

УДК 548.24

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ФАЗ В НАНОДВОЙНИКАХ

О. М. ОСТРИКОВ

*Учреждение образования «Гомельский государственный
технический университет имени П. О. Сухого»,
Республика Беларусь*

В [1] изучалось явление нанодвойникования. При этом были рассмотрены нанодвойники длиной ($L_{дв}$) до 200 нм. Изучение двойников меньшей длины нецелесообразно, так как такие двойники можно интерпретировать как совокупность нескольких частичных дислокаций Шоули [1]. В монокристаллах висмута [2]–[5] у концентраторов напряжений преимущественно формируются клиновидные двойники шириной ($h_{дв}$) на порядок меньшей их длины (т. е. $h_{дв}/L_{дв} \approx 0,1$). Для таких материалов, как, например, Ti, α – Fe, величина $h_{дв}/L_{дв}$ меньше 0,1 [6], [7]. Отношение $h_{дв}/L_{дв}$ называется степенью некогерентности двойниковой границы, которая пропорциональна плотности дислокаций на границах двойника и определяется межатомным расстоянием в плоскости, перпендикулярной плоскости двойникования [8], [9]. Поэтому процессы формирования двойников длиной до 200 нм можно считать наноскопическими.

Формирование наноразмерных фаз заданной плотностью и элементарным составом – является важной прикладной задачей, например, в области создания полупроводниковых лазеров [10]. Известно [11], [12], что двойникованию при определенных условиях деформирования или термообработки подвержены материалы с ОЦК, ГЦК, ГПУ структурами, к которым, в частности, относится подавляющее большинство кристаллов, используемых в кристаллооптике, электронике. Поэтому с практической точки зрения вопрос формирования наноразмерной фазы в нанодвойниках представляется весьма интересным, так как задание в кристалле определенной плотности нанодвойников контролируемо, например, внешними напряжениями.

С научной точки зрения данный вопрос также интересен, так как формирование нанофаз в полях напряжений двойниковых границ – малоизученный вопрос.

Целью данной работы стал теоретический анализ на основании дислокационной модели нанодвойника закономерностей формирования в нем нанофаз.

Распределение легирующего компонента или примесей в материале, имеющем концентраторы напряжений, в качестве которых, в частности, могут выступать нанодвойники, рассчитывается по общеизвестной формуле [13], [14]:

$$C = C_0 \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \quad (1)$$

где C_0 – концентрация легирующего компонента вдали от внутренних источников напряжений; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Энергия U взаимодействия легирующего компонента с нанодвойником определяется по формуле:

$$U = -\frac{4}{3} \pi r^3 \varepsilon (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}), \quad (2)$$

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

В (2) компоненты тензора напряжений могут быть рассчитаны на основании дислокационной модели нанодвойника. Для этого представим нанодвойник в виде совокупности краевых дислокаций (краевой двойник [7]), расположенных друг относительно друга так, как это показано на рис. 1. Пусть параметры d и h (рис. 1) являются проекциями на оси OX и OY соответственно отрезка, соединяющего две соседние дислокации, а длина нанодвойника равна $2L$, ширина – $2H$. Тогда $2L = Nd$, $2H = Nh$, где N – число двойникующих дислокаций на границе AB (в принимаемом случае, когда количество дислокаций на всех границах нанодвойника одинаково), а степень некогерентности двойниковых границ нанодвойника, представленного на рис. 1, можно определить из соотношения $\eta = H/L$, или $\eta = h/d$ [15].

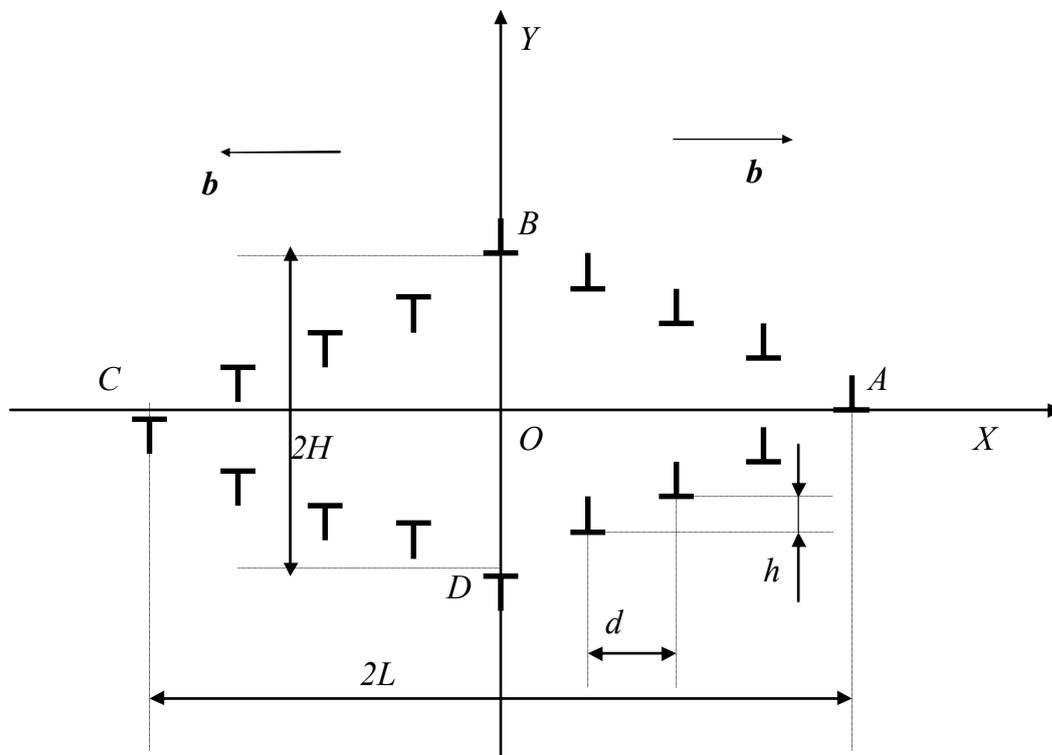


Рис. 1. Дислокационная модель нанодвойника

Пусть у дислокаций, находящихся в положительной области оси OX , вектор Бюргера b направлен вдоль оси OX (рис. 1), а у дислокаций, находящихся в отрицательной области оси OX , вектор Бюргера направлен в противоположную сторону. Тогда из известных соотношений для расчета полей напряжений у единичной дислокации [14], [16] не трудно показать, что напряженное состояние у нанодвойника, представленного на рис. 1, при использовании принципа суперпозиции может быть определено из выражений:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx} = & -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{(y+nh)[3(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} - \right. \\
 & - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(y+nh)[3(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \\
 & + \sum_{n=1}^N \frac{(y-nh)[3(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]^2} - \\
 & \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{(y-nh)[3(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]^2} \right); \\
 \sigma_{yy} = & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{(y+nh)[(x+nd-L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2]^2} - \right. \\
 & - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(y+nh)[(x-nd+L)^2 - (y+nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2]^2} + \\
 & + \sum_{n=1}^N \frac{(y-nh)[(x+nd-L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2]^2} - \\
 & \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{(y-nh)[(x-nd+L)^2 - (y-nh)^2]}{[(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2]^2} \right); \\
 \sigma_{zz} = & -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \left(\sum_{n=0}^N \frac{y+nh}{(x+nd-L)^2 + (y+nh)^2} - \right. \\
 & - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{y+nh}{(x-nd+L)^2 + (y+nh)^2} + \sum_{n=1}^N \frac{y-nh}{(x+nd-L)^2 + (y-nh)^2} - \\
 & \left. - \sum_{n=1}^{N-1} \frac{y-nh}{(x-nd+L)^2 + (y-nh)^2} \right);
 \end{aligned} \tag{3}$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; n – индекс суммирования. В суммах (3) учтено, что в точках A , B , C и D (рис. 1) может находиться только одна дислокация. Следует отметить, что каждая дислокация двойника движется параллельно оси OX вдоль выделенной кристаллографической плоскости так, что h равно межплоскостному расстоянию [17].

Вообще говоря, двойничающие дислокации являются частичными дислокациями Шокли [16] и их вектор Бюргерса можно разложить на две составляющие: краевую и винтовую. Поэтому соотношения (3) в общем случае необходимо дополнить выражениями для сдвиговых компонент тензора напряжений, обусловленными винтовой составляющей вектора Бюргерса, и сдвиговыми компонентами краевой составляющей. Однако в соотношениях (1) и (2) фигурируют только нормальные компоненты тензора напряжений. Поэтому выражения для сдвиговых напряжений рассматриваемого нанодвойника в данной работе не приводятся.

Результаты расчета распределения легирующего компонента в области зарождения нанодвойника представлены на рис. 2. Можно выделить два типа областей локализации легирующего компонента у нанодвойника: внутри двойника (области 1 на рис. 2) и снаружи нанодвойника у его границ (области 2 на рис. 2). Разница между радиусами атомов матрицы и легирующего компонента оказывает незначительное

влияние на величину максимального значения концентрации легирующего компонента в указанных областях. Зарождение новой фазы у нанодвойника носит негомогенный характер. Энергетически выгодно образование зародышей на двойниковой границе. В случае, когда, например, матрицей является металл (Me), а легирующим компонентом – металлоид (M), и в областях отдаленных от концентраторов напряжений энергетически выгодно зарождение фаз типа Me_xM_y , в областях 1 и 2 на рис. 2, благодаря избыточной концентрации металлоида, создаются благоприятные условия для формирования новой фазы, с повышенным значением y и заниженным x в формуле Me_xM_y .

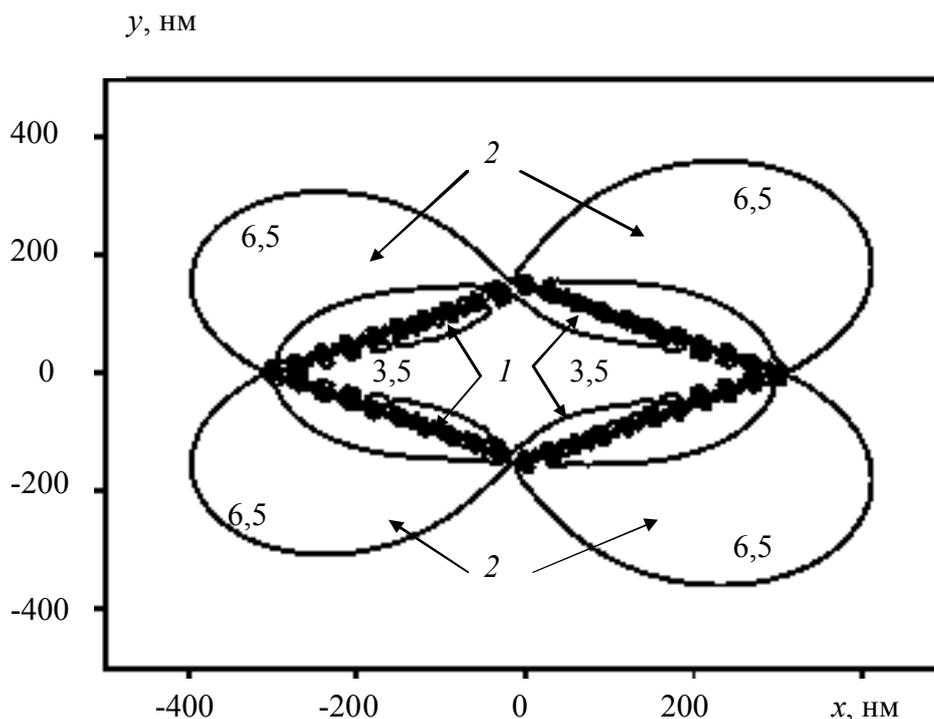


Рис. 2. Профили распределения легирующего компонента у нанодвойника:
1 и 2 – области локализации легирующего компонента

Таким образом, на основании дислокационной модели нанодвойника рассчитано распределение у него легирующего компонента. Показана роль избыточной концентрации у нанодвойника легирующего компонента в процессе зарождения новой фазы.

Литература

1. Остриков, О. М. Нанодвойникование монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия. – 2002. – № 3. – С. 51–52.
2. Остриков, О. М. Влияние импульсного электрического тока большой плотности на особенности двойникования монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Физика и химия обработки материалов. – 2003. – № 1. – С. 12–15.
3. Остриков, О. М. Влияние температурных условий деформирования на реализацию двойникования монокристаллов висмута, облученных ионами циркония / О. М. Остриков // Металлофизика и новейшие технологии. – 2002. – Т. 24, № 9. – С. 1215–1220.

4. Остриков, О. М. Особенности зарождения клиновидных двойников у отпечатка пирамиды Виккерса на поверхности (111) монокристаллов висмута / О. М. Остриков // Материаловедение. – 2002. – № 1. – С. 17–20.
5. Остриков, О. М. Некоторые особенности формы клиновидных двойников в монокристаллах висмута, деформированных сосредоточенной нагрузкой / О. М. Остриков // Физика металлов и металловедение. – 2000. – Т. 90, № 1. – С. 91–95.
6. Макквиллэн, А. Д. Титан / А. Д. Макквиллэн, М. К. Макквиллэн. – Москва : Металлургиздат, 1958. – 458 с.
7. Классен-Неклюдова, М. В. Механическое двойникование кристаллов / М. В. Классен-Неклюдова. – Москва : АН СССР, 1960. – 261 с.
8. Остриков, О. М. Напряженное состояние у клиновидного двойника при дисбалансе плотностей двойникующих дислокаций / О. М. Остриков // Прикладная механика и техн. физика. – 2002. – Т. 43, № 4. – С. 180–182.
9. Остриков, О. М. Исследование механического двойникования монокристаллов сурьмы методом наноиндентирования / О. М. Остриков, С. Н. Дуб // Инженер.-физ. журн. – 2003. – Т. 76, № 1. – С. 170–172.
10. Грибковский, В. П. Полупроводниковые лазеры / В. П. Грибковский. – Минск : Университетское, 1988. – 304 с.
11. Дефекты структуры в ионно-имплантированном кремнии / Ф. Ф. Комаров и [др.]. – Минск : Университетское, 1990. – 320 с.
12. Полухин, П. И. Физические основы пластической деформации / П. И. Полухин, С. С. Горелик, В. К. Воронцов. – Москва : Металлургия, 1982. – 584 с.
13. Савенко, В. С. Влияние электрического тока на распределение примесей у двойниковой границы / В. С. Савенко, О. М. Остриков // Изв. вузов. Сер. Черная металлургия. – 1998. – № 6. – С. 12–14.
14. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – Москва : Атомиздат, 1972. – 600 с.
15. Савенко, В. С. Поля напряжений у границы клиновидного двойника / В. С. Савенко, О. М. Остриков // Письма в журн. техн. физики. – 1997. – Т. 23, № 22. – С. 1–6.
16. Фридель, Ж. Дислокации / Ж. Фридель. – Москва : Мир, 1967. – 644 с.
17. Косевич, А. М. О дислокационной модели двойника / А. М. Косевич, Л. А. Пастур // Физика твердого тела. – 1961. – Т. 3, № 4. – С. 1290–1297.

Получено 28.12.2005 г.