

УДК 548.24

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕГИРУЮЩЕГО КОМПОНЕНТА В ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКИХ ДВОЙНИКАХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПРОГНОЗ ВОЗМОЖНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СЛОИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЯВЛЕНИЯ ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКОГО ДВОЙНИКОВАНИЯ

О. М. ОСТРИКОВ

УО «Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого», пр. Октября, 48, 246746, г. Гомель, Беларусь.

Рассчитано распределение легирующего компонента в конденсированной среде с полисинтетическим двойником. Установлено, что на место локализации легирующего компонента существенное влияние оказывает соотношение между радиусом его атомов и атомов матрицы. Теоретически показано, что на основании явления полисинтетического двойникования возможно формирование слоистых материалов.

Введение

Слоистые материалы в настоящее время все больше находят практическое применение, например, в синтезе полупроводниковых лазеров [1]. Технология получения слоистых материалов заключается, как правило, в послойном наращивании материалов различного химического состава.

Двойниковые границы являются концентраторами больших внутренних напряжений [2]. Поэтому они притягивают к себе примеси и легирующий компонент, что при определенных термических условиях может приводить к формированию фаз, существование которых вдали от источников внутренних напряжений является энергетически невыгодным. Полисинтетические двойники представляют собой совокупность параллельных друг другу двойниковых границ [3], что дает возможность создавать слоистые материалы за счет упорядоченного перераспределения легирующего компонента полями напряжений полисинтетических двойников.

Целью данной работы стал расчет на основании дислокационной модели двойников распределения легирующего компонента в полисинтетическом двойнике и теоретическое обоснование возможности формирования слоистых материалов на основании явления полисинтетического двойникования.

Решение задачи и обсуждение результатов

Распределение легирующего компонента у полисинтетического двойника будем рассчиты-

вать по общеизвестной формуле [4]:

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

где C_0 – концентрация легирующего компонента вдали от внутренних источников напряжений; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Энергия U взаимодействия легирующего компонента с полисинтетическим двойником находится по формуле [4]:

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

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

В соответствии с дислокационной моделью полисинтетического двойника, схематически изображенной на рис. 1, нормальные компоненты тензора напряжений, входящих в формулу (2) найдем из соотношения:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(1)} - \sigma_{ij}^{(2)}, \quad (3)$$

где, зная напряжения, создаваемые единичной дислокацией [5], не трудно показать, что

$$\sigma_{xx}^{(1)} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[3(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2]}{[(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2]^2},$$

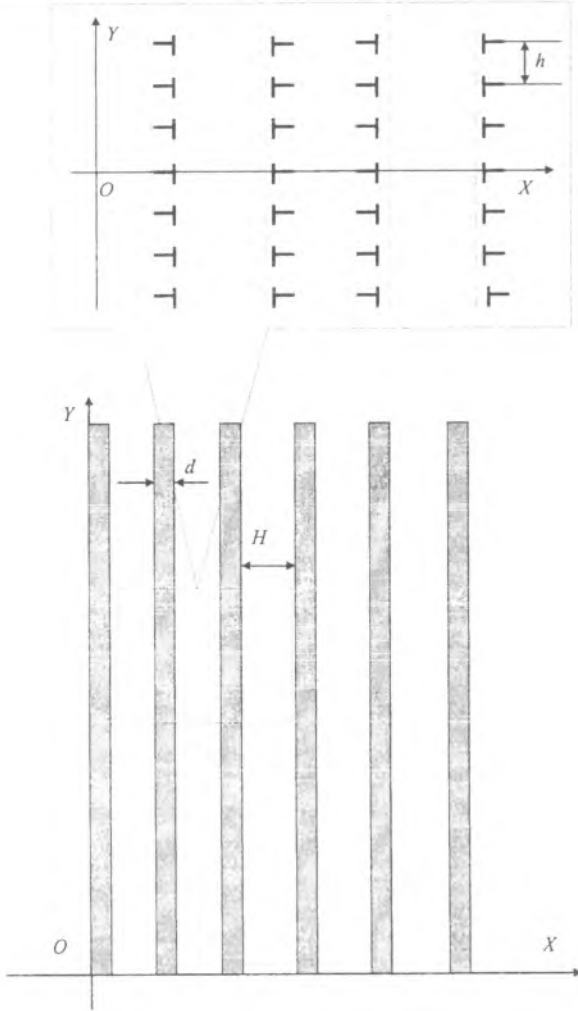


Рис. 1. Схематическое изображение полисинтетического двойника (выноска – расположение дислокаций на границах двойников)

$$\sigma_{yy}^{(1)} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[(x-m(d+H))^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2]^2};$$

$$\sigma_{zz}^{(1)} = -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(d+H))^2 + (y-nh)^2};$$

$$\sigma_{xx}^{(2)} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \times$$

$$\times \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[3(x-m(d+H)-d)^2 + (y-nh)^2]}{[(x-m(d+H)-d)^2 + (y-nh)^2]^2}; \quad (4)$$

$$\sigma_{yy}^{(2)} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)[(x-m(d+H)-d)^2 - (y-nh)^2]}{[(x-m(d+H)-d)^2 + (y-nh)^2]^2};$$

$$\sigma_{zz}^{(2)} = -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(y-nh)^2}{(x-m(d+H)-d)^2 + (y-nh)^2}.$$

Здесь μ – модуль сдвига; b – краевая составляющая вектора Бюргера частичных двойни-
кующих дислокаций; ν – коэффициент Пуассона; n и m – индексы суммирования; N – число дисло-

каций на двойниковой границе; M – число двой-
ников в полисинтетическом двойнике; d – ширина
двойников; H – расстояние между двойниками;
 h – расстояние между двойникующими дислока-
циями на двойниковой границе; $\sigma_{ij}^{(1)}$ и $\sigma_{ij}^{(2)}$ – на-
пряжения, создаваемые двумя границами единич-
ного двойника, входящего в состав полисинтети-
ческого двойника. В соотношении (3) учтено, что
краевые составляющие вектора Бюргера двойни-
кующих дислокаций на двух границах единичного
двойника имеют противоположное направление.

При выводе соотношений (4) принималось,
что двойники в полисинтетическом двойнике ори-
ентированы вдоль оси ОУ (см. рис. 1). Краевая
составляющая вектора Бюргера двойникующих
дислокаций также направлена вдоль этой оси.

Результаты расчетов приведены на рис. 2.
Принималось $h = 0,1$ мкм; $d = 1$ мкм; $H = 3$ мкм;
 $b = 1\text{ \AA}$; $\nu = 0,33$; $N = 100$; $M = 10$; $y = 0$;
 $C_0 = 25$ ат.%. Как видно из рис. 2, распределение
легирующего компонента в полисинтетическом
двойнике носит осциллирующий характер. За
пределами полисинтетического двойника с удале-
нием от него концентрация легирующего компо-
нента стремится к C_0 (см. рис. 2), т. е. к значению
концентрации вдали от источников внутренних
напряжений. Важное значение в характере рас-
пределения легирующего компонента в полисин-
тетическом двойнике играет соотношение радиусов
атомов легирующего компонента и атомов
матрицы. В зависимости от этого соотношения
легирующий компонент локализуется у двойнико-
вой границы либо внутри единичного двойника,
либо снаружи (см. рис. 2). Это приводит к тому,
что у двойниковых границ полисинтетического
двойника из-за избыточной концентрации леги-
рующего компонента возможно формирование
фаз, образование которых невозможно вдали от
источников внутренних напряжений, к которым
относятся границы полисинтетических двойников.

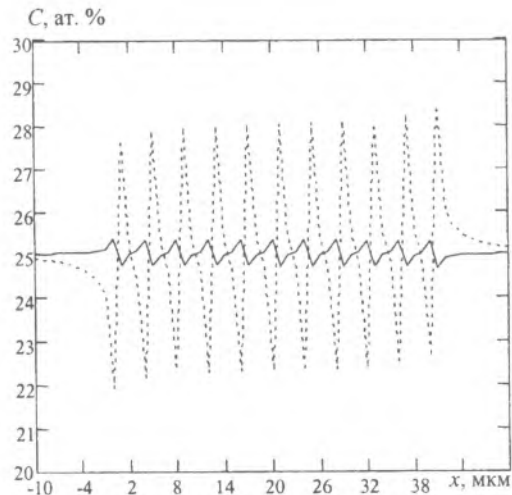


Рис. 2. Распределение легирующего компонента у полисинте-
тического двойника вдоль оси ОХ при $y = 0$: сплошная линия
 $r > r_0$, пунктирная $r < r_0$

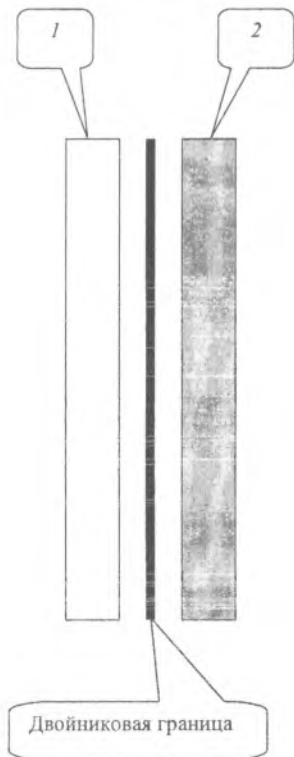


Рис. 3. Схематическое изображение распределения легирующего компонента и областей зарождения фаз типа $A_{x-n}B1_{y+n}$ (1) и $A_{x-n}B2_{y+n}$ (2). Здесь n – целое число

Пусть A_xBR_y – фаза, формирующаяся вдали от источников внутренних напряжений (A – элемент матрицы; BR – элемент легирующего компонента; $R = 1$ при $r > r_0$; $R = 2$ при $r < r_0$; x и y – целые числа). Тогда, согласно рис. 2, легирующий компонент у двойниковой границы будет располагаться

так, как это показано на рис. 3. В области 1 благоприятны условия для зарождения фаз типа $A_{x-n}B1_{y+n}$ (n – целое число), а в области 2 – фаз типа $A_{x-n}B2_{y+n}$. Это создает условия для синтеза слоистых материалов, благодаря периодичности концентраторов напряжений в полисинтетическом двойнике, способствующим специфической сортировке легирующего компонента.

Заключение

Таким образом, на основании дислокационной модели рассчитано распределение легирующего компонента у полисинтетического двойника. Показана принципиальная возможность использования полисинтетического двойникования для синтеза слоистых материалов.

Работа поддержана ФФИ РБ (грант Ф05М-009). Автор благодарит профессора Шепелевича В. Г. за интерес к работе.

Литература

1. Грибковский В. П. Полупроводниковые лазеры. – Мн.: Университетское, 1988
2. Остриков О. М. Напряженное состояние у клиновидного двойника при дисбалансе плотностей двойниующих дислокаций // Прикладная механика и техническая физика. – 2002 (43), № 4, 180–182
3. Классен-Неклюдова М. В. Механическое двойникование кристаллов. – М.: АН СССР. – 1960
4. Остриков О. М. Напряженное состояние у вершины клиновидного двойника // Механика твердого тела. – 2004, № 2, 104–113
5. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат. – 1972

Ostrikov O. M.

Distribution of alloying component in polysynthetic twins and theoretical prediction of possibility of formation of layered materials using polysynthetic twinning.

The distribution of an impurity in condensed matter with a polysynthetic twin is calculated. It is established that the region of impurity localization depends essentially by the proportion of the radius of impurity atoms and matrix atoms. Is theoretically shown that on the basis of the phenomenon of polysynthetic twinning the formation of layered materials is possible.

Поступила в редакцию 13.03.2006.

© О. М. Остриков, 2006.