

## Внутреннее трение при изменении формы малых включений

© Ю.Н. Андреев, Б.М. Даринский, В.А. Мошников<sup>†</sup>, Д.С. Сайко\*, Н.П. Ярославцев<sup>‡</sup>

Воронежский государственный технический университет,  
394026 Воронеж, Россия

<sup>†</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,  
197376 Санкт-Петербург, Россия

\*Воронежская государственная технологическая академия,  
394000 Воронеж, Россия

(Получена 9 декабря 1999 г. Принята к печати 21 декабря 1999 г.)

Произведена теоретическая оценка размеров микровключений второй фазы в твердотельной матрице, наличие которых характерно для полупроводниковых соединений  $A^{III}B^V$ ,  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{IV}B^{VI}$  и их производных. Получена рабочая формула, связывающая температурный сдвиг пика внутреннего трения, обусловленного изменением формы включений под действием знакопеременных упругих напряжений, с линейными размерами включений. Результаты подтверждаются данными по низкочастотному внутреннему трению в SnTe.

В работах [1–3] показано, что в материалах, содержащих легкоплавкие включения другой фазы, возникает специфический пик внутреннего трения (ВТ). К настоящему времени предложено несколько атомных механизмов, которые могут быть ответственны за возникновение этого пика. Общей чертой для всех механизмов является изменение формы полости (включения), возникающее вследствие упругой деформации матрицы. Процесс последующего необратимого изменения формы полости или включения может происходить по одному из следующих механизмов: 1) объемная самодиффузия вещества матрицы и включения; 2) поверхностная самодиффузия по границе раздела матрица–включение; 3) вязкое скольжение по границе раздела матрица–включение; 4) изменение формы матрицы и включения путем пластической деформации.

Все перечисленные механизмы были оценены для достаточно больших включений, на несколько порядков превышающих размер элементарной ячейки. Было показано, что эти механизмы приводят к появлению пика ВТ. Температурная зависимость ВТ, определяющая форму релаксационного пика, в предположении, что наиболее существенный вклад вносят диффузионные механизмы, имеет форму дебаевского пика. В то же время в температурной зависимости, полученной экспериментально для ряда легкоплавких включений, проявляется сильно выраженная асимметрия пика ВТ [4], наблюдающегося при температуре плавления включений. Данное обстоятельство свидетельствует в пользу предположения, что ведущими механизмами возникновения пика являются механизмы 3), 4) из перечисленных выше. Высота пика примерно соответствует относительной доле объема образца, занимаемого включениями.

В ряде работ температурная зависимость ВТ использовалась для прецизионного определения концентрации легкоплавких включений, способ защищен авторским свидетельством [5].

Актуальной проблемой является измерение концентрации относительно малых включений, размеры которых составляют  $10^2$ – $10^3$  постоянных решетки. Экспериментальные исследования образцов из бинарных соединений  $A^{IV}B^{VI}$  показали, что в случае малых включений пик ВТ смещается в сторону низких температур на  $\Delta T \approx 10^\circ\text{C}$  и оказывается более широким по сравнению с аналогичным пиком для образцов с большими включениями (рис. 1).

Цель настоящей работы — объяснение этих закономерностей, присущих материалам с включениями малых размеров.

Рассмотрим среду, состоящую из матрицы и включений, имеющих кубическую решетку, например GaAs–Ga. Естественно считать, что в состоянии термодинамического равновесия, которое достигается в материале в процессе его получения, направления кристаллографических осей для решеток матрицы и включения совпадают, что позволяет достигнуть минимума энергии границы раздела матрица–включение. Формы полости и включения должны в этих условиях иметь вид правильных многогранников, причем ориентация граней определяется минимумом поверхностной энергии границы раздела.

Для простоты дальнейших рассуждений будем считать форму полости кубической. Обозначим постоянные решетки матрицы и включения соответственно  $a$  и  $b$ . В общем случае константы  $a$  и  $b$  являются несоизмерными, т. е. при любых значениях целых чисел  $m$  и  $n$

$$\Delta = ma - nb \quad (1)$$

( $nb = l$  — длина ребра включения) не может равняться нулю. Материал включения и матрицы вблизи включения находятся в упруго-напряженном состоянии. Величина  $\Delta$ , а вместе с ней и упругая энергия будут достигать наименьших значений для спектра  $(m, n)$ , который определится несоизмерностью параметров  $a$  и  $b$ . Для этого спектра справедливо  $\Delta(m, n) \leq 0.5b$ . При этом  $\Delta$  может принимать положительные и отрицательные значения. В первом случае включение будет иметь упругие деформации растяжения, во втором — сжатия.

<sup>‡</sup> Факс: (0732) 163277

E-mail: kalinin@nsl.vstu.ac.ru

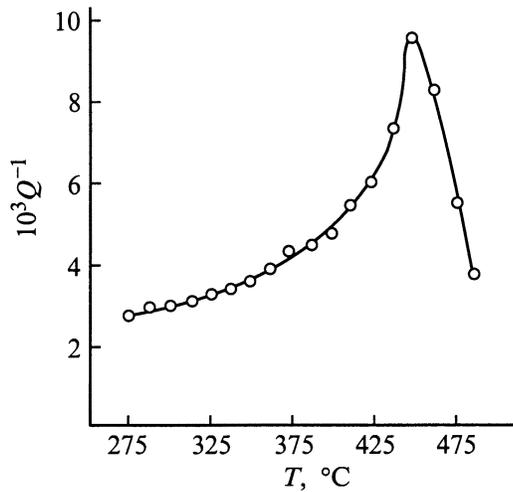


Рис. 1. Температурная зависимость внутреннего трения.

Из-за нелинейной зависимости энергии от деформации следует полагать, что второй случай маловероятен, так что небольшое число включений растянуто. При плавлении включений происходит увеличение их объема, что сопровождается изменением упругих напряжений. Если относительное изменение объема при плавлении вещества включения составляет  $\Delta V/V = \gamma \sim 10^{-2}$ , то наибольшее уменьшение упругой энергии в результате плавления будут иметь включения, размеры которых определяются из условия  $\gamma = \Delta/nb$ . Отсюда получаем оценку  $n = \Delta/\gamma b \sim 10^2$ . Таким образом, заметное смещение температуры плавления будет достигаться для относительно малых включений, имеющих размеры до нескольких сотен постоянных решеток.

Под действием внешних напряжений на границе, разделяющей матрицу и включение, возникают скальвающие напряжения  $\tau_i$ , определяемые выражением

$$\tau_i = \sigma_{ij}n_j - \sigma_{lm}n_l n_m n_i, \quad (2)$$

где  $\sigma_{ij}$  — тензор напряжений,  $n_i$  — нормаль к поверхности в данной точке границы раздела матрицы и включения. В результате скользяния на межфазной границе эта скальвающая компонента спадает до нуля. Время  $\tau$ , за которое происходит проскальзывание, определяет частоту пика ВТ, связанного с этим процессом, оно определяется эффективным коэффициентом вязкости  $\eta$  и упругим модулем  $G$  среды:  $\tau = \eta/G$ .

Резкое уменьшение коэффициента вязкости с ростом температуры происходит вблизи температуры плавления включения. Известно, что вначале происходит существенная перестройка атомного строения границы между поверхностями матрицы и включения, затем плавление. Это приводит к появлению асимметричного пика ВТ на температурной зависимости.

В настоящей работе ставится задача исследования влияния размеров легкоплавких включений на температурное положение пика ВТ.

При плавлении включения происходит увеличение его объема, что сопровождается снятием напряжения. По этой причине плавление включения, находящегося в напряженном состоянии, наступает при более низкой температуре. Смещение температуры плавления находим из условия равенства химических потенциалов жидкой ( $\varphi_1$ ) и твердой ( $\varphi_2$ ) фаз.

Полагая линейными зависимости  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  от температуры  $T$  вблизи точки фазового перехода, находим

$$\varphi_1 = \varphi_{10} - \alpha_1 kT, \quad \varphi_2 = \varphi_{20} - \alpha_2 kT. \quad (3)$$

Отсюда температура фазового перехода определяется равенством

$$(\varphi_{10} - \varphi_{20})/(\alpha_1 - \alpha_2) = kT. \quad (4)$$

Если вещество включения находится в условиях растяжения, то получим добавку к химическому потенциалу:

$$\varphi_2 \rightarrow \varphi_{20} + a^3 \varepsilon^2 G/2. \quad (5)$$

Отсюда получается смещение точки плавления:

$$k\Delta T = Ga^3 \varepsilon^2 / 2(\alpha_1 - \alpha_2). \quad (6)$$

Для оценки деформации  $\varepsilon$  следует принять во внимание соотношение между элементарными ячейками матрицы и включения. Для таких размеров, когда  $l \sim ma \sim nb$ , дополнительная деформация составляет  $\varepsilon \sim a/l$ .

Подставляя это значение в формулу для  $\Delta T$ , находим

$$\Delta T \sim (Ga^3/2k\Delta\alpha)(a/l)^2. \quad (7)$$

Полагая для оценки  $Ga^3 = 1$  эВ,  $a/l = 0.01$  и  $\alpha_1 - \alpha_2 = 0.3$ , что отвечает параметрам теллура, находим  $\Delta T \sim 2^\circ\text{C}$ . Экспериментально наблюдаемое смещение пика (см. рис. 1) составляет величину  $\sim 10^\circ\text{C}$  и, таким образом, возможно объяснение смещения пика ВТ наличием напряжений во включениях, возникающих вследствие несоизмерных постоянных решеток матрицы и включения.

Выражение (7) показывает, что с уменьшением линейных размеров включений смещение пика внутреннего трения в сторону низких температур возрастает. При наличии в образце достаточно большого количества малых включений этот эффект экспериментально обнаруживается и может служить удобным способом для оценки среднего размера легкоплавких включений и их количества в образце.

В заключение отметим, что рассмотренная картина возникновения напряжений вследствие трехмерной несоизмерности постоянных решеток матрицы и включения предполагает, что распределение по возможным значениям  $\Delta$  смещено в область положительных значений. Отсюда следует, что при наложении скальвающих напряжений возможны отрывы вещества от матрицы, что должно сопровождаться появлением амплитудной

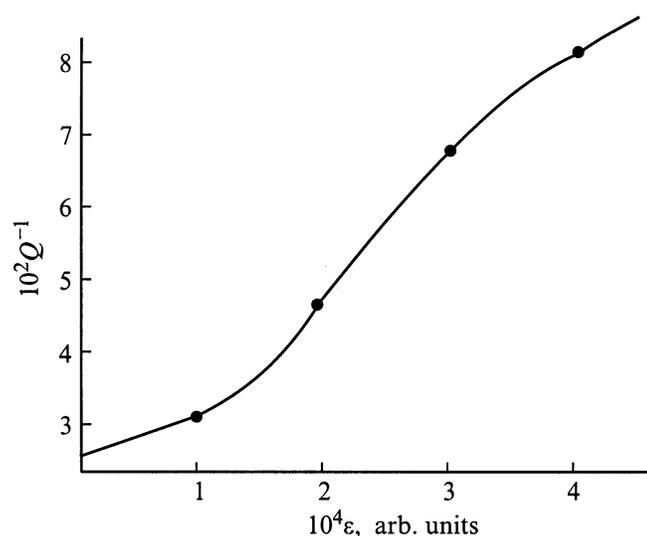


Рис. 2. Зависимость внутреннего трения от деформации.

зависимости ВТ. Такая зависимость действительно наблюдается в эксперименте (рис. 2).

Полученные результаты свидетельствуют об эффективности метода ВТ для определения конкретных параметров системы матрица–(включения другой фазы). Ранее было установлено [1–3], что по высоте пика ВТ можно оценивать интегральную характеристику среды — объемную концентрацию вещества включений. Результаты настоящей работы показывают, что по данным ВТ можно оценивать и средние размеры включений. Получать такую информацию другими методиками, такими как рентгеновский микроанализ или электронная микроскопия, практически невозможно.

## Список литературы

- [1] Б.М. Даринский, Ю.И. Левин, В.С. Постников, С.К. Турков. Физика и химия обраб. материалов, № 6, 46 (1967).
- [2] Б.М. Даринский, Ю.И. Левин, С.К. Турков. Физика и химия обраб. материалов, № 3, 51 (1968).
- [3] Б.М. Даринский, Н.П. Ярославцев. Высокочистые вещества, № 3, 80 (1990).
- [4] Ю.Н. Андреев, М.В. Бестаев, Д.Ц. Димитров, В.А. Мошников, Ю.М. Таиров, Н.П. Ярославцев. ФТП, **31** (7), 841 (1997).
- [5] В.И. Митрохин, Н.П. Ярославцев, С.И. Рембеза, Г.С. Песоцкий, Н.В. Измайлов. А.с. 105/42 СССР G01N11/16 (1985).

Редактор Л.В. Шаронова

## Internal friction and the shape change of minor inclusions

Yu.N. Andreev, B.M. Darinski, V.A. Moshnicov<sup>†</sup>,  
D.S. Saiko\*, N.P. Yaroslavtsev

Voronezh State Technical University,  
394026 Voronezh, Russia

<sup>†</sup>St. Petersburg State Electrical Engineering University,  
197376 St. Petersburg, Russia

\*Voronezh State Technological Academy,  
394000 Voronezh, Russia

**Abstract** A theoretical evaluation of the size of phase microinclusions the presence of which is characteristic of semiconductor compounds  $A^{III}B^V$ ,  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{IV}B^{VI}$  and their derivatives in a solid state matrix has been made. A formula connecting the temperature shift of the internal friction peak with the linear size of inclusions has been obtained. This peak is conditioned by the change of the inclusion shape due to the influence of elastic stresses of different signs. The results are confirmed by the data obtained on SnTe.