

циклическом нагружении сопровождается образованием мартенситной фазы, закономерности формирования которой во многом определяют усталостные свойства.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МНТЦ № 2398, Проекта РАН №8.16. Авторы выражают признательность профессору Валиеву Р.З. за предоставленные материалы для исследований*

УДК 534.014.1

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР АТОМА ПРИМЕСИ В ПОЛЕ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ

Гашевский В. А.

*Университет Франциско Хосе де Кальдас, Богота, Колумбия*  
[vgachevs@uniandes.edu.co](mailto:vgachevs@uniandes.edu.co)

### Аннотация

Выполнена оценка энергетических уровней атома примеси в поле упругих напряжений краевой дислокации на основе градиентной теории дислокаций в приближении двумерного гармонического осциллятора. Приведены численные результаты для атома бора в кристалле кремния.

### Введение

Градиентная теория упругости устранила сингулярность упругих напряжений на линии дислокаций, существовавшую в классической континуальной теории упругости [1] и изменила представление о виде потенциала взаимодействия атома примеси с краевой дислокацией. В представляемой работе исследуется влияние упругих напряжений краевой дислокации на энергетический спектр точечного дефекта с точки зрения градиентной теории в квазиклассическом приближении двумерного гармонического осциллятора.

### Постановка задачи

Рассмотрим прямолинейную краевую дислокацию, линия которой проходит через начало декартовой системы координат и совпадает с осью Z, а экстраллюксность при этом совпадает с положительной полуплоскостью YZ. Безразмерный потенциал взаимодействия краевой дислокации с атомом примеси согласно градиентной теории записывается в виде [2]

$$V = \left[ -\frac{\sqrt{c}}{r} + K_1 \left( \frac{r}{\sqrt{c}} \right) \right] \sin \theta, \quad (1)$$

где  $\beta = \frac{\mu b(1+\nu)\delta v}{3\pi(1-\nu)}$ ,  $\mu$  – модуль сдвига,  $b$  – модуль вектора Бюргерса,  $\nu$  – отношение Пуассона,  $\delta v$  – изменение объема при введении атома примеси,  $K_1$  – модифицированная

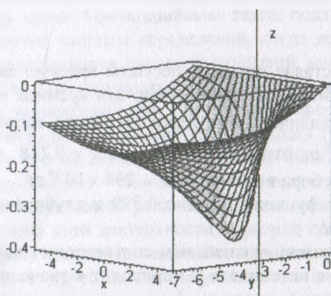


Рис. 1. Безразмерный потенциал  $V$  взаимодействия атома примеси с краевой дислокацией.

функция Бесселя второго рода,  $\sqrt{c} = \frac{a}{4}$  и

$a$  – постоянная решетки,  $r$  и  $\theta$  – координаты полярной системы в плоскости  $XY$  с началом, лежащим в точке  $(0,0)$  декартовой системы, упомянутой ранее.

При введении в материал атома примеси внедрения объем кристалла увеличивается и потенциал (1) соответствует притяжению атома примеси к области с положительной дилатацией. На рис. 1 отобрана функция безразмерного потенциала  $V$ . Цель данной работы заключена в оценке уровней энергии атома примеси в поле упругих напряжений краевой дислокации.

### Приближение гармонического осциллятора

Если атом примеси расположен непосредственно напротив эстреплоскости краевой дислокации, минимум функции  $V = -0.399$  находится в точке  $(0, y_0^*)$ , где безразмерная координата равна  $y_0^* = \frac{r_0}{\sqrt{c}} - 1.11$  и  $r_0$  – расстояние между положением равновесия атома и дислокацией. Аппроксимируем функцию  $V$  вблизи ее минимума безразмерным потенциалом двумерного анизотропного гармонического осциллятора  $\frac{1}{2} k_x^* (x^*)^2 + \frac{1}{2} k_y^* (y^* - y_0^*)^2 - 0.399$  где  $x^*$  и  $y^*$  – безразмерные пространственные координаты декартовой системы, а  $k_x^*$  и  $k_y^*$  – безразмерные «константы упругости»

Собственные частоты системы  $\omega_x$  и  $\omega_y$  оцениваются формулой

$$\omega_{x,y} = \sqrt{\frac{k_{x,y}}{m}} \quad (2)$$

где  $m$  – масса атома примеси, а  $k_x$  and  $k_y$  соответствуют безразмерным константам  $k_x^*$  и  $k_y^*$ .

Стационарные состояния системы соответствуют периодическим «траекториям» волнового пакета, когда

$$\frac{\omega_x}{\omega_y} = \frac{p}{q} \quad (3)$$

где  $p$  и  $q$  принимают целочисленные значения. В этом случае классическое движение имеет периодический характер, а волновой пакет воспроизводит фигуры Лиссажу. Уровни энергии рассчитываются по формуле

$$E_{m,n} = E_m + E_n \quad (4)$$

и

$$E_l = \left( l + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad l = x, y; \quad l = m, n \quad (5)$$

### Численные оценки

Энергетические уровни атома бора в кристалле кремния, несущем краевую дислокацию, оценены при следующих численных значениях параметров: для кремния модуль сдвига  $\mu = 6.81 \times 10^{10}$  Па; постоянная кристаллической решетки  $a$  и модуль вектора Бюргерса  $b$  равны друг другу  $a = b = 3.84 \times 10^{-10}$  м; отношение Пуассона  $\nu = 0.218$ ; изменение объема, производимое введением атома бора в кремний  $\delta v = .294 \times 10^{-28}$  м<sup>3</sup>.

Максимальное значение абсолютной величины функции  $V$  равно 0.399 и глубина потенциальной ямы оценивается значением 3.30 eV.

В предположении, что максимальная ширина потенциальной ямы соответствует параметру кристаллической решетки, аппроксимация потенциала (1) приводит к значениям «упругих» постоянных  $k_x = 57.6 \text{ Nm}^{-1}$  и  $k_y = 7.15 \text{ Nm}^{-1}$ , при этом частоты

$\omega_x = 0.566 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  и  $\omega_y = 0.200 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ .  $\frac{\omega_x}{\omega_y} \approx \frac{99}{35}$  Энергия основного состояния

$E_{0,0} = E_{0x} + E_{0y} = 0.117 \text{ eV} + 0.0413 \text{ eV} = 0.158 \text{ eV}$  и состояние  $E_{01} = 0.241 \text{ eV}$ . Максимальное значение энергии «x-состояний»  $E_{13,0} = 3.21 \text{ eV}$  и для «y-состояний»  $E_{38,0} = 3.23 \text{ eV}$ .

### Выводы

Приведенные результаты позволяют предположить возможность излучения фотона атомом примеси в поле упругих напряжений краевой дислокации при смене квантовых состояний.

### Список литературы

1. Gutkin M. Yu., Aipantis E.C. *Phys. Stat. Sol.* **214**, 245 (1999)
2. Власов Н.М., ФТТ, **43**, 1999 (2001)

### УДК 539.3

## ДИНАМИКА СТРУКТУРНОСТИ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ НА МЕЗОУРОВНЕ

Осташев В. В., Шевченко О. Д.

Псковский педагогический институт им. С.М.Кирова Псков, Россия

### 1. Общие положения

Известно, что неоднородность микропластических деформаций в поликристаллических материалах и их осциллирующий характер является общей чертой кинетики микропластических деформаций на мезоуровне. Спектральный анализ кривых микропластических деформаций позволяет дать математическое описание энергетических