

При $d \geq 150$ мкм на стадии III наблюдались характерные скачки ДМ (рис. 1, кривые 4, 5), сопровождавшиеся появлением трещин размером ≥ 100 мкм, причем время, предшествующее появлению первого скачка t_c , уменьшалось с ростом d и при $d \geq 250$ мкм $t_c < t_p$. Это приводило к увеличению разброса значений P_p и отклонению $P_p(d)$ от линейной зависимости при больших d . Учитывая, что ДМ трещины в форме полудиска (радиусом R , вскрытием δ и поверхностной плотностью зарядов на свежей поверхности скола σ) $P = \pi R^2 \sigma \delta / 2$, и принимая для LiF $\sigma = 3 \cdot 10^{-4}$ Кл/м², а $R/\delta \approx 30$ [6], получим, что минимально регистрируемому ДМ соответствует появление трещины с $R \approx 60$ мкм, что согласуется с результатами наблюдений.

Таким образом, методом анализа ДМ образца совместно с методами ДФУ и травления выявлены три основные последовательно развивающиеся во времени стадии процессов пластической деформации и разрушения при динамическом индентировании LiF: 1) инкубационная, протекающая на фронте импульса нагрузки, которая разделяет момент приложения нагрузки и начало развития дислокационной розетки; 2) стадия нелинейного роста полос скольжения в лучах розетки, сопровождаемого заметной релаксацией нагрузки; 3) стадия релаксации внутренних напряжений в розетке (как правило, после окончания нагружения), которая сопровождается появлением довольно крупных (~ 60 мкм) трещин. Итак, исследование кинетики поляризации кристалла при индентировании позволяет получать информацию о динамике формирования отпечатка и дислокационной розетки вокруг него, обнаруживать макротрещины, фиксировать момент их появления и связывать его с определенной фазой формирования дислокационной структуры розетки.

Л и т е р а т у р а

- [1] Боярская Ю. С., Грабко Д. З., Кац М. С. Физика процессов микроиндентирования. Кяшинец: Штинца, 1986. 294 с.
- [2] Lankford J., Davidson D. L. J. Matter. Sci., 1979, vol. 14, p. 1662—1668.
- [3] Collins N. Rad. Eff., 1983, vol. 15, p. 217—226.
- [4] Головин Ю. И., Шибков А. А. ФТТ, 1986, т. 28, № 11, с. 3492—3499.
- [5] Акчурич А. Ш., Васев Е. Н., Мизина Е. Ю., Регель В. Р. ФТТ, 1988, т. 30, № 3, с. 760—764.
- [6] Головин Ю. И., Дьячек Т. П., Орлов В. И., Талин Ю. И. ФТТ, 1985, т. 27, № 4, с. 1110—1115.

Тамбовский государственный
педагогический институт
Тамбов

Поступило в Редакцию
9 июня 1988 г.

ДИФфуЗИОННЫЙ РОСТ ВАКАНСИОННЫХ ПОР В ОБЛУЧЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ БРОМИДА ЦЕЗИЯ

А. В. Шапурко, Л. А. Громов, С. А. Кукушкин, В. И. Штанько

Высокодозное радиационное воздействие на щелочно-галогидные кристаллы (ЩГК) может приводить к образованию в облученной матрице продуктов радиолитического разложения, представляющих собой фазовые выделения: галогена, коллоидальных частиц металла, микропор [1]. Среди этих радиолитических образований наименее изученными к настоящему времени являются микропоры.

В данном сообщении приведены результаты исследования коалесценции вакансионных пор, наблюдаемой при нагреве облученных монокристаллов бромиде цезия. Показано, что лимитирующей стадией коалесценции является процесс испарения (конденсации) вакансии с поверхности пор.

Для исследования использовались монокристаллы CsBr, выращенные по методу Стокбаргера из соли марки «х. ч.», дополнительно подвергнутой очистке экстракционно-хроматографическим способом [2]. Образцы диаметром 15 и толщиной 2 мм облучали при 300 К на гамма-установке до 10^7 Гр (мощность дозы 1.5 Гр/с) и импульсном ускорителе электронов ЭЛИТ-2 до $5 \cdot 10^7$ Гр (энергия электронов 1.5 мэВ, длительность импульса 3 мкс, доза за импульс $2 \cdot 10^3$ Гр). Нами установлено, что прогрев облученных ($\sim 10^7$ Гр) монокристаллов при $T \sim 700$ К в течение 10 мин приводит

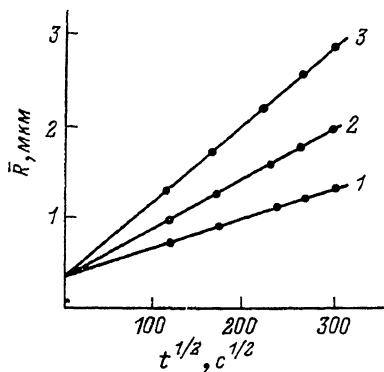


Рис. 1.

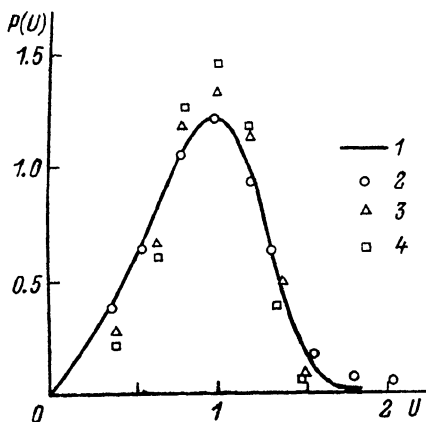


Рис. 2. Плотность вероятности распределения пор по размерам при коалесценции в облученных $5 \cdot 10^7$ Гр монокристаллах бромиде цезия.

T , К: 2 — 813, 3 — 843, 4 — 873. 75 000 с.

к отжигу всех центров окраски и образованию в объеме образцов микропор, наблюдаемых оптической микроскопией. При дальнейшей обработке 750—870 К в течение 0.3—30 ч наблюдался процесс коалесценции вакансионных пор.

На рис. 1 представлены экспериментальные зависимости среднего радиуса пор \bar{R} от времени отжига при температурах 783 (1), 813 (2), 843 К (3) в облученных $5 \cdot 10^7$ Гр образцах. Аналогичные результаты получены и в гамма-облученных образцах. Зависимости хорошо описываются уравнениями вида

$$\bar{R}^2 - \bar{R}_0^2 = At\bar{R}_0^2 \quad (1)$$

(A — константа, \bar{R}_0 — начальный радиус пор) и, согласно [3], соответствуют случаю, когда лимитирующей стадией коалесценции является граничная кинетика, т. е. процессы конденсации (испарения) вакансий с поверхности пор. Значение A определяется выражением

$$A = \beta v^2 / (kTR_0^3), \quad (2)$$

где в общем случае β — обобщенный удельный граничный поток компонентов выделения новой фазы

$$\beta = \left(\sum_{i=1}^n P_i^2 / (\beta_i C_i) \right)^{-1}, \quad P_i = \nu_i / \sum_{i=1}^n \nu_i,$$

ν_i — стехиометрический коэффициент i -го компонента, C_i — равновесная концентрация i -го компонента, v — объем атома фазового выделения, σ —

поверхностная энергия. Значение β_i может быть оценено [4] из выражения

$$\beta_i = n_i \nu_i \exp(-E_i/kT), \quad (3)$$

где E_i — энергия активации десорбции i -го компонента, n_i — поверхностная плотность i -го компонента, ν_i — частота колебаний атома i -го компонента на поверхности выделения. Так как поры в ШГК состоят из вакансий катионной и анионной подрешеток, то процесс роста (растворения) может осуществляться за счет испарения (конденсации) как вакансий каждой из подрешеток в отдельности, так и бивакансий, т. е. катионной и анионной вакансий, связанных кулоновским взаимодействием. Выявить преобладающий механизм можно путем оценки значений β_i и E_i для каждого случая из уравнений (2) и (3) и экспериментальных значений A (1).

Если полагать, что рост пор осуществляется за счет испарения (конденсации) вакансий каждой из подрешеток в отдельности (в этом случае $\nu_1 = \nu_2 = 1$, $P_1 = P_2 = 0.5$), то при $AR_0^2 = 2.5 \cdot 10^{-13}$ с·см² (рис. 1), $\sigma \sim 10^2$ эрг/см², $\nu \sim 10^{13}$ с⁻¹, $\nu = 4 \cdot 10^{-23}$ см⁻³, $kT \sim 10^{-13}$ эрг и учитывая, что $C_1 = C_2 = \exp(-g_S/2kT)$, $g_S = h_S - TS_S$ — свободная энергия образования пор Шоттки, $h_S = 2$ эВ [5], $S_S/k = 6.08$ [6], имеем для анионных или катионных вакансий $\beta \sim 5 \cdot 10^{21}$ см⁻²·с⁻¹, $E_1 = E_2 \sim 1$ эВ. Итак, в этом случае значение энергии активации десорбции вакансий совпадает с энергией активации образования вакансий $h_S/2$ [5]. С другой стороны, если бы рост пор осуществлялся за счет испарения (конденсации) бивакансий ($\nu = 1$, $P = 1$), то, используя соответствующие для этого случая значения: $\nu = 8 \cdot 10^{-23}$ см⁻³, $C = Z \exp(g_K - g_S)/kT$, $Z = 8$ — координационное число, $g_K = h_K - TS_K$ — свободная энергия ассоциации вакансий, $h_K = 0.58$ эВ [6], $S_K/k = 3.7$ [6] при тех же параметрах процесса (AR_0^2 , σ , ν , kT), получим $\beta \sim 10^{24}$ см⁻²·с⁻¹, $E \sim 0.6$ эВ. Полученное значение энергии активации десорбции бивакансий значительно ниже энергии активации образования бивакансий, равной $h_S - h_K \approx 1.4$ эВ. Таким образом, на основе сопоставления энергий активации десорбции и энергий активации образования вакансий и бивакансий мы полагаем, что коалесценция пор в CsBr осуществляется за счет испарения (конденсации) отдельных вакансий каждой из подрешеток.

Другим подтверждением того, что граничная кинетика лимитирует процесс коалесценции, является характер функции распределения пор по размерам $f(R, t) = P(U) N(t)/R(t)$. В случае граничной кинетики, согласно [3],

$$P(U) = \begin{cases} 3 \cdot 2^3 e^{3U} \exp[-6/(2-U)] / (2-U)^6, & U < 2, \\ 0, & U \geq 2, \end{cases} \quad U = R, \bar{R}. \quad (4)$$

Теоретическая кривая I по (4) и экспериментальные значения плотности вероятности $P(U)$ (рис. 2) имеют хорошее совпадение. Вместе с тем было установлено, что по мере роста температуры отжига (813, 843, 873 К) совпадение теоретической кривой и экспериментальных значений ухудшается. Наблюдаемые изменения $P(U)$ по мере роста температуры отжига могут быть обусловлены переходом процесса коалесценции в область смены лимитирующего механизма, так как, согласно [3], возможны два процесса, лимитирующие скорость роста выделений новой фазы на стадии коалесценции, а именно диффузионные процессы, когда $D \ll \beta \nu R$ (D — обобщенный коэффициент диффузии), и процессы на границе выделения, когда $D \gg \beta \nu R$. В области температур, когда $D \approx \beta \nu R$, будет происходить смена лимитирующего механизма. Эту температурную область можно определить следующим образом. При известном коэффициенте наименее подвижного компонента $D = D_0 \exp(-E_d/kT)$, а $D \approx \beta \nu R$, используя выражение (3), получим

$$T \approx (E - E_d) / k \ln(n \nu \nu R / D_0).$$

Так как для катионной подрешетки в CsBr $D_2 C_2 = 15.3 \exp(-1.54 \text{ эВ} / kT)$ см²·с⁻¹ [5], $R \sim 5 \cdot 10^{-4}$ см (рис. 1), получим $T \sim 900$ К, что согласуется с экспериментальными наблюдениями (рис. 2).

Таким образом, проведенные исследования показали, что в облученных монокристаллах CsBr рост среднего размера пор в результате термической обработки при $T > 750$ К осуществляется посредством коалесценции. Лимитирующим звеном коалесценции является граничная кинетика, т. е. испарение (конденсация) вакансий с поверхности пор. В области температур ~ 900 К наблюдается переход лимитирующей стадии от граничной кинетики к объемной диффузии.

Л и т е р а т у р а

- [1] Котов Г. В., Громов Л. А., Колотилин В. В., Штанько В. И. ВАНТ. Физика радиационных повреждений. Харьков, 1980, № 3, с. 40—47.
- [2] Карпов И. К., Михальченко Г. А. В сб.: Проблемы чистоты и совершенства ионных кристаллов. Тарту, ИФ АН ЭССР, 1969, с. 11—15.
- [3] Слезов В. В., Кукушкин С. А. ФТТ, 1987, т. 29, № 6, с. 1812—1818.
- [4] Кукушкин С. А., Калинин И. П., Сергеева Л. А., Степанова Н. Д. Поверхность, 1985, № 3, с. 84—90.
- [5] Lynch D. W. Phys. Rev., 1960, vol. 118, N 2, p. 468—473.
- [6] Bollman W. Crystal Res. and Technol., 1982, vol. 17, N 7, p. 849—856.

Ленинградский технологический
институт им. Ленсовета
Ленинград

Поступило в Редакцию
10 июня 1988 г.

УДК 519.4+537.311+621.315/58

Физика твердого тела, том 30, в. 11, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 11, 1988

ЧАСТИЧНО ЛОКАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ КРИСТАЛЛА

И. М. Резник

Хорошо известно, что распределение электронного заряда играет важнейшую роль в неопирающихся на феноменологию методах теории твердого тела [1]. Электронная плотность $\rho(r)$ (ЭП) обуславливает коллективные свойства основного состояния кристаллов, особенности химической связи, характеристики дефектов, поверхности, служит фундаментом, на котором строится количественная теория элементарных возбуждений. Между тем расчет ЭП даже идеальных кристаллов составляет весьма сложную проблему, решение которой невозможно без полного анализа одночастичной задачи, как правило, в рамках теории функционала плотности в форме Кона и Шэма [2]. Есть лишь два случая, когда имеется явная связь ЭП с полным потенциалом. Это томас-фермиевский предел локальной однородности, отвечающий медленно меняющемуся, но не обязательно малому потенциалу, и случай, когда применима теория возмущений. Последний реализуется достаточно хорошо в простых металлах. Подход Томаса—Ферми дал разумное описание ЭП полупроводников, во всяком случае Si, Ge и GaAs [3], несмотря на то, что полный потенциал нельзя считать плавным. В данной работе развита теория, применимость которой определяется возможностью представления полного эффективного потенциала в виде

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r), \quad (1)$$

где $V_1(r)$ — достаточно плавная функция, а $V_2(r)$ может считаться малой по сравнению с характерными электронными энергиями.

Исходим из теории Марча и Мэррея [4] для матрицы плотности Дирака $\rho(r; r'; k)$. Можно показать, что она сводится к уравнению дайсоновского типа