

расчет, кривая 2 — эксперимент). Кривая 1 получена из теории Бардина-Купера-Шриффера [4].

Как видно, имеется значительный эффект в изменении пропускания пленки. К экспериментальной кривой 2 наиболее близко подходит расчетная кривая с величиной энергетической щели $2\Delta = 40$ мкм (20 МэВ), что дает значение $2\Delta/kT_c = 2.8$ (кривая 1). Измерить зависимость от температуры величины энергетической щели при осциллографической системе регистрации затруднительно из-за низкой точности отсчета значений амплитуд.

Оценка точности определения энергетической щели сверхпроводящей пленки в этой методике дает значение 30%. Таким образом, полученное значение энергетической щели составляет $2\Delta = (40 \pm 12)$ мкм.

Список литературы

- [1] William G.P., Budnam R.C., Hirschmug C.J. // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 41. N 7. P. 4752-4755.
- [2] Kuzmin E., Skintey N., Tyutyunnikov S., Snalyapin V. Communication of JINR. 1991. E14-91-542.
- [3] Долбилев Г.В., Саранцев В.П., Сумбаев А.П., Тютюнников С.И. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 7. С. 1311.
- [4] Mattis D., Bardeen J. // Phys. Rev. 1958. Vol. 111. P. 412.

01;05;12

Журнал технической физики, т. 64, в. 8, 1994

© 1994 г.

О ВОЗНИКНОВЕНИИ ДИНАМИЧЕСКИХ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ МАТЕРИАЛА С СИСТЕМОЙ МИКРОПОР

С.Г.Псахье, А.И.Дмитриев

Институт физики прочности и материаловедения,
634048, Томск
(Поступило в Редакцию 31 декабря 1993 г.)

Изучение отклика материала на внешние воздействия различной природы не может быть полным без учета структурной неоднородности, присущей реальному твердому телу. Как показано в [1-3], при этом необходим учет различных структурных уровней деформации и разрушения. Отметим, что особую трудность для экспериментального изучения представляет собой микроуровень. Это обусловлено тем, что практически не существует экспериментальных методов, позволяющих непосредственно изучать атомные механизмы деформации, поскольку это требует не только большого масштабного разрешения, но и возможности наблюдать процессы, происходящие за времена, сравнимые с дебаевским временем. Этим объясняется исключительно широкое распространение метода молекулярной динамики для решения такого класса задач [3-8]. Наличие микроструктурных неоднородностей может приводить к реализации необычных механизмов деформации

вследствие формирования сложной системы внутренних напряжений [6-8].

Исследование такого класса задач представляет не только теоретический интерес, но также является важным с точки зрения практических приложений. Так, известно, что в условиях радиационного облучения в материале могут формироваться многочисленные микропоры. В то же время их влияние на микромеханизмы пластической деформации практически не исследовано. Поэтому настоящая работа посвящена исследованию влияния микропор на развитие сдвиговой деформации.

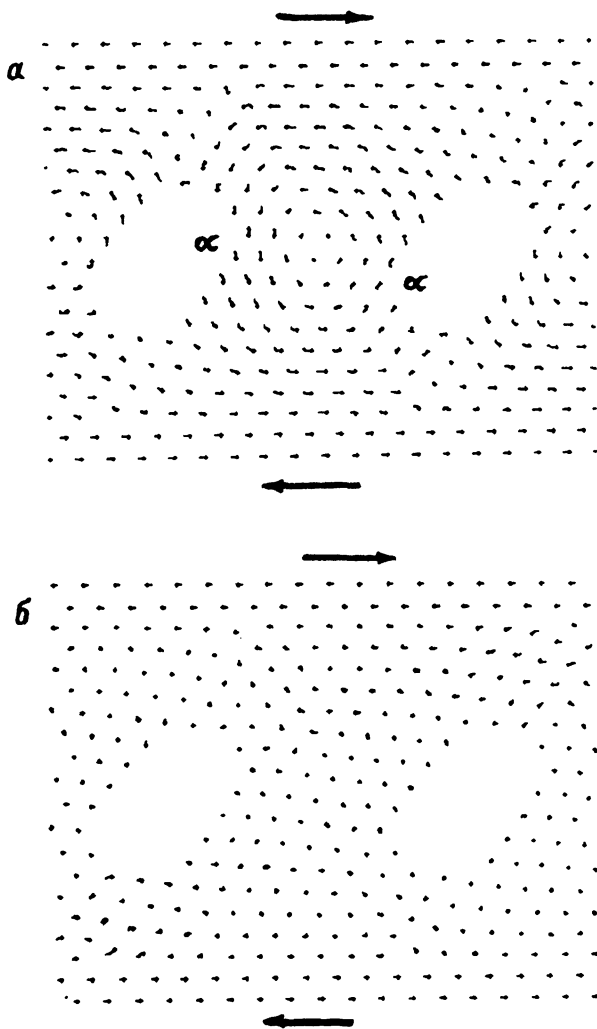


Рис. 1. Траектории движения атомов при 0.
а — интервал с $350\Delta t$ по $650\Delta t$, б — интервал с $650\Delta t$ по $900\Delta t$; стрелкой показано направление сдвиговой деформации.

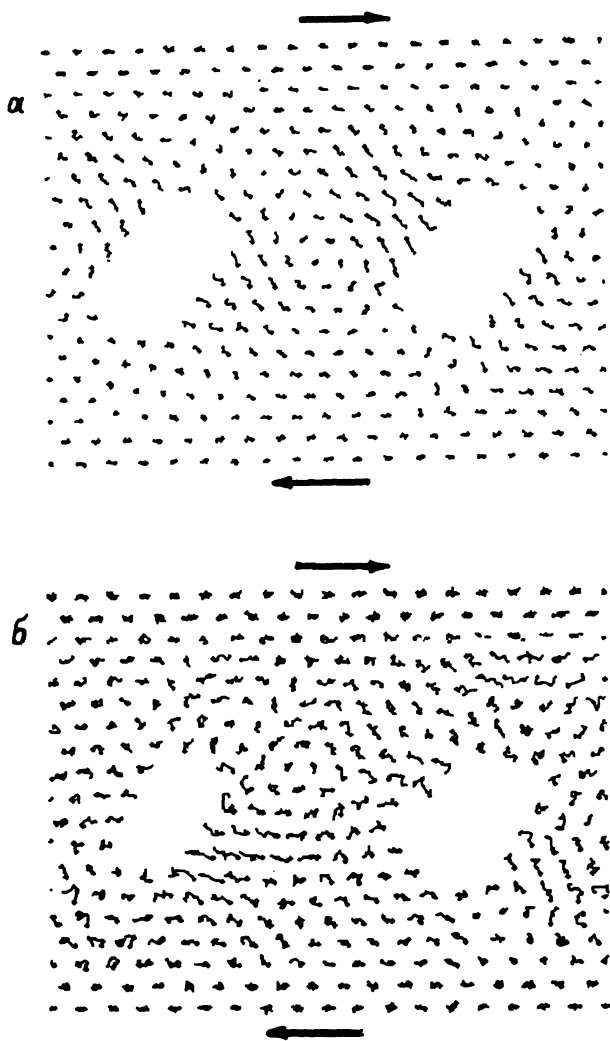


Рис. 2. Траектории движения атомов в интервале с $350\Delta t$ по $650\Delta t$ при различной температуре.

а — 50, б — 300 К; стрелкой показано направление сдвиговой деформации.

Моделирование проводилось методом молекулярной динамики для α -Fe. Характерный фрагмент расчетной ячейки (плоскость (110)) представлен на рис. 1, 2. Межатомное взаимодействие, как и в [3], описывалось потенциалом Морзе [9]. Как и в [6–8], использовалась атомная система единиц, в которой постоянная Планка, заряд электрона, масса электрона и радиус Бора равны единице. Интегрирование уравнений движения проводилось с шагом по времени Δt , равным 100 атомным единицам времени. Вдоль оси Ox использовались периодические граничные условия. Вдоль оси Oy были выбраны так называемые стохастические граничные условия. Их особенность состоит в том, что ко-

ординаты граничных атомов имеют небольшие стохастические отклонения от положения равновесия. Эти отклонения являются функцией температуры, что позволяет моделировать окружение кристаллита в условиях различных внешних воздействий при конечных, не равных нулю температурах.

Моделируемый объект подвергался высокоскоростной сдвиговой деформации вдоль оси OX (рис. 1, 2) со скоростью более 60 м/с. Такие скорости достигаются, в частности, при ударно-волновом нагружении, а также в зонах концентраторов напряжений в материалах с сильно неоднородной внутренней структурой [1-3]. Результаты вычислений анализировались на основе построения полей скоростей атомов, а также их траекторий и смещений за различные моменты времени.

Анализ результатов моделирования процесса деформации при 0 показал, что существуют три явно выраженные стадии. На первой стадии в сдвиговую деформацию вовлекаются слои атомов, слабо взаимодействующие с микропорами. На этой стадии возмущение еще не достигает микропор и процесс деформации развивается в целом традиционным образом. На второй стадии микропоры начинают оказывать влияние на характер пластической деформации. Эта стадия характеризуется согласованным вихреподобным движением атомов в центральной области фрагмента между микропорами (рис. 1,а). Область, охваченная таким движением, включает в себя более 80 атомов, а ее характерный размер составляет около 40 Å. Отметим, что на развитие "вихря" практически не оказывает влияния отсутствие атомов в зонах α (рис. 1,а). Оценки показывают, что вторая стадия развивается за времена порядка дебаевских. Третья стадия процесса деформации уже в самом начале характеризуется практически полным отсутствием "вихревого" согласованного движения атомов, что хорошо видно на рис. 1,б.

Для решения вопроса об устойчивости обнаруженных эффектов при различных температурах были проведены аналогичные расчеты для 50 и 300 К. На рис. 2,а показаны траектории движения атомов на второй стадии процесса деформации при 50 К. Можно видеть, что в этом случае увеличение температуры не приводит к изменению общей картины и основные черты поведения атомной системы остаются теми же, что и при 0. При значительном же увеличении температуры до 300 К характер поведения атомов на второй стадии заметно изменяется, что можно видеть из рис. 2,б. Тепловое движение атомов привело к некоторому размыванию границ "вихря" и смещению его центра, хотя при этом сама тенденция согласованного вихреподобного движения достаточно большого ансамбля атомов по-прежнему остается явно выраженной.

Относительно третьей стадии для температур 50 и 300 К можно отметить, что она так же, как и при 0, начинается с момента разрушения "вихря". Естественно, поведение атомов под влиянием конечной температуры будет несколько сложнее.

Следует также отметить, что подобный вихревой механизм деформации наблюдался в [8], где показано, что сдвиговая деформация может приводить к формированию "вихревых нитей" в области межзеренных границ. По-видимому, "вихревое" движение достаточно большого ансамбля атомов может возникать в твердом теле вследствие неоднородной внутренней структуры, поскольку при этом локально могут реализоваться очень сложные системы нагружения.

- [1] Панин В.Е., Литачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985.
- [2] Литачев В.А., Малинин В.Г. // Изв. вузов. Физика. 1990. № 2. С. 121-139.
- [3] Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. Новосибирск: Наука, 1990.
- [4] Клименко В.Ю., Яковенцев М.А., Дремин А.И. // Хим. физ. 1993. Т. 12. № 5. С. 677-683.
- [5] Landman U., Barnett R.N., Cleveland C.L. et al. // Few-Body System and Multiparticle Dynamics / Ed. D. A. Micha. AIP Conf. Proc. 162. New York, 1987, P. 200.
- [6] Alekseev S.V., Psakhie S.G., Panin V.E. // J. Mater. Sci. Technol. 1993. Vol. 9. P. 223-225.
- [7] Псазье С.Г., Коростелев С.Ю., Панин В.Е. Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. Вып. 18. С. 1645.
- [8] Psakhie S.G., Korostelev S.Yu., Negreskul S.I. et al. // Phys. Stat. Sol. (b). 1993. Vol. 176. P. K41.
- [9] Girifalco L.A., Weizer V.G. // Phys. Rev. 1959. Vol. 114. N 3. P. 687-690.

Журнал технической физики, т. 64, в. 8, 1994

06;07
© 1994 г.

О ПРИРОДЕ ЦЕНТРОВ СВЕЧЕНИЯ В НЕЛЕГИРОВАННОМ ТЕЛЛУРИДЕ ЦИНКА

Б.В.Лисовой, И.И.Пономаренко

Херсонский индустриальный институт,
325000
(Поступило в Редакцию 5 января 1994 г.)

Для кристаллической решетки теллурида цинка характерно присутствие довольно большого числа акцепторных центров, определяющих его дырочный тип проводимости и характер спектров люминесценции [1]. Содержание работ, посвященных исследованию люминесцентных свойств теллурида цинка, указывает на значительные расхождения между данными, приведенными различными авторами. Так, в работах [2,3] природа акцепторных центров, ответственных за излучение в области 0.560 мкм, связывается с двукратно заряженной вакансией цинка, в то время как авторы работ [4,5] связывают их с остаточной примесью меди. Весьма противоречива информация об излучении теллурида цинка в красной области спектра, где люминесценция обусловлена наличием как примесных [6], так и собственных [7] дефектов. Сведения же о природе этих центров остаются вплоть до настоящего времени весьма противоречивыми.

В настоящей работе проведено комплексное исследование фотолюминесценции (ФЛ) нелегированного теллурида цинка, определена химическая природа центров свечения и установлен механизм электронно-дырочных переходов. Спектры ФЛ исходных монокристаллов ZnTe при 77 К характеризуются рядом полос, максимумы которых расположены в области 0.564, 0.71 и 0.87 мкм (рис. 1, кривая 1). Преобладающей по интенсивности всегда была полоса с