1]Следует заметить, что звуковые волны могут генерироваться в твердых телах и при равномерном движении в них тех или иных объектов (в частности, краудионов [10]), если только скорость движения последних превышает фазовую скорость звука.

В то же время акустоэмиссия может возникать и действительно возникает в процессе ультразвукового нагружения, если вызываемое им движение дислокаций является неконсервативным, или, что то же самое, приводит к рождению точечных дефектов — вакансий либо междоузлий. Так, в работе [11] были проанализированы особенности вынужденного движения ступеньки на винтовой дислокации, с необходимостью сопровождающегося образованием точечных дефектов. Опираясь на подход, предложенный М. И. Кагановым и др. [12], удалось (см. [11]) указать на существование не одной, а двух пороговых амплитуд ультразвука: первая соответствует смещению положения ступеньки и образованию некоторого числа вакансий; вторая — началу непрерывной во времени генерации точечных дефектов обоих типов (вакансий и междоузельных ионов). Полученные результаты находятся в неплохом качественном согласии с экспериментально наблюдаемым характером акустической эмиссии, импульсы которой действительно начинают регистрироваться еще до порога возбуждения, к примеру акустолюминесценции, целиком, согласно [11], обязанной одновременной генерации и вакансий, и междоузлий.

Малоамплитудный (допороговый) ультразвук вызывает дискретные акустоэмиссионные импульсы, соответствующие, если говорить о физике явления, сопровождающимся локальным изменением объема (термоактивированным) перескокам ступеньки из исходного в соседние минимумы ее потенциального рельефа в кристалле [13]. Заметим, что энергия активации подобных (вынужденных) перескоков оказывается заметно меньшей, чем соответствующая энергия активации в ненагруженных кристаллах. Воздействие на них ультразвуком сверхпороговой интенсивности приводит к непрерывной акустоэмиссии, что, в свою очередь, отвечает такой же генерации дефектов, движущейся с большой амплитудной ступенькой.

Несмотря на вполне очевидную качественную картину движения ступеньки как в до-, так и в запороговой области и вызываемой им акустоэмиссии, фактически отсутствуют расчеты, которые позволили бы осуществлять количественное исследование этого явления. Поэтому ниже, основываясь на общих уравнениях движения сплошной среды (см., например, [14]), учитывающих присутствие в ней дислокаций, предпринята попытка восполнить этот пробел.

2. При изучении динамики твердого тела с винтовой дислокацией, содержащей ступеньку, запишем вышеупомянутую систему уравнений в линейном по скорости смещения приближении:

$$\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_k} = \rho \frac{\partial v_l}{\partial t}; \tag{1}$$

$$\sigma_{kl} = c_{klmn} u_{m,n}; \tag{2}$$

$$e_{lmn} \frac{\partial u_{n,k}}{\partial x_m} = -\alpha_{lk}; \tag{3}$$

$$\frac{\partial v_k}{\partial x_l} = \frac{\partial u_{l,k}}{\partial t} - j_{lk}, \tag{4}$$

где x_k и t — пространственные и временная переменные; σ_{kl} — тензор упругих напряжений среды; ρ — ее плотность; $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ — скорость перемещения элемента (или физически малого объема) среды с координатой $\mathbf{r}$ в момент времени t; c_{klmn} — тензор упругих модулей; $u_{m,n} = \partial u_n / \partial x_m$ — тензор дисторсии (именно он имеет реальный физический смысл при наличии в системе дислокаций); e_{lmn} — единичный абсолютно антисимметричный тензор;

α_{lk} и j_{lk} — тензоры плотности и плотности потока дислокаций, соответственно, и по дважды повторяющимся индексам, как всегда, предполагается суммирование.

Для наиболее простого случая винтовой дислокации, лежащей вдоль оси x, со ступенькой, расположенной в начале координат и направленной вдоль оси z, ненулевые компоненты тензоров α_{lk} и j_{lk} имеют вид:

$$\alpha_{xx} = b\delta[y - Y(t)][\theta(x)\delta(z) + \theta(-x)\delta(z - h)]; \tag{5}$$

$$\alpha_{zx} = b\delta[y - Y(t)]\delta(x)\theta(z)\theta(h - z); \tag{6}$$

$$j_{xx} = bV(t)\delta[y - Y(t)]\delta(x)\theta(z)\theta(h - z); \tag{7}$$

$$j_{zx} = bV(t)\delta[y - Y(t)][\theta(x)\delta(z) + \theta(-x)\delta(z - h)]. \tag{8}$$

Здесь h — высота ступеньки, функция $Y(t)$ определяет закон движения дислокации вдоль оси y (мы полагаем, что в этом направлении дислокация перемещается как целое), или, другими словами, $V(t) = dY(t)/dt$; наконец, b — модуль вектора Бюргерса дислокации, а $\delta(x)$ и $\theta(x)$ — δ- и θ-функции. Далее, как наиболее интересные с точки зрения генерации акустических волн прыжкообразно движущейся ступенькой, будут рассматриваться такие функции $Y(t)$, для которых скорость $V(t)$, будучи четной функцией, отлична от нуля лишь в течение сравнительно короткого времени $|t| = \tau$, причем $Y(0) = 0$, $Y(\infty) = a$. При этом легко убедиться, что для тензоров $\widehat{\alpha}$ и $\widehat{j}$ в форме (5)–(8) имеют место соотношения совместности [15]

$$\frac{\partial \alpha_{kl}}{\partial x_k} = 0; \qquad \frac{\partial \alpha_{kl}}{\partial t} + e_{kmn}\frac{\partial j_{nl}}{\partial x_m} = 0, \tag{9}$$

обеспечивающие совместность системы уравнений (1)–(4).

Если продифференцировать уравнение (1) по времени, учтя при этом (2) и (4), приходим к динамическому уравнению теории упругости относительно $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho\frac{\partial^2 v_k}{\partial t^2} - c_{klmn}\frac{\partial^2 v_n}{\partial x_l \partial x_m} = c_{klmn}\frac{\partial j_{mn}}{\partial x_l}. \tag{10}$$

Общее решение этого уравнения имеет стандартную форму

$$v_k(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}_1 \int\limits_{-\infty}^{t} dt_1 G_{kl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) c_{lmnq}\frac{\partial j_{nq}(\mathbf{r}_1, t_1)}{\partial x_{1m}}, \tag{11}$$

в которой $G_{kl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1)$ — функция Грина. В простейшем случае упруго-изотропной среды она приводится к виду

$$G_{kl}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\rho r^3}\left[\frac{x_k x_l}{c_\parallel^2}\delta\left(t - \frac{r}{c_\parallel}\right) + \frac{\delta_{kl}\mathbf{r}^2 - x_k x_l}{c_\perp^2}\delta\left(t - \frac{r}{c_\perp}\right)\right] + \\ + \frac{\delta_{kl}\mathbf{r}^2 - 3x_k x_l}{4\pi\rho r^5}\left[\theta\left(t - \frac{r}{c_\perp}\right) - \theta\left(t - \frac{r}{c_\parallel}\right)\right], \tag{12}$$

где $c_\parallel$ и $c_\perp$ — скорости продольной и поперечной звуковых волн. Учитывая теперь, что в такой среде $c_{klmq} = \lambda\delta_{kl}\delta_{mq} + \mu(\delta_{km}\delta_{lq} + \delta_{kq}\delta_{lm})$, а $c_\parallel = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ и $c_\perp = \sqrt{\mu/\rho}$, необходимо подставить явные выражения (7), (8) и (12) в (11), после чего все вычисления можно практически беспрепятственно провести аналитически.

Если при этом ограничиться рассмотрением акустической эмиссии в областях, удаленных от дислокации на расстояния $R \gg c_\parallel \tau$, то в получаемых (достаточно громоздких) формулах можно опустить слагаемые порядка $c_\parallel \tau / R$, а также слагаемые, квадратичные по $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Учет последних был бы превышением точности, поскольку сама система (1)–(4) сохраняет применимость, пока $V(t) \approx a/\tau \ll c_{\parallel,\perp}$. В оговоренных ограничениях и при $x^2 \approx y^2 + z^2$ искомое решение принимает вид:

$$
\begin{aligned}
v_x(\mathbf{R}, t) &= -\frac{bhx}{4\pi c_\perp R^4}\left[\gamma(\mathbf{R}^2 - 2\gamma^2 y^2) w_\parallel + \left(2y^2 + \frac{z^2}{x^2}\mathbf{R}^2\right) w_\perp\right] - \\
&\quad - \frac{bz^2(y^2+z^2)}{4\pi c_\perp}\int\limits_{-\infty}^{\infty} w\left(t - \frac{R_1}{c_\perp}\right)\frac{dx_1}{R_1^4}; \\
v_y(\mathbf{R}, t) &= -\frac{bhy}{4\pi c_\perp R^4}[\gamma(\mathbf{R}^2 - 2\gamma^2 y^2) w_\parallel + 2(y^2 + \mathbf{R}^2) w_\perp]; \\
v_z(\mathbf{R}, t) &= -\frac{bhz}{4\pi c_\perp R^4}[\gamma(\mathbf{R}^2 - 2\gamma^2 y^2) w_\parallel + (2y^2 + \mathbf{R}^2) w_\perp],
\end{aligned}
\tag{13}
$$

где $w_{\parallel,\perp} \equiv w(t - R/c_{\parallel,\perp})$, а $w(t) \equiv dV(t)/dt$ — ускорение дислокации в момент времени t. Кроме того, в записанных выражениях введены обозначения: $R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, $R_1 = \sqrt{x_1^2 + y^2 + z^2}$ и $\gamma \equiv c_\perp / c_\parallel < 1/\sqrt{2}$.

Используя выражения (13), нетрудно при помощи уравнения (4) непосредственно установить зависящую от времени часть тензора дисторсии $u_{l,k}$. Не зависящая от времени часть этого тензора на больших расстояниях R от дислокации должна определяться (см. [14]) лишь полем смещений $u_x^{(0)} = (b/2\pi)\,\mathrm{arctg}(z/y)$ прямолинейной винтовой дислокации. Тогда для плотности потока $\Pi_k = -\sigma_{kl} v_l$ звуковой энергии находим:

$$
\begin{aligned}
\Pi_x &= \frac{\mu b^2 hyz}{8\pi^2 c_\perp \mathbf{R}^2 (y^2+z^2)} w_\perp; \\
\Pi_y &= -\frac{\mu b^2 hxz}{8\pi^2 c_\perp R^4 (y^2+z^2)}\left[\gamma(\mathbf{R}^2 - 2\gamma^2 y^2) w_\parallel + \left(2y^2 + \frac{z^2}{x^2}\mathbf{R}^2\right) w_\perp\right] - \\
&\quad - \frac{\mu b^2 z^2}{8\pi^2 c_\perp}\phi_4(y,z) + \frac{\mu b^2 y z^2 (y^2+z^2)^2}{16\pi^2 c_\perp^2}\phi_4(y,z)\phi_5(y,z); \\
\Pi_z &= -\frac{\mu b^2 hxy}{8\pi^2 c_\perp R^4 (y^2+z^2)}\left[\gamma(\mathbf{R}^2 - 2\gamma^2 y^2) w_\parallel + \left(2y^2 + \frac{z^2}{x^2}\mathbf{R}^2\right) w_\perp\right] - \\
&\quad - \frac{\mu b^2 z^2}{8\pi^2 c_\perp}\phi_4(y,z) + \frac{\mu b^2 z^3 (y^2+z^2)^2}{16\pi^2 c_\perp^2}\phi_4(y,z)\phi_5(y,z),
\end{aligned}
\tag{14}
$$

где

$$
\phi_p(y,z) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_1 \frac{w(t - R_1/c_\perp)}{R_1^p}. \tag{15}
$$

Полученные формулы (13) и (14) фактически полностью описывают акустоэмиссию движущейся винтовой дислокацией. Приступая к их обсуждению, прежде всего, необходимо отметить, что в общем случае акустоэмиссионный сигнал от совершившей скачкообразное перемещение дислокации со ступенькой может быть разделен на три последовательных импульса. Первый из них связан с ускоренным консервативным движением винтовой части дислокации. Этот импульс, форма которого задается функцией (15) с $p = 4$, проходит точку регистрации (или наблюдения) со скоростью поперечного звука в момент времени $t_I = \sqrt{y^2 + z^2}/c_\perp$. Два других своим появлением обязаны именно некосервативному переползанию с места на место ступеньки на дислокации, сопровождающемуся, как упоминалось, генерацией дефектов и локальным изменением объема. Вследствие соответствующего возмущения генерируется акустический сигнал, состоящий уже из двух импульсов, которые распространяются в решетке с разными скоростями — $c_\parallel$ и $c_\perp$. Эти акустоэмиссионные импульсы регистрируются в моменты $t_{II} = R/c_\parallel$ и $t_{III} = R/c_\perp$, соответственно.

При выполнении условия $x^2 \geqslant y^2 + z^2$ амплитуды первого и второго импульсов оказываются сравнимыми по величине. Когда же выполняется неравенство $x^2 \ll y^2 + z^2$, второй импульс (от ступеньки) будет регистрироваться практически одновременно с первым (от винтовой части дислокации). И хотя сомножитель (см. (14)) $(z/x)^2 R^2 w_\perp$, определяющий интенсивность импульса от ступеньки, заменяется в этом случае на другой, а именно: $(zR^6/2h|x|)[\phi_4(y, z - h) - \phi_4(y, z)]$, амплитуда этого импульса от ступеньки имеет дополнительный порядок малости $\sim h/R$ и он, скорее всего, окажется скрытым на фоне сравнительно сильного импульса от дислокации.

Для условия $x^2 \approx y^2 + z^2$ последовательность “прибытия” импульсов акустоэмиссии может быть, вообще говоря, различной, что зависит от отношения γ звуковых скоростей. Так, если имеет место соотношение $y^2 + z^2 < (\gamma R)^2$, то первым должен прийти импульс от винтовой дислокации; в противном случае, первым точки наблюдения достигает “продольный” импульс от ступеньки, или импульс, распространяющийся со скоростью продольного звука. При этом “поперечный” импульс от ступеньки будет последним при любом выборе точки наблюдения. Аналогично можно рассмотреть и другие возможные ситуации, вытекающие из найденного общего решения (13) и (14).

3. Приведенные выше решения для временного поведения акустоэмиссии относятся, в некотором смысле, к идеальному случаю, когда винтовая дислокация и ступенька на ней перемещаются как единое целое. В реальных ситуациях это не совсем так и ответ может быть несколько иным: дело в том, что если движение ступеньки действительно скачкообразно, то относительно свободные, т. е. удаленные от места локализации ступеньки, участки дислокации движутся в кристалле намного более плавно. Это, в свою очередь, с необходимостью приводит к “размазыванию” соответствующего (генерируемого дислокацией) акустоэмиссионного импульса во времени.

Кроме того, следует заметить, что изучение формы, а также порядка следования экспериментально наблюдаемых импульсов акустоэмиссии могло бы помочь извлечь достаточно важную для многих других процессов информацию о характере движения дислокаций, временах перескока ступенек (или, что то же самое, временах генерации дефектов) движущимися вследствие действия на кристалл внешних нагрузок дислокациями. Имеет смысл также упомянуть, что сама акустоэмиссия может зависеть от вида такого нагружения (стационарно ли оно, гармоническое или импульсное), дефектного состава кристаллической среды, ее температуры, характера структуры. Наиболее интересными представляются измерения при контролируемом изменении температуры, что позволило бы ответить на такой важный вопрос, как соотношение между термоактивированными и безактивационными вынужденными перемещениями дислокаций (а также ступенек на них), температурным поведением порогов генерации и времен релаксации дефектов и т. д. Все это, безусловно, можно и нужно исследовать, и полученные в данной работе результаты дают принципиальную возможность для анализа измерений на количественной основе.

Авторы искренне признательны А. Б. Надточию и И. В. Островскому, которые обратили наше внимание на проблему акустической эмиссии в кристаллах, находящихся в поле ультразвуковой волны, за многократное обсуждение результатов и критические замечания. Работа частично поддержана грантом Министерства образования и науки Украины.

1. *Островский И. В.* Акустолюминесценция и дефекты кристаллов. – Киев: Вища шк., 1993.
2. *Здебский А. П., Шейнкман М. К., Аннаниязов А. Н., Гарягдыев Г.* Влияние ультразвукового нагружения на акустические и электрические характеристики CdS // Физика тв. тела. – 1987. – **29**, № 4. – С. 1135–1140.
3. *Ostapenko S., Jastrzevski L., Lagodski J., Stermer R. K.* Enhanced Hydrogeneration in Polycrystalline Silicon Thin Films Using Low-Temperature Ultrasound Treatment // Appl. Phys. Lett. – 1996. – **68**, No 20. – P. 2873–2875.
4. *Klimm D., Tippelt B., Paufler P., Haasen P.* Ultrasound Treatment of GaP and GaAs // Phys. Status Solidi (a). – 1993. – **138**, No 2. – P. 517–521.
5. *Островский И. В., Лысенко В. Н.* Генерация ультразвуком точечных дефектов в CdS // Физика тв. тела. – 1986. – **24**, № 4. – С. 1206–1208.
6. *Калитенко В. А., Коротченков О. А., Кучеров И. Я. и др.* Акустическая эмиссия, индуцированная ультразвуком в кристаллах // Укр. физ. журн. – 1985. – **30**, № 9. – С. 1358–1359.
7. *Косевич А. М., Нацик В. Д.* Упругое поле непрерывно распределенных дислокационных петель // Физика тв. тела. – 1964. – **6**, № 1. – С. 228–235.
8. *Schwenker R. O., Granato A. V.* Plane-Wave Sound Radiation from Mobile Dislocation Walls // Phys. Rev. Lett. – 1969. – **23**, No 16. – P. 918–921.
9. *Нацик В. Д., Чишко К. А.* Звуковое излучение при аннигиляции дислокаций // Физика тв. тела. – 1972. – **14**, № 11. – С. 3126–3132.
10. *Косевич А. М., Ковалев А. С.* Динамика дислокаций. – Киев: Наук. думка, 1975. – 275 с.
11. *Локтев В. М., Халак Ю. Н.* Генерация точечных дефектов как одна из возможных причин возбуждения акустолюминесценции // Укр. физ. журн. – 1997. – **42**, № 8. – С. 1016–1019.
12. *Каганов М. И., Кравченко В. Я., Нацик В. Д.* Электронное торможение дислокаций в металлах // Усп. физ. наук. – 1973. – **111**, № 4. – С. 655–682.
13. *Островский И. В., Надточий А. Б.* Влияние генерации точечных дефектов на затухание ультразвука в щелочно-галоидных кристаллах // Укр. физ. журн. – 1999. – **44**, № 5. – С. 582–584.
14. *Косевич А. М.* Дислокации в теории упругости. – Киев: Наук. думка, 1978.
15. *Косевич А. М.* Поле деформаций в изотропной упругой среде с движущимися дислокациями // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1962. – **42**, № 1. – С. 152–162.

Институт теоретической физики
им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 24.07.2007