

УДК 669.017 : 539.22

© 1992

ИСПУСКАНИЕ ВАКАНСИЙ МЕЖКРИСТАЛЛИТНОЙ ГРАНИЦЕЙ

В. В. Горбунов, Б. М. Даринский

Рассмотрено испускание вакансий под действием напряжения межкристаллитной границей наклона, имеющей несоизмеримую структуру в одном из направлений. Показано, что зависимость относительного перемещения контактирующих кристаллитов от напряжения имеет линейный или квадратичный характер, что связано с наличием различных процессов, лимитирующих излучение вакансий.

Границы зерен в поликристаллах являются эффективными источниками (стоками) вакансий в твердых телах. Процесс излучения вакансий в значительной мере определяется структурой, свойствами самой границы. Так, например, малоугловые границы субзерен, представляемые дислокационными стенками, под действием напряжения σ будут излучать или поглощать вакансии при неконсервативном перемещении ступенек на дислокациях [1]. Специальные границы зерен станут источниками вакансий только при реализации специального механизма, соответствующего неконсервативному движению подвижных зернограницных дислокаций с восхождением их участков в местах пересечения с другими дислокациями, или бездислокационными ступеньками [2]. Произвольные границы зерен как источники вакансий использовались при разработке механизма диффузионно-вязкого течения твердых тел [3, 4], где они рассматривались как сильно испорченные аморфизированные слои, около которых под действием напряжения σ создаются различные пересыщения вакансий. Процесс определялся временем диффузии вакансий к границе или от границы зерен. Время образования вакансии в самой границе не учитывалось, тем самым полагалось, что оно намного меньше времени диффузионного удаления (или подвода) вакансий. Таким образом, представления об испускании вакансий межкристаллитными границами разных типов, использованные к настоящему времени, отражают существенную зависимость этого процесса от геометрических характеристик межкристаллитной границы.

В связи с этим возникает необходимость более детального изучения границ зерен как источников вакансий. В настоящей работе этот вопрос решается на примере межкристаллитной границы в кристалле, которая имеет несоразмерную структуру, аналогичную [5].

Рассмотрим контакт двух кристаллов с простой кубической решеткой, причем верхний кристалл повернут относительно нижнего на угол φ вокруг оси OZ , совпадающей с ребром куба элементарной ячейки (рис. 1). Для верхнего кристалла оставлены только атомы, лежащие выше плоскости $y = y_0$. Граничная плоскость нижнего кристалла является кристаллографической, а граничная плоскость верхнего кристалла кристаллографической не является. Геометрия сопряжения кристаллитов становится плоской в том смысле, что не меняется при трансляциях кристаллитов относительно друг друга вдоль оси OZ на постоянную решетки. Периодическое расположение атомов верхней и нижней решетки образуют не-

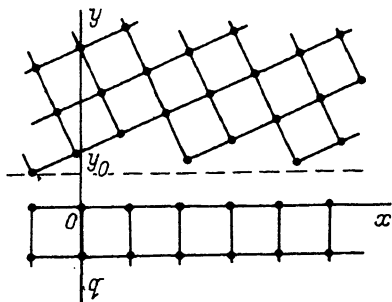


Рис. 1. Контакт плотноупакованной кристаллографической и некристаллографической плоскостей.

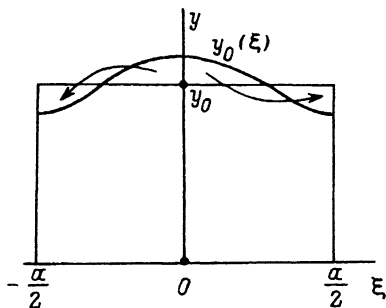


Рис. 2. Схема релаксации на границе зерен общего вида.

соизмеримую структуру в направлении оси OX и периодическую вдоль оси OZ . Область контакта будет представляться расположением атомов верхней решетки в периодическом потенциальном поле $U(x, y)$, созданном атомами нижнего кристалла.

Введем вероятность $f(\xi, y)$ того, что узел кристаллической решетки верхнего кристаллита занят атомом, где ξ — разность координат двух соседних принадлежащих разным кристаллитам атомов. Несрелаксированной структуре, возникающей сразу после наложения кристаллитов, соответствует $f(\xi, y) = \Theta(y - y_0)$, где $\Theta(y)$ — единичная ступенчатая функция, отличная от нуля при положительном значении аргумента. Релаксация границы зерен общего вида в нашем случае приведет к перераспределению части атомов верхнего кристаллита, которые займут некоторые узлы кристаллической решетки, расположенные ниже плоскости $y = y_0$. Вероятность $f(\xi, y)$ изменится и примет вид

$$f(\xi, y) = \Theta(y - y_0(\xi)),$$

где $y_0(\xi)$ есть решение уравнения $U(x, y) = 0$. На рис. 2 стрелками указан характер перераспределения атомов. В силу несоизмеримости накладываемых структур атомы верхнего кристалла равномерно распределены по площади, расположенной выше $y = y_0(\xi)$.

Если к кристаллитам приложено напряжение σ_{yy} , атомы верхнего кристаллита начнут выкрашиваться, т. е. разовьется процесс поглощения вакансий границей зерен. Введем дополнительную систему координат qOx , движущуюся вместе с верхним кристаллом со скоростью V навстречу нижнему кристаллу, полагая тем самым, что процесс выкрашивания атомов стационарен во времени. Рассмотрим случай быстро протекающей на границе зерен структурной релаксации, когда $f(q, \xi, t) = f(y_0(\xi) - y)$. В этом случае функция $f(q, \xi, t)$ будет удовлетворять кинетическому уравнению

$$\frac{df}{dt} = -\frac{f}{\tau}, \quad (1)$$

где τ — характерное время выкрашивания атомного ряда, соответствующего точке на рис. 1. Учитывая, что $q = -y - vt$, из (1) получаем

$$f(y_0(\xi) - y) = \exp \left[\frac{1}{V} \int_{y_1(\xi)}^y \frac{dy}{\tau(y_0(\xi) - y)} \right], \quad (2)$$

где $y_1(\xi)$ — предельная координата, с которой еще может происходить выкрашивание атома, т. е. когда τ обращается в бесконечность. Характерное время τ выкрашивания атома, находящегося в точке (y, ξ) , определяется высотой преодолеваемого барьера U_0 и термодинамическим стимулом $\Delta E(\xi, y)$

$$\tau(\xi, y) = \frac{M}{\Delta E(\xi, y)} = \frac{\tau_0 kT \exp(-U_0/kT)}{\Delta E(\xi, y)},$$

где τ_0 — характерное время решеточных колебаний атомов. Термодинамический стимул выкрашивания ΔE складывается из изменения потенциальной энергии атома при выкрашивании $B[y_0(\xi) - y]$, где B — величина порядка тангенса угла наклона кривой потенциала взаимодействия атомов, и работы внешних сил A при выкрашивании атома. Около границы создается некоторая концентрация c выкрашенных атомов, большая, чем равновесная концентрация c_0 в отсутствие напряжений, и меньшая, чем равновесная концентрация $c(\sigma)$ в напряженном кристалле. Если c достигает $c(\sigma)$, то выкрашивание прекратится, а работа внешних сил A обратится в нуль. Для рассматриваемого случая малых напряжений $A = \varepsilon(c(\sigma) - c)$, а $c(\sigma) = c_0 + c_0 \sigma a^3 / kT$. Реальная концентрация c будет определяться условиями притока вакансий

$$c = c_0 + \frac{VL}{Da^3},$$

где D — коэффициент диффузии вакансий, L — характерное расстояние от источников вакансий до границы зерен. Тогда

$$\Delta E = B(y_0(\xi) - y) + \varepsilon \left(\frac{c_0 \sigma a^3}{kT} - \frac{VL}{Da^3} \right) = B(y_1(\xi) - y), \quad (3)$$

где

$$y_1(\xi) = y_0(\xi) + \frac{\varepsilon}{B} \left(\frac{c_0 \sigma a^3}{kT} - \frac{VL}{Da^3} \right)$$

— предельная координата выкрашивания атомов. Подставляя (3) в (2), имеем

$$f = \exp \left[- \frac{(y - y_1(\xi))^2}{2VM} \right].$$

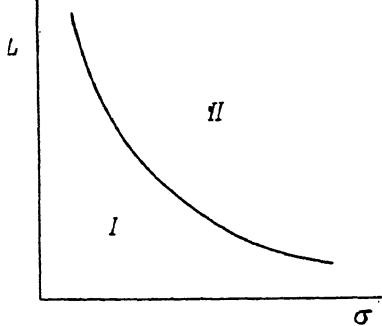
Это решение должно подчиняться условия [5]

$$\int_{y_0(\xi)}^{y_1(\xi)} (1 - f) dy = \int_{-\infty}^{y_0(\xi)} f dy, \quad (4)$$

которое дает зависимость $V(\sigma)$

$$\frac{\varepsilon}{B} \left(\frac{c_0 \sigma a^3}{kT} - \frac{VL}{Da^3} \right) = \sqrt{\frac{\pi MV}{2B}}. \quad (5)$$

На диаграмме (L, σ) нанесена линия (рис. 3)



$$\frac{c_0 \sigma a^3}{kT} \frac{L}{Da^3} = \frac{\pi MB}{4\epsilon^2}.$$

В области I, где

$$\frac{c_0 \sigma a^3}{kT} \frac{L}{Da^3} < \frac{\pi MB}{4\epsilon^2},$$

лимитирующим по времени является процесс преодоления атомами потенциального барьера при выкрашивании. Квадратичная зависимость $V(\sigma)$

$$V = \left(\frac{c_0 \sigma a^3}{kT} \right)^2 / \left(\frac{\pi MB}{2\epsilon^2} \right)$$

объясняется тем, что с увеличением напряжения σ растет число мест излучения атомов. В области II, где

$$\frac{c_0 \sigma a^3}{kT} \frac{L}{Da^3} > \frac{\pi MB}{4\epsilon^2},$$

число мест излучения атомов вышло на насыщение и ситуация определяется притоком вакансий. Вследствие этого понятно, что зависимость $V = V(\sigma)$ получается такой же, как в модели Набарро-Херринга [3]

$$V = \frac{c_0 \sigma a^3 Da^3}{kT L}.$$

Рассмотренный случай характеризуется близостью структуры стационарно поглощающей вакансии границы зерен к структуре срелаксированной равновесной границы. Степень отклонения строения границы при наличии вакансионного потока определяется его величиной, и при стремлении потока к нулю строение границы переходит к равновесному. Однако в реальных кинетических процессах, возникающих при рекристаллизации, пластическом деформировании поликристаллов появляются относительно быстрые воздействия на границу, приводящие к резкому возмущению ее атомного строения. В качестве примера рассмотрим резкое относительное перемещение $\delta < a$ кристаллитов по оси OX . Тогда энергия отдельных атомов возрастет на величину

$$\Delta U = \frac{\partial U}{\partial x} \delta \approx \frac{dU}{dr} \frac{x}{r} \delta,$$

где r — расстояние от центра атома до нулевого значения потенциала межатомного взаимодействия. Для оценки ΔU примем

$$\delta \sim \frac{1}{4}a, \quad \frac{dU}{dr} \sim \mu a,$$

где μ — упругий модуль, $x/r \sim 1/2$. В результате получим

$$\Delta U \sim \frac{\mu \alpha^2}{8},$$

что может составить величину десятых долей от энергии активации.

Список литературы

- [1] Ройтбурд А. Л., Вершок Б. А. // ФММ. 1971. Т. 32. № 3. С. 499—509.
- [2] Даринский Б. М., Федоров Ю. А. Механизмы внутреннего трения в полупроводниковых и металлических материалах. М.: Наука, 1972. С. 117—120.
- [3] Herring C. // J. Appl. Phys. 1950. V. 21. P. 105—117.
- [4] Лифшиц И. М. // ЖЭТФ. 1963. Т. 44. № 4. С. 1349—1367.
- [5] Даринский Б. М., Сайко Д. С., Федоров Ю. А. // Изв. вузов, Физика. 1987. Т. 30. № 3. С. 53—57.

Воронежский
политехнический институт

Поступило в Редакцию
22 июля 1991