

PACS numbers: 61.72.Bb, 61.72.Mm, 61.72.Yx

МОДЕЛЬ УТВОРЕННЯ НАНОРОЗМІРНОГО ВІСКЕРА З КАНАЛУ ПОТРІЙНОГО СТИКУ МЕЖ ЗЕРЕН ПОЛІКРИСТАЛА

А.С. Лазаренко

Бердянський державний педагогічний університет,
Вул. Шмідта, 4, 71118, Бердянськ, Україна
E-mail: an-lazar@yandex.ru

Розроблено модель утворення нанорозмірного ниткоподібного монокристалу з виходу каналу потрійного стику меж зерен на поверхню полікристала. Розроблена модель спирається на уявлення про формування концентратора напружень в стиковому каналі під час дифузійної повзучості полікристала. Модель пояснює збільшення швидкості росту віскерів під час виникнення в полікристалах неоднорідних розподілів внутрішніх механічних напружень.

Ключові слова: НИТКОПОДІБНІ МОНОКРИСТАЛИ, ДЕФЕКТИ БУДОВИ, ПОВЕРХНЯ, ПОТРІЙНІ СТИКИ, МЕЖІ ЗЕРЕН, КОНЦЕНТРАТОРИ НАПРУЖЕНЬ, ДИФУЗИОННА ПОВЗУЧІСТЬ.

(Одержано 27.07.2011, опубліковано online 30.12.2011)

1. ВСТУП

Незвичайні фізико-механічні властивості ниткоподібних монокристалів («вусів» або «віскерів») достатньо давно привертають до себе увагу дослідників. Віскери практично не мають дефектів, їхня міцність близька до теоретичної межі, тобто значно перевищує міцність звичайних монокристалів [1, 2].

В існуючих модельних уявленнях про механізми росту віскерів істотну роль відіграють гвинтові дислокації: вершина або основа зростаючого нитковидного кристалу має наростаючу сходинку, що відтворює себе в міру надходження речовини. Лінія гвинтової дислокації буде віссю симетрії утвореного віскера. Такий механізм добре пояснює процеси формування нитковидних кристалів за схемою «пар-рідина-кристал» [3], але деякі особливості утворення і росту віскерів досі повністю не з'ясовані. Відомо, наприклад, що ниткоподібні монокристали можуть утворюватися від поверхні полікристалів під дією зовнішньої пондеромоторної сили, спрямованої уздовж нормалі до поверхні полікристалу. Швидкість росту таких нитковидних кристалів значно збільшується, якщо в полікристалі виникають внутрішні механічні напруження.

Відповідно викликає інтерес питання про те, в яких саме місцях поверхні полікристала може розпочатися утворення віскерів під дією зовнішніх пондеромоторних сил. Можна припустити, що локальні осередки зародження віскерів повинні за своєю структурою і властивостями відрізнятися від «ідеальної поверхні», тобто ниткоподібні монокристали утворюються на поверхневих дефектах. Необхідною

Одними з найбільш значних дефектів поверхні полікристалу є місця виходу каналів потрійних стиків (ПС) меж зерен (МЗ) на поверхню. Канал ПС МЗ утворюється в результаті взаємного перетину трьох меж зерен полікристалу. МЗ активно виявляють себе в процесах пластичної деформації полікристалів як шляхи прискореного дифузійного переносу речовини; поверхні відносних зсувів зерен; місця виходу, утворення, поглинання решіткових дислокацій або інших дефектів будови кристалічних зерен. В ПС здійснюється узгодження різноманітних процесів, які відбуваються в межах зерен під час пластичної деформації полікристалів [4-8]. У більшості випадків це узгодження призводить до утворення в каналах ПС МЗ концентраторів напружень [9]. Якщо канал стику зерен не виходить на поверхню полікристала, то релаксація стикового концентратора напружень здійснюється за рахунок локальної пластичної деформації зерен поблизу каналу ПС [10-15]. Якщо ж канал стику кристалічних зерен одним кінцем (для зеренповерхневого шару) або обома кінцями (паркетний полікристал) виходить на поверхню стає можливою релаксація стикового концентратора напружень за рахунок дифузійного переносу речовини з каналу стику на поверхню, або навпаки. Таким чином вихід каналу ПС МЗ на поверхню полікристала є найбільш імовірним місцем зародження ниткоподібного монокристала.

Розглянемо модель росту нанорозмірного віскера з каналу ПС МЗ під час дифузійної повзучості полікристала.

2. ФОРМУЛЮВАННЯ МОДЕЛІ

2.1 Утворення і релаксація концентратора напружень в каналі ПС МЗ

У випадку, коли зовнішні механічні напруження не перевищують значення бар'єру Пайерлса-Набарро для консервативного ковзання решіткових дислокацій пластична деформація полікристала здійснюється за рахунок дифузійної повзучості.

Якщо значення температури міститься в діапазоні $0,4 - 0,5 T_{пл}$ (де $T_{пл}$ – температура плавлення) виконується умова

$$D_{мз} \cdot \delta \gg D_{об} \cdot d, \quad (1)$$

де $D_{мз}$ – коефіцієнт дифузії вакансій вздовж меж зерен, δ – ширина МЗ, $D_{об}$ – коефіцієнт об'ємної дифузії вакансій, d – характерний розмір зерна полікристалу.

Виконання умови (1) гарантує значну перевагу дифузійного переносу речовини вздовж меж зерен над дифузійним переносом речовини через об'єм кристалічних зерен. Під час одноосного розтягування в каналах потрійних стиків паркетних полікристалів може відбуватися накопичення речовини за рахунок ненульового сумарного дифузійного потоку вакансій вздовж меж зерен, які утворюють стик. Накопичення матеріалу відбувається за виконання умови [9]:

$$3 \sum_{i=1}^3 \sin^2 \phi_i^0 > \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 \sin^2 \phi_i^j, \quad (2a)$$

де ϕ_i^0 – значення кутів, які утворюють з напрямком зовнішнього одно осного механічного напруження площини МЗ стику, для якого визначається

можливість виникнення концентратора напружень; ϕ_i^j – значення кутів, що утворюють з напрямком зовнішнього механічного напруження площини МЗ суміжних ПС, які мають з досліджуваним стиком спільну МЗ; i – номер суміжного стику; j – номер МЗ в суміжному стикі.

Для випадку одноосного стискання маємо аналогічну умову:

$$3 \sum_{i=1}^3 \sin^2 \phi_i^0 < \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 \sin^2 \phi_i^j . \quad (26)$$

Виконання умови (2а) або (26) визначає можливість утворення концентратора напружень в каналі ПС МЗ[9]. Для паркетного полікристалу, коли обидва кінці стикового каналу виходять на поверхню полікристалу стає можливою релаксація концентратора за рахунок виходу надлишку речовини на зовнішню поверхню. Цей надлишок може розосереджуватися внаслідок поверхневої дифузії, а може утворити ниткоподібний монокристал, який росте безпосередньо з каналу ПС. Формування віскера з каналу ПС відбудеться під дією зовнішньої сили, спрямованої нормально до поверхні полікристалу, якщо поверхневий дифузійний перенос речовини від виходу стикового каналу буде значно повільнішим за швидкість надходження надлишкового матеріалу до каналу стику.

2.2 Визначення залежності швидкості росту віскера від часу

Швидкість росту віскера з каналу ПС обмежується максимальною швидкістю надходження матеріалу в канал стику. Ця швидкість визначається виразом для сумарного дифузійного потоку вакансій вздовж меж зерен від каналу ПС [19]:

$$J_0 = D_{мз} \frac{c_0 \sigma_0 b^3}{dkT} \left(3 \sum_{i=1}^3 \sin^2 \phi_i^0 - \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 \sin^2 \phi_i^j \right), \quad (3)$$

де c_0 – рівноважна концентрація вакансій в МЗ, σ_0 – значення зовнішнього одноосного механічного напруження, b – параметр кристалічної решітки, k – стала Больцмана, T – абсолютна температура.

Загальний об'єм надлишкової речовини, внесеної до каналу ПС за час t розраховується за формулою:

$$V(t) = J_0 b^3 \delta h t, \quad (4)$$

де h – товщина «паркетного» полікристалу ($h \leq d$).

Для визначення граничної максимальної швидкості росту віскера необхідно припустити, що вся надлишкова речовина витрачається на формування нанорозмірного ниткоподібного монокристалу поперечний переріз якого співпадає з поперечним перерізом стикового каналу. В цьому випадку максимальна швидкість визначається наступним чином:

$$v_{\max} = \frac{\delta h b^3}{\pi r^2} J_0, \quad (5)$$

де r – радіус каналу ПС МЗ.

Визначимо $v(t)$ – залежність швидкості росту ниткоподібного монокристалу зі стикового каналу від часу. Об'єм віскера в момент часу t розраховується за допомогою інтеграла:

$$V(t) = \pi r^2 \int_0^t v(t) dt. \quad (6)$$

Оскільки ниткоподібний монокристал утворюється зі стикового каналу під дією зовнішньої пондеромоторної сили $F(t)$, то миттєве прискорення росту віскера в даному випадку можна розрахувати за другим законом Ньютона:

$$a(t) = \frac{F(t)}{\rho V(t)}, \quad (7)$$

де ρ – щільність речовини віскера.

За визначенням миттєве прискорення – це перша похідна за часом від миттєвої швидкості. Використовуючи це визначення, після підстановки (6) в (7) отримуємо інтегрально-диференціальне рівняння для залежності швидкості росту віскера від часу:

$$\frac{dv(t)}{dt} = F(t) / \left(\rho \pi r^2 \int_0^t v(t) dt \right), \quad (8)$$

Після елементарних математичних перетворень з рівняння (8) отримуємо диференціальне рівняння другого порядку:

$$F(t) \frac{d^2v}{dt^2} - \frac{dF}{dt} \frac{dv}{dt} + \rho \pi r^2 v(t) \left(\frac{dv}{dt} \right)^2 = 0. \quad (9)$$

Для використання рівняння (8) або (9) необхідно конкретизувати вигляд зовнішньої пондеромоторної сили $F(t)$, яка забезпечує формування віскера.

2.3 Розрахунок параметрів утворення віскера

Розглянемо детально випадок утворення віскерів з стикових каналів під дією пондеромоторних сил електростатичного походження. Практична значимість саме цього випадку визначається тим, що таким чином віскери виникають на контактах електронних приладів, де вони і були виявлені вперше.

Пондеромоторна сила, яка діє на торцеву поверхню віскера з боку електростатичного поля, напруженість якого за модулем дорівнює E_i спрямована нормально до поверхні паркетного полікристалу, розраховується за формулою:

$$F_E = 0.5 \xi_0 E^2 \pi r^2, \quad (10)$$

де ξ_0 – електрична стала.

Враховуючи сталість пондеромоторної сили F_E і нехтуючи силою тяжіння перепишемо рівняння (9) з підстановкою (10). Отримаємо в результаті:

$$\frac{d^2v}{dt^2} + \frac{2\rho}{\xi_0 E^2} v(t) \left(\frac{dv}{dt} \right)^2 = 0, \quad (11)$$

Диференціальне рівняння (11) можна звести до більш простого вигляду:

$$\frac{df}{dv} + \frac{2\rho}{\xi_0 E^2} v f = 0, \quad (12)$$

де $f = dv/dt$.

Рівняння (12) допускає розв'язування методом розділення змінних:

$$\frac{dv}{dt} = f(v) = C \exp\left(-\frac{\rho v^2}{\xi_0 E^2}\right), \quad (13)$$

де C – константа інтегрування.

Константу інтегрування визначаємо, враховуючи дискретний характер росту віскера з окремих атомів, що надходять з каналу ПС МЗ. Початкові умови можна записати як:

$$\left(\frac{dv}{dt} \right)_{t=0} = \frac{\xi_0 E^2}{2b\rho}; \quad v(0) = \sqrt{\frac{\xi_0 E^2}{\rho}}.$$

Після підстановки початкових умов в (13) і визначення константи інтегрування отримуємо:

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\xi_0 E^2}{2b\rho} \exp\left(1 - \frac{\rho v^2}{\xi_0 E^2}\right). \quad (14)$$

З рівняння (14) можна зробити висновок про те, що прискорення росту віскера зменшується з ростом швидкості цього росту.

Збільшення швидкості росту віскера обмежується значенням v_{max} з формули (5). В цьому випадку фізичні умови задачі обмежують математичний розв'язок (14), який нібито свідчить про можливість нескінченного зростання швидкості росту віскера з часом. Це означає, що після досягнення значення швидкості росту v_{max} ниткоподібний монокристал перестав збільшуватися у довжину при сталому поперечному перерізі. На віскері може утворитися шийка, що призведе до зламу, або кінець віскера загостриться до атомного вістря. Подальша еволюція форми віскера за умови збереження неоднорідного розподілу внутрішніх механічних напружень в полікристалі виявиться в збільшенні поперечного перерізу віскера при його сталій довжині.

Для визначення максимальної довжини віскера використаємо рівняння (14) з підстановкою (5). При цьому

$$\frac{dv}{dt} = \frac{\xi_0 E^2}{2\rho l_{max}}, \quad (15)$$

де l_{max} – максимальна довжина віскера.

В результаті отримуємо:

$$l_{\max} = b \exp \left[\frac{\rho}{\xi_0} \left(\frac{\delta h b^3 J_0}{\pi r^2 E} \right)^2 - 1 \right], \quad (16)$$

де J_0 визначається формулою (3).

Формулу (16) можна переписати в наближеному вигляді:

$$l_{\max} \approx b \exp \left[\frac{\rho}{\xi_0} \left(\frac{\delta h b^3 J_0}{\pi r^2 E} \right)^2 \right]. \quad (17)$$

Час утворення нанорозмірного віскера максимальної довжини з каналу ПС МЗ оцінюється з формули:

$$\tau \approx \pi r^2 l_{\max} / \delta h b^3 J_0. \quad (18)$$

3. ВИСНОВКИ

Виходи каналів потрійних стиків меж зерен на поверхню полікристалів є найбільш імовірним місцем утворення ниткоподібних монокристалів під дією зовнішніх пондеромоторних сил.

Утворення віскерів зі стикових каналів значно полегшується, якщо в полікристалі виникає неоднорідний розподіл внутрішніх механічних напружень. При цьому ниткоподібні монокристали зростають з тих стикових каналів, в яких утворюються концентратори напружень.

Використання аналітичної моделі формування концентратора напружень в каналі потрійного стику зерен під час дифузійної повзучості полікристала [9] дозволяє теоретично оцінити максимальну довжину та характерний час утворення нанорозмірних віскерів з каналів потрійних стиків меж зерен полікристалів.

MODEL OF FORMATION OF NANO-SIZED WHISKERS OUT OF CHANNELS OF THE TRIPLE JUNCTIONS OF GRAIN BOUNDARIES OF POLYCRYSTAL

A.S. Lazarenko

Berdyansk State Pedagogical University,
4, Shmidt Str., 71118 Berdyansk, Ukraine
E-mail: an-lazar@yandex.ru

A model of formation of nano-sized whiskers out of channel of triple junction grain boundaries on the surface of polycrystal has developed. The model is based on the idea of the formation of the stress concentrators in the junction channels under diffusion creep of polycrystals. Model explains the increase of the growth rate whiskers under inhomogeneous distributions of internal mechanical stresses in polycrystals.

Keywords: WHISKERS, DEFECTS OF STRUCTURE, SURFACE, TRIPLE JUNCTIONS, GRAIN BOUNDARIES, CONCENTRATORS OF STRESS, DIFFUSION CREEP.

МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНОГО ВІСКЕРА ИЗКАНАЛА ТРОЙНОГО СТЫКА ГРАНИЦ ЗЁРЕН ПОЛИКРИСТАЛЛА

А.С. Лазаренко

Бердянский государственный педагогический университет,
Ул. Шмидта, 4, 71118 Бердянск, Украина
E-mail: an-lazar@yandex.ru

Разработана модель образования наноразмерного нитевидного монокристалла из выхода канала тройного стыка границ зёрен на поверхность поликристалла. Разработанная модель опирается на представления о формировании концентраторов напряжений в стыковых каналах при диффузионной ползучести поликристалла. Модель объясняет увеличение скорости роста вискеро́в при возникновении в поликристаллах неоднородных распределений внутренних механических напряжений.

Ключевые слова: НИТЕПОДОБНЫЕ МОНОКРИСТАЛЛЫ, ДЕФЕКТЫ СТРОЕНИЯ, ПОВЕРХНОСТЬ, ТРОЙНЫЕ СТЫКИ, ГРАНИЦЫ ЗЁРЕН, КОНЦЕНТРАТОРЫ НАПРЯЖЕНИЙ, ДИФФУЗИОННАЯ ПОЛЗУЧЕСТЬ.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Г.В. Бережкова, *Нитевидные кристаллы* (Москва: Наука., 1969).
2. Э.М.Надгорный, *УФН* **77**, **2**, 201 (1962).
3. У.И. Гивардгизов, *Рост нитевидных и пластинчатых кристаллов из пара* (Москва: Наука,1977).
4. В.Б. Рабухин, *ФММ* **55**, **1**, 178 (1983).
5. В.Б. Рабухин, *Поверхность. Физика, химия, механика* №6, 143 (1986).
6. В.Б. Рабухин, *Поверхность. Физика, химия, механика* №7, 126 (1986).
7. В.Б. Рабухин, *ФММ* **61** 5, 996 (1986).
8. В.Н. Перевезенцев, А.В. Шалимова, М.Ю. Щербань, *Металлофизика* №4, 26 (1988).
9. А.С. Лазаренко, В.Б. Рабухин, В.В. Слёзов, *Металлофизика* №3, 26 (1991).
10. А.С. Лазаренко, В.Б.Рабухин, В.В. Слёзов, *Металлофизика* №4, 40 (1991).
11. А.С. Лазаренко, В.Б. Рабухин, В.В. Слёзов, *ФММ* №9, 53 (1991).
12. А.С. Лазаренко, В.Б. Рабухин, В.В. Слёзов, *ФММ* №9, 59 (1991).
13. А.С. Лазаренко, В.Б. Рабухин, В.В. Слёзов, *Известия Академии Наук (серия физическая)* **57** №11, 115 (1993).
14. А.С. Лазаренко, О.А. Великодная, И.М. Михайловский, В.Б. Рабухин, *Металлофизика и новейшие технологии* **16**, №1, 86 (1994).
15. A.S. Lazarenko, I.M. Mikhailovskij, V.B. Rabukhin, O.A. Velikodnaya, *Actametall. mater.* **43**, 639 (1995).