

## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПОЛЯ, СОЗДАВАЕМЫЕ ДВОЙНИКОВЫМИ ДЕФЕКТАМИ

В.А. Тялина<sup>1</sup>, С.В. Мищенко<sup>1</sup>, Ю.И. Тялин<sup>2</sup>

*Кафедра «Управление качеством и сертификация», ФГБОУ ВПО «ТГТУ» (1);  
vtyalina@mail.ru; кафедра общей физики, ФГБОУ ВПО «Тамбовский  
государственный университет им. Г.Р. Державина» (2)*

**Ключевые слова и фразы:** двойник; двойникующая дислокация; заряженная дислокация; электрическое поле.

**Аннотация:** Определена напряженность электрического поля, создаваемого двойниковой границей в кристаллах с заряженными двойникующими дислокациями.

В ряде ионных и полупроводниковых кристаллов дислокации являются заряженными. Причем, в полупроводниковых материалах типа  $A_2B_6$  электрическим зарядом обладают как полные, так и частичные двойникующие дислокации [1]. Плотности дислокационных зарядов могут быть достаточно велики и достигать долей элементарного заряда  $e$  на параметр решетки. Это обстоятельство приводит к дополнительному электростатическому взаимодействию между дислокациями, а также к заметной концентрации не только упругих, но и электрических полей в зонах локальной деформации [2]. Последние могут быть ответственны за различного рода механоэлектрические процессы при пластической деформации кристаллов. Приведем расчет электрических полей, создаваемых в кристалле с заряженными двойникующими дислокациями заторможенным и свободно растущим двойниками.

**Заторможенный двойник.** Известно, что границы двойников представляют собой ступенчатые скопления двойникующих дислокаций [3]. Поэтому в общем случае задача сводится к численному расчету равновесной конфигурации двойника и суммированию электрических полей отдельных дислокаций. При этом возможно использование нескольких дислокационных моделей двойников [4]. Самой простой и общей из них является одиночная двойниковая граница, в которой все дислокации лежат по одну сторону от плоскости движения головной дислокации (рис. 1). В этом случае уравнения равновесия заторможенного двойника будут иметь следующий вид:

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n \left[ A(x_i - x_j) \frac{(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2}{[(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]^2} + \frac{2\lambda^2}{\epsilon b} \frac{x_i - x_j}{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \right] - \tau = 0, \quad i = 2, 3, \dots, n, \quad (1)$$

где  $A = Gb / 2\pi(1 - \nu)$ ,  $G$  – модуль сдвига,  $b$  – вектор Бюргера,  $\nu$  – коэффициент Пуассона;  $x_i, y_i$  – координаты дислокаций;  $\lambda$  – линейная плотность заряда дислокаций;  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость;  $\tau$  – внешнее напряжение. Здесь первое слагаемое соответствует упругому, а второе – электростатическому взаимодействию.

вию  $i$ -й и  $j$ -й дислокаций. Смещение соседних дислокаций по оси  $y$  равно межплоскостному расстоянию  $h$  в направлении, перпендикулярном плоскости двойникова  $y_i - y_{i-1} = h$ .

В вычислениях использовались следующие значения упругих констант:  $G = 32$  ГПа;  $b = 1,27 \cdot 10^{-10}$  м;  $h = 3,82 \cdot 10^{-10}$  м;  $\nu = 0,3$ . Величина  $n$  менялась от единиц до ста, плотность дислокационных зарядов выбиралась равной  $10^{-3}$  ед. CGSE/см. Расчеты равновесной конфигурации двойников показали, что в области допустимых  $\tau$  с хорошей точностью двойник может быть представлен одиночной границей с числом дислокаций  $n$ , равным сумме подвижных дислокаций в обеих границах двойника (рис. 2). Видно, что координаты дислокаций в двойнике с двумя границами хорошо совпадают с координатами дислокаций в одиночной границе.

Расчеты напряженности электрического поля  $E$  выполнялись в следующей последовательности. При заданных величинах  $n$  и  $\tau$  численными методами определялись равновесные координаты дислокации  $x_i$ . Затем по известным координатам дислокаций с помощью суммирования находилась величина напряженности поля

$$\bar{E}(z) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \sum_{i=1}^n \frac{1}{z - z_i},$$

где  $z_i$  – координаты дислокаций скопления;  $n$  – число дислокаций. Действительная и мнимая части  $\bar{E}(z)$  дают проекции вектора напряженности поля на оси координат.

Понятно, что как абсолютные значения, так и распределение напряженности  $E$  зависят от  $n$  и  $\tau$ . С ростом внешних напряжений меняется равновесная конфигурация дислокаций в скоплении. Причем наиболее заметно плотность дислокаций меняется в вершине двойника. На рисунке 3 видно, что увеличение внешнего напряжения приводит к затуплению вершины двойника и выстраиванию дислокаций в стенку со все более увеличивающимся углом наклона к вершине. Максимальное значение  $\tau_{кр}$  соответствует сближению головных дислокаций до расстояния  $d = x_2 - x_1 = 2,41h$ . Плотность дислокации в вершине двойника при данных условиях максимальна. Очевидно, что данной предельной конфигурации соответствуют наибольшие значения напряженности электрического поля.

Для определения  $\tau_{кр}$  рассчитывались зависимости  $d$  от  $\tau$  и определялась конечная устойчивая конфигурация двойниковой границы (рис. 4). На рисунке 4 дополнительно приведена аналогичная зависимость для плоского скопления дис-

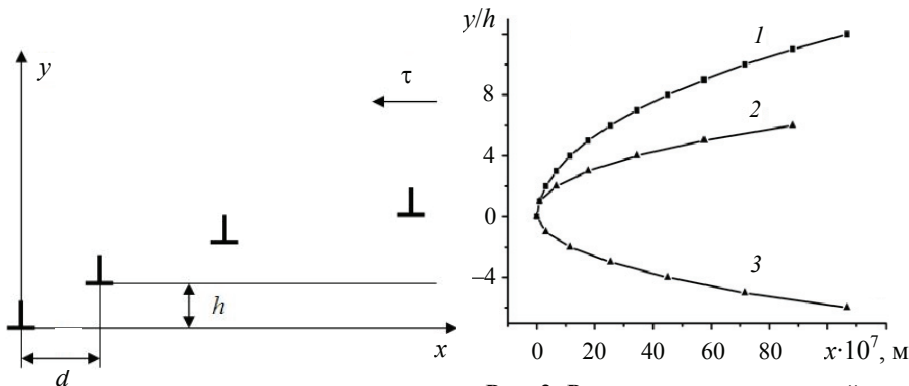


Рис. 1. Схема двойниковой границы

Рис. 2. Расположение дислокаций в вершине дефектов: 1 – граница двойника; 2 – двойник с асимметричным расположением дислокаций в границах

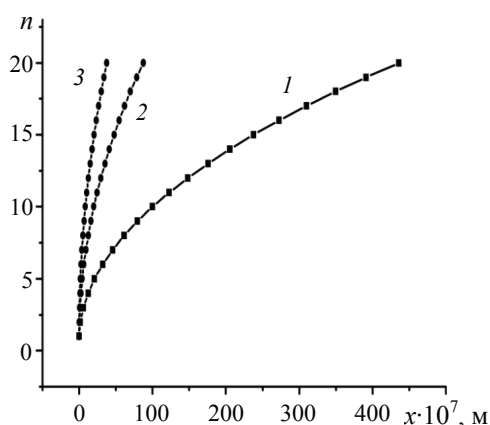


Рис. 3. Координаты головных дислокаций двойника при различных внешних напряжениях: 1 –  $\tau = 11,7$  МПа; 2 –  $\tau = 5$  МПа; 3 –  $\tau = 1$  МПа

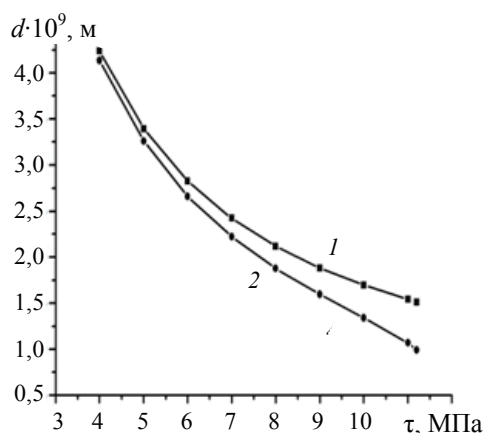


Рис. 4. Зависимость расстояния между головными дислокациями от приложенного напряжения: 1 – плоское скопление; 2 – двойниковая граница

локаций. Видно, что в области предельных (для двойника) значений  $\tau$  расстояние между головными дислокациями в плоском скоплении примерно в полтора раза больше, чем в границе.

При этом различия в значениях координат имеют место для небольшой группы дислокаций (до 20 % от общего их числа) в окрестности вершины двойника. Расположение дислокаций в средней и хвостовой частях обоих скоплений различаются незначительно. Таким образом, при  $\tau/\tau_{\max} < 0,1$  двойниковую границу можно достаточно точно описывать как плоское скопление.

Результаты расчета напряженности электрического поля приведены на рис. 5, где представлены данные для напряженности поля  $E$ , создаваемого всеми подвижными дислокациями ( $n - 1$ ) в точке нахождения головной дислокации ( $x = 0$ ).

Видно, что значения напряженности поля  $E$  могут быть достаточно велики и достигать значений порядка  $10^6$  В/см. Для сравнения на рис. 5 приведено изменение напряженности поля, создаваемое плоским скоплением (кривая 2) при тех же значениях  $\tau$ . Величины  $E$  в этом случае несколько меньше, чем для двойниковой границы. Это понятно, так как при одной и той же величине  $\tau$  плотность дислокации в двойнике будет больше чем в плоском скоплении. Это связано с тем, что дислокации в соседних плоскостях отталкиваются друг от друга слабее, чем в плоском скоплении. С приемлемой точностью распределение напряженности поля в вершине двойника можно заменить аналогичным распределением для плоского скопления, которое может быть получено в конечном виде [3]. Исключением является область  $\tau$  непосредственно вблизи  $\tau = \tau_{\text{кр}}$ .

Изменение напряженности поля  $E$  за пределами скопления приведено на рис. 6. На малых расстояниях  $x \sim 1$  мкм напряженность поля  $E$  может достигать значений  $\sim 10^4$  В/см. Такие значения  $E$  близки к напряженности электрического пробоя атмосферного воздуха. Здесь также следует учесть, что использованные в расчетах значения  $\lambda$  существенно меньше предельных плотностей дислокационных зарядов. В этой области расстояний расчеты с использованием плоской и ступенчатой моделей скопления дают практически одинаковые результаты.

**Свободно растущий двойник.** Выше отмечалось, что при определенных условиях заторможенный двойник может быть заменен плоским скоплением двойнивающих дислокаций. Для свободно растущего двойника, удерживаемого только силами трения, это приближение будет еще более точным, поскольку плотность

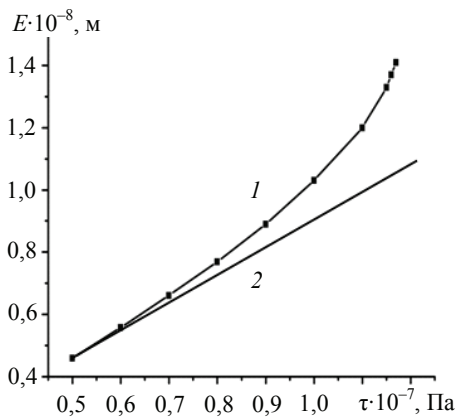


Рис. 5. Напряженность поля в вершине скопления: 1 – граница двойника; 2 – плоское скопление дислокаций

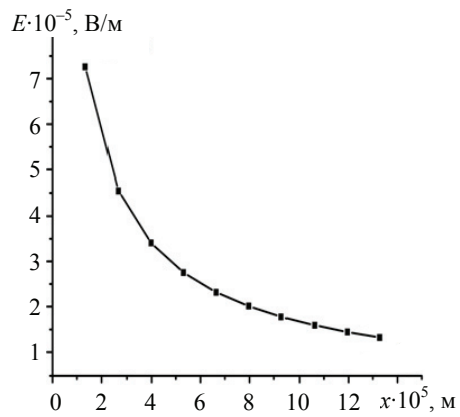


Рис. 6. Распределение напряженности электрического поля на продолжении двойниковой границы

дислокаций в его границах будет меньше, чем в заторможенном двойнике. Дислокационная схема двойника, развивающегося под действием сосредоточенной нагрузки, приведена на рис. 7.

Двойник растет под действием внешнего напряжения  $\tau(x)$  и удерживается напряжением трения  $\tau_s$ . Зададим внешнее напряжение полем дислокации с вектором Бюргерса  $mb$ , где  $m$  целое число. Уравнение равновесия будет иметь следующий вид

$$-Db \int_{l_1}^{l_2} \frac{\rho(t)}{t-x} dt + \frac{mDb}{x} - \tau_s = 0, \quad (2)$$

где  $D = A/b$ ;  $l_1, l_2$  – левая и правая границы скопления соответственно;  $\rho(t)$  – плотность дислокаций в скоплении.

Решение (2), ограниченное в точках  $x = l_1$  и  $x = l_2$ , являющихся границами скопления, дается выражением [5]

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi^2} \sqrt{(l_2-x)(x-l_1)} \int_{l_1}^{l_2} \frac{w(t) dt}{(t-x)\sqrt{(l_2-t)(t-l_1)}}, \quad (3)$$

где

$$w(t) = \frac{mb}{t} - \frac{\tau_s}{D}.$$

Значения  $l_1$  и  $l_2$  находятся из системы уравнений, одно из которых является условием нормировки

$$\int_{l_1}^{l_2} \rho(x) dx = nb, \quad (4)$$

а другое – условием существования решения уравнения (2)

$$\int_{l_1}^{l_2} \frac{w(x)}{\sqrt{(l_2-x)(x-l_1)}} dx = 0. \quad (5)$$

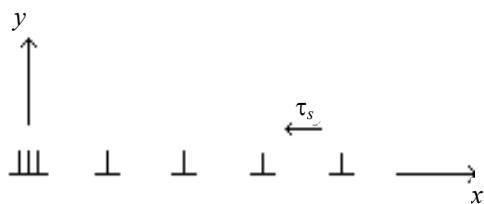


Рис. 7. Дислокационная схема свободного двойника

Выполнив интегрирование в (3), получаем

$$\rho(x) = \frac{mb}{\pi\sqrt{l_1 l_2}} \frac{1}{x} \sqrt{(l_2 - x)(x - l_1)}. \quad (6)$$

Для определения величин  $l_1$  и  $l_2$  имеем из (4)

$$\frac{mb}{2\sqrt{l_1 l_2}} (\sqrt{l_2} - \sqrt{l_1})^2 = nb, \quad (7)$$

и (5)

$$\frac{1}{\sqrt{l_1 l_2}} = \frac{\tau}{Dmb}. \quad (8)$$

Решая систему уравнений (7) и (8), получаем

$$l_1 = \frac{bD}{\tau} \left( n + m - \sqrt{(n + m)^2 - m^2} \right); \quad (9)$$

$$l_2 = \frac{bD}{\tau} \left( n + m + \sqrt{(n + m)^2 - m^2} \right). \quad (10)$$

Зная плотность  $\rho(x)$ , можно найти напряженность электрического поля  $E(z)$  скопления

$$E(z) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \frac{1}{z} \left( z + \sqrt{(l_2 - z)(l_1 - z)} - \sqrt{l_1 l_2} \right). \quad (11)$$

Здесь берется главное значение корня в комплексной плоскости с разрезом вдоль оси  $x$  от  $l_1$  до  $l_2$ . В полярных координатах выражение (11) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} E(r, \varphi) &= \frac{2\lambda}{\varepsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left( 1 - r^{-1} e^{-i\varphi} \sqrt{r_1 r_2} e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)/2} - \sqrt{l_1 l_2} r^{-1} e^{-i\varphi} \right) = \\ &= \frac{2\lambda}{\varepsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left( 1 - \frac{\sqrt{r_1 r_2}}{r} e^{-i(\varphi_1 + \varphi_2 - 2\varphi)/2} - \frac{\sqrt{l_1 l_2}}{r} e^{-i\varphi} \right), \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} r_1 &= \sqrt{(x - l_1)^2 + y^2}; \quad r_2 = \sqrt{(x - l_2)^2 + y^2}; \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}; \\ \varphi_1 &= \arctg \frac{y}{x - l_1}; \quad \varphi_2 = \arctg \frac{y}{x - l_2}; \quad \varphi = \arctg \frac{y}{x}. \end{aligned}$$

Соответственно составляющие вектора  $\vec{E}$  по осям координат будут равны

$$E_x(r, \varphi) = \frac{2\lambda}{\varepsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left\{ 1 - \frac{\sqrt{r_1 r_2}}{r} \cos[(\varphi_1 + \varphi_2 - 2\varphi)/2] - \frac{\sqrt{l_1 l_2}}{r} \cos \varphi \right\}, \quad (13)$$

$$E_y(r, \varphi) = -\frac{2\lambda}{\varepsilon} \frac{m}{\sqrt{l_1 l_2}} \left\{ -\frac{\sqrt{r_1 r_2}}{r} \sin[(\varphi_1 + \varphi_2 - 2\varphi)/2] - \frac{\sqrt{l_1 l_2}}{r} \sin \varphi \right\}. \quad (14)$$

На рисунке 8 приведены кривые изменения плотности дислокации  $\rho$  по длине скопления при различных соотношениях величин  $m$  и  $n$ . Хорошо видно, что с ростом  $m$  скопление удаляется от источника и плотность дислокаций в нем уменьшается. Соответственно и напряженность электрического поля существенно выше у границы  $l_1$  (рис. 9). Кривые 1 и 2 на рис. 9 показывают изменение напряженности в окрестности обеих границ скопления.

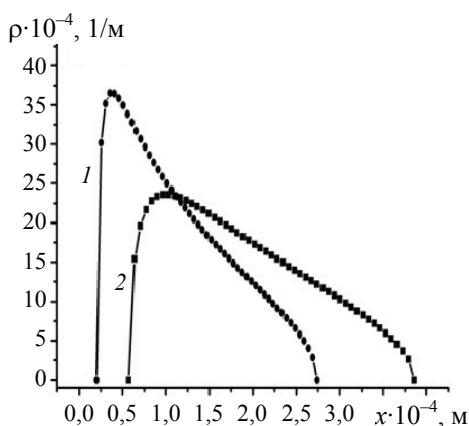


Рис. 8. Плотность дислокаций в скоплениях: 1 –  $m = 50, n = 50$ ; 2 –  $m = 100, n = 50$

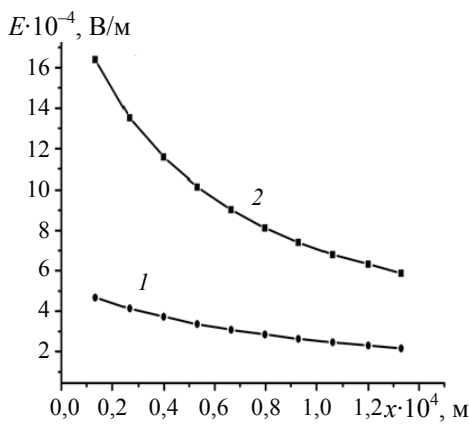


Рис. 9. Изменение электрического поля в плоскости скольжения дислокаций: 1 –  $m = 20, n = 50$ ; 2 –  $m = 50, n = 50$

В зависимости от величины электрического заряда дислокаций, напряжений источника дислокаций и сопротивления кристалла сдвигу величина напряженности поля у левой границы скопления может достигать значений  $\sim 10^4$  В/см, сравнимых с напряженностью электрического пробоя воздуха.

#### Список литературы

1. Перенос электрического заряда полными и частичными дислокациями в ZnS / А.В. Зарецкий [и др.] // Физика твердого тела. – 1983. – Т. 25, № 3. – С. 715–726.
2. Тялин, Ю.И. Скопления заряженных дислокаций и зарождение трещин в неметаллических кристаллах / Ю.И. Тялин, В.М. Финкель // Докл. АН СССР. – 1984. – Т. 279, № 5. – С. 1126–1130.
3. Федоров, В.А. Дислокационные механизмы разрушения двойняющихся материалов / В.А. Федоров, Ю.И. Тялин, В.А. Тялина. – М.: Машиностроение-1, 2004. – 336 с.
4. Тялин, Ю.И. Дислокационные модели двойниковых дефектов и зарождение трещин в вершине заторможенного двойника / Ю.И. Тялин, В.А. Тялина // Вестн. Тамб. ун-та. Сер. Естественные и техн. науки. – 2011. – Т. 16, вып. 3. – С. 793–796.
5. Владимиров, В.И. Дискретно-континуальное рассмотрение дислокационных скоплений / В.И. Владимиров, Ш.Х. Ханнанов // Физика металлов и металловедение. – 1969. – Т. 27, № 6. – С. 960–975.

### Electric Fields Created by Twin Defects

V.A. Tyalina<sup>1</sup>, S.V. Mishchenko<sup>1</sup>, Yu.I. Tyalin<sup>2</sup>

Department “Quality Management and Certification”, TSTU (1); vtyalina@mail.ru;  
Department of General Physics, Tambov State University named after G.R. Derzhavin (2)

**Key words and phrases:** charged dislocation; electric field; twin; twin dislocation.

**Abstract:** The intensity of electric field created by twin boundary in crystals with charged twin dislocations has been determined.

---

### **Elektrische Felder, die von den Zwillingsdefekten geschaffen werden**

**Zusammenfassung:** Es ist die Gespanntheit des elektrischen Feldes, das mit der Zwillingsgrenze in den Kristallen mit den geladenen Zwillingsdislokationen geschaffen wird, bestimmt.

---

### **Champs électriques créés par les défauts jumeau**

**Résumé:** Est définie la tension du champs électrique créé par une limite jumeau dans les cristaux avec les dislocations chargées de macle.

---

**Авторы:** *Тялина Валентина Анатольевна* – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Управление качеством и сертификация»; *Мищенко Сергей Владимирович* – доктор технических наук, профессор, научный руководитель кафедры «Управление качеством и сертификация», ФГБОУ ВПО «ТГТУ»; *Тялин Юрий Ильич* – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики, ФГБОУ ВПО «Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина».

**Рецензент:** *Поликарпов Валерий Михайлович* – доктор химических наук, профессор кафедры «Физика», ФГБОУ ВПО «ТГТУ».

---