

УДК 548.571.548.4

©1993

РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ С ОБРАЗОВАНИЕМ ДИСЛОКАЦИЙ И ТРЕЩИН ПРИ ФОРМИРОВАНИИ КОНТАКТА МЕЖДУ РАЗНОРОДНЫМИ КРИСТАЛЛАМИ

В. П. Мацюкин

Исследованы две возможности релаксации напряжений, возникающих в диффузионной зоне при припекании кристаллов из различных веществ, — образование дислокаций и трещин. Обнаружены специфические дислокационные структуры (розетки), формирующиеся вблизи контакта дисперсных частиц с плоской поверхностью монокристалла. Прослежены закономерности возникновения трещин под контактом и вне его, высказаны соображения о возможных причинах их образования. Проанализированы распределение напряжений под контактом и в непосредственной близости от него, геометрия и тип возникающих вследствие диффузионных напряжений дислокаций.

При высокотемпературном формировании контакта между кристаллами из разных веществ в диффузионной зоне возникают напряжения, природа которых может быть различной. Во-первых, термоупругие напряжения, связанные с различием коэффициентов теплового расширения α матрицы и твердого раствора, образовавшегося в области контакта. Во-вторых, напряжения, которые в диффузионной зоне вызываются как различием в размерах атомов (\bar{a}) взаимно диффундирующих веществ (концентрационные напряжения), так и неравенством парциальных коэффициентов диффузии (диффузионные напряжения) [1]. Знаки и абсолютные величины этих напряжений в зависимости от выбора компонентов системы могут быть различными, что может приводить к разным механизмам релаксации.

Напряжения, возникающие в месте контакта дисперсных частиц с поверхностью кристаллов, и их релаксация в области контакта и в непосредственной близости от него с возможным образованием дислокаций и трещин могут существенным образом определить поведение островковых пленок, деталей плат микроэлектроники, кинетику спекания и т.п. Для того чтобы иметь возможность прогнозировать эффекты, связанные с этими напряжениями, необходимо знать величину и распределение напряжений вблизи контакта и возможные механизмы их релаксации.

При формировании диффузионного контакта между разнородными веществами в случае монокристалльных образцов «бутербродного» типа (пластинка-пластинка) в диффузионной зоне образуются поры, трещины, дислокационные структуры, вид которых зависит как от геометрии контактирующих кристаллов, так и от растворимости одного компонента в другом [1]. Распределение дислокаций не всегда следует распределению

концентрации растворенного вещества, поэтому величину и распределение напряжений в диффузионной зоне определить нельзя.

В принципиально другой постановке эксперимента: маленькая крупинка-большой монокристалл, где релаксация напряжений может происходить не только в глубь кристалла, но и параллельно его поверхности, как показано в [2], можно оценить величину несрелаксированных напряжений.

В данной статье приведены результаты исследования дислокационных структур и трещин, образующихся в результате релаксации напряжений, возникающих при высокотемпературном формировании контакта дисперсной частицы вещества А с монокристалльной подложкой вещества В, и анализ распределения напряжений в областях, где наблюдается релаксация напряжений.

1. Экспериментальные результаты

Опыты заключались в следующем. На свежий скол (001) щелочно-галоидного монокристалла помещалась плоскопараллельная монокристаллическая пластинка (крупинка) другого вещества. Размеры крупинки варьировались от десятков микрон до 1–2 мм, но всегда были значительно меньше кристалла-подложки размером $\sim 2 \times 2 \times 2$ см. После проведения отжига различной длительности при $T > 0.5T_{пл}$ ($T = 400 \div 630^\circ \text{C}$) образцы охлаждались до комнатной температуры со скоростями от $2 \cdot 10^{-2}$ до $4 \cdot 10^{-2}$ К/с. Затем исследовалась структура подложки вблизи зоны контакта с помощью оптического микроскопа, рентгеновского микроанализатора и аппаратуры для рентгеноструктурного анализа.

С целью выяснения общности и различия в картине релаксации напряжений для исследования были выбраны пары с разным типом диаграмм состояния, различным соотношением между коэффициентами теплового расширения и парциальными коэффициентами диффузии. В одних из них (KCl–KBr) компоненты неограниченно растворимы. В других (KCl–NaCl) формируется раствор, распадающийся при охлаждении. В третьих (крупинки Pb, Sn, Ni на подложках монокристаллов KCl, NaCl, LiF) очень мала растворимость компонентов. В указанных системах

$$\alpha_{\text{Na}} < \alpha_{\text{K}}, \quad \alpha_{\text{Cl}} < \alpha_{\text{Br}}, \quad \alpha_{\text{NaCl}} = \alpha_{\text{KBr}} > \alpha_{\text{KCl}} [3]$$

соотношение между парциальными коэффициентами диффузии таково, что выполняются следующие неравенства между потоками ионов (j), определяющими перенос массы:

$$\begin{aligned} j_{\text{KCl} \rightarrow \text{NaCl}} &> j_{\text{NaCl} \rightarrow \text{KCl}}, \\ j_{\text{KBr} \rightarrow \text{NaCl}} &> j_{\text{NaCl} \rightarrow \text{KBr}}, \\ j_{\text{KBr} \rightarrow \text{KCl}} &> j_{\text{KCl} \rightarrow \text{KBr}} [1]. \end{aligned}$$

В случае кратковременного отжига, когда толщина диффузионной зоны под крупинкой $\delta \simeq (D_V t)^{1/2}$ (D_V — химический коэффициент диффузии) значительно меньше линейных размеров крупинки r_0 , вокруг крупинки образуются извилистые линии скольжения (рис. 1).

Со временем дислокационная структура преобразуется в специфические дислокационные розетки (розетки первого типа; рис. 2,а), имеющие

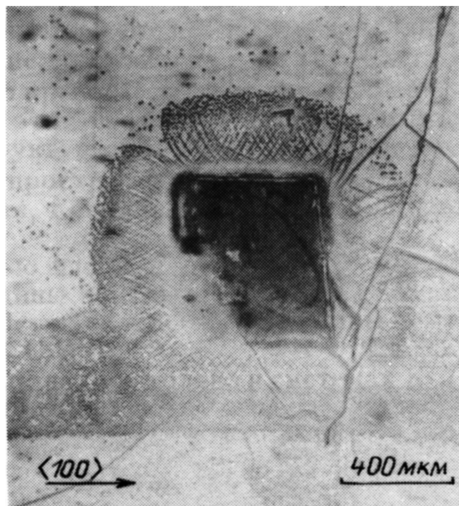


Рис. 1. Характерный вид линий скольжения.
NaCl-KCl, $T = 420^\circ \text{C}$, $t = 30$ мин.

четыре «лепестка» с характерным криволинейным контуром. Внутри контура расположены идущие от крупинки ряды дислокаций (ямки травления) в направлениях $\langle 110 \rangle$ и два взаимно ортогональных ряда ямок в направлениях $\langle 100 \rangle$, выходящих на контур крупинки. Качественно другой вид дислокационных структур (розетки второго типа; рис. 2, б) образовывался вблизи крупинки, если толщина диффузионной зоны становилась сравнимой с размерами контакта. В розетках этого типа имеются ряды ямок травления в направлениях типа $\langle 110 \rangle$ (как и в розетках первого типа) и окаймляющие крупинку на некотором расстоянии от нее ряды в направлениях типа $\langle 100 \rangle$.

Изучение дислокационной структуры на плоскости, перпендикулярной той, на которой лежит крупинка, показало, что в розетках первого типа дислокации распространяются на глубину меньше 1 мкм, в то время как в розетках второго типа непосредственно под крупинкой обнару-

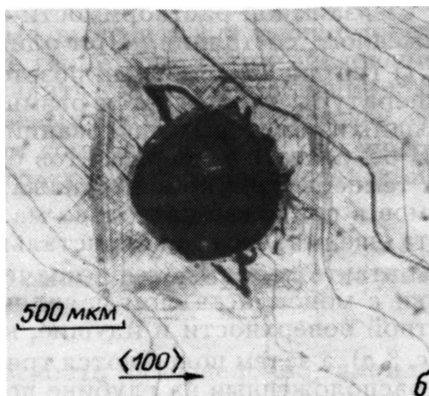
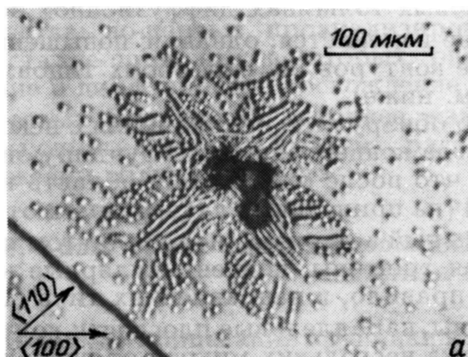


Рис. 2. Типичная структура дислокационных розеток первого (а) и второго (б) типов.
KCl-NaCl $T(^\circ \text{C})$, $t(\text{мин})$: а — 500, 20; б — 600, 90.

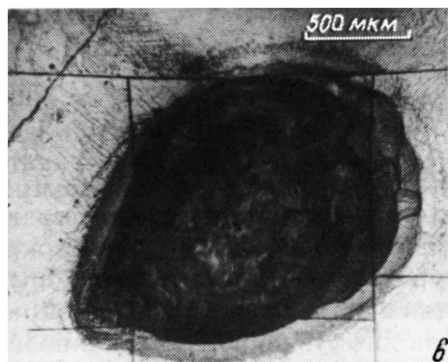
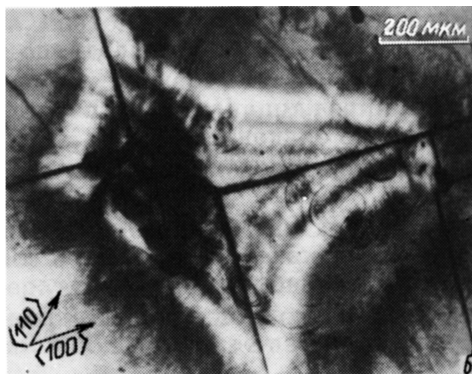
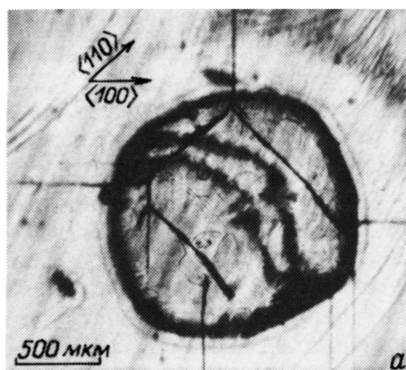


Рис. 3. Типичные картины расположения трещин.

KCl-NaCl $T(^{\circ}\text{C})$, $t(\text{мин})$: а — 600, 90; б — 600, 120; в — 630, 15.

живаются дислокационные структуры, характерные для образцов бутербродного типа [1], а вблизи крупинки видны линии скольжения, идущие на расстояние, большее линейных размеров крупинки, как это наблюдается в розетках укола [4].

Заметим, что тип дислокационных розеток на плоскости $\{001\}$ исследованных нами щелочно-галоидных кристаллов качественно подобен у всех выбранных пар при соответствующих температурах и временах отжига, когда толщины диффузионной зоны одинаковы, т.е. он не зависит от взаимной растворимости компонентов, а определяется видом напряженного состояния. При одинаковых толщинах диффузионной зоны $\delta(T, t)$ тип дислокационных розеток не изменяется, однако с повышением температуры наблюдается размытие контуров розеток обоих типов, состоящих из винтовых дислокаций (см. ниже).

В результате экспериментов было обнаружено, что начиная с некоторых температур и времен отжига, когда концентрация диффундирующих атомов в подложке настолько мала, что после охлаждения область контакта еще остается монокристалльной (на прицельных лауэграммах от зоны контакта наблюдается незначительный астеризм), под контактом крупинки с монокристаллом появляются трещины, перпендикулярные контактной поверхности и идущие, как правило, в направлениях типа $\langle 110 \rangle$ (рис. 3,а), а затем появляются трещины, параллельные плоскости контакта, расположенные на глубине порядка нескольких микрон от поверхности монокристалла (рис. 3,б). С увеличением температуры или длительности отжига, когда зона контакта из-за распада твердого раствора становится поликристаллической (об этом свидетельствуют рентгенограм-

мы), вблизи контакта крупинки с монокристаллом в последнем появляются трещины, окаймляющие крупинку (рис. 3,е), иногда прогнутые в сторону крупинки. Длина их незначительно превосходит линейные размеры крупинки. Отличительная особенность этих трещин — отсутствие в их устье характерных дислокационных структур, присущих трещинам раскола [5]. Это значит, что трещины распространяются до тех пор, пока напряжения в их устье не спадают до нуля, т.е. конец трещины не является концентратором напряжений.

Исследования, проведенные с помощью высокотемпературного микроскопа, позволили установить, что трещины возникают при охлаждении кристаллов. При указанных выше скоростях охлаждения трещины начинают образовываться при $T \approx 200 \div 250^\circ \text{C}$.

Было установлено, что трещины наблюдались только в системах KCl-NaCl и KBr-NaCl (далее везде на первом месте указано вещество подложки). Сравнительный анализ параметров исследованных систем позволяет сделать вывод, что трещины образуются в результате релаксации напряжений диффузионного происхождения, а не термоупругих.

Это заключение основывается на том, что, во-первых, абсолютная величина термоупругих деформаций в подложке $\epsilon(\Delta\alpha) = \Delta\alpha\Delta T$ для исследованных систем значительно меньше величины деформаций, возникающих из-за взаимной диффузии, например концентрационных деформаций $\epsilon(c) \approx \beta c$ (β — безразмерная объемная дилатация при внедрении диффундирующего из крупинки в подложку атома, c — концентрация этих атомов). Диффузионные напряжения такого же порядка [1].

Во-вторых, несмотря на равенство коэффициентов теплового расширения кристаллов KBr и NaCl, трещины в системе KBr-NaCl образуются. Следовательно, положительные нормальные напряжения, способствующие зарождению трещин, должны возникать в системах KCl-NaCl, KBr-NaCl, KBr-KCl. Однако образуются трещины только в первых двух исследованных нами системах, отличающихся от третьей тем, что в них, согласно диаграммам состояния, при охлаждении происходит распад образовавшегося при высокой температуре раствора. По-видимому, возникающие в системе KBr-KCl напряжения недостаточны для раскрытия трещин.

Для того чтобы объяснить наблюдаемые дислокационные структуры и расположение трещин, необходимо выяснить следующие обстоятельства: во-первых, проанализировать геометрию и тип дислокаций в кристалле-подложке; во-вторых, определить силы, вызывающие скольжение и диффузионное восхождение краевых и консервативное движение винтовых дислокаций, а точнее, какими компонентами напряжений эти силы определяются; в-третьих, рассмотреть задачу о распределении напряжений вблизи контакта.

2. Геометрия, типы дислокаций и силы, действующие на них вблизи контакта

В случае припекания крупинки к плоскости (001) щелочно-галогенидного кристалла в образовании дислокационных розеток, наблюдаемых на этой плоскости, могут принимать участие как краевые дислокации в системах скольжения (110) [110] и (110) [110], так и винтовые дислокации в системах (101) [101], (101) [101], (011) [011] и (011) [011]. Установить тип дислокаций

в розетках (краевые или винтовые) можно двумя способами: по ориентации линейных рядов дислокаций (ямок травления) на плоскости (001) и по направлению смещения дислокаций под действием известного внешнего напряжения. В результате реализации этих двух возможностей было установлено, что ряды ямок травления в направлениях $\langle 110 \rangle$ выявляют краевые дислокации, собранные в полигональные стенки, а ряды в направлениях $\langle 100 \rangle$ и контуры розеток состоят из винтовых дислокаций.

Определить направления векторов Бюргерса дислокаций в розетках можно, изучив взаимодействие этих дислокаций с дислокациями с известными векторами Бюргерса. Для этого слабо изогнутый вокруг направления [001] кристалл отжигался такое время, чтобы в результате полигонизации образовывались незавершенные наклонные границы из краевых дислокаций с известными векторами Бюргерса, выявляемые на плоскости (001), а на плоскости (010) видны были ряды винтовых дислокаций [6]. Поместив крупинки на поверхности (001) и (010) предварительно изогнутого и отожженного кристалла-подложки и дополнительно проведя диффузионный отжиг, мы смогли на первой поверхности проанализировать взаимодействие краевых дислокаций розетки с дислокациями, возникшими в результате изгиба, а на второй поверхности — взаимодействие винтовых дислокаций. Для системы KCl-NaCl, например, было установлено, что образовавшиеся краевые дислокации имеют составляющую лишней полуплоскости, направленную от крупинки (для KCl-KBr и NaCl-KCl лишняя полуплоскость направлена к крупинке).

Рассмотрим для определенности краевую дислокацию с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = a/2 [110]$ и винтовую дислокацию с вектором Бюргерса $\mathbf{b}' = a/2 [101]$. Из соотношения Пича-Келлера [7] для компонент сил, действующих на дислокации

$$f_i = e_{ikj} l_k \sigma_{jm} b_m \quad (1)$$

(e_{ikj} — тензор Леви-Чивита, l_k и b_m — соответственно компоненты единичного вектора вдоль линии дислокации и ее вектора Бюргерса; σ_{jm} — компоненты тензора напряжений, в поле которых находится дислокация), следует, что скольжение выбранной нами краевой дислокации определяется силой $f_x = \sigma_{xy} b$, а ее восхождение — силой $f_y = -\sigma_{xx} b$ (ось X выбрана в направлении вектора Бюргерса [110]), в то время как скольжение винтовой дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b}' вызывает сила $f_y = 1/2 \sigma_{xx} b'$ (ось X — в направлении [100], т.е. линии пересечения плоскости скольжения дислокации с поверхностью наблюдения).

3. Распределение напряжений под контактом и вблизи него

Вид дислокационных структур вблизи контакта зависит от напряженного состояния. Розеткам первого типа соответствует плосконапряженное состояние ($\delta \ll r_0$). Розетки второго типа возникают при объемно-напряженном состоянии. Распределение напряжений во втором случае (подобное действию сосредоточенной нагрузки на полупространство [8]) и вызванное ими скольжение краевых и винтовых дислокаций проанализированы в [4], поэтому ниже основное внимание будет сосредоточено на плосконапряженном состоянии.

В общем случае задача о распределении напряжений при припекании диска толщиной h и радиусом r_0 с некоторой невязкой ε к поверхности

монокристалла (плоскости $Z = 0$) решена в [9]. Напряжения, вызываемые в кристалле-подложке частицей, можно представить как результат приложения к поверхности кристалла касательных усилий $F = 2(1 - \nu^2)\epsilon Gh$ (G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона), расположенных по контуру частицы и направленных по нормали к этому контуру. Из [9] следует, что на расстояниях $r \gg r_0$ все компоненты напряжений спадают по закону $\sigma_{ik} \sim r^{-3}$. Так как дислокационные розетки и трещины возникают в непосредственной близости от контакта, необходимо проанализировать напряжения в этой области.

Радиальные σ_{rr} и азимутные $\sigma_{\varphi\varphi}$ компоненты напряжений в безразмерных величинах, удобных для численного расчета, можно представить в следующем виде:

под контактом

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{rr} &= \frac{K(R) - E(R)}{R^2}, \\ \bar{\sigma}_{\varphi\varphi} &= \frac{1}{R^2} \left[\frac{E(R)}{1 - R^2} - K(R) \right], \\ R &= r/r_0, \end{aligned} \quad (2)$$

вне контакта

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{rr} &= R[K(R) - E(R)], \\ \bar{\sigma}_{\varphi\varphi} &= \frac{R^3 E(R)}{1 - R^2}, \\ R &= r_0/r, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\bar{\sigma}_{ii} = \sigma_{ii}/\sigma_0, \quad \sigma_0 = 8(1 + \nu)h\epsilon G/\pi r_0,$$

$K(R)$, $E(R)$ — полные эллиптические интегралы соответственно первого и второго рода; r — расстояние от центра частицы.

Решенная в [9] задача осесимметрична. Для того чтобы проанализировать структуры дислокационных розеток и места возможного зарождения трещин, введем декартовы координаты X и Y в соответствии с кристаллографией скольжения и плоскостями скола в исследованных кристаллах (в дальнейшем ориентация осей координат будет оговорена в каждом конкретном случае).

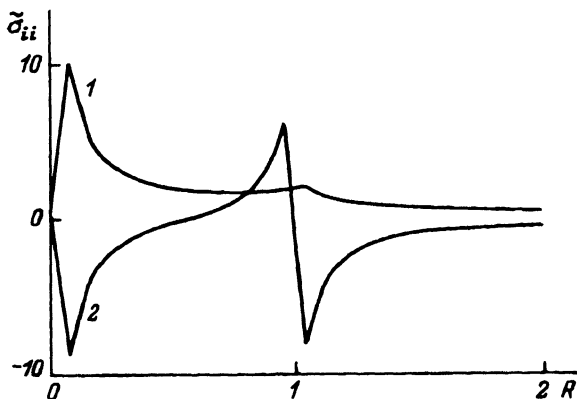


Рис. 4. Зависимость нормальных компонент напряжений от расстояния от центра крупинки. 1 — $\bar{\sigma}_{rr}$, 2 — $\bar{\sigma}_{\varphi\varphi}$.

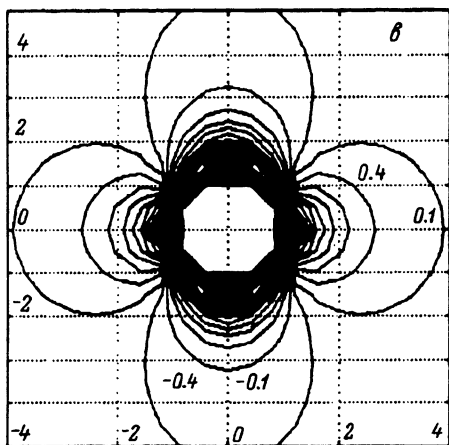
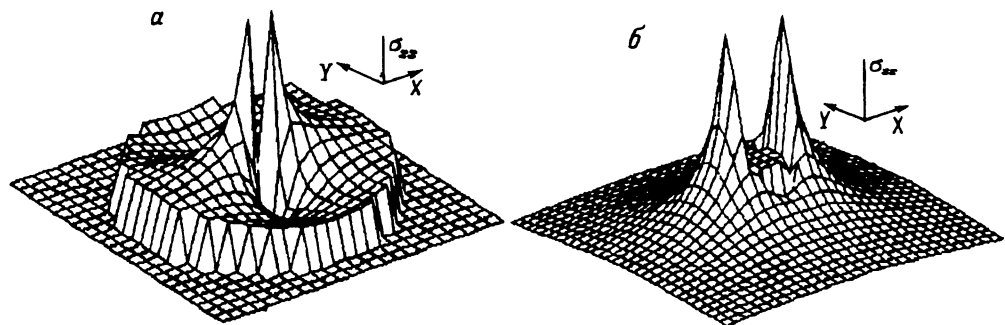


Рис. 5. Распределение на плоскости $Z = 0$ компоненты напряжения σ_{xx} .

a — под частицей, b — вне ее, v — контуры равных напряжений $\bar{\sigma}_{xx}$ для ($\tau > \tau_0$) ($\Delta\bar{\sigma}_{xx} = 0.3$).

В дальнейшем для определенности рассмотрим систему KCl-NaCl. Радиальная компонента σ_{rr} везде положительна (рис. 4) и совпадает со знаком деформации (для концентрационных напряжений, например, $\epsilon = (a_A - a_B)/a_B$, a_A и a_B — размеры замещаемых атомов (ионов) вещества подложки и частицы соответственно), а азимутальная компонента имеет разные знаки и непосредственно вблизи контакта отрицательна. Распределение напряжений σ_{xx} на плоскости $z = 0$ и контуры равных напряжений $\bar{\sigma}_{xx}$ вблизи контакта представлены на рис. 5.

4. Обсуждение результатов

При формировании контакта в рассматриваемой системе, ввиду того что коэффициент диффузии $D_{K \rightarrow NaCl} > D_{Na \rightarrow KCl}$ и размер иона $a_K > a_{Na}$, в тонком приповерхностном слое подложки возникает деформация $\epsilon > 0$. Распределение вызванных ею напряжений представлено на рис. 6.

Когда глубина диффузионной зоны под частицей $\delta \ll r_0$ (розетки первого типа) и реализуется практически плосконапряженное состояние, винтовые компоненты образовавшихся из-за напряжений дислокаций движутся в тонком приповерхностном слое в плоскостях $\{110\}_{45}$, расположенных под углом 45° к плоскости (001), под действием компоненты σ_{xx} , как было указано выше (ось X — [100]). Зародившись на контуре частицы, они смещаются до контура напряжений, соответствующих уровню внутренних обратных напряжений, например напряжениям Пайерлса, что и

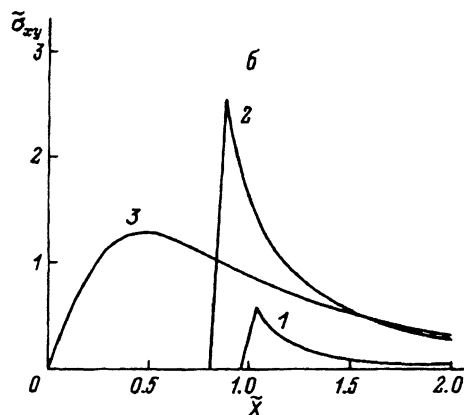
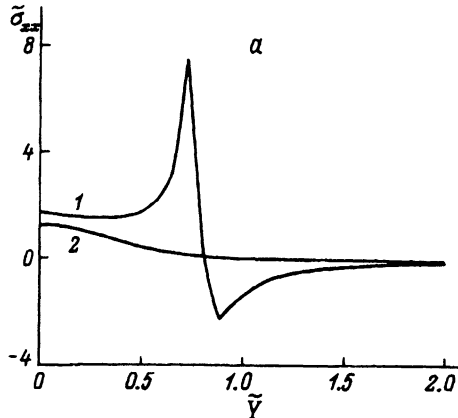


Рис. 6. а) Зависимость $\bar{\sigma}_{xx}(\bar{Y})$. $\bar{X} = 0.7$ (1), 1.02 (2).

б) Зависимость $\bar{\sigma}_{xy}(\bar{X})$ при $r > r_0$. $\bar{Y} = 0.15$ (1), 0.72 (2), 1.02 (3).

обуславливает контур розетки, т.е. ряды ямок травления в направлениях типа $\langle 100 \rangle$ и контур розеток первого типа соответствуют винтовым дислокациям.

Скольжение краевых дислокаций с векторами Бюргерса $\mathbf{b} = a/2 [100]$, происходящее под действием напряжения σ_{xy} (ось X — $[110]$), в принципе может приводить к тангенциальному смещению материала на расстояние от центра частицы порядка $2r_0$, где напряжения практически спадают до нуля (рис. 6, б). Однако в наших опытах, по-видимому, реализуется другая возможность переноса массы, приводящая к релаксации напряжений: образовавшиеся на контуре частицы дислокации «выдавливаются» от контакта, перемещаясь диффузионно под влиянием компоненты напряжения σ_{xx} .

Так как максимальные по абсолютной величине напряжения возникают вблизи радиуса крупинки ($X = 0$) (рис. 6, а; рис. 4 (кривая 2) соответствует $\bar{\sigma}_{xx}(X = 0)$), то краевые дислокации образуются и переползают на большое расстояние именно в этой области, где $\sigma_{xx} < 0$. Взаимодействие между краевыми дислокациями с одинаковыми векторами Бюргерса приводит к образованию полигональных границ в направлениях типа $\langle 110 \rangle$ (рис. 2, а). Аналогичная ситуация и в розетках второго типа (рис. 2, б).

При $\delta \gtrsim r_0$ объемно-напряженное состояние аналогично тому, которое возникает при внедрении индентора при испытаниях на микротвердость [4] (в рассматриваемом нами случае $\varepsilon > 0$ с заменой знаков на противоположные в компонентах тензора напряжений). Отметим принципиальное отличие в формировании напряжений при индентировании и при формировании контакта: в первом случае напряжения создаются достаточно быстро, во втором случае напряжения нарастают постепенно по мере увеличения концентрации атомов вещества крупинки в подложке. Вследствие последнего обстоятельства, а также из-за того, что контакт формируется при повышенных температурах, роль диффузионных механизмов переноса массы в релаксационных процессах должна быть определяющей.

Проведенный в [4] анализ дислокационных структур вокруг отпечатков индентора, полученных при различных температурах на щелочно-

галоидных кристаллах, показал следующее. Во-первых, вид дислокационных структур при невысоких температурах определяется спецификой элементов скользящего кристалла, а с повышением температуры появляются черты, характерные для поведения изотропного тела: линии тока вещества из зоны индентирования задаются видом напряженного состояния. В наших опытах это проявляется в первую очередь появлением извилистых линий скольжения (рис. 1) на начальном этапе формирования контакта. Во-вторых, при $T > 200^\circ \text{C}$ для NaCl при медленном «мягком» индентировании (вдавливание стального шарика, а не алмазной пирамиды) скольжение развивается по плоскостям винтового типа $\{110\}_{45}$. Это связано с тем, что ^[4] максимальные касательные напряжения в плоскостях $\{110\}_{45}$ больше, чем в плоскостях скольжения краевого типа $\{110\}_{90}$, и убывают они медленнее по мере удаления от поверхности.

Представленные в статье опыты, по-видимому, соответствуют самому медленному из возможных способов «мягкого индентирования», когда вещество поставляется (выносится) в контакт поатомно. Указанные выше причины объясняют расположение ямок травления на выходах винтовых дислокаций в розетках второго типа (рис. 2, б).

Таким образом, по виду дислокационных розеток на данной поверхности монокристалла можно судить о сравнительной диффузионной подвижности атомов других веществ в объеме кристалла, так как вид розеток, как было показано выше, определяется не количеством продиффундировавшего вещества и не относительными размерами атомов, а глубиной диффузионной зоны под контактом. Так, например, в проведенных нами опытах с частицами Pb и Sn на поверхности монокристаллов KCl и NaCl было установлено, что при одинаковых температурах и временах отжига в системе KCl-Sn образуются розетки второго типа, а в системах KCl-Pb и NaCl-Sn — розетки первого типа, т.е. диффузия атомов Sn в KCl происходит на большую глубину, чем этих же атомов в NaCl или атомов Pb в KCl.

В данной статье мы не рассматриваем возможные модели образования трещин и их развитие, поэтому для объяснения расположения трещин анализируется не коэффициент интенсивности напряжений, а напряжение. В случае изотропных материалов в области контакта должны были бы образовываться трещины в виде концентрических окружностей за счет релаксации напряжений σ_{rr} ; раскрытие радиальных трещин возможно только вблизи края крупинки (рис. 4, кривая 2).

Плоскостями скола в щелочно-галоидных кристаллах с решеткой типа NaCl, как известно ^[10], являются плоскости типа $\{100\}$, обладающие минимальной поверхностной энергией γ . Исключением являются кристаллы KCl, для которых, несмотря на то что $\gamma_{110} < \gamma_{100}$, трещины наиболее легко образуются по плоскостям $\{100\}$. Если по каким-то причинам (наличие примесей, соответствующее распределение напряжений и т.п.) распространение трещин по $\{100\}$ затруднено, то они образуются по $\{110\}$. Именно это и наблюдается в наших экспериментах (рис. 3, а). Выход радиальных трещин за пределы контакта в область напряжений $\sigma_{\varphi\varphi} < 0$, по-видимому, обусловлен прорывом зародившихся вблизи края крупинки радиальных трещин в месте пересечения трещин по плоскостям $\{110\}$ из-за большой концентрации напряжений в этой области.

Причина образования трещин, параллельных плоскости контакта (рис. 3, б), на наш взгляд, более тривиальна. Распределение напряжений в области контакта при формировании диффузионной зоны толщиной δ

подобно распределению напряжений от вдавливаемого в плоскость $X\bar{Y}$ штампа [8] с заменой в рассматриваемых нами системах знака напряжений. Нормальная компонента напряжений σ_{zz} максимальна на плоскости между штампом и матрицей, что в нашем случае соответствует границе между кристаллом-подложкой и областью под контактом с такой концентрацией атомов кристалла-частицы, что вызываемые ими напряжения достаточны для раскрытия трещин.

Окаймляющие крупинку трещины (рис. 3,е) по плоскостям $\{100\}$ возникают вследствие релаксации напряжений σ_{xx} (ось X направлена вдоль направления $\langle 100 \rangle$). Из зависимостей $\sigma_{xx}(\bar{Y})$ ($\bar{Y} = Y/r_0$) (рис. 6,б и рис. 4) видно, что трещины в непосредственной близости от контакта могут распространяться на расстояния $\sim 1.6r_0$, что и наблюдается в эксперименте.

Трещины в плоскостях $\{110\}$ под контактом раскрываются из-за релаксации напряжений σ_{xx} (ось X — в направлении $\langle 110 \rangle$), величина которых в области образования трещин значительно превышает величину напряжений за контактом (рис. 6,б, кривая 1). Несмотря на это, при распаде раствора напряжения релаксируют с образованием трещин в непосредственной близости от контакта, а не под ним, по-видимому, из-за трудности распространения трещин в упроченном выделениями поликристаллическом контакте.

В заключение заметим, что релаксация напряжений с образованием трещин под контактом и вблизи него может существенно повлиять на физико-механические свойства твердотельных островковых пленок на чужеродных подложках при различных их применениях, особенно в области повышенных температур.

Выражаю благодарность В. Д. Надику за обсуждение результатов работы и Д. В. Мацокину за помощь в проведении численных расчетов.

Список литературы

- [1] Гегузин Я.Е. Диффузионная зона. М., 1979. 343 с.
- [2] Гегузин Я.Е., Мацокин В.П., Витарс К. // ДАН СССР. 1977. Т. 237. № 1. С. 82–85.
- [3] Воробьев А.А. Механические и тепловые свойства щелочно-галоидных монокристаллов. М., 1968. 269 с.
- [4] Боярская Ю.С. Деформирование кристаллов при испытаниях на микротвердость. Кишинев, 1972. 233 с.
- [5] Шаскольская М.П., Ван Янь Вэнь, Гу Шу Чжао // Кристаллография. 1961. Т. 6. В. 4. С. 605–613.
- [6] Gilman J.J. // Progress in ceramis science. N. Y., 1961. V. 1. P. 146–199.
- [7] Peach M., Koehler J.S. // Phys. Rev. 1950. V. 80. N 2. P. 436–441.
- [8] Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости: Пер. с англ. М., 1979. 560 с.
- [9] Гегузин Я.Е., Дзюба А.С., Инденбом В.Л., Овчаренко Н.Н. // Кристаллография. 1973. Т. 18. № 4. С. 800–806.
- [10] Атомный механизм разрушения: Пер. с англ. М., 1963. 660 с.

Харьковский государственный университет

Поступило в Редакцию
1 июля 1992 г.
В окончательной редакции
6 апреля 1993 г.