

УДК 539.219.3

© 1992

ДЕФОРМИРОВАНИЕ РЕШЕТКИ ПРИ ДИФФУЗИОННОМ ПЕРЕМЕЩЕНИИ АТОМА И ПРАВИЛО ВАН ЛИМПА

В. В. Мецераков

Динамика возмущения решетки единичным диффузионным пробегом атома исследуется с помощью мультипольного разложения для плотности силы, зависящей от времени. В линейной модели упругого кристалла получено решение в виде монопольных и дипольных объемных и сдвиговых волн деформации решетки, структура которых может качественно меняться в зависимости от температурного изменения упругих постоянных.

1. Известно, что для большинства элементов хорошо выполняется эмпирическое правило Ван Лимпа, состоящее в зависимости энергии активации самодиффузии от температуры плавления $E=18RT_m$ [1], где R — газовая постоянная. Однако диффузия должна сопровождаться значительными искажениями структуры [2], зависящими от кристаллографических и упругих свойств решетки, от исходного статически деформированного состояния вакансии, от кинематических особенностей движения атома, наконец, от особенностей электронных спектров матрицы и диффундирующего атома.

Каким физическим механизмом (судя по всему, инвариантным относительно перечисленного) связаны диффузия и точка фазового превращения?

Разработка этого вопроса может оказаться полезной при рассмотрении эффектов расслоения материалов при высоких температурах [3] и связи ускоренной диффузии с низкотемпературными структурными превращениями [4].

2. Постановка динамической задачи о деформациях решетки требует задания плотности силы $F(r, t)$, действующей на решетку со стороны диффундирующего атома. Полагая, что характерная область движения атома $r(t) \ll r$ — расстояния до точки наблюдения, представим $F(r, t)$ мультипольным разложением

$$F_i(r, t) = f_i(t) \delta(r) - P_{in}(t) \partial_n \delta(r). \quad (1)$$

Монопольная и дипольная составляющие (1) определяются силой $f(t) = = md^2r(t)$, где m — масса атома, и силовой диадой $P(t) = [f_0 + f(t)] \otimes [r_0 + r(t)]$. Постоянные векторы f_0 и r_0 характеризуют начальное состояние решетки и определяют тензор статических силовых диполей P_0 [5], который связан с P соотношением

$$P(t) = P_0 + T(t). \quad (2)$$

Тензор

$$T(t) = P_1(t) + P_2(t) + P_3(t), \quad (3)$$

где $P_1 = f(t) \otimes r(t)$ определяется динамикой движения атома, а $P_2 = f_0 \otimes r(t)$ и $P_3 = f(t) \otimes r_0$ — динамикой переноса по решетке начального упругого поля.

Структура возмущения (1) достаточно сложна, однако пока что единствен-

ное условие $r(t) \ll r$ позволяет поставить задачу о вычислении линейного отклика решетки в модели упругого кристалла

$$\rho_0 \partial_t^2 s_i(\mathbf{r}, t) = H_{ik, mn} \partial_m \partial_n s_k(\mathbf{r}, t) + F_i(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

где ρ_0 — плотность, $H_{ik, mn}$ — тензор Хуанга [5].

Условие статического равновесия решетки требует, чтобы $f(0)=0$. В этом случае уравнения (4) принимают правильный вид статической задачи с тензором P_0 [5]. Еще заметим, что, поскольку $P_1 = m\mathbf{A}$, где \mathbf{A} — тензор ускорения-координаты, определяемый диадой $d_i^j r(t) \otimes \mathbf{r}(t)$, а в модели (4) кинематика атома не зависит от смещений решетки \mathbf{s} , то \mathbf{A} необходимо задавать, руководствуясь сторонними соображениями.

Примем, что

$$H_{ik, mn} = c_{44} \delta_{ik} \delta_{nm} + (c_{11} - c_{44}) \delta_{ikmn}, \quad (5)$$

где c_{11} и c_{44} — упругие постоянные, определяющие продольную $c_l = (c_{11}/\rho_0)^{1/2}$ и поперечную $c_t = (c_{44}/\rho_0)^{1/2}$ скорости распространения деформаций.

В приближении (5) уравнения (4) с силой (1) расцепляются. Например,

$$\begin{aligned} \rho_0 \partial_t^2 s_x(\mathbf{r}, t) = & [c_{11} \partial_x^2 + c_{44} (\partial_y^2 + \partial_z^2)] s_x(\mathbf{r}, t) + f_x(t) \delta(\mathbf{r}) - \\ & - [P_{xx}(t) \partial_x + P_{xy}(t) \partial_y + P_{xz}(t) \partial_z] \delta(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (6)$$

Диагонализуя оператор дифференцирования смещений по координатам с помощью масштабного преобразования $\bar{x} = (c_{44}/c_{11})^{1/2} x$, $\bar{y} = y$, $\bar{z} = z$, получим

$$(\rho_0 \partial_{\bar{t}}^2 - c_{44} \nabla^2) s_x(\mathbf{r}, t) = \xi f_x(t) \delta(\mathbf{r}) - \xi [P_{xx} \partial_x + P_{xy} \partial_y + P_{xz} \partial_z] \delta(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где $\xi = (c_{44}/c_{11})^{1/2}$, $\bar{r} = (\xi^2 x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$.

Запаздывающий интеграл уравнения (7) имеет стандартный вид. Его разложение для случая $n\bar{r}' \ll c_t \tau \ll \bar{r}$ (τ — время диффузионного пробега атома), соответствующего приближению волновой зоны, равно

$$\frac{1}{4\pi c_{44} \bar{r}'} \int d\bar{\mathbf{r}}' F_x(\bar{\mathbf{r}}', t') + \frac{1}{4\pi c_{44} \bar{r}'} \int d\bar{\mathbf{r}}' \frac{n\bar{\mathbf{r}}'}{c_t} \dot{F}_x(\bar{\mathbf{r}}', t'), \quad (8)$$

где $t' = t - \bar{r}/c_t$.

Интегрирование (8) и других аналогичных интегралов для s_y и s_z дает поле смещений в волновой зоне

$$s_i(\mathbf{r}, t) = \frac{\xi f_i(t')}{4\pi c_{44} r_i} + \frac{\xi \dot{U}_{in}(t') x_n}{4\pi c_{44} c_{11} c_t r_i^2}, \quad (9)$$

где $r_i = [(\xi^2 - 1) x_j^2 \delta_{ij} + r^2]^{1/2}$; компоненты тензора

$$U_{in} = \begin{cases} c_{44} T_{in}, & i \neq n, \\ c_{11} T_{in}, & i = n. \end{cases}$$

Из (9) следует, что если в момент времени $t=0$ атом начал движение, то через время $t_0 = r_i/c_t$ в точке r_i возникает смещение среды s_i . Длится процесс от момента времени r_i/c_t до $r_i/c_t + \tau$.

3. Поля деформации (9) убывают с расстоянием по закону r^{-1} , что может приводить к конечной величине интенсивности упругого излучения на бесконечности. Это важное обстоятельство позволяет найти динамические параметры диффундирующего атома.

Определим энергию активации самодиффузии как поглощенную атомом энергию, необходимую для осуществления диффузионного пробега. В этом случае начальная скорость атома $v(0)=0$.

Учтем далее, что условие статического равновесия решетки требует, чтобы $f(0)=f(\tau)=0$. Это приводит к необходимости выбора осциллирующей функции для ускорения атома. Наконец, положим, что при $t=0$ атом находится в начале

координат, и учет линейный пробег атома. Перечисленным требованиям удовлетворяют следующие функции:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(t) &= \frac{f_m}{m} \sin \omega t, \\ \mathbf{v}(t) &= \frac{f_m}{m\omega} (1 - \cos \omega t), \\ \mathbf{r}(t) &= \frac{f_m}{m\omega^2} (\omega t - \sin \omega t), \end{aligned} \quad (10)$$

где f_m и ω — неопределенные параметры движения.

Кинематика (10) в общем случае будет нарушать равновесие кристалла в процессе движения атома. Однако если существование поступательной степени свободы решетки предопределено постановкой задачи, то вращательные необходимо исключить. Достигается это удовлетворением условию $\mathbf{f}_0 \times \mathbf{r}(t) + \mathbf{f}(t) \times \mathbf{r}_0 = 0$. Дифференцируя дважды по времени и учитывая, что в статике $\mathbf{f}_0 \times \mathbf{r}_0 = 0$, получим $\mathbf{f}_0 = m\omega^2 \mathbf{r}_0$ — условие отсутствия вращения кристалла при движении атома.

Примем, что процесс диффузии осуществляется с помощью вакансионного механизма. Это значит, что начальное состояние решетки должно быть статически деформированным и описывается тензором

$$\mathbf{P}_0 = \begin{bmatrix} f_{0x}x_0 & f_{0xy}y_0 & f_{0xz}z_0 \\ f_{0yx}x_0 & f_{0yy}y_0 & f_{0yz}z_0 \\ f_{0zx}x_0 & f_{0zy}y_0 & f_{0zz}z_0 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Тогда, задавая движение атома вдоль отрицательного направления оси x , получим

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} f_{0x}x(t) + f_x(t)x_0 + f_x(t)x(t) & f_x(t)y_0 & f_x(t)z_0 \\ f_{0y}x(t) & 0 & 0 \\ f_{0z}x(t) & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Особенностью \mathbf{T} является его независимость от сдвиговых компонент \mathbf{P}_0 . Это значит, что динамика деформирования решетки в приближении тензора (12) не зависит от исходной статической деформации типа сдвига. Связано это с выбором плотности силы (1), которая исключает перемещение монополей в пространстве.

Подставляя (10) в (12) и учитывая, что $\mathbf{f}_0 = m\omega^2 \mathbf{r}_0$, получим

$$\begin{aligned} s_x &= \frac{\xi f_m}{4\pi c_{44} r_x} \sin \omega t + \frac{\xi f_m}{4\pi c_{44} c_{11} c_f m \omega r_x^2} \times \\ &\times \{c_{44} [f_{0x} + f_m (\omega t - \sin \omega t \cos \omega t)] x + c_{11} (f_{0y} y + f_{0z} z) \cos \omega t\}, \\ s_y &= \frac{\xi f_{0y} f_m x}{4\pi c_{44} c_f m \omega r_y^2} (1 - \cos \omega t), \\ s_z &= \frac{\xi f_{0z} f_m x}{4\pi c_{44} c_f m \omega r_z^2} (1 - \cos \omega t). \end{aligned} \quad (13)$$

Итак, для определения смещений s в модели (4) с тензором Хуанга (5) необходимо иметь следующие величины: ρ_0 , c_{44} , c_{11} , \mathbf{P}_0 , f_m и ω . Первые три известны из опыта. Компоненты \mathbf{P}_0 в принципе можно рассчитать одним из методов статистики решетки, хотя надо сказать, что для вакансии это требует решения нелинейной квантованной задачи и пока что в практическом отношении реализу-

ется не вполне надежно. Причина этого в отсутствии прямой экспериментальной информации о компонентах P_0 . А для определения f_m и ω можно использовать закон сохранения импульса, выраженный в (4), и закон сохранения энергии в динамике атома.

4. Определение энергии активации как поглощенной энергии позволяет ввести вектор Пойнтинга поля деформации, обусловленного движущимся атомом, и воспользоваться законами сохранения.

Плотность тока упругих деформаций $j_k = -\sigma_{ik} \dot{s}_i$, где тензор напряжений $\sigma_{ik} = C_{ik, mn} \partial_m s_n$, определяется тензором плотности энергии [5]

$$C_{ik, mn} = H_{im, kn} + H_{in, mk} - H_{ik, mn}. \quad (14)$$

Для дальнейших оценок используем приближение $c_{11} = c_{44}$ (это соответствует $H_{ik, mn} = c_{44} \delta_{ik} \delta_{mn}$), которое хотя и огрубляет задачу, однако в силу сохранения динамической устойчивости модели (4) позволяет сохранить и ее качественные особенности. В этом случае $\partial_i s_n = -\dot{s}_n x_i / c_i r$ и $j_n = c_{44} \dot{s}_n^2 x_i / c_i r$. Тогда

$$\dot{s}_i = \frac{1}{4\pi c_{44} r} \left(\dot{j}_i + \frac{\ddot{T}_{in} x_n}{c_i r} \right), \quad (15)$$

и так как интенсивность излучения $I = \int j_n dS_n$, то

$$I = \frac{\dot{j}_i^2}{4\pi c_{44} c_i} + \frac{\ddot{T}_{in}^2}{12\pi c_{44} c_i^2}. \quad (16)$$

Формула (16) имеет знакомый вид для интенсивности классического поля излучения. Следует только заметить, что, поскольку плотность силы (1), записанная для физической системы, ограничена первыми двумя мультиполями, интенсивность (16) содержит только монополюсный и дипольный вклады вне зависимости от использованных приближений.

Подстановка T и f в (16) дает

$$I = \frac{\dot{j}_x^2}{4\pi c_{44} c_i} + \frac{1}{12\pi c_{44} c_i^2} \left[(\dot{j}_x x + 2\dot{j}_x \dot{x} + f_x \ddot{x})^2 + (f_y^2 + f_z^2) \left(\frac{\dot{j}_x^2}{m^2 \omega^2} + \dot{x}^2 \right) \right]. \quad (17)$$

Отметим, что в (17) не вошла продольная движению компонента f_{0x} , а значит, начальная деформация решетки, обусловленная статической силой, направленной вдоль движения атома, переносится без затраты работы. Этот факт может объяснить удовлетворительные результаты работ по диффузии, где рассматриваются упругие смещения ближайших соседей в поперечных движению направлениях.

Полная поглощенная энергия за время $\tau = \pi/\omega$, когда атом приобретает максимальную скорость $v(\tau)$, равна

$$E = \frac{\omega f_m^2}{8c_{44} c_i} + \frac{k f_m^4}{12c_{44} c_i^2 m^2 \omega} + \frac{f_0^2 f_m^2}{12c_{44} c_i^2 m^2 \omega}, \quad (18)$$

где постоянная $k = \pi^2/6 + 45/12 + 8/3\pi \approx 4.55$, $f_0^2 = f_{0y}^2 + f_{0z}^2$.

Первое слагаемое в (18) характеризует излучение, идущее на изменение кинетической энергии атома под действием силы f . Так как $E_{kin} = m\dot{v}^2(\tau)/2$, то $2f_m^2/m\omega^2 = f_m^2/m/8c_{44} c_i$ и

$$\omega_m = \left(\frac{16c_{44} c_i}{m} \right)^{1/2} \quad (19)$$

— частота, на которой происходит поглощение энергии в системе.

Сейчас следовало бы дать оценки частоты ω_m и малого параметра разложения (8), однако удобнее сделать это в конце среди прочих оценок. Поэтому продолжим вычисления.

Перенос энергии в решетке осуществляется упругими волнами (являющимися решениями однородного волнового уравнения (1)) с плотностью кинетической энергии $\rho_0 c_t^2/2$. Полагая $\rho_0 = m/\Omega_0$, где Ω_0 — атомный объем, получим

$$m c_t^2/2 = E, \quad (20)$$

подставляя (18) в (20) с использованием (19), найдем уравнение для f_m

$$f_m^4 + \frac{1}{k} \left[\frac{3}{2} (m c_t \omega_m)^2 + f_0^2 \right] f_m^2 - \frac{3}{8k} (m c_t \omega_m)^4 = 0. \quad (21)$$

Для решения (21) необходимо иметь значения компонент тензора \mathbf{P}_0 , описывающего статическое поле вакансии. Воспользуемся тем, что объемный эффект статического дефекта определяется в основном электростатикой решетки [6] (следствие задачи Смолуховского о сглаживании плотности распределения заряда), и оценим f_0 приближенно. Тогда, если при образовании вакансии объем кристалла изменяется на $\Delta \Omega \approx \Omega_0$, то силу f_0 можно определить через энергию образования вакансии, сравнимую с энергией связи решетки E_0 . Полагая $c_{44} \approx E_0/\Omega_0$, получим

$$f_0 \approx \frac{E_0}{\Omega_0^{1/2}} \approx c_{44} \Omega_0^{1/2} \approx c_{44} \frac{m^{1/3}}{\rho_0^{1/3}} \approx m c_t \omega_m.$$

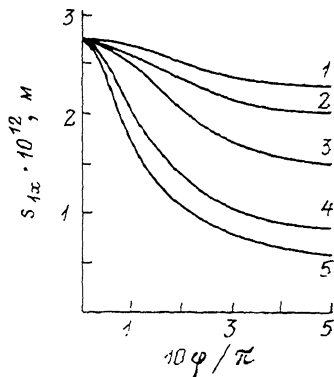


Рис. 1. Смещения $s_{1x}(\varphi, \pi/2)$ на расстоянии $r=30 \text{ \AA}$ от начала координат для $\xi=0.82$ (1), 0.74 (2), 0.5 (3), 0.3 (4), 0.2 (5).

Для $f_0 = m c_t \omega_m$ решение уравнения (21) дает $f_m \approx 0.35 m c_t \omega_m$, и если обозначить

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{vol}} + E_{\text{dis}}, \quad (22)$$

то оказывается, что $E_{\text{kin}} \approx 0.5E$, $E_{\text{vol}} \approx 0.3E$ и $E_{\text{dis}} \approx 0.2E$.

Таким образом, в принятых приближениях энергия активации складывается из $\approx 50\%$ энергии, идущей на изменение кинетической энергии атома, достигающего скорости $v(\tau) \approx 0.7c_t$; $\approx 30\%$ энергии, идущей на изменение дипольного момента решетки, обусловленного динамикой атома, и $\approx 20\%$ энергии, идущей на изменение дипольного момента, обусловленного динамикой переноса упругого поля вакансии, поперечного движения атома.

Энергия $E_{\text{dis}} \sim f_0^2$, и, следовательно, в гармонической задаче снимается нередко возникающий вопрос о знаке упругого поля вакансии. Другими словами, в линейном приближении на перенос центра сжатия или центра растяжения затрачивается одна и та же работа. Различие может появиться лишь при учете ангармонических эффектов.

5. Сделаем количественные оценки смещений (13), имея в виду, что приближение $c_{\parallel} = c_{44}$, использованное для оценок f_0 и f_m , должно исказить значения амплитуд. Поэтому проведем вычисления для отдельных слагаемых смещений: монопольного s_{1x} и дипольных s_{2x} и s_y , не придавая особого значения их отношениям.

Для определенности возьмем Na с параметрами: $c_{11} = 8.5 \cdot 10^9 \text{ н/м}^2$, $c_{44} = 5.8 \cdot 10^9 \text{ н/м}^2$ при $T=100 \text{ К}$ и $c_{11} = 7.4 \cdot 10^9 \text{ н/м}^2$ и $c_{44} = 4.0 \cdot 10^9 \text{ н/м}^2$ при $T=350 \text{ К}$ [7].

Смещения s удобно представить в сферических координатах. Тогда, рассматривая наиболее характерный случай при полярном угле, равном $\pi/2$, будем

строить графики смещений в зависимости от азимутального угла φ . Ограничимся иллюстрацией смещений при $\omega_m t' = \pi/2$ на расстоянии $r = 30 \cdot 10^{-10}$ м от начала координат.

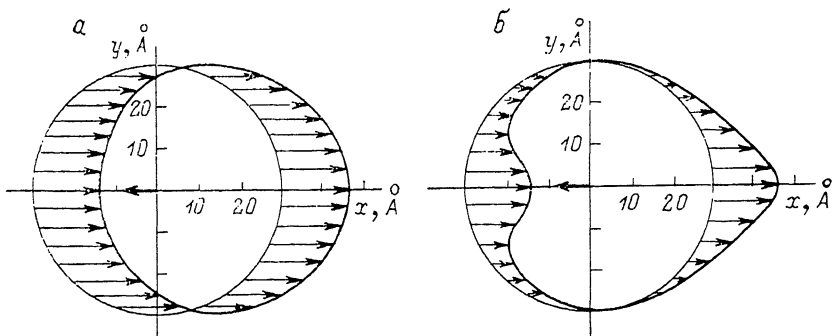


Рис. 2. Смещения s_{1x} в плоскости xy для $\xi = 0.82$ (а) и 0.2 (б).

На рис. 1 показаны зависимости $s_{1x}(\varphi)$ для пяти различных значений величины ξ : 0.82 (100 К), 0.74 (350 К), 0.5 , 0.3 и 0.2 . Два последних значения ξ соответствуют поведению упругой постоянной c_{44} при приближении к точке плавления [8].

На рис. 2 смещения s_{1x} показаны в плоскости xy (масштаб смещений $s \cdot 10^2$; стрелкой в начале координат обозначена сила f). С уменьшением ξ все меньшая область решетки вовлекается в перенос атома. Но, поскольку в принятых приближениях атом разгоняется до одной и той же скорости $0.7c_t$ и E_{kin} оказывается не связанной с ξ , то и амплитуда смещений $s_{1x}(0)$, обусловленных E_{kin} , не зависит от ξ .

Рис. 3 иллюстрирует зависимости $s_{2x}(\varphi)$. Их изображение на плоскости (рис. 4, а) говорит о том, что изменение дипольного момента решетки, обусловленного ускоренным движением атома, приводит к объемному эффекту. С приближением к точке плавления (рис. 4, б) величина объемного эффекта падает. Это значит, что в пределах справедливости гипотезы Борна о плавлении твердых тел ускоренное движение частицы жидкой среды не сопровождается изменением объемного дипольного момента решетки. При этом $E_{vol} \rightarrow 0$.

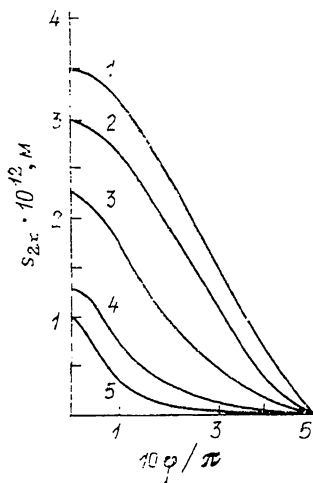


Рис. 3. Смещения s_{2x} для $\xi = 0.82$ (1), 0.74 (2), 0.5 (3), 0.3 (4), 0.2 (5).

На рис. 5 показаны смещения s_y , которые энергетически обусловлены слагаемым E_{dis} в (22). Их сдвиговой характер отчетливо виден на рис. 6, а. С уменьшением ξ структура поля смещений качественно меняется (рис. 6, б). Можно утверждать, что если с ростом температуры c_{44} уменьшается быстрее, чем c_{11} , то возможно развитие сдвиговой неустойчивости.

Таким образом, начальное статическое деформированное состояние вакансии, которое в балансе энергии (22) вряд ли превосходит 20 % от полной энергии диффузии, может обеспечивать слом решетки.

Этот результат находится в кажущемся противоречии с правилом Ван Лимпа, утверждающим, что температура плавления T_m связана с полной величиной энергии диффузии, а не какой-то ее частью. Однако все три слагаемых в (22) имеют характер mc_i^2 , и если воспользоваться критерием плавления Линдемана

$$\omega_D^2 = \frac{9k_B T_m}{C_L m \Omega_0^2}, \quad (23)$$

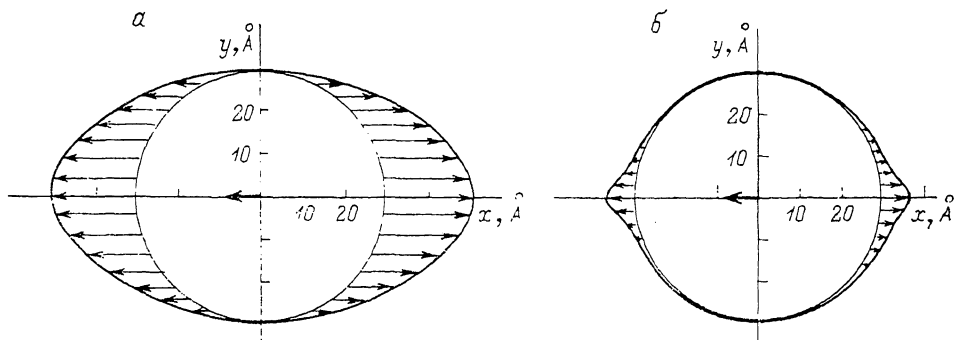


Рис. 4. Смещения s_{2x} в плоскости xy для $\xi=0.82$ (а) и 0.2 (б).

Случай б иллюстрирует уменьшение объемного эффекта с приближением к T_m .

где k_B и C_L — постоянные, дебаевская частота

$$\omega_D^3 = \frac{18\pi^2}{\Omega_0} \left(\frac{2}{c_i^3} + \frac{1}{c_l^3} \right)^{-1}, \quad (24)$$

то, вновь используя изотропное приближение и подставляя (23) и (24) в (22), получим

$$E = \frac{9k_B T_m}{2(6\pi^2)^{2/3} C_L}. \quad (25)$$

Действительно, E оказывается линейно связанной с T_m и не зависит от других физических переменных. Для Na формула (25) дает величину $E=0.42$ эВ вместо экспериментального значения 0.45 эВ.

Правило Ван Лимпа выполняется с экспериментальной точностью $\pm 20\%$ [1], а точность измерения E составляет 10% . Не проводя систематических оценок, укажем лишь, что разброс значений постоянной Линдемана для разных элементов [9] удовлетворительно описывает эти отклонения, которые можно наз-

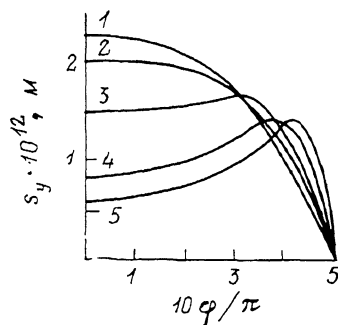


Рис. 5. Смещения s_y для $\xi=0.2$ (1), 0.74 (2), 0.5 (3), 0.3 (4), 0.2 (5).

вать отклонениями I рода. Очевидно, они связаны с динамическими особенностями кристалла, обуславливающими разброс значений C_L .

К отклонениям II рода можно отнести особенности диффузии в некубических решетках [1]. По абсолютной величине они в среднем меньше, чем отклонения I рода. Вычислить их можно, рассматривая анизотропный аналог уравнения (18).

Наконец, существенно выпадают данные для Ge, Si и некоторых ОЦК металлов [1]. Назовем их отклонениями III рода. В работе [4] отмечено, что они

связаны с низкотемпературным структурным превращением и, следовательно, также могут быть обусловлены механизмом диффузионного пробега атомов. Однако это требует самостоятельного исследования.

6. Оценим справедливость разложения (8) для малого параметра $\xi \tau(\tau)/c_f \tau$. Поскольку $x(\tau) = \pi f_m / m \omega_m^2$, то $\xi x(\tau)/c_f \tau = \xi \cdot 0.35 \ll 1$; длина волны для Na $\lambda = 2\pi \cdot c_f / \omega_m = 8.6 \cdot 10^{-10}$ м, $x(\tau) = 1.5 \cdot 10^{-10}$ м, и условие для волновой зоны соблюдается.

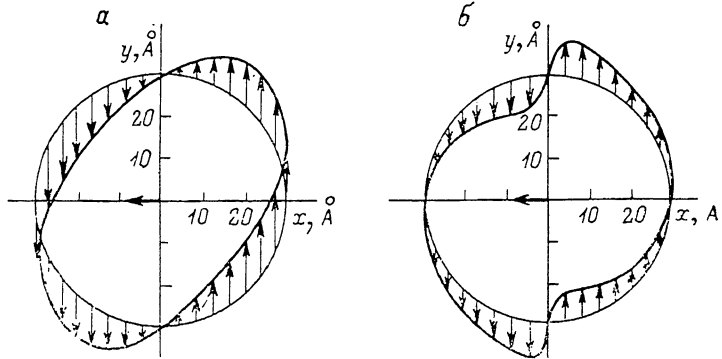


Рис. 6. Смещения s_y в плоскости xy для $\xi=0.82$ (а) и 0.2 (б).

Случай б иллюстрирует развитие сдвиговой неустойчивости с приближением к T_m .

Оценка величины $E_{dis} = 0.2E = 0.08$ эВ должна быть завышена из-за грубой оценки объема образования вакансии. Во всяком случае нижнюю границу для E_{dis} задает энергия релаксации статической решетки, содержащей вакансию; $E_{rel} = 0.1E_v$ [10], где экспериментальное значение энергии образования вакансии в щелочных металлах $E_v = 0.31 - 0.42$ эВ [11, 12].

Остаются, однако, нерешенными качественные вопросы. Так, в рассмотренном процессе поглощения энергии атом проходит лишь часть диффузионного пути и необходимо, следовательно, включить в анализ процесс излучения энергии, который должен привести к новым особенностям волнового поля в окрестности диффундирующего атома. Следующая неопределенность связана с квазистатичностью мультипольного разложения для плотности силы (1). Выход за пределы приближения $r(t) \ll r$ должен соответствовать вычислению деформации решетки в близких к диффундирующему атому зонах, где гармонические оценки могут оказаться недостаточными.

Список литературы

- [1] Бокштейн Б. С. Диффузия в металлах. М., 1978. 248 с.
- [2] Manning J. R. // Diffus. Anal. and Appl.: Proc. Sump. TMS Fall Meet. Chicago, 1989.
- [3] Akbar S. A., Sato H. // J. Phys. Chem. Sol. 1989. V. 50. N 7. P. 729—733.
- [4] Sanches J. M., de Fontaine D. // Phys. Rev. Lett. 1975. V. 35. N 4. P. 227—230.
- [5] Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах. М., 1981. 439 с.
- [6] Мещеряков В. В. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 1. С. 77—82.
- [7] Landolt-Bornstein H. Zahlenwerte and Funktionen aus Naturwissenschaften and Technik. Gr. III. B 41. 1979. 854 p.
- [8] Bilgram J. H. // Phys. Reports. 1987. V. 7. P. 1—89.
- [9] Zemansky M. Head and Thermodynamics. McGraw—Hill, 1957. 270 p.
- [10] Братковский А. М., Зейн И. Е. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 9. С. 2561—2569.
- [11] Adlhart W., Fritsch G., Lucher E. // J. Phys. Chem. Sol. 1975. V. 36. N 12. P. 1405.
- [12] Jacusei G., Taylor R. // J. Phys. 1979. F9. N 8. P. 1487—1502.