УДК 548.24

О. М. ОСТРИКОВ

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ И ПОТОКОВ ЕЕ МИГРАЦИИ У КЛИНОВИДНОГО ДВОЙНИКА НА ОСНОВАНИИ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ МОДЕЛИ

Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого

(Поступила в редакцию 12.04.2006)

Атмосферы примесей у дислокаций во многом определяют их поведение при внешнем деформировании кристаллических материалов, изменяя динамические параметры дислокаций [1, 2]. Избыток примесных атомов в областях локализации напряжений повышает вероятность зарождения фазы, образование которой вдали от источников напряжений невозможно [1]. Это интересно в плане разработки технологии целенаправленного формирования необходимых свойств материалов.

Согласно дислокационной модели двойников, двойниковые границы моделируются упорядоченно расположенной относительно друг друга совокупностью двойникующих дислокаций, являющихся частичными дислокациями Шокли [2]. При этом вопросы, связанные с определением характера развития двойниковых прослоек с учетом влияния примесей, в настоящее время остаются малоизученными. Не изучены вопросы, касающиеся определения потоков миграции примесей у двойников. Экспериментально данные задачи решить довольно трудно. Поэтому представляет научный интерес цель данной работы, заключающаяся в расчете распределения примеси и определения потоков ее миграции у клиновидного двойника.

Клиновидные двойники обычно зарождаются у концентраторов напряжений и имеют форму в виде вытянутого равнобедренного треугольника [3]. В реальной ситуации на эксперименте наблюдаются различного рода искривления границ клиновидных двойников [3]. В данной работе пренебрегаем этими искривлениями и при расчете будем считать, что границы клиновидного двойника являются прямолинейными, как это показано на рис. 1, где границами двойника являются отрезки AB и CB. Такое приближение является оправданным при рассмотрении дальнодействующих напряжений, на конфигурацию которых, с одной стороны, форма границ клиновидного двойника оказывает малое влияние. С другой, двойники, имеющие в профиле вид в форме вытянутого равнобедренного треугольника, реально существуют и наблюдаются на эксперименте при развитии двойника, например, в малодефектной области монокристалла [3]. Поэтому рассматриваемое приближение имеет важное практическое значение, так как оно описывает определенный класс клиновидных двойников.

В качестве другого допущения рассмотрим клиновидный двойник, зародившийся вдали от поверхности двойникующегося материала. Такие двойники обычно зарождаются в объеме двойникующегося монокристалла у концентратора напряжений и способствуют их релаксации. В нашей задаче не будем учитывать напряжения, которые создает данный концентратор напряжений, что позволит сделать расчеты менее громоздкими. При этом появляется возможность изучить именно роль самого двойника в процессе перераспределения и миграции примесей.

В общем случае в плоскости XOY форма границ клиновидного двойника на рис. 1 описывается функциями $f_1(x_0)$ (граница AB) и $f_2(x_0)$ (граница CB). Пусть дислокации на данных границах параллельны друг другу и оси OZ, перпендикулярной плоскости рис. 1. Плотность двойникующих дислокаций на границах клиновидного двойника равна ρ_1 (на границе AB) и ρ_2 (на границе CB). Тогда напряжения, создаваемые рассматриваемым клиновидным двойником, могут быть определены из формулы

$$\sigma_{ij}(x,y)=\sigma_{ij}^{(1)}(x,y)+\sigma_{ij}^{(2)}(x,y), \qquad (1)$$

где

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x,y)=\int_0^L\sqrt{1+(f_1'(x_0))^2}\rho_1(x_0)\sigma_{ij}^{(1,0)}(x,y,x_0)dx_0; \qquad (2)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x,y)=\int_0^L\sqrt{1+(f_2'(x_0))^2}\rho_2(x_0)\times \sigma_{ij}^{(2,0)}(x,y,x_0)dx_0. \qquad (3)$$

Здесь $\sigma_{ij}^{(1)}$ и $\sigma_{ij}^{(2)}$ – напряжения, создаваемые каждой из границ клиновидного двойника; L – длина двойника, равная длине отрезка OB (рис. 1); $\sigma_{ij}^{(1,0)}$ и $\sigma_{ij}^{(2,0)}$ – напряжения, создаваемые единичной дислокацией, находящейся на границе AB и CB соответственно.

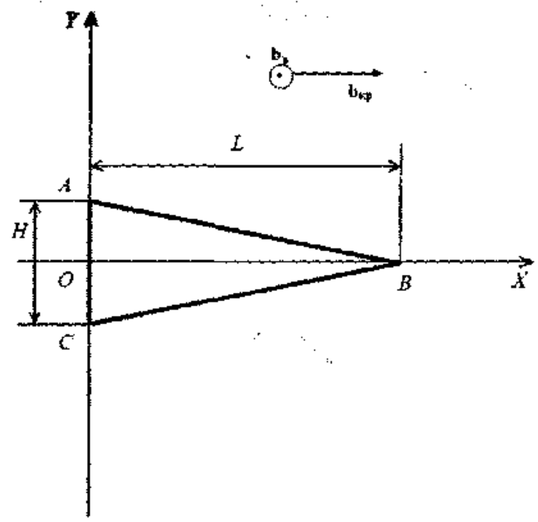

Рис. 1. Схематическое изображение клиновидного двойника формы в плоскости сечения XOY в виде вытянутого равнобедренного треугольника

Так как двойникующие дислокации являются частичными дислокациями Шокли [2], то их вектор Бюргерса имеет винтовую ($\mathbf{b}_в$) и краевую ($\mathbf{b}_{кр}$) составляющие. Тогда напряжения $\sigma_{ij}^{(1,0)}$ и $\sigma_{ij}^{(2,0)}$ могут быть определены из следующих соотношений:

$$\sigma_{xx}^{(1,0)}=-\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}\frac{(y-f_1(x_0))[3(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]^2};$$

$$\sigma_{yy}^{(1,0)}=\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}\frac{(y-f_1(x_0))[(x-x_0)^2-(y-f_1(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]^2};$$

$$\sigma_{xy}^{(1,0)}=\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}\frac{(x-x_0)[(x-x_0)^2-(y-f_1(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2]^2}; \qquad (4)$$

$$\sigma_{zz}^{(1,0)}=-\frac{\mu b_{кр}\nu}{\pi(1-\nu)}\frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2};$$

$$\sigma_{zx}^{(1,0)}=-\frac{\mu b_в}{2\pi}\frac{y-f_1(x_0)}{(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2};$$

$$\sigma_{zy}^{(1,0)}=\frac{\mu b_в}{2\pi}\frac{x-x_0}{(x-x_0)^2+(y-f_1(x_0))^2},$$

$$\sigma_{xx}^{(2,0)}=-\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}\frac{(y-f_2(x_0))[3(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]^2};$$

$$\sigma_{yy}^{(2,0)}=\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}\frac{(y-f_2(x_0))[(x-x_0)^2-(y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]^2};$$

$$\sigma_{xy}^{(2,0)}=\frac{\mu b_{кр}}{2\pi(1-\nu)}\frac{(x-x_0)[(x-x_0)^2-(y-f_2(x_0))^2]}{[(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2]^2}; \qquad (5)$$

$$\sigma_{zz}^{(2,0)}=-\frac{\mu b_{кр}\nu}{\pi(1-\nu)}\frac{y-f_2(x_0)}{(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2};$$

$$\sigma_{zx}^{(2,0)}=-\frac{\mu b_в}{2\pi}\frac{y-f_2(x_0)}{(x-x_0)^2+(y-f_2(x_0))^2};$$

$$\sigma_{zy}^{(2,0)} = \frac{\mu b_в}{2\pi} \frac{x - x_0}{(x-x_0)^2 + (y - f_2(x_0))^2},$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона. Принималась представленная на рис. 1 ориентировка винтовой и краевой составляющих вектора Бюргерса.

Для рассматриваемого двойника нетрудно показать справедливость соотношений

$$f_1(x_0) = \frac{H}{2}\left(1 - \frac{x_0}{L}\right); \tag{6}$$

$$f_2(x_0) = -\frac{H}{2}\left(1 - \frac{x_0}{L}\right), \tag{7}$$

где H – ширина двойника у устья (рис. 1). При этом формулы (2) и (3) можно записать в виде

$$\sigma_{ij}^{(1)}(x,y) = \sqrt{1 + \left(\frac{H}{2L}\right)^2} \int_0^L \rho_1(x_0)\sigma_{ij}^{(1,0)}(x,y,x_0)dx_0 \; ; \tag{8}$$

$$\sigma_{ij}^{(2)}(x,y) = \sqrt{1 + \left(\frac{H}{2L}\right)^2} \int_0^L \rho_2(x_0)\sigma_{ij}^{(2,0)}(x,y,x_0)dx_0 \, . \tag{9}$$

Распределение легирующего компонента у клиновидного двойника рассчитывается по формуле [1]

$$C = C_0 \exp(-\frac{U}{kT}), \tag{10}$$

где C_0 – концентрация примесей вдали от внутренних источников напряжений; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; U – энергия взаимодействия примесей с клиновидным двойником, которая находится по формуле [1]:

$$U = -\frac{4}{3}\pi r^3 \, \varepsilon \, (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}). \tag{11}$$

Здесь r – радиус атома матрицы; $\varepsilon = (r_0 - r)/r$ – малый параметр (r_0 – радиус атома легирующего компонента); σ_{xx}, σ_{yy} и σ_{zz} – нормальные компоненты тензора напряжений, определяемые из (1).

Результаты расчетов распределения примеси у клиновидного двойника представлены на рис. 2. Принималось L = 100 мкм, H = 11 мкм, T = 300 К. Плотность двойникующих дислокаций на двойниковых границах в настоящей работе принималась постоянной. Профили распределения примесей у клиновидного двойника при $r > r_0$ и $r < r_0$ имеют одинаковый вид. Разница заключается в расположении областей минимальной и максимальной концентрации примесей. В случае, когда $r > r_0$, примесь локализуется в областях сжатия (рис. 2), а при $r < r_0$ – в областях растяжения, т. е. в тех областях, где для случая $r > r_0$ наблюдается максимум концентрации примесей, в случае $r < r_0$ имеет место ее минимум.

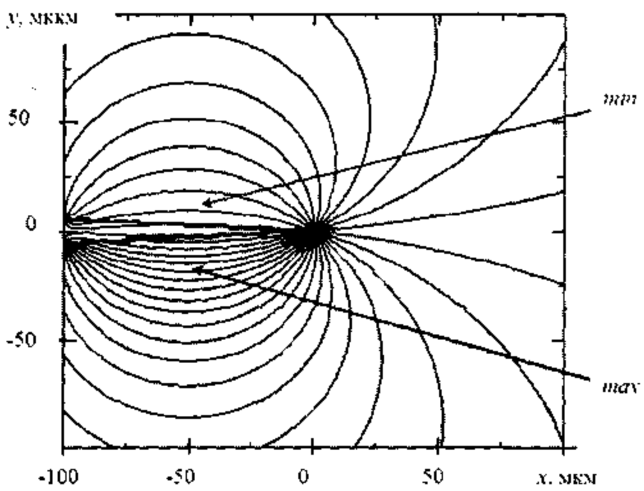

Рис. 2. Рассчитанные концентрационные профили распределения примеси у клиновидного двойника с постоянной плотностью двойникующих дислокаций на двойниковых границах

Для определения направления потоков миграции примесей необходимо построение эквипотенциальных поверхностей [1]. Согласно расчетам на основании (11), их профиль для рассматриваемого двойника имеет аналогичный вид, как и вид профилей распределения примесей на рис. 2. По данным [1] линии, перпендикулярные линиям профилей эквипотенциальных поверхностей, укажут поток миграции примеси. Схематически эти потоки для случая $r > r_0$ показаны на рис. 3. Примесь, радиус которой больше радиуса атомов матрицы, мигрирует в противоположном направлении.

Следует отметить, что дрейф примесных атомов происходит от области, близкой к вершине и устью двойника, к его центральной части. При этом максимальная концентрация примеси наблюдается не только у двойниковых границ, но и в некотором удалении от них (для рассматриваемого двойника это удаление от границы составляет около 10 мкм).

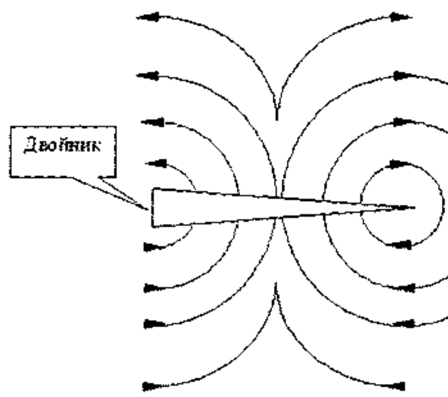

Рис. 3. Потоки миграции у клиновидного двойника примеси, радиус которой меньше радиуса атомов матрицы

Скорость дрейфа атомов примеси может быть определена из соотношения [1]

$$\mathbf{V} = \frac{D}{kT}\mathbf{F} = -\frac{D}{kT}\,\mathbf{grad}\,U, \tag{12}$$

где D – коэффициент диффузии; $\mathbf{F}$ – сила, действующая на атом примеси в поле двойника. Нетрудно показать, что модуль скорости дрейфа атомов примеси определяется из соотношения

$$V = \frac{D}{kT}\sqrt{\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)^2}\,. \tag{13}$$

Анализируя данное выражение, можно отметить, что частные производные по x и y от U равны нулю в точках максимального и минимального значений $U(x, y)$ [4]. В этих точках $V = 0$. Такие области наблюдаются на двойниковых границах, у вершины двойника и в областях максимальной и минимальной концентрации примесей в удалении от средней части двойника. Сопоставляя данные, представленные на рис. 2, 3, учитывая (13), можно сделать заключение, что в областях максимальной концентрации примеси у клиновидного двойника величина ее скорости стремится к нулю. Это связано с тем, что нормальные напряжения у клиновидного двойника распределены таким образом, что обеспечивают дрейф примеси к зонам ее локализации (рис. 2) и способствуют ее торможению в данных областях.

Таким образом, разработана макроскопическая дислокационная модель клиновидного двойника, на основании которой сделан расчет распределения у него примесей и потоков их миграции. Установлено, что примесь у клиновидного двойника локализуется не только на двойниковых границах, но и в области, удаленной (для двойника длиной 100 мкм, это удаление имеет порядок 10 мкм) от средней части двойника. Потоки миграции примеси таковы, что она мигрирует по концентрическим траекториям к границам двойника и к средней его части. Минимальная скорость дрейфа примеси наблюдается у границ двойника и в областях максимальной концентрации примеси.

Литература

1. Предводителев А. А., Тяпунина Н. А., Зиненкова Г. М., Бушуева Г. В. Физика кристаллов с дефектами. М., 1986.

2. Новиков И. И., Розин К. М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. М., 1990.

3. Остриков О. М. // Физика металлов и металловедение. 2000. Т. 90, № 1. С. 91–95.

4. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М., 1974.

O. M. OSTRIKOV

CALCULATION OF IMPURITY DISTRIBUTION AND ITS MIGRATION FLAWS AT WEDGE-SHAPED TWIN BASED ON MACROSCOPIC DISLOCATION MODEL

Summary

A dislocation model of the wedge twin is developed, on which basis of the distribution of an impurity and flows of migration of impurity is calculated.