Письма в ЖТФ, том 14, вып. 14 26 июля 1988 г.

ДИФФУЗИЯ В УПРУГОМ ПОЛЕ КЛИНОВОЙ ДИСКЛИНАЦИИ

А.Е. Романов, Г.Г. Самсонидзе

Дисклинационные дефекты по своей природе являются источниками мощных упругих полей [1]. Благодаря этому свойству они (наряду с дислокациями) могут контролировать кинетику многих физических процессов в твердых телах. Выяснение закономерностей диффузии в упругих полях дисклинаций необходимо при анализе сегрегации точечных дефектов, изучении совместной эволюции дисклинаций и примесей в тонких кристаллах (как известно, „усы" часто обладают запрещенной пентагональной симметрией, т.е. содержат дисклинации [2]), при расчете эффектов закрепления и стабилизации дисклинаций примесями.

По своей пространственной зависимости распределение упругих полей вблизи прямолинейной дисклинации существенно отличается от случая дислокаций, поскольку в зависимости от своего знака дисклинация притягивает точечные дефекты только одного сорта. Кроме того, упругое поле клиновой дисклинации не имеет зависимости от угловой координаты, что позволяет получать аналитические соотношения при решении диффузионных задач. На это обстоятельство впервые было указано в работах Любова и Власова [3–5], которые рассмотрели задачу о диффузии в поле оборванной дислокационной стенки [3]. Однако при решении данной задачи, эквивалентной по упругим полям дисклинационной, ими были использованы некорректные граничные и начальные условия. В настоящем сообщении рассматривается диффузия дилатационных точечных дефектов (ТД) в упругом поле клиновой дисклинации, расположенной в центре цилиндра радиуса R со свободной поверхностью. Учитывается генерация ТД и их уход на другие стоки.

Расчет концентрационных профилей собственных ТД проведен в случае их нестационарного неоднородного распределения вблизи дисклинации без учета рекомбинации разноименных ТД в объеме облучаемого материала. Тогда уравнение баланса для концентрации ТД $C(r,t)$ имеет вид:

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = g - \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(r,t) - Dk^2 C(r,t). \qquad (1)$$

Здесь g – скорость генерации ТД, D – коэффициент диффузии вакансий или межузельных атомов, k^2 – сумма сил сторонних стоков [6] (например, дислокационных петель и пор). Здесь

$$\vec{J}(r,t) = -D\left\{\vec{\nabla}C(r,t) + \frac{C(r,t)}{kT}\vec{\nabla}E(r)\right\} - \qquad (2)$$

плотность потока ТД к дисклинации, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, а $E(r)$ – энергия взаимодействия ТД с клиновой дисклинацией, которая (см., например, [1]) представима в виде:

$$E(r)=kT\alpha\left\{\ln\left(\frac{r}{R}\right)+\frac{1}{2}\right\},\quad \alpha=\frac{\Delta V}{kT}\cdot\frac{G\omega}{3\pi}\left(\frac{1+\nu}{1-\nu}\right).$$

В последних формулах ω – величина вектора Франка дисклинации, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, ΔV – локальное изменение объема вблизи ТД, которое может иметь разный знак в зависимости от сорта ТД.

При определении начального и граничных условий будем полагать, что исходная атмосфера ТД согласована с упругим полем клиновой дисклинации, а g и Dk^2 включаются в момент времени $t=0$. Все ТД, подошедшие к ядру дисклинации радиуса $r=r_0$, поглощаются ею, так что на поверхности цилиндра радиуса r_0 сохраняется стационарная равновесная концентрация ТД, причем зависимость $r_0(t)$ в задаче не учитывается. На внешней поверхности цилиндра ($r=R$) концентрация ТД также сохраняется и равна своему равновесному значению. В итоге начальное и граничные условия для уравнения баланса (1) представимы в виде:

$$C(r,0)=C^e e^{-E(r)/kT}=C^e\left(\frac{r\sqrt{e}}{R}\right)^{-\alpha},$$

$$C(r_0,t)=C_{r_0}=C^e\left(\frac{r_0\sqrt{e}}{R}\right)^{-\alpha},$$

$$C(R,t)=C_R=C^e\left(\sqrt{e}\right)^{-\alpha},$$

где C^e – термодинамически равновесная концентрация ТД в бездисклинационном материале.

Применяя к уравнению (1) преобразование Лапласа, находим его решение в обратном пространстве:

$$\tilde{C}(r,s)=\frac{C(r,0)+g/s}{D\beta}+\left(\frac{r_0}{r}\right)^{\alpha/2}\left(C_{r_0}-\frac{g}{Dk^2}\right)\frac{k^2}{\beta s}\cdot\frac{\Delta(\sqrt{\beta}r,\sqrt{\beta}R)}{\Delta(\sqrt{\beta}r_0,\sqrt{\beta}R)}+$$

$$+\left(\frac{R}{r}\right)^{\alpha/2}\left(C_R-\frac{g}{Dk^2}\right)\frac{k^2}{\beta s}\cdot\frac{\Delta(\sqrt{\beta}r_0,\sqrt{\beta}r)}{\Delta(\sqrt{\beta}r_0,\sqrt{\beta}R)}, \qquad (3)$$

где $\Delta(x,y)=\begin{vmatrix} I_{\frac{\alpha}{2}}(x) & I_{\frac{\alpha}{2}}(y) \\ K_{\frac{\alpha}{2}}(x) & K_{\frac{\alpha}{2}}(y)\end{vmatrix},$

$I_{\frac{\alpha}{2}}(x)$ и $K_{\frac{\alpha}{2}}(x)$ – модифицированные функции Бесселя, $\beta = k^2 + \frac{s}{D}$, а s – параметр преобразования Лапласа.

Зная распределение ТД в упругом поле дисклинации, можно найти в обратном пространстве плотность их потока на данный сток $\tilde{\vec{J}}(r_0, s)$ и эффективность поглощения ТД дисклинацией:

$$\tilde{K}(r_0, s) = 2\pi r_0 \left| \tilde{\vec{J}}(r_0, s) \right| . \qquad (4)$$

В силу своей громоздкости эти соотношения здесь не приводятся.

На начальных временах облучения (большие значения s) при анализе формулы (3) будем использовать асимптотические свойства функций Бесселя. Тогда плотность потока $\vec{J}(r_0, t)$ и эффективность поглощения $K(r_0, t)$ ТД клиновой дисклинацией определяются в прямом пространстве. Так, в частном случае $\alpha < 0$ (например, для взаимодействия вакансий с положительной дисклинацией) эффективность поглощения ТД представима в виде:

$$K(r_0, t) \simeq 2\pi D r_0 \left\{ \frac{\alpha C_{r_0}}{r_0}\left(1 - e^{-Dk^2 t}\right) + \left(\frac{g}{Dk^2} - C_{r_0}\right) k \Phi\left(k\sqrt{Dt}\right) \right\}, \qquad (5)$$

где $\Phi(x)$ – интеграл ошибок.

Для стационарного неоднородного распределения ТД в упругом поле дисклинации уравнение баланса (1) имеет точное аналитическое решение в прямом пространстве. Зная $C(r)$, которую можно получить из (3), делая обратное преобразование при $s \to 0$ (т.е. $t \to \infty$), определим эффективность поглощения ТД дисклинацией:

$$K(r_0) = 2\pi D r_0 \left| \left(C_{r_0} - \frac{g}{Dk^2}\right) k \frac{\Delta_1(kr_0, kR)}{\Delta(kr_0, kR)} - \right.$$

$$\left. - \left(\frac{R}{r_0}\right)^{\frac{\alpha}{2}} \cdot \left(C_R - \frac{g}{Dk^2}\right) k \frac{\Delta_\perp(kr_0, kr_0)}{\Delta(kr_0, kR)} + \frac{\alpha C_{r_0}}{r_0} \right| ,$$

где $\Delta_\perp(x, y) = \begin{vmatrix} I_{\frac{\alpha}{2}+1}(x) & I_{\frac{\alpha}{2}}(y) \\ -K_{\frac{\alpha}{2}+1}(x) & K_{\frac{\alpha}{2}}(y) \end{vmatrix} .$

В предельном случае отсутствия стоков в объеме материала ($k^2 = 0$) это соотношение упрощается:

$$K(r_0) = 2\pi g r_0^2 \left| \frac{1}{2+\alpha} \left(\frac{\alpha}{2} \; \frac{1 - R^2/r_0^2}{\left(\frac{r_0}{R}\right)^{\alpha} - 1} - 1 \right) \right| \qquad (6)$$

В качестве примера рассмотрим диффузию вакансий в упругом поле дисклинации в никеле. Считая, что $kT \simeq 1/20$ эВ, $\omega = \pi/100$ (это отвечает частичной дисклинации [1]), $|\Delta V G| \simeq 10$ эВ, $R \simeq$

$\simeq 10^{-6}$ м, $r_0 \simeq 3\cdot10^{-10}$ м, а характерные энергии миграции ε_v^m и образования ε_v^f вакансий примерно одинаковы [7] $\varepsilon_v^m \simeq \varepsilon_v^f \simeq 1.4$ эВ, из (6) найдем $\mathcal{K}_V(r_0) = (2/3)\cdot 10^8 g r_0^2$. Зная эффективность поглощения $\mathcal{K}_V(r_0)$ вакансий клиновой дисклинацией в стационарном режиме, можно рассчитать зависимость от времени радиуса R_p формирующихся на ее ядре пор:

$$\frac{R_p(t)}{r_0} \simeq \left(1 + \frac{10^8 g r_0^2}{2\pi\rho} t\right)^{1/3} \tag{7}$$

где ρ – линейная плотность пор. Из (7) следует, что при скоростях генерации ТД $g=10^{20}$ м$^{-3}$с$^{-1}$ и $\rho \simeq 10^8$ м$^{-1}$ пора достигает размера $\sim\rho^{-1}$ за время облучения $t \simeq 10^6$ с.

Заметим, что при оценке эффективности стока вакансий на дисклинацию в нестационарном режиме по формуле (5) получим слабую зависимость от параметра α, характеризующего взаимодействие ТД с дисклинацией. Это связано с тем, что приближение (5) работает либо для очень малых времен $t \sim \frac{r_0^2}{D}$ (когда дисклинация поглощает дефекты из близлежащего к ядру материала), либо для большой плотности и мощности сторонних стоков и времен $t > \frac{1}{Dk^2}$ (в этом случае до дисклинации доходит лишь небольшое число возникающих ТД, а большая их часть уходит на объемные стоки).

Таким образом, дисклинации могут, с одной стороны, являться центрами гетерогенного зарождения пор, а с другой стороны, служить эффективными стоками для точечных дефектов выбранного сорта, что означает наличие дисклинационного преференса.

Литература

[1] Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах, Л.: Наука, 1986. 224 с.

[2] De Witt R. – J. Phys. (C), 1972, v. 5, N 5, p. 528–534.

[3] Власов Н.М., Любов Б.Я. – ФММ, 1975, т. 40, № 6, с. 1162–1168.

[4] Любов Б.Я., Власов Н.М. – ФММ, 1979, т. 47, № 1, с. 140–157.

[5] Власов Н.М., Любов Б.Я. – ДАН СССР, 1981, т. 259, № 2, с. 348–351.

[6] Brailsford A.D., Bullough R. – J. Nucl. Mater., 1978, v. 69–70, N 1–2, p. 434–450.

[7] Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов в металлах, М.: Энергоатомиздат, 1983. 81 с.

Физико–технический
институт им. А.Ф. Иоффе
АН СССР, Ленинград

Поступило в Редакцию
26 апреля 1988 г.