

цего X-анионы. Воксиде этот процесс начинается с делокализированного (резонансного) состояния дырки, а деформации решетки, аналогичной наблюдаемой для NaF, недостаточно для локализации вдоль связи X—X.

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Vidal-Valat G., Vidal J. P., Kurki-Suonio K. // Acta Cryst. 1978. V. A34. P. 594—601.
- [2] Bukowski M. S. T. // J. Geophys. Res. 1982. V. 81. N B1. P. 303—310.
- [3] Лобач В. А., Кулябин Б. Е., Медведева Н. И., Жуков В. П., Леванов М. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 7. С. 2238—2240.
- [4] Лобач В. А., Рубин И. Р., Кружалов А. В., Шульгин Б. В., Иванов В. Ю. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 9. С. 2610—2615.
- [5] Эварестов Р. А., Котомин Е. А., Ермошкин А. Н. Молекулярные модели точечных дефектов в широкощелевых твердых телах. Рига: Зинатне, 1983. 287 с.
- [6] Stoneham A. M. // Adv. Phys. 1979. V. 8. N 4. P. 457—492.
- [7] Соболев А. Б., Лобач В. А., Шульгин Б. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3129—3132.
- [8] Song K. S., Stoneham A. M., Harker A. H. // J. Phys. C. 1975. V. 8. N 9. P. 1125—1135.
- [9] Brunet G., Leung C. H., Song K. S. // Sol. St. Comm. 1985. V. 53. N 7. P. 607—609.
- [10] Pendry J. B. // J. Phys. C. 1977. V. 10. N 6. P. 809—824.

Уральский политехнический институт  
им. С. М. Кирова  
Свердловск

Поступило в Редакцию  
17 августа 1989 г.  
В окончательной редакции  
25 сентября 1990 г.

УДК 539.4

© Физика твердого тела, том 33, № 3, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 3, 1991

## О РОЛИ ВАКАНСИЙ В РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ ВОКРУГ РАСТУЩЕГО ВКЛЮЧЕНИЯ НОВОЙ ФАЗЫ

А. С. Абызов, В. В. Слезов, Л. В. Танатаров

Диффузионный распад пересыщенного твердого раствора может сопровождаться возникновением механических напряжений. При диффузии атомов примеси по междоузельному механизму это очевидно, так как поток атомов привносит во включение массу, но не объем. Аналогичная ситуация возникает и при диффузии по вакансионному механизму, если удельные объемы атомов примеси в матрице и включении различны. В отсутствие процессов релаксации напряжений вокруг включения его рост прекращается. В работе [1] рассмотрен механизм релаксации напряжений, возникающих при росте газонаполненных пузырьков гелия в облучаемом материале за счет диффузии вакансий по механизму Набарро—Херринга. В настоящей работе этот механизм используется для описания релаксации напряжений, возникающих вокруг растущего включения новой фазы. Вакансии привносят во включение объем, компенсируя его дефицит, возникающий при диффузии атомов примеси. При полной компенсации дефицита объема устанавливается квазистационарный процесс, при котором поле напряжений практически не зависит от размера включения.

Нормальное напряжение  $\sigma_n$  на границе включения с матрицей связано с дефицитом объема  $\delta V$  соотношением

$$-\delta V/V = 3\sigma_n [1/(4G) + 1/K], \quad (1)$$

где  $V$  — объем включения,  $G$  — модуль сдвига материала матрицы,  $K$  — модуль всестороннего сжатия материала включения. Объем включения и его дефицит в случае раствора внедрения можно записать в виде

$$V = \int_0^t S(t') j_c(t') dt', \quad \delta V = \int_0^t S(t') [j_c(t') - j_q(t')] dt'.$$

Здесь  $S(t)$  — площадь поверхности включения;  $j_c, j_q$  — плотности потоков атомов примеси и вакансий на его поверхность из матрицы. Подставляя эти выражения в (1) и дифференцируя по времени, находим

$$R dp/dR + 3p = 1 - j_q/j_c, \quad (2)$$

где  $p = -\sigma_n [1/(4G) + 1/K]$ . Пренебрегая зависимостью равновесной концентрации  $c_R$  от радиуса включения и вводя  $\Delta = \bar{c} - c_R$  ( $\bar{c}$  — среднее значение концентрации примеси), представим  $j_c$  в виде

$$j_c = D_c \Delta / R, \quad (3)$$

$D_c$  — коэффициент диффузии атомов примеси. Отметим, что это выражение справедливо, когда упругие модули включения и матрицы одинаковы, а напряжения не настолько велики, чтобы оказывать влияние на коэффициент диффузии [2], и, кроме того, несущественна граничная кинетика.

Для определения  $j_q$  необходимо найти зависимость концентрации вакансий  $q$  от координат. Приравнявая разность значений химпотенциала при  $r=R$  и  $r=\infty$  скачку, определяемому нормальным напряжением

$$T (\ln q|_{r=R} - \ln \bar{q}) = a^3 \gamma_n [3],$$

находим значение концентрации у поверхности включения

$$q|_{r=R} = \bar{q} \exp(a^3 \gamma_n / T). \quad (4)$$

Здесь  $\bar{q}$  — значение концентрации вакансий вдали от включения.

Решение стационарного уравнения диффузии  $\Delta_q = 0$ , удовлетворяющее граничным условиям (4) и  $q|_{r=\infty} = \bar{q}$ , имеет вид

$$q(r) = \bar{q} [1 - (R/r)(1 - \exp(-p/p^*))],$$

где  $p^* = (T/a^3) [1/(4G) + 1/K]$ . Находя отсюда выражение для потока  $j_q$  и подставляя в (2), получаем

$$R dp/dR = 1 - D_c \bar{q} [1 - \exp(-p/p^*)] (D_c \Delta)^{-1} - 3p. \quad (5)$$

Решение этого уравнения при больших  $R$  стремится к значению, определяемому его неподвижной точкой  $p_s$ , которая находится из уравнения  $dp/dR = 0$ . В предельном случае малой пересыщенности

$$\Delta \ll \bar{q} D_q / D_c \quad (6)$$

получаем

$$p_s = [T D_c \Delta / (a^3 D_q \bar{q})] [1/(4G) + 1/K]. \quad (7)$$

Выражения (6) и (7) записаны в предположении  $G a^3 \gg T$ , которое практически всегда выполнено. Из (7) получаем выражение для соответствующего нормального напряжения

$$\sigma_n^{(s)} = -T D_c \Delta / (D_q \bar{q} a^3). \quad (8)$$

Если условие (6) не выполнено, то  $p_s \sim 1$  и  $\sigma_n^{(s)} \sim G$ , что не имеет физического смысла. Оценка показывает, что отношение  $D_q/D_c \sim \exp(-Q/T)$ , где  $Q \approx 1.23$  эВ [4]. При  $T = 500$  К условие (6) можно записать в виде  $\Delta < \bar{q} \cdot 10^{-9}$ . Видим, что практическое осуществление этого условия затруднительно (по-видимому, его можно реализовать для тугоплавких металлов при достаточно высоких температурах).

Если транспорт атомов примеси на включение осуществляется по механизму замещения и удельный объем примеси в растворе и во включении

одинаков, дефицита объема не возникает. Только в том случае, когда эти объемы заметно отличаются, можно ожидать появления напряжений вокруг включения. В этом случае нормальное напряжение на границе связано с дефицитом объема соотношением (1), а выражение для  $\delta V$  имеет вид

$$\delta V = \int_0^t S(t') dt' (j_c \delta\omega/\omega_1 - j_q), \quad (9)$$

где  $\delta\omega = \omega_2 - \omega_1 > 0$ ;  $\omega_1, \omega_2$  — удельные объемы атома примеси в матрице и включении. Уравнение для  $p$  получаем аналогично (2)

$$R dp/dR + 3p = \delta\omega/\omega_1 - j_q j_c. \quad (10)$$

Отметим, что, строго говоря, пространственная неоднородность распределения концентрации вакансий, обусловленная напряжениями, влияет на диффузию атомов примеси. В этом случае  $j_c(r) = D_c^* (q\nabla c - c\nabla q)$ . Решая стационарную диффузионную задачу, получаем

$$j_c(R) = D_c^* \bar{q} [\bar{c} - c_R \bar{q}/q(R)] / [Rv(R)],$$

где

$$v(R) = R \int_R^\infty \bar{q}^2 q^{-2}(r) r^{-2} dr. \quad (11)$$

Подставляя полученное ранее выражение для концентрации (4) в (11), находим  $v(R) = (1 + \sigma_n a^3/T)^{-1}$ . Здесь мы воспользовались малостью величины  $\Delta\delta\omega/\omega_1$ . Для  $j_c$  получаем

$$j_c = D_c^* \bar{q} [\bar{c}(1 + \sigma_n a^3/T) - c_R] / R.$$

Подставляя это выражение в (10), находим стационарное решение

$$p = (\delta\omega/\omega_1) D_c^* \Delta T [1/(4G) + 1/K] [1 + (\delta\omega/\omega_1) \bar{c} D_c^* / D_q]^{-1} / (a^3 D_q).$$

Отметим, что второе слагаемое в знаменателе этого выражения мало, поэтому пространственная неоднородность распределения вакансий в данном случае не играет заметной роли. Оценка соответствующего значения  $\sigma_n^{(s)}$  показывает, что при 500 К  $\sigma_n^{(s)} = 10^{10} \Delta\delta\omega/\omega_1$ , что намного меньше предела пропорциональности  $\sigma_s \sim 10^9$  дн/см<sup>2</sup> при всех разумных значениях  $\Delta$  и  $\delta\omega/\omega_1$ .

Одним из наиболее вероятных альтернативных процессов релаксации напряжений является испускание междоузельных дислокационных петель [5]. Однако этот механизм может конкурировать с вакансионным только в случае, когда диффузия примеси происходит по междоузлиям.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Greenwood P. J., Foreman A. J. E., Rimmer D. E. // J. Nucl. Mater. 1959. V. 16. № 4. P. 305—324.
- [2] Лифшиц И. М., Слезов В. В. // ФТТ. 1959. Т. 1. № 9. С. 1401—1410.
- [3] Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев, 1981. 327 с.
- [4] Ахизер И. А., Давыдов Л. Н. Введение в теоретическую радиационную физику металлов и сплавов. Киев, 1985. 144 с.
- [5] Ефременко А. Н., Слезов В. В., Яновский В. В. // Металлофизика. 1990. Т. 12. № 1. С. 91—100.

Харьковский физико-технический институт  
АН УССР

Поступило в Редакцию  
16 июля 1990 г.

В окончательной редакции  
25 сентября 1990 г.