

Процессы формирования поверхностных структур в фольгах слоистых кристаллов

А.Ш.Кахраманов*, К.Г.Халилова, З.И.Бадалова, К.Ш.Кахраманов

Аннотация. При пластическом деформировании слоистых (неоднородно легированных монокристаллов Bi_2Te_3 обнаружено, что формирование линий и полос скольжения в них чувствительно к жесткости слоев. “Расщепление” полос на отдельные более узкие полосы скольжения свидетельствует о процессе повышенной локализации деформации в жестких слоях по сравнению с мягкими. На основе анализа этих процессов показана идентичность процессов формирования нанообъектов при конденсации тонких пленок и формирования межслоевых нанообъектов в слоистых кристаллах.

Key Words and Phrases: Ключевые слова: Локализация, функция Грина, тензорная плотность, рельеф Пайерлса, дислокации, Освальдовское созревание.

1. Введение

Проанализированы модели роста пленок из пара и раствора-расплава с учетом деталей процесса: распределения островков по размерам, коалесценции, ориентации островков, морфологической устойчивости и т.п. Рассматривается изотермическое и неизотермическое освальдовское созревание ансамблей многокомпонентных островков новой фазы, исследуются нелинейные явления при росте сплошных структур. Рассмотрена проблема управления процессом роста слоев новой фазы. [1] Рассмотрены элементарные процессы на поверхностях твердых тел: типы поверхностей твердых тел, адсорбция, десорбция и диффузия адатомов. Режимы роста тонких пленок. Механизмы роста зародышей новой фазы. Кинетика начальной стадии конденсации тонких пленок, теории конденсации при низких пересыщениях. Теория возмущений.

Кинетика поздней стадии конденсации тонких пленок: коалесценция кластеров, освальдовское созревание (ОС).

Тепловое созревание. Неизотермическое созревание: в многокомпонентных пленках, эволюция свойств растущих пленок на стадии ОС.

*Corresponding author.

В [2] обсуждается проблема теоретического описания эволюции дислокационного ансамбля в пластически деформируемом кристалле с учетом его реальной структуры. Формулируются кинетические уравнения для плотности дислокаций, включающие в себя процессы генерации дислокаций из источников, иммобилизации, размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций. С помощью уравнений проводится количественный анализ первых трех стадий кривых деформационного упрочнения кристаллов. Рассматриваются процессы самоорганизации дислокаций в дислокационном ансамбле, вызывающие локализацию деформации и образование в кристалле различных неоднородных дислокационных структур. Детально излагаются механизмы образования линий и полос скольжения, бездефектных (аннигиляционных) каналов при пластической деформации.

2. Основные соотношения. Кривые деформационного упрочнения кристаллов.

Даются уравнения эволюции плотности дислокаций, а также стадийность кривых упрочнения.

С микроскопической точки зрения пластическая деформация кристаллов является результатом движения линейных дефектов - дислокаций, а в более общем случае - дислокаций и дисклинаций. Дислокации являются границами областей незавершенного пластического сдвига, а дисклинации-незавершенного пластического поворота.

3. Основные уравнения

В случае чисто дислокационного ансамбля представлены следующие уравнения и соотношения:

для внешних σ_{ik}^{ext} и внутренних σ_{ik}^{in} напряжений

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x} = 0, \sigma_{ik} = \sigma_{ik}^{ext} + \sigma_{ik}^{in},$$

$$\sigma_{ik}^{in} = \int A_{iksp} (r' - r) \alpha_{sp} (r', t) dr', F_l = \theta_{lpq} \nu_p b_s \sigma_{qs}; \quad (1)$$

для тензорной плотности дислокаций a_{sp} и ее потока J_{lp}

$$\frac{\partial \alpha_{sp}}{\partial t} + \theta_{sql} \frac{\partial J_{lp}}{\partial x_q} = 0, \frac{\partial \alpha_{sp}}{\partial x_p} = 0, J_{ip} = \theta_{lqs} \alpha_{ps} u_q; \quad (2)$$

для деформаций и скоростей деформаций (упругих и пластических)

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ik}^{el} + \varepsilon_{ik}^{pl}, \varepsilon_{ik}^{el} = \int B_{iksp} (r' - r) \alpha_{sp} (r', t) dr',$$

$$\dot{\varepsilon}_{ik}^{pl} = \int \dot{\varepsilon}_{ik}^{pl} dt, \dot{\varepsilon}_{ik} = \dot{\varepsilon}_{ik}^{el} + \dot{\varepsilon}_{ik}^{pl},$$

$$\dot{\varepsilon}_{ik}^{el} = \int C_{ikml} J_{ml} dr', \dot{\varepsilon}_{ik}^{pl} = \frac{1}{2} (J_{ik} + J_{ki}). \quad (3)$$

В формулах (2) – (3) $A_{ikps} = -c_{ikmn} \theta_{njs} c_{pjql} G_{qm,l}$, $B_{iksp} = [\theta_{sim} c_{lqmp} G_{qk,l}]_{[ik]}$, $B_{iksp} = [\theta_{sim} c_{lqmp} G_{qk,l}]_{[ik]}$, $C_{ikml} = -c_{njml} [G_{ij,nk}]_{[ik]}$, $G_{qm}(r'-r)$ - тензорная функция Грина статической теории упругости кристалла, c_{ikmn} - тензор упругих постоянных, e_{njs} - перестановочный тензор, F_l - сила, действующая на дислокацию со стороны внешних и внутренних далекодействующих напряжений, ν - орт касательной к линии дислокации, u - скорость дислокации, $a_{sp} = \sum a \alpha_{sp}^a$ - тензорная плотность дислокаций с различными векторами Бюргера.

$$n_i (\sigma_{ik}^{ext} + \sigma_{ik}^{in}) b_k = b \sigma^{(f)}, \sigma^{(f)} = \sigma^*(u, T) + \sigma_f + \sigma_\mu \quad (4)$$

В результате уравнение равновесия приложенных к дислокации с вектором Бюргера b^a напряжений имеет вид (индекс a опускаем)

Здесь $n = \nu \times \xi$ - орт нормали к плоскости скольжения дислокации (ξ - орт нормали в направлении движения дислокации), $b = |b|$. В напряжение трения $\sigma^{(f)}$ вносят вклад эффективное напряжение σ^* , зависящее от скорости дислокации u и температуры T , а термическая компонента напряжений трения σ_f вследствие взаимодействия дислокации с точечными препятствиями или рельефом Пайерлса, деформационное (дислокационное) упрочнение кристалла σ_μ , зависящее от скалярной плотности дислокаций.

Если известно распределение плотности дислокаций $\alpha(r, t)$, то с помощью уравнения движения (4), может быть определен поток дислокаций $J(r, t)$ и с помощью уравнения (1) и (3) найдено распределение в кристалле напряжений, деформаций и скоростей деформаций.

4. Деформационное упрочнение кристаллов

Взаимодействие дислокаций друг с другом и определяет процесс деформационного упрочнения кристалла, т.е. повышение сопротивления кристалла пластическому деформированию по мере роста степени пластической деформации (рис. 1).

В настоящее время большинство исследователей полагает, что на первой стадии упрочнения (стадии легкого скольжения) доминирующим механизмом упрочнения является взаимодействие подвижных дислокаций с краевыми диполями, а на второй стадии - их взаимодействие с дислокациями вторичных систем скольжения (с дислокациями "леса"). Третья стадия является стадией динамического отдыха и связана с аннигиляцией винтовых дислокаций [1].

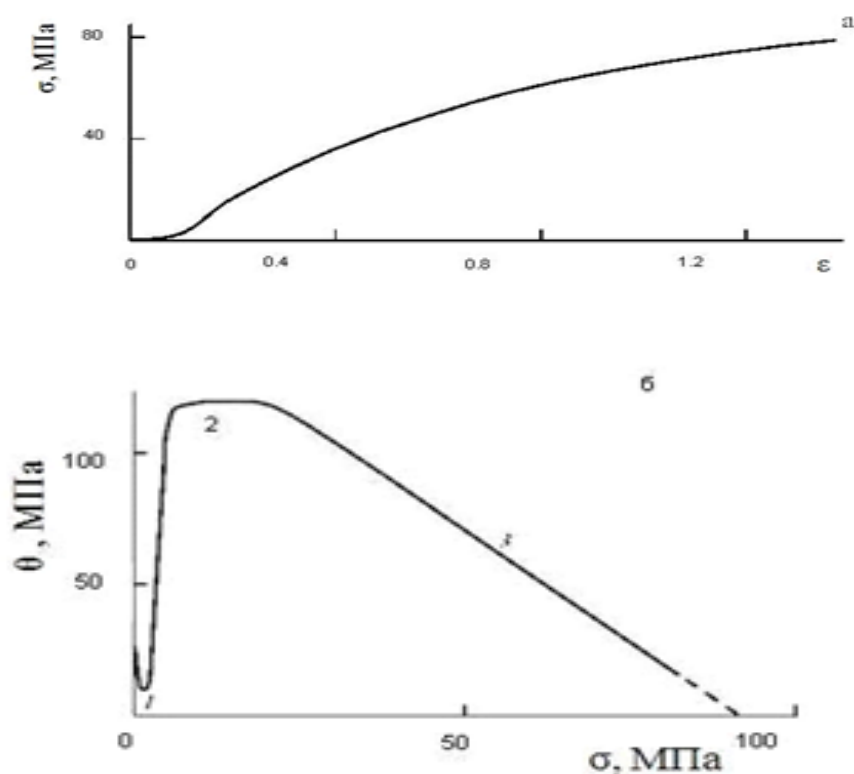


Рис. 1. Кривая деформационного упрочнения $\sigma(\epsilon)$ монокристалла меди при 295 К [2] (а) и зависимость коэффициента деформационного упрочнения меди θ от напряжения течения σ (б). Цифры у кривых представляют стадии упрочнения.

В результате интенсивных исследований были обнаружены четвертая и пятая стадии упрочнения, однако механизм которых является сейчас предметом дискуссии [1].

Процесс пластической деформации кристалла - это непрерывный процесс эволюции в нем дислокационного ансамбля и переход от одной стадии к другой происходит достаточно плавно по мере роста степени пластической деформации.

Одной из характерных черт пластической деформации кристаллов является ее локализация в виде линий и полос скольжения. Сама дискретность скольжения и его развитие вдоль определенных кристаллографических плоскостей не вызывает удивления и находит естественное объяснение в рамках дислокационного механизма.

Рисунок 2 демонстрирует полученное методом реплик распределение линий скольжения по расстояниям Λ между ними в конце первой стадии упрочнения в кристалле сплава Cu-8ат.%Mn [209]. Аналогичного вида гистограммы были получены при разных увеличениях в сплаве Ni₃Fe с помощью оптического и электронного (метод ре-

плик) микроскопов. Как видно из рис.2, расстояния между линиями распределяются с некоторой вероятностью вокруг среднего значения. Это среднее значение не остается постоянным, а зависит от состояния кристалла и деформации (напряжения).

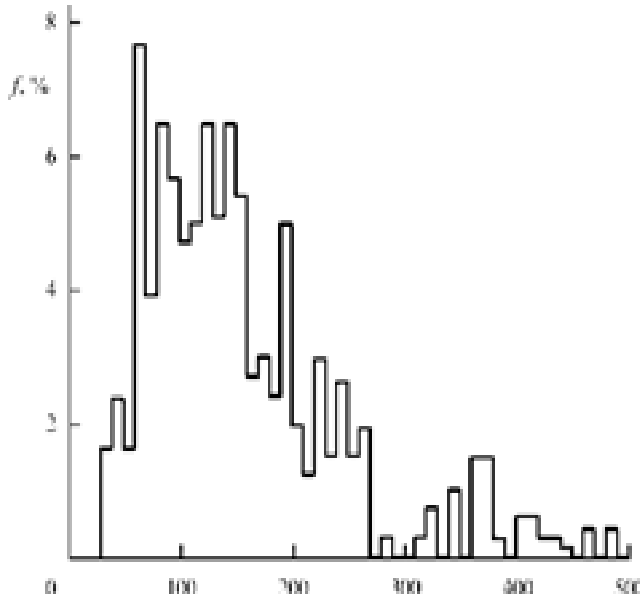


Рис. 2. Гистограмма распределения расстояний между линиями скольжения Λ в монокристаллах сплава Cu-8ат.%Mn в конце первой стадии упрочнения [2].

В настоящее время обсуждается несколько возможных механизмов возникновения пространственно упорядоченной системы линий скольжения. Линии скольжения также возникают в результате последовательной активации дислокационных источников, ближайших к данной плоскости скольжения, полями внутренних напряжений от движущихся групп дислокаций одного знака.

Среднее расстояние между линиями скольжения Λ должно зависеть от характерного масштаба поля внутренних напряжений, а распределение линий скольжения по расстояниям определяться распределением по расстояниям дислокационных источников. Поскольку, как показывает опыт среднее расстояние Λ в зависимости от масштаба наблюдения может изменяться в широких пределах (от 10 нм до 100 мкм), то, например, при $\Lambda = 10 - 100$ нм плотность дислокационных источников в виде сетки Франка должна быть порядка Λ^{-3} , а плотность ростовых дислокаций $\rho_0 \sim \Lambda^{-2} \approx 10^0 - 10^1$ см $^{-2}$. Эта плотность на несколько порядков выше плотности ростовых дислокаций в реальных кристаллах ($10^4 - 10^8$ см $^{-2}$).

Эстафетный механизм образования линий скольжения обусловлен последовательной активацией поверхностных дислокационных источников полями внутренних напряжений от выходящих на поверхность групп одноименных дислокаций и образующейся при таком выходе ступеньки на поверхности, являющейся геометрическим концентратором напряжений.

Имеется несколько уровней (масштабов) скольжения. Первый из них - это уровень элементарного скольжения, связанного с механизмом ДПС, с масштабом $h_o = 10 - 10^2$

нм. Следующий уровень - это уровень критических флуктуаций плотности дислокаций: $y^{cr} \approx 10h_0 = 0,1 - 1$ мкм. Наконец, третий уровень - это уровень линий скольжения, наблюдаемых в оптический микроскоп: $\Lambda_y \approx 50h_0 = 0,5 - 5$ мкм. На каждом из уровней масштаб изменяется с напряжением в соответствии с законом $\Lambda \propto \sigma^{-1}$, т.е. для деформационных структур выполняется закон подобия.

Применение сканирующего туннельного микроскопа для исследования структур линий скольжения на поверхности деформированных кристаллов [2] открывает для количественного анализа масштабный уровень 1-10 нм. Первые полученные здесь результаты указывают на дискретность деформации не только в поперечном к плоскости скольжения дислокаций направлении, но и в самих плоскостях скольжения [1].

5. Постановка задачи. Полосы скольжения

Другим характерным явлением на начальной стадии деформации кристаллов является образование и расширение полос скольжения [2]. Стационарное движение фронта размножения дислокаций свидетельствует о коррелированном характере развития пластической деформации в поперечном к плоскости скольжения дислокаций направлении. На движение фронта могут оказывать влияние рассмотренные выше механизмы образования линий скольжения [2-3] в результате действия внутренних напряжений от скоплений дислокаций одного знака или концентратора напряжений в виде ступеньки на поверхности кристалла при выходе на нее линии скольжения. С действием этих напряжений может быть связан дрейфовый поток дислокаций $j_y = \rho_m u_y$ в поперечном к плоскости скольжения дислокаций направлении.

Еще одно обстоятельство, которое следует отметить, это возможность изменения (увеличения) числа полос скольжения в процессе пластической деформации в результате возникновения новых полос или размножения (ветвления) существующих.

Как показывают электронно-микроскопические исследования, при пластической деформации кристаллов на второй и третьей стадиях деформационного упрочнения вместо слоистых дислокационных структур, характерных для первой стадии упрочнения, формируются двумерные (решетчатые) и трехмерные (ячеистые) дислокационные структуры. Образование таких структур связано с действием двух или более систем скольжения.

Изложенное подтверждается процессом роста и морфологией поверхности слоистых кристаллов на примере тонких фольг Sb_2Te_3 и Bi_2Te_3 . На рис. 3, на основании результатов ряда экспериментальных и теоретических работ, схематически показаны линейные и плоские дефекты кристаллической структуры.

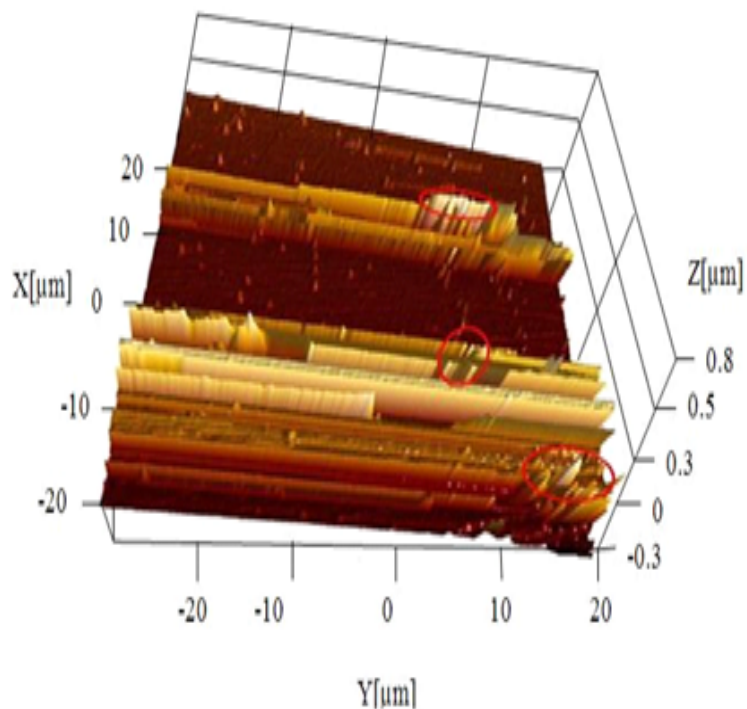


Рис.3. Экспериментальная форма полосы скольжения на поверхности (0001) Bi_2Te_3 . Кругами изображены дефектные места полос скольжения.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики - Грант No. **EİF/MQM/Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/16/1**

Список литературы

- [1] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Процессы конденсации тонких пленок, Успехи Физических Наук, 1998 г, том 168, No. 10, с.1083-1116.
- [2] Г.А. Малыгин, Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов, Успехи Физических Наук, 1999 г, том 169, No. 9, с. 978-1011.
- [3] Basinski S J, Basinski Z S, in Dislocation in Solids Vol. 4 (Ed. F R N Nabarro) (Amsterdam: North-Holland, 1979) p. 263

А.Ш.Кахраманов
Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан
Email: adilqakhramanov@gmail.com

К.Г.Халилова

Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан

З.И.Бадалова *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

К.Ш.Кахраманов *Институт физики НАНА, Баку, Азербайджан*

Received 15 May 2018

Accepted 20 February 2019