

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ

PACS numbers: 61.05.cc, 61.05.fd, 61.05.jd, 61.72.Bb, 61.72.Dd, 61.72.Lk

Влияние дислокационных петель на осевую теневую картину

М. А. Иванов, Л. Б. Квашнина, А. Ю. Наумук

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев, Украина*

В рамках классической теории рассеяния исследуется осевая теневая картина в кристалле, содержащем призматические и скользящие дислокационные петли. Рассматривается случай, когда характерный размер корреляции искажений в кристалле значительно больше, чем расстояние, на котором формируется теневая картина. Величина минимального выхода для частиц, рассеянных искажённой цепочкой атомов, оказывается пропорциональной концентрации дефектов и является функцией углов, определяющих ориентацию направления наблюдения теневой картины относительно как нормали к плоскости дислокационной петли, так и вектора Бюргерса. При этом соответствующие угловые зависимости для призматических и скользящих петель существенно различаются между собой, что позволяет использовать теневой эффект для диагностики дислокационных петель в кристаллах.

У межах класичної теорії розсіяння досліджується вісна тіньова картина у кристалі, що містить призматичні та ковзні дислокаційні петлі. Розглядається випадок, коли характерний розмір кореляції спотворень у кристалі виявляється значно більшим за віддаль, на якій формується тіньова картина. Величина мінімального виходу для частинок, розсіяних спотвореним ланцюгом атомів, виявляється пропорційною концентрації дефектів і є функцією кутів, що визначають орієнтацію напрямку спостереження тіньової картини відносно як нормалі до площини дислокаційної петлі, так і Бюргерсового вектора. До того ж відповідні кутові залежності для призматичних і ковзних петель істотно відрізняються між собою, що уможливило використовувати тіньовий ефект для діагностики дислокаційних петель у кристалах.

The axial shadow pattern in a crystal containing prismatic and sliding dislocation loops is investigated within the scope of the classical scattering theory. The case, when the characteristic size of distortions' correlation in a crys-

tal is much more than distance of shadow-picture formation, is considered. The value of a minimal output of the particles, which are scattered by the distorted chain of atoms at not too large deformations, is proportional to the concentration of defects. In addition, it is a function of the angles determining an orientation of direction of a shadow-picture observation relative to a normal to the plane of dislocation loop as well as to a Burgers vector. Therefore, angular dependences for prismatic and sliding loops differ from each other substantially. That allows using a shadow effect for diagnostics of dislocation loops in crystals.

Ключевые слова: ориентационные эффекты, теневая картина, минимальный выход, призматические и скользящие дислокационные петли.

(Получено 29 апреля 2015 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Различные дефекты в кристалле приводят к возникновению дальнедействующих полей напряжений, которые деформируют цепочки атомов и, следовательно, приводят к изменению параметров осевой теневой картины (см., например, [1–7]). В работе [8] было рассмотрено влияние на осевую теневую картину семейства прямолинейных параллельных дислокаций, произвольным образом ориентированного относительно направления наблюдения. Было показано, что минимальный выход рассеянных частиц пропорционален плотности дислокаций, а также некоторой функции углов между характерными ориентировками дислокации и направлением наблюдения. При этом для винтовых и краевых дислокаций вид этой функции будет разным. Поэтому исследование теневого эффекта может оказаться одним из удобных методов изучения дислокационной структуры в кристаллах. В работе [9] была исследована теневая картина для двух взаимно перпендикулярных семейств винтовых дислокаций. В этом случае исследование угловой зависимости минимального выхода позволяет определить направления и плотности дислокаций различных систем. В работе [10] было рассмотрено влияние на минимальный выход осевой тени дефектов эллипсоидальной формы. Показано, что величина минимального выхода существенно зависит как от параметров дефекта, так и его ориентации относительно направления оси цепочки, формирующей осевую теневую картину. Причём наиболее чётко ориентационная зависимость минимального выхода проявляется при достаточно малой анизотропии дефекта. Представляет поэтому интерес рассмотреть влияние на теневую картину и ряда других дефектов, в том числе, сильно анизотропных.

В настоящей работе в рамках подхода, развитого в [8], рассмотрено влияние на осевую теневую картину таких анизотропных де-

фектов, какими являются дислокационные петли разного типа. Предполагается, что петли хаотически распределены по кристаллу, но все они имеют одну и ту же, но, вообще говоря, произвольную ориентацию относительно направления оси цепочки атомов кристалла, формирующих теньевую картину. Будет показано, что минимальный выход рассеянных частиц пропорционален некоторой функции углов между направлением указанной цепочки и характерными направлениями для дислокаций. Причём для призматических (вектор Бюргерса перпендикулярен плоскости петли) и скользящих (вектор Бюргерса лежит в плоскости петли) петель вид этой функции будет разным. Поэтому исследование теневого эффекта может оказаться одним из удобных методов диагностики дислокационных петель в кристаллах.

2. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ, РАССЕЯННЫХ ИСКАЖЁННОЙ ЦЕПОЧКОЙ АТОМОВ

Как было показано в [8], влияние дефектов кристаллической решётки на теньевую картину оказывается различным в зависимости от соотношения между характерной длиной корреляции искажений в кристалле l_1 и расстоянием l , на котором формируется теньевая картина. В случае, когда $l_1 \gg l$, т.е. деформации, создаваемые разными дефектами, плавно изменяются на расстоянии l , так что $l |\partial u_{ij} / \partial r| \ll u_{ij}$, наблюдаемая теньевая картина оказывается суперпозицией элементарных теневого картин, сформированных отдельными участками рассеивающей цепочки, которые вследствие влияния дефектов кристаллической решётки оказываются направленными под некоторыми углами относительно исходной оси цепочки.

Будем искать функцию распределения $f(\theta) = f(\theta_x, \theta_y)$, описывающую распределение частиц, падающих на кристалл параллельно некоторой неискажённой цепочке атомов кристалла (Z — ось этой цепочки) и рассеянных под углами θ_x, θ_y к указанной цепочке ($\theta_x, \theta_y \ll 1$). Очевидно, что в кристалле с дефектами такая цепочка в целом оказывается искажённой и изогнутой. Тем не менее, будем считать, что её можно разбить на короткие отрезки, каждый из которых формирует свою функцию распределения рассеянных частиц, причём эта функция носит универсальный характер в собственной системе координат. Тогда распределение частиц, рассеянных каждым из указанных отрезков, можно записать в виде $f_1[(\theta_x - u), (\theta_y - v)]$, где функция $f_1[\theta'_x, \theta'_y]$ будет определена ниже, а u и v — проекции на оси X и Y угла отклонения цепочки от исходного направления Z ($u, v \ll 1$). Введём также функцию $F(u, v)$, описывающую плотность распределения углов отклонения u и v , так что результирующая функция распределения частиц, рассеянных на всей рассматриваемой искажённой цепочке, может быть записана в

виде:

$$f(\theta) = f(\theta_X, \theta_Y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_1[(\theta_X - u), (\theta_Y - v)] F(u, v) du dv. \quad (1)$$

В качестве $f_1[\theta'_X, \theta'_Y]$ будем использовать максимально простую изотропную функцию параболического вида, которая в то же время достаточно хорошо аппроксимирует экспериментально наблюдаемую форму теневой картины:

$$\begin{aligned} f_1[\theta'_X, \theta'_Y] &= f_1[(\theta'_X)^2 + (\theta'_Y)^2] = f_1[(\theta')^2] = (\theta')^2 / \bar{\theta}^2 \quad (\theta < \bar{\theta}), \\ f_1[(\theta')^2] &= 1 \quad (\theta \geq \bar{\theta}). \end{aligned} \quad (2)$$

В случае, когда дефекты в кристалле распределены хаотически, а их концентрация мала, функцию распределения $F(u, v)$, которая входит в выражение (1), можно записать в виде (см., например, [11]):

$$F(u, v) = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-i(q_X u + q_Y v)] \exp[T(q_X, q_Y)] dq_X dq_Y, \quad (3)$$

$$T(q_X, q_Y) = \sum_n T_n(q_X, q_Y), \quad (4)$$

$$T_n(q_X, q_Y) = -c_n \sum_l [1 - \exp(-i(q_X u_{XZ}^{nl} + q_Y u_{YZ}^{nl}))].$$

Здесь c_n — относительная концентрация на узлах решётки дефектов типа n (в рассматриваемом приближении $c_n \ll 1$), u_{XZ}^{nl} , u_{YZ}^{nl} — компоненты тензора дисторсии, которая создаётся в начале координат дефектом типа n , расположенным на узле l .

3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАССЕЯННЫХ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛЕ, СОДЕРЖАЮЩЕМ ПРИЗМАТИЧЕСКИЕ ДИСЛОКАЦИОННЫЕ ПЕТЛИ

Рассмотрим кристалл, содержащий призматические дислокационные петли. Для таких петель в собственной системе координат, где петли лежат в плоскости, перпендикулярной оси z , и вдоль этой же оси направлен вектор Бюргера, смещения атомов кристалла на больших расстояниях от дефекта в приближении изотропного континуума описываются следующим выражением [12]:

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{\Delta V_d g_{izz}}{8\pi(1-\sigma)}, \quad \Delta V_d = b_{pl} S_{pl}, \quad (5)$$

$$g_{ijk} = (1-2\sigma)(\delta_{ij} J_k + \delta_{ik} J_j - \delta_{jk} J_i) + 3J_i J_j J_k, \quad i, j, k = x, y, z, \quad J_i = r_i / r,$$

где x, y, z — координаты в системе, связанной с дефектом, r — расстояние от дефекта до точки наблюдения, b_{pl}, S_{pl} — модуль вектора Бюргерса и площадь петли, σ — коэффициент Пуассона.

При наличии несферических дефектов, размеры которых значительно больше межатомных расстояний, характер теневой картины (в том числе минимального выхода) значительно отличается от случая точечных дефектов как за счёт увеличения мощности дефекта, так и вследствие возникающей зависимости от выделенного направления дефекта, в частности, вектора Бюргерса. Примером таких дефектов и являются различные дислокационные петли.

Далее здесь будем полагать, что имеется кристалл, содержащий семейство призматических дислокационных петель, вектора Бюргерса которых параллельны между собой. Взаимосвязь между собственной системой координат петли и лабораторной системой координат XYZ , связанной с рассеивающей цепочкой характеризуется только одним углом ψ между направлением z и осью цепочки Z . В этом случае дисторсии u_{XZ}^l и u_{YZ}^l , создаваемые в некоторой нулевой точке на оси рассматриваемой цепочки дислокационной петли, центр которой находится в положении l , можно выразить через дисторсии u_{ij}^l в собственной системе координат x, y, z . Последние легко могут быть найдены из выражений (5): $u_{ij}^l = \partial(u_i^l(\mathbf{r}))/r_j$. Учитывая, что при переходе от координат x, y, z к X, Y, Z оси x и X совпадают, выражения u_{XZ}^l и u_{YZ}^l принимают вид:

$$\begin{aligned} u_{XZ}^l &= u_{xz}^l \cos \psi - u_{xy}^l \sin \psi, \\ u_{YZ}^l &= u_{yz}^l \cos^2 \psi - u_{zy}^l \sin^2 \psi - (u_{yy}^l - u_{zz}^l) \cos \psi \sin \psi. \end{aligned}$$

В результате, переходя в собственной системе координат дефекта к сферическим переменным r, ϑ и φ , получим:

$$\begin{aligned} u_{XZ}^l &= \alpha_0^{pl} \frac{\alpha_X^{pl}(\psi, \vartheta, \varphi)}{r_l^3}, \quad u_{YZ}^l = \alpha_0^{pl} \frac{\alpha_Y^{pl}(\psi, \vartheta, \varphi)}{r_l^3}, \quad \alpha_0^{pl} = \frac{3b_{pl}S_{pl}}{8\pi(1-\sigma)}, \quad (6) \\ \alpha_X^{pl}(\psi, \vartheta, \varphi) &= -\cos \psi [A_1 + 5 \cos^2 \vartheta] \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi + \\ &+ \sin \psi [B_1 + 5 \cos^2 \vartheta] \sin^2 \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi, \\ \alpha_Y^{pl}(\psi, \vartheta, \varphi) &= -\cos^2 \psi [A_2 + 5 \cos^2 \vartheta] \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi + \\ &+ \sin^2 \psi [B_2 + 5 \cos^2 \vartheta] \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi - \\ &- \sin \psi \cos \psi [(E_1 + 5 \cos^2 \vartheta) \cos^2 \vartheta - (E_2 + 5 \cos^2 \vartheta) \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi - E_3/3], \\ B_2 &= -B_1 = 1 - 2\sigma, \quad A_1 = A_2 = 2\sigma - 3, \quad B_1 = E_2 = 2\sigma - 1, \\ E_1 &= -(1 + 2\sigma), \quad E_3 = 2(1 - 2\sigma). \end{aligned}$$

Подставим (6) в (4) и перейдём от суммирования по l к интегрированию по r . Выполнив это интегрирование, получим:

$$\begin{aligned}
T_{\text{pl}}(q_X, q_Y) &\equiv T_{\text{pl}}(q_X, q_Y; \psi) = \\
&= \gamma_{\text{pl}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \vartheta \left| q_X \alpha_X^{\text{pl}}(\psi, \vartheta, \varphi) + q_Y \alpha_Y^{\text{pl}}(\psi, \vartheta, \varphi) \right| d\vartheta, \\
\gamma_{\text{pl}} &= \frac{\pi}{6} \rho_{\text{pl}} \alpha_0^{\text{pl}} = \frac{\rho_{\text{pl}} b_{\text{pl}} S_{\text{pl}}}{16(1 - \sigma)},
\end{aligned} \tag{7}$$

где ρ_{pl} — объёмная концентрация дефектов.

Для выполнения дальнейших расчётов воспользуемся проведённым в [10] анализом, где было показано, что с достаточной степенью точности выражение типа (7) можно существенно упростить, воспользовавшись определённой интерполяционной процедурой. В рассматриваемом здесь случае это означает, что выражение для $T_{\text{pl}}(q_X, q_Y; \psi)$ в (7) можно заменить на $\tilde{T}_{\text{pl}}(q_X, q_Y; \psi)$, где

$$\begin{aligned}
\tilde{T}_{\text{pl}}(q_X, q_Y; \psi) &= \gamma_{\text{pl}} \sqrt{[P_{\text{pl}1}^2(\psi) q_X^2 + P_{\text{pl}2}^2(\psi) q_Y^2]}, \\
P_{\text{pl}1}(\psi) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \vartheta \left| \alpha_X^{\text{pl}}(\psi, \vartheta, \varphi) \right| d\vartheta, \\
P_{\text{pl}2}(\psi) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \vartheta \left| \alpha_Y^{\text{pl}}(\psi, \vartheta, \varphi) \right| d\vartheta.
\end{aligned} \tag{8}$$

Подставляя функцию $\tilde{T}_{\text{pl}}(q_X, q_Y; \psi)$ вместо $T_{\text{pl}}(q_X, q_Y)$ в (3), получим следующее выражение для плотности распределения углов отклонений рассеивающей цепочки при произвольных значениях угла ψ между нормалью к плоскости петли и направлением падающего пучка Z :

$$F_{\text{pl}}(u, v) = \frac{\gamma_{\text{pl}}}{2\pi} \frac{1}{P_{\text{pl}1}(\psi) P_{\text{pl}2}(\psi)} \left[\gamma_{\text{pl}}^2 + \frac{u^2}{P_{\text{pl}1}^2(\psi)} + \frac{v^2}{P_{\text{pl}2}^2(\psi)} \right]^{-3/2}. \tag{9}$$

Отсюда, подставляя в (1) это значение функции $F_{\text{pl}}(u, v)$ и выражение для $f_1[\theta'_X, \theta'_Y]$ в виде (2), не трудно получить искомую функцию распределения частиц, рассеянных цепочкой, находящейся в деформирующем поле семейства параллельных призматических дислокационных петель.

Выполняя нормирование выражений (1) и (9) на ширину теневой картины $\bar{\theta}$, получим следующее выражение для функции распределения частиц:

$$\begin{aligned}
f_{\text{pl}}(\theta_X, \theta_Y) &= f_{\text{pl}}\left(\frac{\theta_X}{\bar{\theta}}, \frac{\theta_Y}{\bar{\theta}}\right) = \tilde{\gamma}_{\text{pl}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}_1[(\theta_X/\bar{\theta} - \tilde{u})^2 + (\theta_Y/\bar{\theta} - \tilde{v})^2] \times \\
&\times \tilde{F}_{\text{pl}}(\tilde{u}, \tilde{v}) d\tilde{u} d\tilde{v},
\end{aligned} \tag{10}$$

где

$$\tilde{f}_1(x) = x \text{ при } x < 1 \text{ и } \tilde{f}_1(x) = 1 \text{ при } x \geq 1,$$

$$\tilde{F}_{pl}(\tilde{u}, \tilde{v}) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\tilde{P}_{pl1}(\psi)\tilde{P}_{pl2}(\psi)} \left[\tilde{\gamma}_{pl}^2 + \frac{\tilde{u}^2}{\tilde{P}_{pl1}^2(\psi)} + \frac{\tilde{v}^2}{\tilde{P}_{pl2}^2(\psi)} \right]^{-3/2},$$

$$\tilde{P}_{pl1}(\psi) = P_{pl1}(\psi)/P_{pl0}, \quad \tilde{P}_{pl2}(\psi) = P_{pl2}(\psi)/P_{pl0}, \quad \tilde{\gamma}_{pl} = \gamma_{pl}P_{pl0}/\bar{\theta},$$

P_{pl0} — численный коэффициент, выбранный для нормирования:

$$P_{pl0} = P_{pl1}(\psi = 0) = 4 \int_0^\pi |2\sigma - 3 + 5 \cos^2 \vartheta| \sin^2 \vartheta |\cos \vartheta| d\vartheta.$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении форма кривой, описывающей рассеяние частиц на искажённой цепочке атомов, т.е. форма осевой теневой картины, оказывается функцией параметра $\tilde{\gamma}_{pl}$, равного отношению величины γ_{pl} , определяющей мощность и концентрацию дефектов, к исходной ширине теневой картины $\bar{\theta}$.

На рисунке 1 приведены полученные с использованием выражений (9), (10) несколько характерных примеров поведения функции распределения рассеянных частиц. На рисунке 1, а представлены графики функции $f_{pl}(\theta_x, 0)$ при различных значениях параметра $\tilde{\gamma}_{pl}$ в случае, когда рассеивающая цепочка параллельна вектору Бюргера ($\psi = 0$). Из рисунка видно, что величина минимального выхода $f_{min}^{pl} = f_{pl}(0, 0)$ увеличивается с ростом мощности дефекта, причём

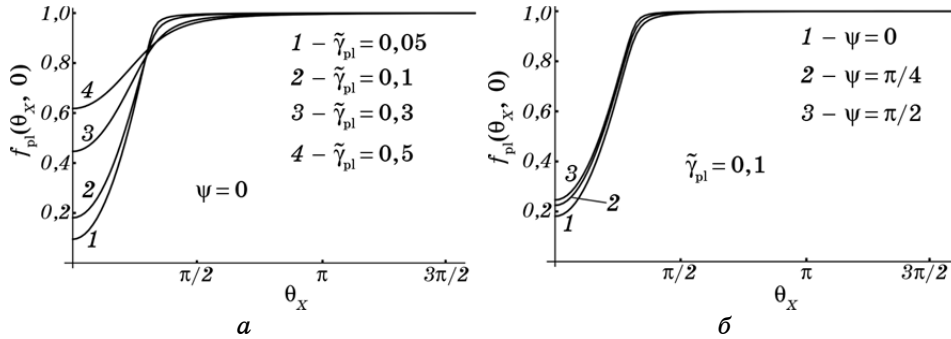


Рис. 1. Характер распределения рассеянных частиц для призматических петель, согласно (10). Функция $f_{pl}(\theta_x, 0)$ при разных значениях параметра $\tilde{\gamma}_{pl}$: 0,05 — кривая 1, 0,1 — кривая 2, 0,3 — кривая 3, 0,5 — 4 ($\psi = 0$) (а); функция $f_{pl}(\theta_x, 0)$ при разных ориентациях вектора Бюргера петли (направления z) относительно направления наблюдения тени: кривая 1 — $\psi = 0$, кривая 2 — $\psi = \pi/4$, кривая 3 — $\psi = \pi/2$ ($\tilde{\gamma}_{pl} = 0,1$) (б).

уже при $\tilde{\gamma}_{pl} = 0,5$ глубина лунки становится существенно меньше величины минимального выхода. На рисунке 1, б приведены графики функции распределения $f_{pl}(\theta_x, 0)$ при различных ориентациях вектора Бюргера относительно направления наблюдения осевой тени Z . Как видно из этих графиков, ширина тени в рассмотренных случаях практически не меняется, в то время как минимальный выход существенно зависит от мощности дефекта и его ориентации относительно направления наблюдения теневой картины. Поэтому далее более подробно рассмотрим только значение минимального выхода тени, поскольку оно наиболее чувствительно к изменению параметров дефектов.

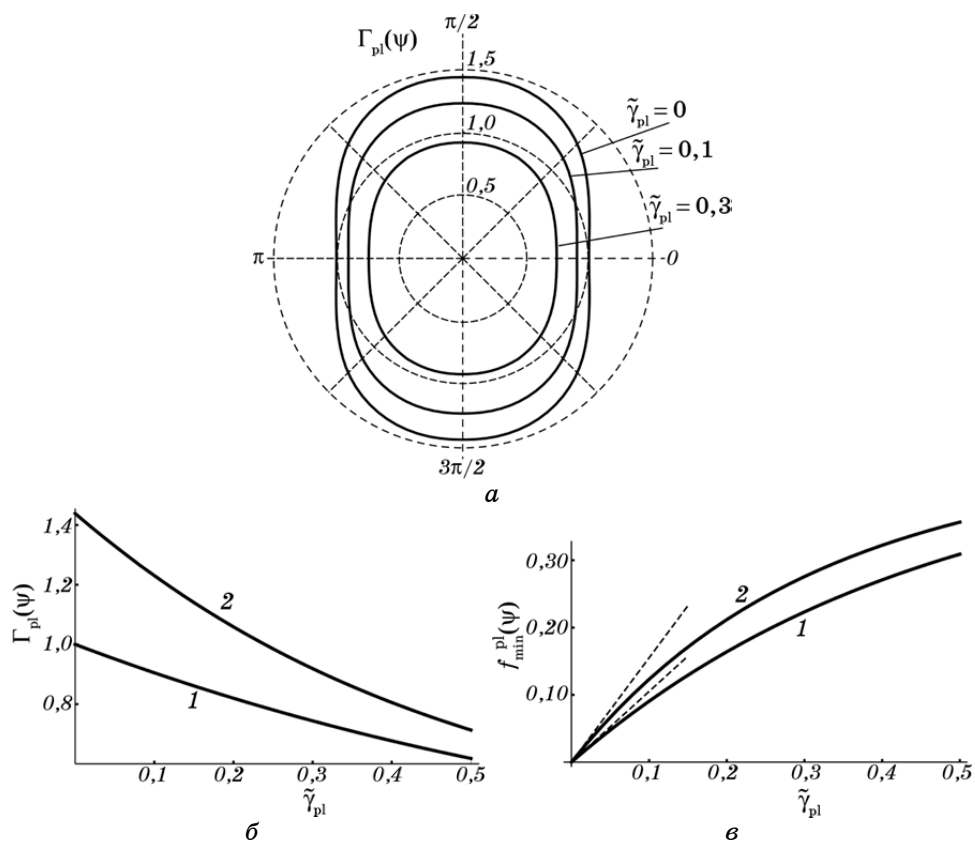


Рис. 2. Минимальный выход рассеянных частиц при наличии семейства параллельных призматических петель. Зависимость фактора $\Gamma_{pl}(\psi)$ от угла ψ при разных значениях параметра $\tilde{\gamma}_{pl}$: кривая 1 — $\tilde{\gamma}_{pl} = 0$, кривая 2 — $\tilde{\gamma}_{pl} = 0,1$, кривая 3 — $\tilde{\gamma}_{pl} = 0,3$ (а); зависимость $\Gamma_{pl}(\psi)$ от $\tilde{\gamma}_{pl}$: кривая 1 — $\psi = 0$, кривая 2 — $\psi = \pi/2$ (б); зависимость в целом минимального выхода $f_{min}^{pl}(\psi)$ от параметра $\tilde{\gamma}_{pl}$: кривая 1 — $\psi = 0$, кривая 2 — $\psi = \pi/2$ (в).

Как следует из (1), (10) выражение для величины минимального выхода осевой теневой картины $f_{\min}^{\text{pl}}(\psi) = f_{\text{pl}}(\theta_X = 0, \theta_Y = 0)$ в данном случае принимает следующий вид:

$$f_{\min}^{\text{pl}}(\psi) = 2\tilde{\gamma}_{\text{pl}}\Gamma_{\text{pl}}(\psi), \quad \Gamma_{\text{pl}}(\psi) = 2^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}_1(u^2 + v^2) \tilde{F}_{\text{pl}}(\tilde{u}, \tilde{v}) d\tilde{u} d\tilde{v}, \quad (11)$$

где $\Gamma_{\text{pl}}(\psi)$ – фактор, который характеризует ориентацию дефекта относительно рассеивающей цепочки и, вообще говоря, зависящий также от параметра $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$, характеризующего мощность и концентрацию дефектов.

На рисунке 2 представлены зависимости минимального выхода для призматических петель, как от угла наклона этих петель ψ , так и от параметра $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$. На рисунке 2, а показана зависимость фактора $\Gamma_{\text{pl}}(\psi)$ от угла ψ при разных значениях параметра $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$, а на рис. 2, б — зависимость $\Gamma_{\text{pl}}(\psi)$ от $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$ при фиксированных значениях угла ψ . Отсюда видно, что значение $\Gamma_{\text{pl}}(\psi)$ уменьшается с ростом параметра $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$, однако характер угловой зависимости $\Gamma_{\text{pl}}(\psi)$ при этом почти не изменяется. Нетрудно также видеть, что при всех значениях $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$ величина $\Gamma_{\text{pl}}(\psi)$, а, следовательно, и величина минимального выхода $f_{\min}^{\text{pl}}(\psi)$ оказывается максимальной при $\psi = \pi/2$, т.е., когда рассеивающая цепочка, перпендикулярна вектору Бюргера: $z \perp Z$. Минимальное же значение $f_{\min}^{\text{pl}}(\psi)$ будет иметь место при $\psi = 0$, т.е. $z \parallel Z$. Таким образом, угловая анизотропия минимального выхода теневой картины в случае призматических дислокационных петель проявляется очень чётко. Зависимость в целом величины минимального выхода рассеяния от эффективного параметра $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$, определяющего мощность дефектной структуры, показана на рис. 2, в. Как и следовало ожидать, значение $f_{\min}^{\text{pl}}(\psi)$ с увеличением параметра $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$ растёт слабее, чем по линейному закону, причём соответствующее расхождение становится весьма значительным при $\tilde{\gamma}_{\text{pl}}$ порядка 0,3–0,5.

4. МИНИМАЛЬНЫЙ ВЫХОД РАССЕЙАННЫХ ЧАСТИЦ ДЛЯ СКОЛЬЗЯЩИХ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ

Рассмотрим теперь кристалл, в котором имеется семейство параллельных скользящих дислокационных петель с одинаковыми векторами Бюргера. В отличие от призматических петель, скользящие имеют два выделенных направления — нормаль к плоскости петли и вектор Бюргера, лежащий в плоскости петли. Поэтому скользящие петли характеризуются двумя углами относительно лабораторной системы координат XYZ , связанной с рассеивающей цепочкой (см. рис. 3).

В качестве одного из таких углов снова выберем ψ — угол между

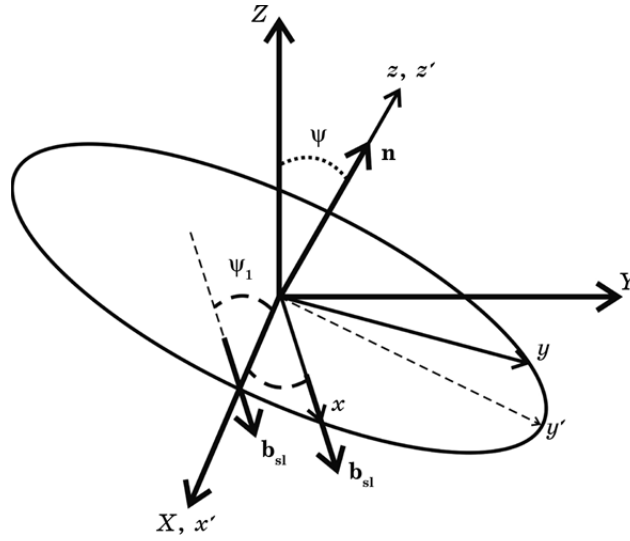


Рис. 3. Взаимная ориентация выделенных направлений скользящей дислокационной петли и лабораторной системы координат X, Y, Z : \mathbf{n} — нормаль к плоскости петли, \mathbf{b}_{sl} — вектор Бюргера петли, ψ — угол между \mathbf{n} и осью Z , ψ_1 — угол между вектором \mathbf{b}_{sl} и осью X .

нормалью к плоскости петли \mathbf{n} (т.е. осью z в собственной системе координат петли) и направлением рассеивающей цепочки Z . Как и в [12], будем считать, что вектор Бюргера \mathbf{b}_{sl} скользящей петли в её системе координат направлен вдоль оси x . Учитывая, что в любой точке на окружности петли вектор Бюргера одинаков, и, полагая, что ось Y лежит в плоскости Zz , согласно рис. 3, нетрудно видеть, что другим углом, который характеризует скользящую петлю в лабораторной системе координат, удобно выбрать угол ψ_1 , т.е. угол между вектором Бюргера и осью X . Согласно [12], поля смещения атомов кристалла на больших расстояниях от рассматриваемого дефекта в собственной системе координат петли и в приближении изотропного континуума описываются следующим выражением:

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{b_{sl} S_{sl} g_{ixz}}{4\pi(1-\sigma)}, \quad (12)$$

где S_{sl} — площадь скользящей петли, b_{sl} — модуль её вектора Бюргера, а тензор g_{ijk} определён в (5). Соответствующие компоненты тензора дисторсии, обусловленные такой дислокационной петлёй, в лабораторной системе координат имеют следующий вид:

$$u_{XZ}^l = \alpha_0^{sl} \frac{\alpha_X^{sl}(\psi, \psi_1, \vartheta, \varphi)}{r_i}, \quad u_{YZ}^l = \alpha_0^{sl} \frac{\alpha_Y^{sl}(\psi, \psi_1, \vartheta, \varphi)}{r_i}, \quad \alpha_0^{sl} = \frac{3b_{sl} S_{sl}}{4\pi(1-\sigma)}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \alpha_X^{sl}(\psi, \psi_1, \vartheta, \varphi) &= \sin \psi [(1 - 2\sigma \cos^2 \psi_1 + 5 \cos 2\psi_1 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi) \sin \varphi - \\ &\quad - \cos \psi_1 \sin \psi_1 (2\sigma - 5 \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi) \cos \varphi] \cos \vartheta \sin \vartheta + \\ &\quad + \cos \psi [\cos \psi_1 \{(1 - 2\sigma)(1/3) - \cos^2 \vartheta\} + \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi (1 - 5 \cos^2 \vartheta)] + \\ &\quad + \sin \psi_1 (1 - 5 \cos^2 \vartheta) \sin^2 \vartheta \cos \varphi \sin \varphi], \\ \alpha_Y^{sl}(\psi, \psi_1, \vartheta, \varphi) &= \cos^2 \psi [\sin \psi_1 \{(1 - 2\sigma)(1/3) - \cos^2 \vartheta\} - \\ &\quad - (1 - 5 \cos^2 \vartheta) \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi] + \cos \psi_1 (1 - 5 \cos^2 \vartheta) \sin^2 \vartheta \cos \varphi \sin \varphi - \\ &\quad - \sin^2 \psi [\sin \psi_1 \{(1 - 2\sigma)(\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi - (1/3)) - \cos^2 \vartheta (1 - 5 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi)\} + \\ &\quad + \cos \psi_1 (1 - 2\sigma + 5 \cos^2 \vartheta) \sin^2 \vartheta \cos \varphi \sin \varphi] + \cos \psi \sin \psi [\{2\sigma \cos^2 \psi_1 - \\ &\quad - 5 \cos^2 \vartheta + 5 \sin^2 \vartheta (\sin^2 \psi_1 \cos^2 \varphi + \cos^2 \psi_1 \sin^2 \varphi)\} \cos \varphi - \\ &\quad - \sin 2\psi_1 (\sigma - 5 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi) \sin \varphi] \cos \vartheta \sin \vartheta. \end{aligned}$$

Здесь r, ϑ, φ — сферические переменные в собственной системе координат дефекта.

В результате для функции распределения рассеянных частиц $f_{sl}(\theta_X, \theta_Y)$, т.е. формы осевой теневой картины при наличии семейства скользящих дислокационных петель, получаем выражение, аналогичное (10):

$$f_{sl}(\theta_X, \theta_Y) = f_{sl} \left(\frac{\theta_X}{\bar{\theta}}, \frac{\theta_Y}{\bar{\theta}} \right) = \tilde{\gamma}_{sl} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}_1 [(\theta_X/\bar{\theta} - \tilde{u})^2 + (\theta_Y/\bar{\theta} - \tilde{v})^2] \times \quad (14)$$

$$\times \tilde{F}_{sl}(\tilde{u}, \tilde{v}) d\tilde{u} d\tilde{v},$$

$$\tilde{F}_{sl}(\tilde{u}, \tilde{v}) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\tilde{P}_{sl1}(\psi) \tilde{P}_{sl2}(\psi)} \left[\tilde{\gamma}_{sl}^2 + \frac{\tilde{u}^2}{\tilde{P}_{sl1}^2(\psi)} + \frac{\tilde{v}^2}{\tilde{P}_{sl2}^2(\psi)} \right]^{-3/2},$$

$$\tilde{P}_{sl1}(\psi) = P_{sl1}(\psi)/P_{sl0}, \quad \tilde{P}_{sl2}(\psi) = P_{sl2}(\psi)/P_{sl0},$$

где

$$P_{sl1}(\psi, \psi_1) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta |\alpha_X^{sl}(\psi, \psi_1, \vartheta, \varphi)| d\vartheta, \quad (15)$$

$$P_{sl2}(\psi, \psi_1) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta |\alpha_Y^{sl}(\psi, \psi_1, \vartheta, \varphi)| d\vartheta,$$

$$\tilde{\gamma}_{sl} = \frac{\rho_{sl} b_{sl} S_{sl}}{8(1 - \sigma)} \frac{P_{sl0}}{\bar{\theta}}, \quad P_{sl0} = P_{pl0}/2.$$

Выбор нормировочного коэффициент P_{sl0} здесь обусловлен тем, что при этом выражения $\tilde{\gamma}_{pl}$ и $\tilde{\gamma}_{sl}$, определяющие нормированные мощности соответственно призматических и скользящих дислокационных петель, как видно из (7), (10), (15), совпадают.

В результате выражение для минимального выхода рассеянных частиц в случае скользящих дислокационных петель примет следующий вид:

$$f_{\min}^{\text{sl}} = f_{\text{sl}}(\theta_X = 0, \theta_Y = 0) = 2\tilde{\gamma}_{\text{sl}}\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1), \quad (16)$$

и будет отличаться от минимального выхода для призматических петель (11) только видом углового фактора $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$, который зависит от ориентации рассматриваемого здесь семейства скользящих дислокаций относительно рассеивающей цепочки

$$\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}_1(u^2 + v^2) \tilde{F}_{\text{sl}}(\tilde{u}, \tilde{v}) d\tilde{u} d\tilde{v}. \quad (17)$$

Как видно из (11), в случае призматических дислокационных петель соответствующий фактор $\Gamma_{\text{pl}}(\psi)$ зависит только от одного угла ψ , а именно между направлением наблюдения теневой картины и нормалью к плоскости петли. Для семейства же скользящих петель величина $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$ является функцией двух углов ψ и ψ_1 , определяющих ориентацию нормали к плоскости петли и вектора Бюргерса в лабораторной системе координат (см. рис. 3).

Выражения (14)–(17) позволяют выполнить подробный анализ функции распределения рассеянных частиц при произвольных ориентациях семейства скользящих дислокационных петель относительно выбранного направления осевой теневой картины. Однако здесь мы ограничимся лишь анализом угловой зависимости такого минимального выхода, которая, согласно (16), описывается фактором $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$.

На рисунке 4 в качестве примера представлены некоторые характерные зависимости фактора $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$ от углов ψ и ψ_1 , определённых на рис. 3 (параметр $\tilde{\gamma}_{\text{sl}}$ всюду выбран равным 0,1). На рисунке 4, а изображена зависимость этого фактора от угла ψ_1 при трёх фиксированных значениях угла ψ : $\psi = 0, \pi/4, \pi/2$. Здесь видно, что имеется достаточно существенное отклонение полученных кривых от окружности, которая отвечала бы изотропии функции $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$ по углу ψ_1 . На врезках более подробно показаны те области углов ψ_1 , где две из трёх рассматриваемых зависимостей принимают близкие между собой значения. На рисунке 4, б показан общий вид зависимости фактора $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$ от углов ψ и ψ_1 в цилиндрической системе координат, где вдоль оси z отложено значение угла ψ от 0 до $\pi/2$. Угол ψ_1 отсчитывается здесь в нормальной к оси z плоскости, отвечающей некоторому значению величины ψ , а радиус-вектор в этой плоскости описывает значения $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$. На рисунке 4, в показана зависимость величины $\Gamma_{\text{sl}}(\psi, \psi_1)$ от ψ при нескольких фиксированных значениях угла ψ_1 , т.е. здесь представлены некоторые огибающие цилиндрической поверхности, показанной на рис. 4, б, тогда

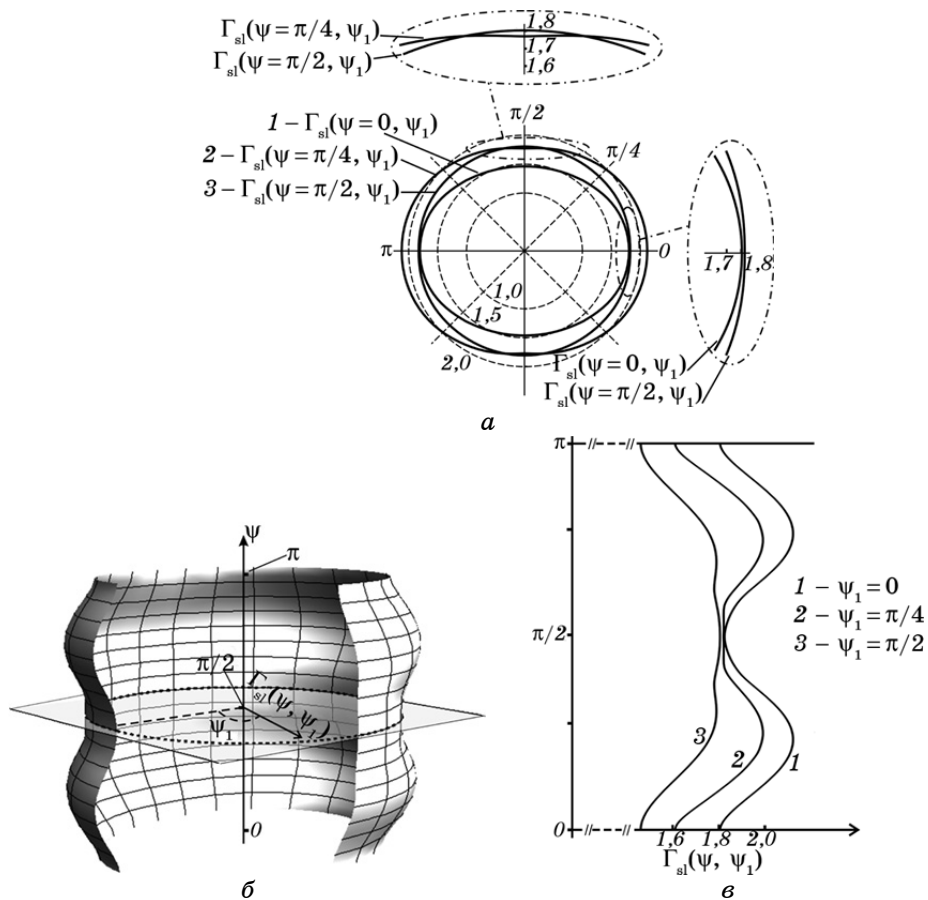


Рис. 4. Угловая зависимость минимального выхода и фактора $\Gamma_{sl}(\psi, \psi_1)$ осевой теневой картины при наличии семейства скользящих дислокационных петель (углы ψ, ψ_1 показаны на рис. 3, а параметр $\tilde{\gamma}_{sl}$ всюду выбран равным 0,1). Зависимость $\Gamma_{sl}(\psi, \psi_1)$ от ψ_1 : $\psi = 0$ — кривая 1, $\psi = \pi/4$ — кривая 2, $\psi = \pi/2$ — кривая 3 (а); общий вид зависимости $\Gamma_{sl}(\psi, \psi_1)$ от ψ и ψ_1 в цилиндрической системе координат, где ψ отложено вдоль оси z , ψ_1 отсчитывается в плоскости, нормальной к z , а радиус-вектор в этой плоскости определяет значения $\Gamma_{sl}(\psi, \psi_1)$ (б); зависимость величины $\Gamma_{sl}(\psi, \psi_1)$ от ψ при заданных значениях ψ_1 (в).

как рис. 4, а отвечает определённым горизонтальным сечениям этой поверхности.

Полученные здесь и в разделе 3 выражения для $\Gamma_{sl}(\psi, \psi_1)$ и $\Gamma_{pl}(\psi)$ предоставляют достаточно широкие возможности для выполнения последовательного анализа угловых зависимостей минимального выхода рассеянных частиц.

Наиболее интересными в этом отношении являются осевые тене-

вые картины в монокристаллических образцах, где можно сопоставлять результаты, полученные для различных кристаллографических направлений, и на этой основе определять характер дефектной структуры кристаллов, в частности, различать разные виды дислокационных петель.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненный в настоящей работе анализ влияния призматических и скользящих дислокационных петель на осевую теневую картину, возникающую при рассеянии частиц высоких энергий в кристаллах, показывает, что эти дефекты, как и другие типы несферических дефектов, например, рассмотренные в [8–10] прямолинейные дислокации и эллипсоидальные включения, приводят к существенной зависимости параметров и вида функции распределения рассеянных частиц, в том числе и минимального выхода, от ориентации указанных дефектов относительно направления рассеивающей цепочки. При этом характер такой угловой зависимости для разных дефектов будет существенно различаться между собой, что, в принципе, позволяет разделять соответствующие вклады. Для хаотически же распределённых изотропных дефектов, т.е. сферически симметричных включений и точечных дефектов, ориентационная зависимость осевой теневой картин, как было показано в [10], будет проявляться только вследствие вариации значений величин θ для разных кристаллографических направлений. Это, на первый взгляд, могло бы позволить с самого начала выделить вклад за счёт таких дефектов. Однако если в кристалле будет присутствовать несколько семейств анизотропных дефектов, в частности, дислокационных петель, имеющих различную кристаллографическую ориентацию их выделенных направлений, то анализ дефектной структуры кристалла на основе угловой зависимости минимального выхода может встретиться с существенными трудностями. Это связано с тем, что при этом в значительной степени восстанавливается угловая изотропия величины минимального выхода, так что вклад от анизотропных дефектов становится трудно отделить от вклада, обусловленного изотропными дефектами. Поэтому предложенный в настоящей работе метод анализа дислокационной структуры кристаллов, включая разделение скользящих и призматических дислокационных петель, оказывается наиболее предпочтительным в случае, когда в кристалле имеется одно семейство дислокационных петель.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. J. Quere, *phys. status solidi*, **30**: 713 (1968).

2. Л. И. Иванов, Н. А. Махлин, *Изв. АН СССР. Металлы*, № 6: 154 (1970).
3. Л. И. Иванов, А. С. Кошкин, Г. Н. Маренов, Н. А. Махлин, *Труды IV Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами* (Москва: МГУ: 1973), с. 357.
4. В. П. Коробейников, А. А. Пузанов, В. Н. Пьянков, Г. Ю. Хропин, *Труды IV Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами* (Москва: МГУ: 1975), с. 413.
5. Й. Линдхард, *Успехи физических наук*, **99**: 249 (1969) (пер. с англ.).
6. J. Quere, *J. Nucl. Mater.*, **53**: 262 (1974).
7. L. Wielunski, D. Wielunska, G. Della Mea, and A. Tuross, *Nucl. Instrum. Methods*, **168**: 323 (1980).
8. М. А. Иванов, Л. Б. Квашнина, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 6: 811 (2006).
9. М. А. Иванов, Л. Б. Квашнина, *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 2: 161 (2008).
10. М. А. Иванов, Л. Б. Квашнина, В. С. Молодид, *Металлофиз. новейшие технол.*, **32**, № 10: 1335 (2010).
11. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка: 1983).
12. Дж. Эшелби, *Континуальная теория дислокаций* (Москва: Издательство иностранной литературы: 1963) (пер. с англ.).

REFERENCES

1. J. Quere, *phys. status solidi*, **30**: 713 (1968).
2. L. I. Ivanov and N. A. Makhlin, *Izv. AN SSSR. Metallurgy*, No. 6: 154 (1970) (in Russian).
3. L. I. Ivanov, A. S. Koshkin, G. N. Marenov, and N. A. Makhlin, *Trudy IV Vsesoyuznogo Soveshchaniya po Fizike Vzaimodeystviya Zaryazhennykh Chastits s Monokristallami* (Moscow: MGU: 1973), p. 357 (in Russian).
4. V. P. Korobeynikov, A. A. Puzanov, V. N. P'yankov, and G. Yu. Khropin, *Trudy IV Vsesoyuznogo Soveshchaniya po Fizike Vzaimodeystviya Zaryazhennykh Chastits s Monokristallami* (Moscow: MGU: 1975), p. 413 (in Russian).
5. J. Lindhard, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **99**: 249 (1969) (Russian translation).
6. J. Quere, *J. Nucl. Mater.*, **53**: 262 (1974).
7. L. Wielunski, D. Wielunska, G. Della Mea, and A. Tuross, *Nucl. Instrum. Methods*, **168**: 323 (1980).
8. M. O. Ivanov and L. B. Kvashnina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **28**, No. 6: 811 (2006) (in Russian).
9. M. O. Ivanov and L. B. Kvashnina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **30**, No. 2: 161 (2008) (in Russian).
10. M. O. Ivanov, L. B. Kvashnina, and V. S. Molodid, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **32**, No. 10: 1335 (2010) (in Russian).
11. M. A. Krivoglaz, *Difraktsiya Rentgenovskikh Luchey i Neytronov v Neideal'nykh Kristallakh* (Kiev: Naukova Dumka: 1983) (in Russian).
12. J. Eshelby, *Kontinual'naya Teoriya Dislokatsiy* [Continual Theory of Dislocations] (Moscow: Izdatel'stvo Inostrannoy Literatury: 1963) (Russian translation).