УДК 539.219.3

ОПИСАНИЕ РЕЛАКСАЦИОННОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ ВАКАНСИЙ, СОЗДАННЫХ ОБЛУЧЕНИЕМ

Г. С. Жданов, К. П. Гуров, Т. В. Крюкова

(кафедра физики твердого тела)

При воздействии на сплав малой дозы облучения создается система с повышенной концентрацией неравновесных вакансий. В этом случае теория Даркена взаимной диффузии неприменима, поэтому надо пользоваться уравнениями, выведенными Назаровым и Гуровым [1—3] с помощью формализма дырочного газа [4] с учетом неравновесных вакансий:

$$c_t^A = cAc_{xx}^A + cc^A A_{xx} + 2cA_x c_x^A - Ac^A c_{xx};$$

$$c_t = (Ac^A + Bc^B)\,c_{xx} - cAc_{xx}^A - cBc_{xx}^B - cc^A A_{xx} - cc^B B_{xx} - 2cA_x c_x^A - 2cB_x c_x^B. \qquad (1)$$

Здесь c^A, c^B и c — концентрации компонентов A, B и вакансий соответственно, величины A и B прямо пропорциональны вероятностям обмена атомов A и B с вакансией в единицу времени, c_t, c_x, c_{xx} — первые и вторые производные по t и x.

Ниже мы рассмотрим эволюцию начального распределения неравновесных вакансий вида

$$\Delta c(x,\ 0) = c_v e^{-\alpha x} \qquad (2)$$

в полубесконечном образце, представляющем собой пространственно-однородный сплав с ОЦК решеткой.

Произведем линеаризацию уравнений (1):

$$c^A(x,\ t) = c_0^A + u^A(x,\ t);$$

$$c(x,\ t) = c_v^e + v(x,\ t),$$

с $v/c \ll 1$ и $u^A/c^A \ll 1$, где $u^A(x,\ t)$ и $v(x,\ t)$ — концентрации избыточных атомов и неравновесных вакансий. Отметим, что

$$c^A + c^B + c = 1; \quad u^A + u^B + v = 0. \qquad (3)$$

Окончательно получаем

$$u_t^A - D_A u_{xx}^A = -Ac_0^A u_{xx}^A; \quad v_t - Dv_{xx} = -Du_{xx}^A - D_B u_{xx}^B, \qquad (4)$$

где $D = c^A A + c^B B$, $D_A = c(A + c^A \partial A/\partial c^A)$, D^B определяется аналогично.

Если ввести новые переменные

$$w^{(1)} = u^A + c^A \frac{A}{D} v; \ w^{(2)} = v - \frac{D_A - D_B}{D} u^A, \qquad (5)$$

то из (4) следует, что

$$w_t^{(1)} = D^{(1)} w_{xx}^{(1)}, \quad w_t^{(2)} = D^{(2)} w_{xx}^{(2)}, \qquad (6)$$

где константа $D^{(1)} = c\dfrac{AB}{D} g_{AB}$ (термодинамический множитель $g_{AB} = 1 + c^A c^B \times \left(\dfrac{\partial \ln A}{\partial c^A} + \dfrac{\partial \ln B}{\partial c^B}\right)$ имеет смысл коэффициента взаимной диффузии, а $D^{(2)} = D + D_A + D_B - D^{(1)}$ описывает быструю подстройку вакансионной подсистемы (см. [5]).

Начальные условия для $w^{(1)}$, $w^{(2)}$ следуют из (2):

$$w^{(1)}(x,\ 0) = u^A(x,\ 0) + \frac{c_A A}{D} c_v e^{-\alpha x},$$
$$w^{(2)}(x,\ 0) = c_v e^{-\alpha x} - \frac{D_A - D_B}{D} u^A(x,\ 0). \qquad (7)$$

Граничные условия

$$w_x^{(1)}(0,\ t)=0,$$
$$w^{(2)}(0,\ t)+\frac{D_A-D_B}{D}\,w^{(1)}(0,\ t)=0. \qquad (8)$$

Первое обусловлено неподвижностью границы образца вследствие того, что на нее выходят не только вакансии, но и межузельные атомы. Второе следует из того, что поверхность образца является стоком вакансий бесконечной мощности, так что $v(0,\ t)=0$.

Используя известное решение [6] для (6), с учетом (5), (7), (8), получаем, что

$$u^A(x,t)=\frac{1}{2\sqrt{\pi D^{(1)}t}}\int_0^\infty F_+^{(1)}\left[u^A(\xi,0)+\frac{c^A A}{D}c_v e^{-\alpha\xi}\right]d\xi-$$
$$-\frac{c^A A}{D}\,\frac{c_v}{2\sqrt{\pi D^{(2)}t}}\int_0^\infty F_-^{(2)}e^{-\alpha\xi}\,d\xi;$$

$$v(x,t)=\frac{1}{2\sqrt{\pi D^{(2)}t}}\int_0^\infty F_-^{(2)}\left[c_v e^{-\alpha\xi}-\frac{D_A-D_B}{D}u^A(\xi,0)\right]d\xi-$$
$$-\frac{x(D_A-D_B)}{2\pi D\sqrt{D^{(1)}D^{(2)}}}\int_0^t\frac{1}{\sqrt{\tau(t-\tau)^3}}\exp\left[-\frac{x^2}{4D^{(2)}(t-\tau)}\right]\times$$
$$\times\int_0^\infty\exp\left[-\frac{\xi^2}{4D^{(1)}\tau}\right]\left[u^A(\xi,0)+\frac{c^A A}{D}c_v e^{-\alpha\xi}\right]d\xi d\tau+$$
$$+\frac{D_A-D_B}{D}\,\frac{1}{2\sqrt{\pi D^{(1)}t}}\int_0^\infty F_-^{(1)}u^A(\xi,0)\,d\xi,$$

где

$$F_\pm^{(i)}=\exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4D^{(i)}t}\right]\pm\exp\left[-\frac{(x+\xi)^2}{4D^{(i)}t}\right].$$

Для графического представления решения рассмотрим два частных случая: $D_A\approx D_B$ и $D_A\gg D_B$ — и зададим начальное распределение $u^{(A)}(x,\ 0)$ в явном виде. Учитывая (2) и (3), можно положить

$$u^A(x,0)=-c_A c_v e^{-\alpha x},\ \ u^B(x,0)=-c_B c_v e^{-\alpha x}.$$

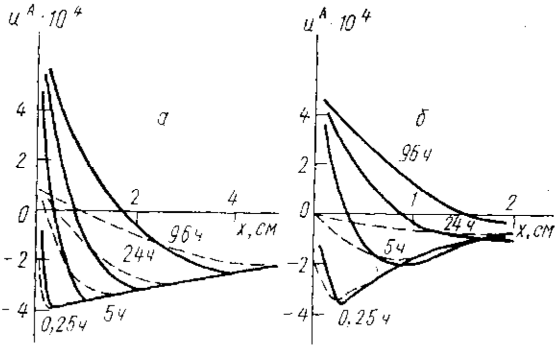
Примем далее, что $c^A=c^B=0{,}5$; $c_v{}^e=10^{-4}$, $c_v=10^{-3}$, что согласуется с экспериментальными данными.

Значения коэффициента взаимной диффузии колеблются обычно в пределах 10^{-11}—10^{-14} м²/с, так что возьмем $D^{(1)}=10^{-12}$ м²/с.

На рисунке показана эволюция кривых распределения отклонения от равновесного значения концентрации атомов сорта A $u^A(x,\ t)$ для $\alpha=10$ и 100 м$^{-1}$ и для а) $D_A\approx D_B=10^{-13}$ м²/с, $D^{(2)}\approx D=10^{-9}$ м²/с; б) $D_A\gg D_B$, $D_A=10^{-13}$ м²/с, $D=5\times\times10^{-10}$ м²/с, $D^{(2)}\approx D=5\cdot10^{-10}$ м²/с.

Для распределения избыточных вакансий и при $D_A\approx D_B$, и при $D_A\gg D_B$ характерно понижение с течением времени максимумов распределения и смещение их в глубь образца вследствие бесконечной мощности стока вакансий на границе.

Как видно из графиков, чем меньше α в формуле (2), тем дольше сохраняется перепад концентраций. При $D_A\approx D_B$ первоначальный максимум распределения вакансий равномерно заполняется атомами обоих сортов. Наблюдается релаксация вакансий в чистом виде. При $D_A\gg D_B$ максимум распределения вакансий заполняют в основном атомы сорта A, обогащая собой приповерхностный слой. Вследствие этого в первоначально однородном сплаве возникают градиенты концентраций атомов обоих сортов и начинается процесс взаимной диффузии, который затормаживает релаксацию системы к равновесному распределению. Релаксация неравновесных вакансий, более быстрая, чем характерный масштаб времени взаимной диффузии, приводит к тому, что в конечном состоянии образуется поверхностный слой, обогащенный одним из компонентов бинарного сплава. Этот результат имеет значение для практики как способ регулирования состава поверхностного слоя.



Распределение избыточной концентрации атомов сорта A по глубине в зависимости от времени при $\alpha=10$ (*а*) и 100 м$^{-1}$ (*б*), $D_A \gg D_B$ (сплошные кривые) и $D_A \approx D_B$ (пунктирные)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Назаров А. В., Гуров К. П. // ФММ. 1972. **34**. С. 936—941. [2] Назаров А. В., Гуров К. П. // ФММ. 1974. **37**. С. 497—503. [3] Назаров А. В., Гуров К. П. // ФММ. 1974. **38**. С. 486—492. [4] Гуров К. П. Основания кинетической теории. М., 1966. [5] Гуров К. П., Гусак А. М. // ФММ. 1981. **52**. С. 603—611. [6] Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М., 1966.

Поступила в редакцию
03.10.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 5

УДК 548.732

РАЗВИТИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПРИНЦИПОВ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В НЕПРЕРЫВНО-СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛАХ

А. В. Колпаков, В. И. Пунегов

(кафедра физики твердого тела)

В настоящее время широко используется рентгенодифракционный метод исследования непрерывно-слоистых кристаллов, под которыми понимают объекты с плавно меняющимся периодом кристаллической решетки по толщине образца. Примерами таких кристаллов могут служить неоднородные эпитаксиальные пленки, ионно-имплантированные и диффузионные приповерхностные слои. Для решения обратной задачи восстановления строения искаженных приповерхностных слоев по рентгенодифракционным данным необходимо детальное физическое понимание процесса дифракции на такого рода объектах.

В данной работе на основе общих оптических принципов дифракции дана физическая интерпретация процесса рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах с линейным изменением периода решетки (ЛИПР).

Согласно развитой в работах [1, 2] динамической теории дифракции рентгеновских лучей в кристалле произвольной толщины l с ЛИПР характер дифракции определяется отношением l_1/l_{ext}, где l_{ext} — длина первичной экстинкции, а $l_1 = a^{3/2}(\Delta a n)^{-1/2}$ — новый характерный параметр, определяющий толщину слоя, в котором рассеянные на разной глубине рентгеновские волны из-за линейного изменения периода решетки a по толщине на величину Δa получают монотонно нарастающий от 0 до π фазовый сдвиг; n — порядок дифракционного отражения.

Величина отношения l_1/l_{ext} соответствует различным предельным случаям дифракции [2]: $l_1/l_{\text{ext}} \to \infty$ — идеальный кристалл; $l_1/l_{\text{ext}} \gg 1$ — слабые искажения (эйкональное приближение); $l_1/l_{\text{ext}} \sim 1$ — сильно искаженный кристалл. Кинематическая