

УДК 541.64:539.199

## ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ НА КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛИЭТИЛЕНА<sup>1</sup>

© 2000 г. А. И. Мусиенко

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук  
117977 Москва, ул. Косыгина, 4

Поступила в редакцию 17.11.1999 г.  
Принята в печать 10.01.2000 г.

Калибровочная теория дислокаций в кристаллах со сложными (многоатомными) решетками использована для изучения влияния дислокаций на колебательный спектр кристаллов. Решена система уравнений, описывающих эволюцию поля механических напряжений в присутствии движущихся дислокаций, и уравнений движения дислокаций. Плотность дислокаций считалась непрерывной и постоянной функцией координат. Исследовано влияние дислокаций на распространение упругих волн, длина которых велика по сравнению со средним расстоянием между дислокациями. Решение системы было получено для ромбического кристалла ПЭ. Рассмотрено влияние на фоновый спектр краевых дислокаций с вектором Бюргерса, параллельным осям полимерных цепей. Установлено, что такие дислокации не влияют на конформационные оптические моды, но влияют на акустические, а также на моды смешанной поляризации, содержащие акустическую и конформационную компоненты.

Динамика твердых тел, содержащих дислокации, исследовалась многими авторами. Большая часть работ в этой области посвящена изучению локализованных мод, связанных с дислокациями. Первое исследование в этой области было проведено Лифшицем и Косевичем [1]. Существование таких мод обусловлено специфическими граничными условиями, возникающими вблизи дислокации, их амплитуда экспоненциально спадает с удалением от дефекта. Ближайшим аналогом таких локализованных мод являются волны Рэлея, появляющиеся благодаря особым граничным условиям, существующим на поверхности твердого тела. Впоследствии локализованные вблизи дислокаций моды более подробно изучали Maradudin [2] в рамках нелинейной континуальной теории, затем Bullough и Tewary [3] с использованием дискретного подхода.

Значительно меньше внимания было уделено другому классу колебаний, связанных с линейными дефектами (дислокациями и дисклинациями) – нелокальным объемным модам, взаимодействующим с дислокациями. Такие колебания рас-

сматривались в книге Kadić и Edelen [4] в рамках предложенной ими калибровочной теории дислокаций. Позже более подробное исследование распространения плоских гармонических упругих волн в изотропном твердом теле, содержащем дислокации, было предпринято Lagoudas [5] с использованием того же подхода. Мы уже анализировали недостатки теории Kadić и Edelen в работах [6, 7]. При построении динамической теории дислокаций [8] было обнаружено, что в этой теории существуют содержательные аналогии с электродинамикой. В частности, дислокации можно рассматривать как аналог электрических зарядов, поля механических напряжений и деформаций – как аналоги напряженности и индукции электрического и магнитного полей и т.д.

В теории дислокаций были найдены аналоги всех эффектов, существующих в электродинамике, в том числе релятивистских. Но в теории Kadić и Edelen [4] материальным лагранжианом является лагранжиан, описывающий безмассовое упругое поле в бездефектном континуме, тогда как в электродинамике материальным лагранжианом является дираковский лагранжиан, описывающий массивное электрон-позитронное поле без учета электромагнитного взаимодействия. Kadić и Edelen описывали взаимодействие дефектов с

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 98-03-33366а).

упругими полями, заменяя частные производные в лагранжиане упругого поля на ковариантные. При этом в теории появлялись новые постоянные – константы связи. Авторы [4] не смогли выяснить, как эти константы связаны с известными характеристиками твердых тел – плотностью, модулями упругости и т.п. Анализ указанных выше аналогий с электродинамикой показывает, что материальным лагранжианом теории дислокаций должен быть лагранжиан, описывающий частицеподобные объекты – дислокации, а не лагранжиан упругого поля в бездефектной среде. Поэтому в работе [6] мы предложили новый вариант калибровочной теории дислокаций и дисклинаций. В работе [7] мы обобщили его на случай линейных дефектов в кристаллах со сложными (многоатомными) решетками, т.е. в кристаллах, содержащих более одного атома в элементарной ячейке. В работе [6] кристалл моделировался упругой сплошной средой, а в работе [7] – совокупностью вставленных друг в друга взаимопроникающих взаимодействующих подконтинуумов.

Результаты работы Lagoudas [5] мы считаем ошибочными, так как автор использовал неверные исходные уравнения, но сам метод несомненно правилен. Он состоит в совместном решении уравнений движения дислокаций во внешнем упругом поле и уравнений, описывающих динамику упругих полей в присутствии дислокаций. Этот метод будет использован в настоящей работе, но, разумеется, с заменой уравнений Kadić и Edelen на уравнения, полученные в работах [6, 7].

Рассмотрим распространение плоских гармонических упругих волн в кристалле со сложной решеткой, содержащем дислокации. Плотность дислокаций будем считать постоянной и непрерывной функцией координат. Другими словами, от рассмотрения отдельных дислокаций, распределенных по кристаллу, мы переходим к непрерывной дислокационной плотности. Этот подход аналогичен переходу от дискретного распределения электрических зарядов в задачах электродинамики к непрерывной зарядовой плотности. Подобный метод изучения дислокаций, “размазанных” по объему твердого тела, является общепринятым в рамках калибровочного подхода [4, 5]. Разумеется, он справедлив только в том случае, если расстояние между дислокациями мало по сравнению с характерной длиной, существующей в данной задаче. В нашем случае такой длиной является длина упругой волны. Качественно изучаемый эффект

состоит в следующем. При распространении упругих волн в кристалле на дислокации действует сила Пича–Келера. В результате они начинают колебаться и тем самым воздействуют на упругое поле распространяющихся волн, изменяя его характеристики.

Как известно [8], в рамках механики сплошной среды дислокацию можно рассматривать как струну с линейной плотностью массы  $m$ . Уравнение движения (т.е. второй закон Ньютона) для единицы длины такой струны имеет вид [7]

$$m\partial_t V_\delta = e_{\gamma\xi\nu} \tau_\xi b_i \sigma_{i\nu} - BV_\delta, \quad (1)$$

где  $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$ ,  $e_{\gamma\xi\nu}$  – тензор Леви–Чивиты,  $\tau_\xi$  – единичный вектор, касательный к линии дислокации,  $b_i$  – вектор Бюргерса,  $\sigma_{i\nu}$  – тензор механических напряжений,  $V_\delta$  – скорость дислокации,  $B$  – эффективная вязкость. Здесь и далее суммирование происходит по повторяющимся индексам. При переходе от дискретного распределения дислокаций к непрерывной дислокационной плотности мы соответственно переходим от дискретного распределения дислокационных масс к непрерывной плотности массы.

В уравнении (1) мы не учтываем дислокационную силу Лоренца, потому что скорости дислокаций в данном случае малы по сравнению со скоростями звука. Греческими буквами в формуле (1) обозначены индексы, принимающие значения от 1 до 3, а латинскими – индексы, принимающие значения от 1 до  $3N$ , где  $N$  – число атомов в элементарной ячейке кристалла. Введение таких индексов было обосновано в работе [7]. В настоящей работе, как и в работе [7], мы используем модель Борна: моделируем кристалл со сложной решеткой, содержащий  $N$  атомов в элементарной ячейке, совокупностью  $N$  вставленных друг в друга взаимопроникающих подконтинуумов. Можно записать уравнения отдельно для каждого подконтинуума, тогда мы получим  $N$  уравнений. Вместо этого можно перейти к  $3N$ -мерным индексам и объединить все эти уравнения в одно. Если в среде имеется дислокация, то дислокации с таким же вектором Бюргерса существуют в каждом из подконтинуумов. Это позволяет ввести  $3N$ -мерный вектор Бюргерса: первые три компоненты

этого вектора представляют собой вектор Бюргерса в первом подконтинууме, следующие три – во втором и т.д. Аналогично вводится понятие 3N-мерного вектора смещений частиц среды  $u_i$ : первые три компоненты этого вектора характеризуют смещения частиц первого подконтинуума, следующие три – второго и т.д.

Уравнения, описывающие динамику упругих полей в присутствии дислокаций (аналог первой пары уравнений Максвелла), в четырехмерных обозначениях, введенных в работах [6, 7], имеют вид [7]

$$C^{n\beta d\gamma} \partial_\beta \partial_\gamma u_d + n C^{i\epsilon n\delta} e_{\delta\varphi\epsilon\lambda} \tau^\varphi b_i V^\lambda = 0 \quad (2)$$

Второе слагаемое в этом уравнении представляет собой эффективную силу, созданную дислокациями. Здесь

$$C^{n\beta d\gamma} = \begin{cases} c^{n\beta d\gamma} & \text{при } n = 1, 2, 3 \\ -\delta^{\beta\gamma} \rho^{nd} & \text{при } n = 0, \end{cases}$$

$\rho^{nd}$  – тензор, описывающий плотности различных подконтинуумов,  $c^{n\beta d\gamma}(r)$  – трехмерный тензор силовых постоянных, которые, вообще говоря, являются сложными функциями межатомных расстояний. Этот тензор включает в себя тензор модулей упругости, характеризующий акустические колебания кристалла, и тензор, описывающий взаимодействие различных подконтинуумов;  $n$  – плотность дислокаций,  $\partial_\beta \equiv \frac{\partial}{\partial x^\beta}$ ,  $e_{\delta\varphi\epsilon\lambda}$  – четырехмерный тен-

зор Леви–Чивиты. Здесь и далее, если иное не оговорено особо, мы будем обозначать греческими буквами индексы, принимающие значения от 0 до 3, а латинскими – индексы, принимающие значения от 1 до 3N. Четырехмерные обозначения позволяют наиболее простым способом учсть эффекты, связанные с конечностью скоростей звука (аналог релятивистских эффектов в электродинамике) и представить результаты в компактной форме. Использование этих обозначений было обосновано в работе [6].

Для исследования влияния дислокаций на распространение упругих волн в кристалле необходимо совместно решить уравнения (1) и (2). Поскольку мы рассматриваем распространение пло-

ских гармонических упругих волн, решение данных уравнений следует искать в виде

$$u_d = U_d \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)) \quad (3)$$

Здесь  $U_d$  – постоянные. После подстановки этого выражения в формулу (1) получаем

$$V_\gamma = -e_{\gamma\xi\nu} \tau^\xi b_i c^{ivd\beta} k_\beta U_d (m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} \exp(i\delta), \quad (4)$$

где  $\delta = \arctg(B/m\omega)$ . Выражения (3) и (4) подставляем в уравнение (2)

$$C_{n\beta d\gamma} k^\beta k^\gamma U^d = -n C_{i\epsilon n\delta} e^{\delta\mu\epsilon\lambda} \tau_\mu b^i e_{0\lambda\xi\nu} \tau^\xi b_h C^{h\nu r\phi} k_\phi U_r \times (m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} \exp(i\delta) \quad (5)$$

Здесь четырехмерный волновой вектор  $k_\beta = (\omega, -\mathbf{k})$ ,  $\phi = 1, 2, 3$ . Так как левая часть уравнения (5) является вещественной величиной,  $\exp(i\delta)$  в правой части можно заменить на  $\cos\delta$ .

Исключим пространственно-временные компоненты тензора  $C^{n\beta d\gamma}$  из уравнений, используя известное соотношение  $\sigma^{\alpha\beta} = C^{n\beta d\gamma} \partial_\gamma u_d$ . Учитывая, что в принятых нами обозначениях  $\sigma^{n0} = \rho \partial_\mu u^n$ , получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \omega U_n (-\rho \omega^2 U_n + c_{n\beta d\gamma} k_\beta k_\gamma U_d) - n(m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} \times \\ \times \cos\delta [b_i b_h c_{i\epsilon r\lambda} k_\lambda U_r c_{h\epsilon q\xi} k_\xi U_q - \\ - (\tau_\phi b_d c_{d\phi f\xi} k_\xi U_f)^2] = 0 \quad (6) \\ k_8 U_n (-\rho \omega^2 U_n + c_{n\beta d\gamma} k_\beta k_\gamma U_d) + \\ + n \rho \omega U_i b_i (m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} \cos\delta [c_{h\delta r\epsilon} b_h k_\epsilon U_r - \\ - \tau_\delta \tau_\phi c_{\eta\phi d\psi} b_\eta k_\psi U_d] - n c_{i\gamma h\xi} k_\xi U_h e_{\delta\xi\gamma} \tau_\zeta b_i = 0 \end{aligned}$$

В уравнениях (6) греческие индексы принимают только пространственные значения – от 1 до 3. Чтобы найти дисперсионные соотношения для упругих волн, распространяющихся в кристалле с дислокациями, необходимо решить эту систему уравнений.

Рассмотрим ромбический кристалл ПЭ. Вibrationный спектр кристалла в рамках модели объединенных атомов подробно исследован в работе Гендельмана и Маневича [9]. В данной модели группы CH<sub>2</sub> в кристалле ПЭ рассматриваются как точечные частицы. Акустические моды это-

го кристалла в длинноволновом континуальном приближении описываются следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} \rho \partial_t^2 U_1 &= C_{11} \partial_x^2 U_1 + C_{12} \partial_y^2 U_1 + C_{13} \partial_z^2 U_1 + \\ &+ K_{13} \partial_x \partial_z U_3 + K_{12} \partial_x \partial_y U_2 \\ \rho \partial_t^2 U_2 &= C_{12} \partial_x^2 U_2 + C_{22} \partial_y^2 U_2 + C_{23} \partial_z^2 U_2 + \\ &+ K_{23} \partial_y \partial_z U_3 + K_{12} \partial_x \partial_y U_1 \\ \rho \partial_t^2 U_3 &= C_{13} \partial_x^2 U_3 + C_{23} \partial_y^2 U_3 + C_{33} \partial_z^2 U_3 + \\ &+ K_{13} \partial_x \partial_z U_1 + K_{23} \partial_y \partial_z U_2, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $C_{ih}$ ,  $K_{ih}$  – упругие модули.

Из оптических мод, существующих в ПЭ, выберем для рассмотрения конформационную моду. В длинноволновом приближении она описывается уравнением

$$\rho \partial_t^2 \Phi + Q\Phi = C_{14} \partial_x^2 \Phi + C_{24} \partial_y^2 \Phi + C_{34} \partial_z^2 \Phi \quad (8)$$

В уравнениях (7) и (8) мы сохранили обозначения работы [9]. Величина  $\Phi$  определяется следующим образом. Пусть  $\mathbf{r}_h$  – позиционный вектор  $h$ -го объединенного атома в полимерной цепи,  $\mathbf{m}$  – единичный вектор, перпендикулярный плоскости цепи. Введем величину  $\Phi$ , характеризующую вращение цепи

$$\Phi_h^d = (\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_{h+1}) \mathbf{m} / \cos(\theta_0/2),$$

где  $\theta_0 = 113^\circ$ ,  $d = 1, 2$  – индекс, нумерующий полимерные цепи в элементарной ячейке. В континуальном приближении мы можем перейти от дискретной функции  $\Phi_h^d$  к непрерывной функции  $\Phi^d$ . Тогда величина  $\Phi$  определяется соотношением

$$\Phi = (\Phi^1 + \Phi^2)/2$$

В длинноволновом приближении акустические и конформационная моды не взаимодействуют с другими оптическими модами, поэтому мы можем не включать остальные моды в наше рассмотрение. Таким образом, все компоненты тензора  $c^{ijkl}(r)$ , не вошедшие в уравнения (7) и (8), будем считать равными нулю.

Рассмотрим влияние краевых дислокаций с вектором Бюргерса, параллельным оси полимерной цепи, на колебательный спектр ромбического ПЭ. Будем считать, что дислокации прямолинейны и параллельны оси  $x$ . Такая ситуация может встречаться в реальных кристаллах. Путем специальной обработки материала можно создать преимущественную концентрацию дислокаций определенного типа. Например, для крае-

вых дислокаций, параллельных оси  $x$ , с вектором Бюргерса, параллельным оси  $z$ , такой обработкой может быть изгиб кристалла в плоскости  $YZ$ . Разумеется, полной параллельности дислокаций добиться не удастся; кроме того, в кристалле всегда будут присутствовать дислокации с другими характеристиками. Но все же одна из компонент тензора плотности дислокаций будет значительно больше остальных. Дислокации, существовавшие в кристалле до обработки, обладают хаотичным разбросом направлений векторов Бюргерса: для каждой дислокации с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  в некоторой окрестности существует дислокация с вектором Бюргерса  $-\mathbf{b}$ . Дислокации с противоположным направлением вектора Бюргерса дают вклады разного знака в тензор плотности дислокаций, поэтому при усреднении по малому объему соответствующая компонента этого тензора оказывается нулевой. Таким образом, существенно отличной от нуля оказывается только одна компонента тензора плотности. Именно эта компонента и учитывается в дальнейшем рассмотрении. В случае необходимости влияние других компонент может быть рассчитано аналогичным образом.

Введем обозначение

$$\begin{aligned} R &= U_1^2 (-\rho \omega^2 + C_{11} k_1^2 + C_{12} k_2^2 + C_{13} k_3^2) + \\ &+ U_2^2 (-\rho \omega^2 + C_{12} k_1^2 + C_{22} k_2^2 + C_{23} k_3^2) + \\ &+ U_3^2 (-\rho \omega^2 + C_{13} k_1^2 + C_{23} k_2^2 + C_{33} k_3^2) + \\ &+ 2K_{13} k_1 k_3 U_1 U_3 + 2K_{12} k_1 k_2 U_1 U_2 + 2K_{23} k_2 k_3 U_2 U_3 - \\ &- Q\Phi^2 + \Phi^2 (-\rho \omega^2 + C_{14} k_1^2 + C_{24} k_2^2 + C_{34} k_3^2) \end{aligned}$$

Тогда система уравнений (6) для дислокаций указанного типа в ромбическом ПЭ принимает вид

$$\begin{aligned} \omega R - nb^2 \cos \delta(m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} [2C_{13}^2 k_1^2 U_3^2 + C_{23}^2 k_2^2 U_3^2 + \\ + C_{33}^2 k_3^2 U_3^2 + K_{13}^2 k_1^2 U_1^2 + K_{23}^2 k_2^2 U_2^2 + \\ + 2C_{33} K_{13} k_1 k_3 U_1 U_3 + 2C_{33} K_{23} k_2 k_3 U_2 U_3 + \\ + 2K_{13} K_{23} k_1 k_2 U_1 U_2] = 0, \quad k_1 R = 0 \\ k_2 R - \rho n b^2 \omega \cos \delta(m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} C_{23} k_2 U_3^2 - \\ - bn(C_{33} k_3 U_3 + K_{13} k_1 U_1 + K_{23} k_2 U_2) = 0 \\ k_3 R - \rho n b^2 \omega \cos \delta(m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} U_3(C_{33} k_3 U_3 + \\ + K_{13} k_1 U_1 + K_{23} k_2 U_2) - bn C_{23} k_2 U_3 = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Из этой системы следует, что дислокации не оказывают никакого влияния на конформационную моду. То же относится и к другим оптическим модам, возможным в ромбическом ПЭ. Взаимодей-

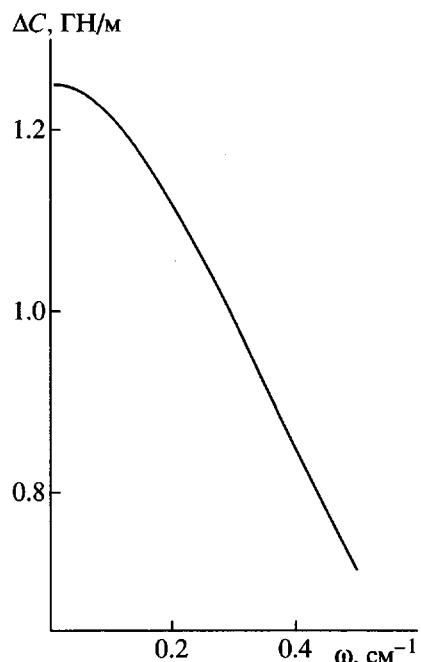


Рис. 1. Зависимость поправки к модулю упругости  $\Delta C$  от частоты колебаний  $\omega$ .

ствие между оптическими и акустическими модами в длинноволновом приближении отсутствует. Поэтому дислокации могут влиять только на распространение акустических мод, либо мод смешанной поляризации, содержащих как акустическую, так и оптическую компоненты.

Рассмотрим влияние дислокаций на продольную акустическую моду с вектором поляризации  $e = (0, e_2, 0)$  и волновым вектором  $k = (0, k_2, 0)$ . Решение системы (9) приводит для этой моды к следующему дисперсионному соотношению:

$$k_2^2 = \rho \omega^2 / (C_{22} - \Delta C(\omega)),$$

где  $\Delta C(\omega)$  – поправка к модулю упругости, обусловленная влиянием дислокаций. Она равна

$$\Delta C(\omega) = \frac{1}{\omega} b^2 n K_{23}^2 \cos \delta (m^2 \omega^2 + B^2)^{-1/2} \quad (10)$$

Пусть плотность дислокаций высока:  $n = 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . В таком случае среднее расстояние между прямыми линейными дислокациями имеет порядок  $d = 10^{-7} \text{ м}$ . Таким образом, данное рассмотрение применимо только для волн, длина которых  $\lambda \gg 10^{-7} \text{ м}$ . Учитывая, что модули упругости, по данным работы [9],  $C_{22} = 15.5 \text{ ГПа}$ ,  $K_{23} = 1.95 \text{ ГПа}$ , а плотность ПЭ при температуре 50 К, по данным работы [10], равна  $\rho = 1127 \text{ кг/м}^3$ , рассчитанной выше поправкой к модулю упругости можно пользоваться (для

данной моды) только при частотах  $\omega \ll 10^{11} \text{ рад/с} = 0.5 \text{ см}^{-1}$ .

Формула (10) справедлива и для двумерного кристалла ПЭ. В нашей работе [11] изложены результаты молекулярно-динамического моделирования движения краевых дислокаций в двумерном кристалле. Этот кристалл представлял собой сечение трехмерного кристалла ПЭ. В двумерном кристалле модули упругости измеряются в Н/м, а краевые дислокации рассматриваемого типа являются точечными дефектами. В работе [11] были найдены их характеристики при 50 К: эффективная инертная масса  $m = 4.77 \times 10^{-24} \text{ г}$  и эффективная вязкость  $B = 5.2 \times 10^{-13} \text{ г/с}$ . Эти данные позволили построить график  $\Delta C(\omega)$  при плотности дислокаций  $n = 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . Такая зависимость для указанного диапазона частот, в котором применима формула (10), представлена на рис. 1. Видно, что взаимодействие с дислокациями уменьшает групповую скорость продольной звуковой волны на величину порядка 3%.

Аналогичное рассмотрение можно провести для упругой волны смешанной поляризации, содержащей как продольную акустическую, так и конформационную оптическую компоненты. Пусть трехмерный вектор поляризации  $e = (0, e_2, 0)$ ,  $\Phi = ae_2$ , волновой вектор  $k = (0, k_2, 0)$ . Тогда решение уравнений (9) приводит к дисперсионному соотношению

$$k_2^2 = [\rho \omega^2 (1 + a^2) - Q] / [C_{22} + a^2 C_{24} - \Delta C(\omega)],$$

где поправка  $\Delta C(\omega)$  описывается той же формулой (10). Расчет показывает, что при оптических частотах поправка к модулю упругости, обусловленная влиянием дислокаций, оказывается на четыре порядка меньше самого модуля.

Таким образом, в настоящей работе исследовано влияние дислокаций на распространение плоских гармонических упругих волн в кристаллах. Расчеты были проведены на примере кристаллического ПЭ. Найдены формулы, описывающие влияние краевых дислокаций с векторами Бюргерса, параллельными осям полимерных цепей, на распространение акустических мод. Оптические моды в кристаллическом ПЭ с дислокациями не взаимодействуют. Влияние дислокаций на моды смешанной поляризации, содержащие как акустическую, так и оптическую компоненты, оказывается пренебрежимо малым.

Автор выражает глубокую благодарность Л.И. Маневичу за ценные советы и полезные обсуждения.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lifshitz I.M., Kosevich A.M. // Rep. Progr. Phys. 1966. V. 29. № 1. P. 217.
2. Maradudin A.A. // Proc. NBS Conf. "Fundamental Aspects of Dislocation Theory." Washington: US Government Printing Office, 1970. V. 1. P. 205.
3. Bullough R., Tewary V.K. // Dislocations in Solids / Ed. by Nabarro F.R.N. Amsterdam: North-Holland, 1979. V. 2. P. 1.
4. Кадич А., Эделен Д. Калибровочная теория дислокаций и дисклиниаций. М.: Мир, 1987.
5. Lagoudas D.C. // Int. J. Engng. Sci. 1987. V. 25. № 3. P. 1323.
6. Мусиенко А.И., Копчик В.А. // Кристаллография. 1995. Т. 40. № 3. С. 438.
7. Мусиенко А.И., Копчик В.А. // Кристаллография. 1996. Т. 41. № 4. С. 586.
8. Косевич А.М. // Успехи физ. наук. 1964. Т. 84. № 4. С. 579.
9. Gendelman O.V., Manevitch L.I. // Int. J. Solids Struct. 1996. V. 33. № 12. P. 1781.
10. Балабаев Н.К., Гендельман О.В., Мазо М.А., Маневич Л.И. // Журн. физ. химии. 1995. Т. 69. № 1. С. 24.
11. Moussienko A.I., Balabaev N.K., Manevitch L.I. // Proc. Int. Soc. for Optical Engineering. 1999. V. 3687. P. 182.

## Effect of Dislocations on the Vibrational Spectrum of Crystalline Polyethylene

**A. I. Musienko**

*Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,  
ul. Kosygina 4, Moscow, 117977 Russia*

**Abstract**—The gauge theory of dislocations in crystals with complex (polyatomic) lattices is used to study the effect of dislocations on the vibrational spectrum of crystals. The system of equations describing the evolution of stress field in the presence of moving dislocations is solved simultaneously with the equations of dislocation motion. The dislocation density is assumed to be a continuous and constant function of the coordinates. The effect of dislocations on the propagation of elastic waves is considered for a wavelength much longer than the average distance between dislocations. The system is solved for an orthorhombic PE crystal. The effect of edge dislocations with the Burgers vector directed along the polymer chain on the vibrational spectrum is considered. These dislocations do not affect the rotational optical modes, but affect the acoustic modes and the mixed polarization modes containing acoustic and rotational components.