KFTI

ХФТИ 88-45

Харьковский

ордена Ленина и ордена Октябрьской Революции

физико-технический институт АН УССР

ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛЕЙ СМЕЩЕНИЯ ОТ ГЕОМЕТРИИ ЯДРА КЛАСТЕРА НАРУШЕНИЙ

Препринт

Москва-ЦНИИатоминформ-1988

УДК 548.4

ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛЕЙ СМЕЩЕНИЯ ОТ ГЕОМЕТРИИ ЯДРА КЛАСТЕРА НАРУШЕНИЙ: Препринт ХФТИ 88-45/А.Н.Григорьев, А.Г.Забела, Л.И.Николайчук, Е.М.Прохоренко, Н.А.Хижняк. - Харьков: ХФТИ АН УССР. 1988. - 6 с.

Исследованы поля смещений в легированных кристаллах кубической и гексагональной структур, содержащих протяженные дефекты. Численные результаты приведены в зависимости от геометрии ядра кластера нарушений. Все расчеты выполнялись на базе аналитических представлений полей смещения в интегральной форме с применением уравнений теории упругости.

Результаты работы актуальны для радиационной физики, поскольку позволяют прогнозировать и рассчитывать как характер и геометрию искажений вокруг кластера нарушенной области, так и определять параметры кластера по известной структуре искажений. Зависимости получены для следующих монокристаллов: Mg, ZnO, CdS, W, Au.

Рис. 3, список лит. - 6 назв.

Одним из способов нарушения геометрии каналов в монокристаллах является легирование их ионами других элементов, приводящее к созданию как точечных, так и протяженных дефектов.

Эти дефекты могут контролироваться условиями легирования, а их особенности исследоваться ядерно-физическими методами, например, методом обратного рассеивания.

Для теоретического описания геометрии каналов и размеров нарушенных областей предлагается использовать метод интегральных уравнений для упругих волн в анизотропной среде. Аналогичные интегральные уравнения широко используются в электродинамике [1], и можно полагать, что разработанные там методы их решения окажутся полезными и при решении граничных задач теории упругости. В изотропных кристаллах метод интегральных уравнений находит разнообразные применения (описание радиационных нарушений, дислокаций и т.д.) [2].

В бесконечной упругой анизотропной среде, характеризуемой тензором модулей упругости λ_{iklm}, упругие волны описываются волновым уравнением

$$\frac{\partial^2 U_i}{\partial t^2} - \lambda_{iklm}\frac{\partial^2 U_m}{\partial x_k \partial x_l} = 0. \qquad (1)$$

Предположим, что в этой среде расположена неоднородность объема V, и что ее свойства характеризуются тензором модулей упругости λ'_{iklm}. При изучении рассеяния волн на этой неоднородности необходимо решать следующую краевую задачу.

Известная падающая волна $U_i^{(o)}$, рассеиваясь на неоднородности, порождает волны внутри неоднородности $U_i^{(i)}$ (внутреннее поле) и вне $U_i^{(o)}$ (рассеянное поле). Функции U_i как внутри, так и вне неоднородности строятся из собственных функций уравнения (1) для внутренней и внешней областей. На поверхности неоднородности должны выполняться граничные условия, например, условия уравнения.

$$\sigma_{ik} n_k + \rho g_i = P_i , \qquad (2)$$

где g_i – плотность внешних объемных сил; P_i – компонента внешней поверхностной силы, действующей на единицу поверхности неоднородности; n_k – внешняя нормаль к этой поверхности; $\sigma_{ik} = \lambda_{iklm}\left(\frac{\partial U_l}{\partial x_m} + \frac{\partial U_m}{\partial x_l}\right)$

– компонента тензора упругих напряжений. Тогда из множества возможных решений уравнения в частных производных (I) граничное условие (2) позволяет выбрать единственное решение, описывающее рассматриваемую краевую задачу.

Наша цель – свести решение данной задачи к решению эквивалентного ей интегрального уравнения вида

$$U_i(\vec{r},t) = U_i^{(0)}(\vec{r},t) + \hat{A}\int G_{ik}(\vec{r},\vec{r}')U_k(\vec{r}',t)d\vec{r}', \tag{3}$$

где $U_i(\vec{r},t) = U_i^{(0)} + U_i^{(e)}$ при $\vec{r} \ni V$, $\check{U}_i(\vec{r},t) = U_i^{(i)}$, при $\vec{r} \in V$, $\hat{A}$ – оператор, $G_{ik}(\vec{r},\vec{r}')$ – функция Грина уравнения (I) для безграничной среды. Это интегральное уравнение для точек внутри неоднородности $\vec{r} \in V$ определяет внутреннее поле смещений $U_i^{(i)}$ через поле смещений в падающей невозмущенной волне, а при $\vec{r} \ni V$ соотношение (3) определяет полное поле (поле падающей $U_i^{(0)}$ и отраженной волны $U_i^{(0)}$ через известное внутреннее поле).

В результате для статического случая получаем уравнение, определяющее поле смещений атомов монокристалла через размер и геометрию сердцевины нарушений [I]

$$U_i(\vec{r}) = U_i^{(0)}(\vec{r}) - (\lambda'_{ikem} - \lambda_{ikem})\frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_e}\int_V G_{mj}^{st}(\vec{r}-\vec{r}')U_j^{(i)}(\vec{r}')d\vec{r}', \tag{4}$$

где V – объем сердцевины нарушения в пространстве; $U_j^{(i)}(\vec{r})$ – поле смещений в нарушенной неоднородности; $U_i^{(0)}(\vec{r})$ – первоначальное поле смещений; $G_{mj}^{st}(\vec{r}-\vec{r}')$ – тензор Грина для статического случая [3]; λ'_{ikem} – тензор модулей упругости внутри неоднородности. В случае появления внутри кристалла неоднородности объемом V с изотропной структурой (зона плавления) происходит изменение структуры самого кристалла вокруг данной неоднородности (рис. I).

Размеры и формы этой зоны определяются размером и формой сердцевины кластера (изотропный эллипсоид с полуосями $a = b, c$) и упругими свойствами самого монокристалла.

Изменение структуры кристалла распространяется на вполне конкретные расстояния, за пределами которых можно вновь говорить о ненарушенной структуре. Таким образом, если смещение вблизи неоднородности искать в следующем виде:

$$\Delta U_i(\vec{r}) = U_i^{(0)}(\vec{r}) - U_i(\vec{r}) = (\lambda'_{ikem} - \lambda_{ikem})\frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_e}\int_V G_{mj}^{st}(\vec{r}-\vec{r}')U_j^{(i)}(\vec{r}')d\vec{r}' \tag{5}$$

и $\Delta U_i(\vec{r})$ приравнять 0, то из уравнения (5) можно найти размеры нарушенной области.

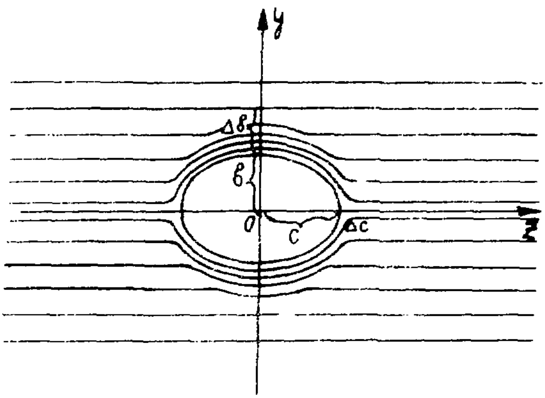


Рис.1. Геометрия каналов и смещения в кристалле, содержащем протяженный дефект

Ниже исследуются параметры нарушенной зоны Δb и Δc для монокристаллов, наиболее часто используемых в физических экспериментах.

КРИСТАЛЛЫ КУБИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Для данного случая тензор модулей упругости в собственной кристаллографической системе координат [4]

$$\lambda_{ikem} = \alpha\,\delta_{ik}\delta_{em} + \beta(\delta_{ie}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{ke}) + M\sum_{p=1}^{3}\delta_{ip}\delta_{kp}\delta_{em}\delta_{mp}\,. \tag{6}$$

Макроскопические модули упругости для кубического поликристалла в случае изотропного распределения кристаллов по ориентациям выражаются следующим образом [4]:

$$\lambda'_{ikem} = \left[\alpha + \frac{2}{375}\,\frac{M^2(3\alpha+8\beta)}{\beta\,(\alpha+2\beta)}\right]\delta_{ik}\delta_{em} + \left[\beta - \frac{1}{125}\,\frac{M^2(3\alpha+8\beta)}{\beta\,(\alpha+2\beta)}\right]\times$$
$$\times\left(\delta_{ie}\,\delta_{mk} + \delta_{im}\,\delta_{ke}\right). \tag{7}$$

Функция Грина кубического монокристалла при исследовании уравнения (5) допускает использование основных свойств объемного потенциала эллипсоида [5] для точек вне объема V и сводит уравнение (5) к алгебраическим уравнениям относительно переменных x^2+y^2 и z^2.

Решением уравнения (5) в предположении, что полуоси эллипсоидальной неоднородности находятся в соотношении $c \geq a = b$, а $x=y=0$ для оси <001> и для оси <010> – $x=z=0$, удалось построить следующие зависимости смещений и размеров нарушенных областей от соотношений b/c для W, Au [4]

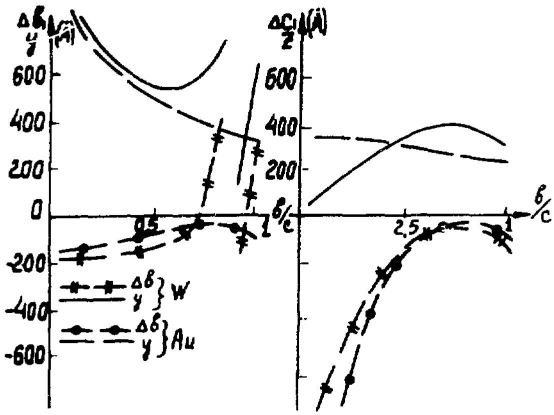
Из рис. 2 видно, что в W только при b/c = 1 ; 0,95; 0,75 ядро кластера сохраняет свои первоначальные размеры. Для остальных а  б

Рис.2. Зависимость смещений и размеров нарушенных областей от параметра ядра b/c для кристаллов кубической структуры: а – по оси <010>; б – по оси <001>

случаев W создает такие усилия, которые приводят к уменьшению размеров центрального тела и в итоге могут его полностью ликвидировать. Последнее справедливо и для всей исследованной области для Au.

КРИСТАЛЛ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ

В данном случае тензор модулей упругости, отнесенный к кристаллографической системе координат, имеет вид [4]:

$$\lambda_{ikem} = \alpha\delta_{ik}\delta_{em} + \beta(\delta_{ie}\delta_{mk} + \delta_{im}\delta_{ke}) + \gamma\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{e3}\delta_{m3} + x(\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{em} + \delta_{ik}\delta_{e3}\delta_{m3}) + \rho(\delta_{im}\delta_{k3}\delta_{e3} + \delta_{i3}\delta_{m3}\delta_{ke}) + \rho(\delta_{ie}\delta_{k3}\delta_{m3} + \delta_{i3}\delta_{em}\delta_{k3}). \tag{8}$$

Тензор модулей упругости при изотропном распределении гексагональных кристаллитов следующий [4]:

$$\lambda'_{ikem} = \Big[\alpha - \frac{4}{675}\,\frac{6\alpha+16\beta}{\beta(\alpha+2\beta)}\cdot\Big(\frac{\gamma^2}{5} + 3(x^2+\rho^2) + 2(x\gamma+\gamma\rho) + 8x\rho\Big) - \frac{2}{675}\,\frac{\alpha+\beta}{\beta(\alpha+2\beta)}(\gamma+3x+4\rho)^2\Big]\delta_{ik}\delta_{em} + \Big[\beta - \frac{1}{1350}\,\frac{6\alpha+16\beta}{\beta(\alpha+2\beta)}\times$$
$$\times\Big(\frac{13}{5}\gamma^2 + 9x^2 + 44\rho^2 + 6x\gamma + 16\gamma\rho + 24x\rho\Big) + \frac{1}{225}\,\frac{\alpha+\beta}{\beta(\alpha+2\beta)}\times(\gamma+3x+4\rho)^2\Big]\cdot(\delta_{ie}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{ke}). \tag{9}$$

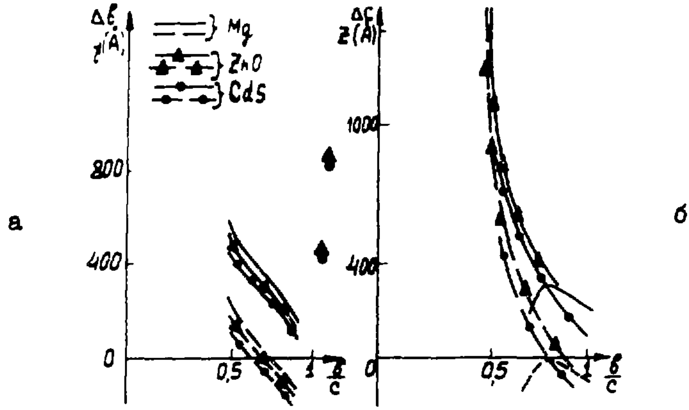


Рис.3. Зависимость смещений и размеров нарушенных областей от параметра ядра b/c для кристаллов гексагональной структуры: а – по оси <0I0> ; б – по оси <00I>

Графики рис. 3 свидетельствуют, что в монокристаллах гексагональной структуры обеспечены условия образования кластеров различной формы.

Как в случае дефектов в кубической, так и в гексагональной решетках [4] наблюдается интересная особенность – величины Δb и Δc определяются лишь в некотором интервале параметров b/c. Вне этих параметров действительные решения уравнения (5) отсутствуют.

Таким образом, эллипсоидальные аморфные сердцевины кластеров порождают равновесные зоны нарушений строго определенной геометрии, зависящие как от размеров сердцевины, так и от других свойств ненарушенного монокристалла.

В расчетах предполагалось, что сердцевина зоны нарушений задана, и определялась нарушенная зона. Можно решать и обратную задачу – при данных масштабах нарушенной зоны – искать геометрию сердцевины.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

I. Хижняк Н.А. Интегральные уравнения макроскопической электродинамики. Киев: Наукова думка, I986.

2. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: Изд-во иностр. лит., I963.

3. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. Построение тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упруго-анизотропной среды//ЖЭТФ. I947. Вып. I7. Т. 9. С. 783-79I.

4. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. К теории упругих свойств поликристаллов//ЖЭТФ, 1946. Вып. 16. Т. 10. С. 967-980.
5. Муратов Р.З. Потенциалы эллипсоида. М.: Атомиздат, 1976.
6. Григорьев А.Н., Николайчук Л.И., Хижняк Н.А. Изучение ориентационной зависимости обратного рассеяния ионов ^4He на монокристалле CdS//УФЖ. 1982. Вып. 27. Т. 10. С. 1485-1488.

Александр Николаевич Григорьев, Александр Григорьевич Забела,
Людмила Ивановна Николайчук, Евгений Михайлович Прохоренко,
Николай Антонович Хижняк

ЗАВИСИМОСТЬ ПОЛЕЙ СМЕЩЕНИЯ ОТ ГЕОМЕТРИИ ЯДРА КЛАСТЕРА НАРУШЕНИЙ

Редактор, корректор Т.И.Ситнянская

Подписано в печать 28.07.88. БЦ 18656. Формат 60х84/16. Бум.писч.№1.
Офсетн.печ. Усл.п.л. 0,7. Уч.-изд.л. 0,4. Тираж 230. Заказ № 807.
Цена 8 коп. Индекс 3624.

Отпечатано в Харьковском ордена Ленина
и ордена Октябрьской Революции физико-техническом институте АН УССР
310108, Харьков, ул. Академическая, 1

Для заметок

8 коп. Индекс 3624

Препринт, 1988, 1-6.