

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.2

Журнал технической физики, т. 58, в. 10, 1988

## СКОЛЬЖЕНИЕ ПО ПРОИЗВОЛЬНОЙ МЕЖКРИСТАЛЛИТНОЙ ГРАНИЦЕ

Б. М. Даринский, Ю. А. Федоров

В существующих к настоящему времени теориях межкристаллитного скольжения при рассмотрении специальных границ [1] гораздо более конкретно учитывается их атомное строение по сравнению с неспециальными [2]. В настоящем сообщении предпринята попытка сделать шаг в направлении устранения этого пробела в теории границ и рассмотреть на атомном уровне скольжение по границе общего типа. С этой целью на межкристаллитные границы переносятся некоторые представления, возникшие при изучении мономолекулярных слоев, расположенных на свободной поверхности [3-5]. Возможность такого подхода указывалась ранее [6].

На рис. 1 изображена граница, образованная в результате разориентировки решеток  $A$  и  $B$  путем поворота вокруг оси  $z$  с малыми индексами, например  $\langle 110 \rangle$ , на неспециальный угол  $\theta = \pi - (\alpha + \beta)$ . Постоянные решетки в плоскости, перпендикулярной оси  $z$ , равны  $a_1$  и  $a_2$ , в направлении оси  $z$  для обоих кристаллитов одинаковы и равны  $a$ . Таким образом, каждый атом на рис. 1 представляет атомный ряд, параллельный оси  $z$ . Граница пересекается четырьмя семействами кристаллографических плоскостей, принадлежащих кристаллитам  $A$  и  $B$ . Расстояния между следами пересечений плоскостей кристаллита  $A$  с границей обозначим  $p_1 = a_1/\sin \alpha$  и  $q_1 = a_2/\cos \alpha$  и соответственно для кристаллита  $B$   $p_2 = a_1/\sin \beta$  и  $q_2 = a_2/\cos \beta$ . Все четыре величины  $p_1, q_1, p_2, q_2$  несоизмеримы.

На рис. 1 зазор между кристаллитами показан конечным только для того, чтобы рисунок был яснее. В реальной ситуации имеет место зацепление между ступенчатыми поверхностями кристаллитов подобно тому, как это показано на рис. 2. Если края двух ступенек находятся на расстоянии, не превышающем некоторое критическое  $a_0$ , то атомам с края одной из ступенек энергетически выгодно диффузионно удалиться (ступеньки  $U$  и  $S$  на рис. 2). Средние расстояния по оси  $x$  между ступеньками в кристаллитах  $A$  и  $B$  равны соответственно  $q_1$  и  $q_2$  (рис. 1). Контакты между ступеньками происходят в слоях  $\zeta_1 = a_1 \cos \alpha$  и  $\zeta_2 = a_1 \cos \beta$  кристаллитов  $A$  и  $B$  соответственно. Слой  $\zeta = \zeta_1 + \zeta_2$  назовем контактным. Положим для определенности  $q_1 > q_2$ . Тогда в контактном слое на единицу длины границы в кристаллите  $B$  атомных рядов будет больше, чем в  $A$ , на величину

$$N_1 = q_1 - q_2/q_1q_2. \quad (1)$$

Эти anomalно сблизившиеся в контактном слое  $N_d$  рядов должны диффузионно удалиться.

Пусть мы имеем два типа точек, расположенных вдоль оси  $x$  через одинаковые интервалы  $q_1$  и  $q_2$  соответственно. В случае несоизмеримости  $q_1$  и  $q_2$  число точек, находящихся в интервале дистанций  $a_0$ , запишется как

$$N_d = a_0/q_1q_2. \quad (2)$$

Здесь использована приведенная в [7] функция распределения по дистанциям. Из (1) и (2) следует, что  $a_0 = q_1 - q_2$ .

Когда в процессе скольжения какие-либо две ступеньки сближаются до расстояния  $a_0$ , начинается поакансионное растворение атомного ряда, представляющего край одной из ступенек. Если же пара ступенек с удаленным атомным рядом расходится на расстояние  $a_0$ , то начинается застройка удаленного ряда, сопровождающаяся испусканием вакансий. Таким образом, при скольжении одни участки границы являются источниками, другие —

стоками вакансий, а весь процесс контролируется самодиффузией. Атомная конфигурация межкристаллитной границы в течение всего процесса скольжения непрерывно воспроизводится, скачкообразно смещаясь в плоскости границы на расстояния, зависящие от величины относительного проскальзывания.

Поскольку действующее при скольжении внешнее напряжение  $\sigma$  изменяет термодинамический потенциал первоначально ненагруженной системы, то при расхождении в про-

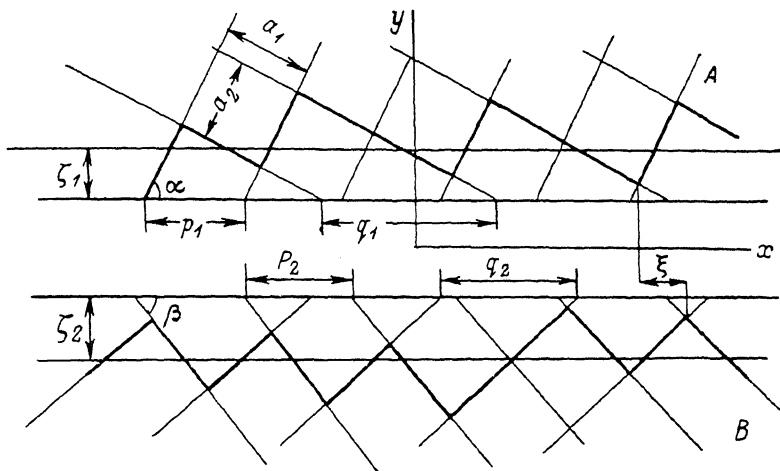


Рис. 1. Межкристаллитная граница.

цессе скольжения двух атомных рядов, один из которых удален, застройка удаленного ряда начнется с расстояния между рядами  $a_0 - \delta\xi$ . При этом испускание вакансий происходит в интервале дистанций  $\delta\xi$ . Будем считать, что в том же интервале происходит и поглощение вакансий.

Пусть при скольжении кристаллиты получили относительное смещение  $dx$ . При этом  $dN$  пар атомов изменили знаки дистанций. Каждый раз при смене знака дистанции происходит удаление или застройка атомного ряда. Согласно (2),  $dN = dx/q_1q_2$ . Работа внешнего

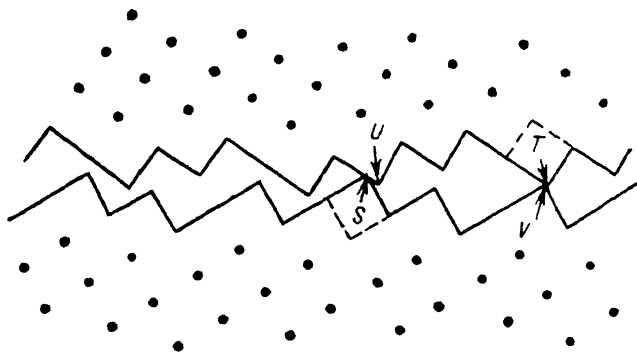


Рис. 2. Перестройки при скольжении. Ступеньки  $U$  и  $S$ ,  $T$  и  $V$  сблизились на критическое расстояние. Штриховыми линиями обозначены положения ступенек после диффузионного удаления атомных рядов с краев сблившихся ступенек.

напряжения на единицу площади границы  $dA = \sigma dx$ , и изменение химического потенциала вакансий

$$\mu = a \frac{dA}{dN} = a q_1 q_2 \sigma. \quad (3)$$

Если в интервал дистанций  $\delta\xi$  попадает на единицу длины  $N_1$  атомных рядов, то расстояние между источниками и стоками выразится формулой

$$\lambda = 1/2N_1 = q_1 q_2 / 2\delta\xi. \quad (4)$$

Используя (3), находим концентрацию вакансий вблизи источника [8]

$$C_{\pm} = \pm c_0 \frac{a q_1 q_2}{kT} \sigma. \quad (5)$$

Здесь знаки «+» и «-» — относятся к источникам и стокам соответственно,  $C \equiv c - c_0$ ,  $c_0$  — равновесная концентрация вакансий.

Обозначим еще  $l$  длину свободного пробега вакансии до того, как она испарится в объем. После решения диффузионной задачи теми же методами, как это делается, например, в [8], получим выражение для скорости зернограничного проскальзывания, когда  $l \gg \lambda$ , т. е. процесс лимитируется граничной самодиффузией

$$v_1 = \frac{4D_b (\delta\xi)^2}{kT} \sigma, \quad (6)$$

и когда процесс лимитируется объемной самодиффузией ( $l < \lambda$ )

$$v_2 = \frac{D_v q_1 q_2 \delta\xi}{r_0 \ln(R/r_0) kT} \sigma. \quad (7)$$

Здесь  $D_b$  и  $D_v$  — соответственно коэффициенты граничной и объемной самодиффузии,  $R$  — размер кристалла,  $r_0 \sim a$ .

Для проведения оценок заметим, что  $\delta\xi$  увеличивается с ростом  $\sigma$ , и при некотором критическом напряжении  $\sigma_c$  будут работать все источники (а также и стоки) вакансий в интервале дистанций от 0 до  $a_0$ . Напряжение  $\sigma_c$  достаточно для того, чтобы переместить «лишний» атомный ряд в контактном слое из одной потенциальной ямы в другую. Такая операция в определенной степени аналогична перемещению на межатомное расстояние одной из дислокаций несоответствия при неподвижных остальных, что равносильно образованию дислокационного диполя, создающего напряжение  $Gq_1q_2/r^2$ , которое должно быть равно  $\sigma_c$ . Здесь  $r=1/N_d$ ,  $G$  — модуль сдвига. Считая  $\delta\xi$  пропорциональным  $\sigma$ , учитывая, что  $\delta\xi = a_0$  при  $\sigma = \sigma_c$ , и принимая во внимание (1), будем иметь

$$\delta\xi \sim \frac{q_1 q_2}{q_1 - q_2} \frac{\sigma}{G}. \quad (8)$$

Для численных оценок рассмотрим скольжение по границе алюминия при 800 К. Примем  $G \sim 5 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $a_1 = a_2 = 3 \cdot 10^{-10}$  м,  $\alpha = 40^\circ$ ,  $\beta = 20^\circ$ , энергии активации объемной и граничной самодиффузии соответственно 1.2 и 0.6 эВ,  $\sigma = 7 \cdot 10^8$  Н/м<sup>2</sup>. В этом случае  $l < \lambda$ , и из (7) получается  $v_2 = 4 \cdot 10^{-5}$  м/ч, что близко к экспериментально наблюдаемому значению  $6 \cdot 10^{-5}$  м/ч [9].

В принятом подходе коэффициенты диффузии входят в соотношения (6) и (7) как феноменологические параметры. Точный расчет их требует рассмотрения межатомного взаимодействия, которое можно провести как в модели жестких кристаллитов, так и с учетом атомной релаксации, что приведет к изменению диффузионных барьеров и параметров в соотношениях (6) и (7).

В заключение заметим, что удалению одного из сблизившихся атомных рядов предшествует образование некоторой критической конфигурации из указанных рядов и их атомного окружения — активированного комплекса [10]. Активированный комплекс представляет собой двухуровневую систему. Зависимость разности  $U$  между минимальными значениями энергии двухуровневых конфигураций от дистанции  $\xi$  представляет собой одну из разновидностей дьявольской лестницы [11], явный вид которой наряду с характеристиками межатомного взаимодействия определяется параметрами несоразмерности.

Условием включения в процесс обмена вакансиями конфигурации с дистанцией  $\xi$  является соотношение  $U(\xi) = \mu$ . С увеличением  $\sigma$  увеличивается  $\delta\xi$ . При некоторых значениях  $\xi$  функция  $U(\xi)$  имеет большие скачки  $\Delta U$ . Поэтому существуют интервалы изменения напряжений, внутри которых число активных атомных конфигураций сохраняется. В этих интервалах могут реализовываться линейные зависимости скорости проскальзывания от напряжения.

Авторы благодарны А. Н. Орлову за обсуждение работы и ценные замечания.

### Литература

- [1] Орлов А. Н., Перегезенцев В. Н., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах. М.: Металлургия, 1980. 154 с.
- [2] Estrin Y., Lücke K. Acta Meth., 1982, v. 30, N 5, p. 983—988.
- [3] Покровский В. Л., Таланов А. Л. ЖЭТФ, 1980, т. 78, № 1, с. 269—294.
- [4] Pokrovsky V. L. J. Phys., 1981, v. 42, N 6, p. 761—766.
- [5] Lyuksyutov I. F., Pokrovsky V. L. J. Phys., 1982, v. 43, N 1, p. L11—L13.

- [6] Браун О. М., Люксов И. Ф., Наумов А. Г. В кн.: Структура и свойства границ зерен. Уфа, 1983, с. 12.
- [7] Даринский Б. М., Сайко Д. С., Федоров Ю. А. Изв. вузов. Физика, 1987, № 9, с. 53—57.
- [8] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
- [9] Глейтер Г., Чалмерс Б. Большебугровые границы зерен. М.: Мир, 1975. 375 с.
- [10] Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978. ч. 1. 806 с.
- [11] Aubry S. J. Phys., 1983, v. 44, N 2, p. 147—162.

Воронежский политехнический институт

Поступило в Редакцию  
12 декабря 1986 г.

УДК 534—18

Журнал технической физики, т. 58, в. 10, 1988

## ДАТЧИКИ НА ОСНОВЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЕ ZnO/Si

В. И. Анисимкин, Э. Верона<sup>1</sup>, Дж. Социно<sup>1</sup>

Слоистая структура пьезоэлектрическая пленка ZnO на кремниевой подложке представляет особый интерес для устройств на поверхностных акустических волнах (ПАВ): она позволяет совместить на одной подложке акустическую и электрическую обработки сигналов. Особенности изготовления таких интегральных устройств с порядком проведения технологических операций для электронной и акустической частей описаны в работе [1].

В настоящей работе сообщаются предварительные результаты исследований акустических датчиков водорода и постоянного электрического поля на основе структуры ZnO/Si. В экспериментах использовались подложки (001) Si толщиной 500 мкм с направлением распространения ПАВ вдоль оси  $\langle 100 \rangle$ . Пьезоэлектрические текстурированные пленки ZnO толщиной  $h$  от 0.8 до 16 мкм наносились на подложку методом реактивного магнетронного распыления. Встречно-штыревые преобразователи изготавливались на поверхности пленки ZnO и содержали 15 пар электродов с периодом  $\lambda = 20.5$  мкм. Сплошной металлический электрод из Cr/Au напылялся на границу пленка—подложка непосредственно под преобразователями. В датчике водорода между входным и выходным преобразователями наносилась пленка Pd длиной 6 мм, чувствительная к водороду. В датчике электрического поля между преобразователями на обеих поверхностях ZnO изготавливались два полевых электрода из Cr/Au длиной 6 мм.

Эксперименты проводились на установке, схематически показанной на рис. 1. Ее ключевым элементом служила линия задержки на ПАВ с пленкой Pd (а) или с полевыми электродами (б) на пути распространения волны. При адсорбции—десорбции водорода пленкой Pd происходило изменение плотности и упругих модулей этой пленки [2]. В результате скорость ПАВ изменялась на величину  $\Delta V$ , зависящую от концентрации водорода в газовой смеси. Подача водорода в систему осуществлялась в смеси с азотом: 1 %  $H_2 + N_2$ .

При приложении постоянного электрического поля  $E$  поперек пленки ZnO перпендикулярно направлению распространения ПАВ изменение скорости ПАВ  $\Delta V$  наступало вследствие электроакустического эффекта — зависимости упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических модулей ZnO от напряжения смещения  $E$ . Напряжение  $E$  величиной до  $\pm 15$  В подавалось от генератора пилообразного напряжения, плавно меняющегося с частотой  $10^{-1}$  Гц.

Величина относительного изменения скорости ПАВ  $\Delta V/V$  в датчиках обоих типов определялась из измерений относительного сдвига частоты  $\Delta f/f$  на выходе интегратора (рис. 1). Регистрация динамических характеристик датчиков производилась на самописце.

Отметим, что нанесение пленки Pd значительно (более чем на 20 дБ) увеличивало потери на распространение ПАВ. Это ограничивало диапазон используемых частот величиной  $f < 400$  МГц и затрудняло исследование акустических мод высокого порядка. Настоящие исследования проводились на двух первых модах — волне Рэлея и волне Сезава.

<sup>1</sup> Институт акустики им. О. М. Корбино, Рим.