Общероссийский математический портал

Ю. И. Тялин, В. А. Тялина, А. А. Бутягин, Д. В. Золотова, Электрические поля в пластически деформированных кристаллах с заряженными дислокациями, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2007, выпуск 1(), 96–99

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu494>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.205.19.152

26 апреля 2023 г., 12:47:03

Ю. И. Тялин, В. А. Тялина, А. А. Бутягин, Д. В. Золотова

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПОЛЯ В ПЛАСТИЧЕСКИ ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ С ЗАРЯЖЕННЫМИ ДИСЛОКАЦИЯМИ

Приведены выражения для напряженностей электрических полей, формируемых при срабатывании дислокационного источника в кристалле с заряженными дислокациями. Отдельно рассмотрены область источника и скопление испущенных им дислокаций. Первая представлена как плоский заряженный слой, суммарный заряд которого равен по величине заряду дислокаций в скоплении

В широком круге материалов дислокации обладают электрическим зарядом. Знак и величина дислокационных зарядов зависят от типа кристалла, наличия примесей, температуры и т.д. В полупроводниковых кристаллах заряд дислокаций связан с наличием в их ядре оборванных связей, а в щелочно-галогидных кристаллах и льде – с захватом заряженных точечных дефектов. При определенных условиях линейная плотность электрического заряда дислокаций может быть достаточно велика и достигать десятых долей элементарного заряда на параметр решетки. В таких материалах скопления дислокаций будут создавать не только упругие, но и электрические поля. Впервые на это обстоятельство было обращено внимание в работах [1, 2]. Авторами были получены выражения для напряженностей электрических полей некоторых плоских скоплений заряженных дислокаций и показано, что в вершине заторможенного скопления имеет место локальная концентрация электрического поля. В этом случае при умеренных значениях плотности дислокационных зарядов напряженность поля может достигать высоких значений за счет особенности в окрестности вершины скопления (типа $r^{-1/2}$, r – расстояние от вершины скопления). Сильное электрическое поле в вершине дислокационного скопления, в свою очередь, может быть причиной различных механоэлектрических процессов при пластическом деформировании кристаллов. В настоящей работе приводятся выражения для напряженностей электрических полей, формируемых при срабатывании дислокационного источника в кристалле с заряженными дислокациями.

Одним из основных механизмов размножения дислокаций при пластической деформации является так называемый источник Франка – Рида [3]. Им может служить отрезок дислокации, закрепленный на его концах. Под действием приложенного напряжения он прогибается, пока не образуется замкнутая дислокационная петля и восстановится исходный отрезок. В общем случае электрическая структура деформированного кристалла при срабатывании такого источника может быть представлена скоплением заряженных дислокаций (рис. 1) и плоским электрическим слоем в его центре, суммарный заряд которого равен по величине заряду дислокаций, испущенных источником, и противоположен ему по знаку.

Поле плоского слоя в центре источника. Примем для определенности, что дислокации являются прямолинейными и приобретают электрический заряд по мере их движения за счет захвата заряженных дефектов в объеме кристалла, как в щелочно-галогидных кристаллах. Пусть максимальный линейный заряд λ формируется при ее движении [4] на пути l . Тогда ширина слоя будет равна $2nl$ (n – число дислокаций, испущенных источником), а его суммарный заряд составит величину

$$q = 2n\lambda L, \quad (1)$$

где L – длина краевых сегментов дислокаций (в призматическом образце совпадает с его шириной). Поверхностная плотность заряда будет равна $\sigma = q/2nL$. Или с учетом (1)

$$\sigma = \lambda/l. \quad (2)$$

Введем функцию $\bar{E}(z) = E_x(z) - iE_y(z)$, действительная и мнимая части которой представляют собой компоненты напряженности электростатического поля в декартовой системе координат, а $z = x + iy$ – точка комплексной плоскости. Задача нахождения напряженности поля плоского слоя с плотностью заряда σ сводится к вычислению интеграла вида

$$\bar{E}(z) = \frac{2\sigma}{\varepsilon} \int_{-a}^a \frac{dx}{z - x}, \quad (3)$$

где a – полуширина слоя, равная $a = nl$.

Выполнив интегрирование, получим выражение

$$\bar{E}(z) = \frac{2\lambda}{\epsilon l} \ln \frac{z+a}{z-a}, \quad (4)$$

в котором берется однозначная ветвь функции $\ln(z+a)/(z-a)$, определенной в комплексной плоскости с разрезом на отрезке $[-a, a]$ и принимающей положительное значение для чисел $b > a$

Р и с. 1. Схема дислокационного источника

В полярных координатах (рис. 2) имеем

$$\bar{E}(z) = \frac{2\lambda}{\epsilon l} \left[\ln \frac{r_2}{r_1} - i(\theta_1 - \theta_2) \right]. \quad (5)$$

Разделяя вещественную и мнимую части (5), получим выражения для компонент напряженности электростатического поля:

$$E_x = \frac{2\lambda}{\epsilon l} \ln \frac{r_2}{r_1}; \quad E_y = \frac{2\lambda}{\epsilon l} (\theta_1 - \theta_2). \quad (6)$$

У правой границы слоя $z = a + re^{i\theta}$, $\theta_2 \approx 0$, $\theta_1 \approx \theta$, $r_1 = r$, $r_2 = 2a$ и

$$E_x(r) = \frac{2\lambda}{\epsilon l} \ln \left(\frac{2a}{r} \right). \quad (7)$$

Выражение для напряженности поля содержит особенность относительно r . Но эта особенность логарифмическая, поэтому она не может привести к сколь угодно большим значениям E при уменьшении r в разумных пределах. В частности, для $a/r < 10^3$ значение логарифма не превышает десяти. Поэтому в окрестности слоя максимальная величина напряженности не будет намного превышать напряженность поля в центре слоя $E_y(0,0) = 2\pi\lambda/\epsilon l$. Величина же последней зависит только от соотношения линейной плотности электрического заряда дислокации и пробега, на котором она приобретает этот заряд.

При выходе скопления на поверхность кристалла связанный с нею заряд образует плоский слой, подобный слою в центре источника, но максимальная плотность поверхностного заряда для этой ситуации будет в l/b раз больше (b – вектор Бюргерса дислокаций). Это обстоятельство также может приводить к высоким значениям напряженности электрического поля, что следует учитывать при рассмотрении механо-электрических процессов с участием заряженных дислокаций. Аналогичный эффект “усиления”, очевидно, будет иметь место и в материалах типа A^2B^6 , для которых величина l также должна иметь размеры порядка b .

Р и с. 2. К расчету напряженности электростатического поля слоя в центре источника дислокаций

Поле дислокационного скопления. При рассмотрении дислокационного скопления возьмем только его часть по одну сторону источника без учета взаимодействия с дислокациями противоположного механического знака по его другую сторону. Найдем равновесное распределение n подвижных дислокаций скопления в поле напряжения источника $\tau(x)$, удерживаемых напряжением трения τ_s .

Зададим $\tau(x)$ упругим полем дислокации с вектором Бюргерса $B = mb$ (рис. 3), где m целое число, b – вектор Бюргерса дислокации. Уравнение равновесия будет иметь следующий вид:

Р и с. 3. Модель дислокационного скопления

$$-Db \int_{l_1}^{l_2} \frac{\rho(t)}{t-x} dt + \frac{mDb}{x} - \tau_s = 0, \quad (8)$$

где $D=G/2\pi(1-\nu)$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, l_1 и l_2 – левая и правая границы скопления, $\rho(t)$ – плотность дислокаций в скоплении.

Решение (8), ограниченное в точках $x=l_1$ и $x=l_2$, дается выражением [5]

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi^2} \sqrt{(l_2-x)(x-l_1)} \int_{l_1}^{l_2} \frac{w(t)dt}{(t-x)\sqrt{(l_2-t)(t-l_1)}}, \quad (9)$$

где $w(t) = \frac{mb}{t} - \frac{\tau_s}{D}$. Значения l_1 и l_2 находятся из системы уравнений

$$\int_{l_1}^{l_2} \rho(x) dx = nb, \quad (10)$$

$$\int_{l_1}^{l_2} \frac{w(x)}{\sqrt{(l_2-x)(x-l_1)}} dx = 0, \quad (11)$$

первое из которых является условием нормировки, а второе – условием существования решения уравнения (8). Выполняя интегрирование в (9), получаем

$$\rho(x) = \frac{mb}{\pi\sqrt{l_1 l_2}} \frac{1}{x} \sqrt{(l_2-x)(x-l_1)}. \quad (12)$$

Для определения величин l_1 и l_2 из условия нормировки (10) имеем

$$\frac{mb}{2\sqrt{l_1 l_2}} (\sqrt{l_2} - \sqrt{l_1})^2 = nb, \quad (13)$$

и из условия (11) существования решения (8) –

$$\frac{1}{\sqrt{l_1 l_2}} = \frac{\tau}{Dmb}. \quad (14)$$

Решая систему уравнений (13) и (14), получим

$$l_1 = \frac{bD}{\tau} (n + m - \sqrt{((n+m)^2 - m^2)}), \quad (15)$$

$$l_2 = \frac{bD}{\tau} (n + m + \sqrt{((n+m)^2 - m^2)}). \quad (16)$$

Зная плотность $\rho(x)$, можно найти напряженность электрического поля $E(z)$ скопления:

$$E(z) = \frac{2\lambda}{\epsilon b} \int_{l_1}^{l_2} \frac{\rho(x) dx}{z-x} = \frac{2\lambda}{\epsilon b} \frac{mb}{\pi\sqrt{l_1 l_2}} \int_{l_1}^{l_2} \frac{\sqrt{(l_2-x)(x-l_1)} dx}{(z-x)x} = \frac{2\lambda}{\epsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \frac{1}{z} \left(z + \sqrt{(l_2-z)(l_1-z)} - \sqrt{l_1 l_2} \right). \quad (17)$$

Здесь берется главное значение корня в комплексной плоскости с разрезом вдоль оси x от l_1 до l_2 . В полярных координатах выражение (17) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} E(r, \varphi) &= \frac{2\lambda}{\epsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left(1 - r^{-1} e^{-i\varphi} \sqrt{r_1 r_2} e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)/2} - \sqrt{l_1 l_2} r^{-1} e^{-i\varphi} \right) = \\ &= \frac{2\lambda}{\epsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left(1 - \frac{\sqrt{r_1 r_2}}{r} e^{-i(\varphi_1 + \varphi_2 - 2\varphi)/2} - \frac{\sqrt{l_1 l_2}}{r} e^{-i\varphi} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

где $r_1 = \sqrt{(x-l_1)^2 + y^2}$; $r_2 = \sqrt{(x-l_2)^2 + y^2}$; $\varphi_1 = \arctg \frac{y}{x-l_1}$; $\varphi_2 = \arctg \frac{y}{x-l_2}$;

$r = \sqrt{x^2 + y^2}$; $\varphi = \arctg \frac{y}{x}$.

Соответственно составляющие вектора напряженности по осям координат будут равны:

$$E_x(r, \varphi) = \frac{2\lambda}{\epsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left\{ 1 - \frac{\sqrt{r_1 r_2}}{r} \cos[(\varphi_1 + \varphi_2 - 2\varphi)/2] - \frac{\sqrt{l_1 l_2}}{r} \cos\varphi \right\}, \quad (19)$$

$$E_y(r, \varphi) = -\frac{2\lambda}{\epsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left\{ -\frac{\sqrt{r_1 r_2}}{r} \sin[(\varphi_1 + \varphi_2 - 2\varphi)/2] - \frac{\sqrt{l_1 l_2}}{r} \sin\varphi \right\}. \quad (20)$$

Выполним некоторые оценки. Для максимальных значений $\lambda \approx 5 \cdot 10^{-3}$ ед. CGSE/см величина напряженности поля у левой границы скопления будет равна

$$E_x(l_1) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left(1 - \sqrt{\frac{l_2}{l_1}} \right) \quad (21)$$

и может достигать значений $\approx 10^2$ ед. CGSE. Это величины, сравнимые с напряженностью электрического пробоя воздуха. Приводимые в работе оценки, таким образом, могут быть использованы для интерпретации механоэлектрических процессов, имеющих место на стадии активного деформирования кристаллов, дислокации в которых являются заряженными.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Тялин Ю. И., Финкель В. М. Скопления заряженных дислокаций и зарождение трещин в неметаллических кристаллах // Доклады АН СССР. 1984. Т. 279. № 5. С. 1126–1130.
2. Тялин Ю. И., Финкель В. М., Гурова О. В., Копылов Н. В. Специфика скоплений заряженных дислокаций // Физика твердого тела. 1985. Т. 27, № 10. С. 3005–3009.
3. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
4. Шевцова И. Н. Заряжение подвижных дислокаций и электризация ионных кристаллов при пластической деформации // Физ. тверд. тела. 1983. Т. 25, № 4. С. 1172–1178.
5. Владимиров В. И., Хананов Ш. Х. Дискретно-континуальное рассмотрение дислокационных скоплений // Физика металлов и металловедение. 1969. Т. 27, № 6. С. 969–975.
6. Бредихин С. И., Шмурак С. З. Стимулированное деформацией свечение кристаллов ZnS // Письма в ж. эксперим. и теор. физ. 1974. Т. 19. Вып. 12. С. 709–713.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-01-00759).

Поступила 16.08.2006 г.

УДК 621.382

А. Н. Агафонов, А. В. Волков, С. Б. Коньгин, А. Г. Саноян

РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ПРИНЦИПОВ И АЛГОРИТМОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ БАЗОВЫХ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОСТРУКТУР МЕТОДАМИ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА

Предложена методика моделирования базовых процессов формирования микроструктур с использованием метода вероятностных клеточных автоматов. Разработан программный комплекс, реализующий данную методику. Приведены примеры моделирования комплексных процессов при наличии на поверхности подложки дефектов различных типов.

Введение. Сложность технологических процессов при создании элементов микроэлектроники и дифракционной оптики вызывает необходимость одновременного рассмотрения широкого круга разнообразных физико-химических процессов (ФХП) и факторов, как непосредственно связанных с рассматриваемыми процессами, так и побочными — например, диффузионного (объемного и поверхностного) транспорта материальных сред.

Решение данной задачи, в столь широкой постановке, с помощью традиционных термодинамических методов, основанных на физике сплошных сред, представляет известные трудности, как в части формирования начальных и динамических граничных условий, так и математического характера.

Широко применяемые в настоящее время методы, основанные на решении систем дифференциальных уравнений в частных производных, оказываются недостаточно эффективными при моделировании процессов создания структур, размер которых сравним с размерами атомных дефектов поверхности, а также при моделировании многокомпонентных систем. Указанные трудности стимулируют поиск принципиально новых методов анализа подобных процессов и систем, которые позволят существенно расширить спектр рассматриваемых ФХП и определять кинетические характеристики процессов, протекающих при создании устройств микро- и наноэлектроники.