



И. С. Браиовицкий С. А. Кохтев

086-88

**ДИФФУЗИЯ В КРИСТАЛЛАХ
С ПРОТЯЖЕННЫМИ СТРУКТУРНЫМИ
ДЕФЕКТАМИ**

МОСКВА 1988

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ СССР ПО НАРОДНОМУ
ОБРАЗОВАНИЮ

МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

И.С.Брановицкий С.А.Кохтев

ДИФфуЗИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ПРОТЯЖЕННЫМИ
СТРУКТУРНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Препринт 086-88

БИБЛИОТЕЧНЫЙ
ФОНД
НИИУ МИФИ

Утверждено
редсоветом института

Москва 1988

БИБЛИОТЕКА
МИФИ

Брановицкий И.С., Кохтев С.А. Диффузия в кристаллах с протяженными структурными дефектами. М.: Препринт/МИФИ, 086-88, 1988. - 24с.

На основе аналогии между кинетическим уравнением для диффундирующих частиц и одночастичным уравнением Шредингера развит микроскопический подход к описанию диффузии в кристаллах с протяженными дефектами. Параметры феноменологических моделей выражены через микроскопические характеристики кристалла. Вычислены долговременные асимптотики среднеквадратичного смещения частиц при диффузии по границе зерен и по ядру дислокации. Предложена модификация существующих феноменологических моделей диффузии в кристаллах с границей зерен, дислокацией и стенкой дислокаций.

ВВЕДЕНИЕ

Характер диффузионных процессов в реальных твердых телах существенно зависит от свойств протяженных дефектов кристаллической структуры — дислокаций и границ зерен, которые представляют собой пути ускоренной диффузии [1]. В настоящее время практически все диффузионные расчеты для дефектных кристаллов ведутся в рамках феноменологических моделей. В частности, в модели Фишера [2] большеугольная граница зерен (ГЗ) представляется в виде однородной и изотропной пластинки толщины δ с высоким коэффициентом диффузии D_{GB} ($D_{GB} \gg D_0$, где D_0 — коэффициент диффузии в идеальном кристалле). Для описания малоугольной ГЗ-наклона используется т.н. трубочная модель [3], в которой граница представляет собой ряд цилиндрических областей радиуса r_0 с параллельными осями, лежащими в одной плоскости на расстоянии d друг от друга, причем $r_0 \ll d$. Каждая из этих областей моделирует ядро дислокации и характеризуется коэффициентом диффузии D_D ($D_D \gg D_0$). В случае промежуточных углов разворота зерен используются аналогичные модели [4,5].

Расчеты [6], выходящие за рамки модели Фишера и трубочной модели, учитывают упругие поля, генерируемые в кристалле границей зерен. Однако такой подход справедлив лишь на больших расстояниях от границы и не может быть применен для описания процесса диффузии непосредственно в области ядра дефекта.

До настоящего времени отсутствует последовательный микроскопический подход к проблеме диффузии в среде с протяженными структурными дефектами, поэтому ниже мы обсудим один из возможных вариантов такого подхода и в качестве первого шага свяжем параметры феноменологических моделей с микроскопическими характеристиками системы, в которой происходит диффузия. Будем рассматривать диффузию примесей внедрения, но аналогичный анализ можно провести и для самодиффузии, если миграция в области дефекта идет по вакансионному механизму. В этом случае диффундирующей частицей является вакансия.

Существует несколько методов вычисления коэффициента диффузии примеси (вакансии) в идеальном кристалле. Это теория переходного состояния [7], динамические теории [8,9] и так называемый стохастический подход [10], рассматривающий диффузию частицы в криста-

лической решетке как броуновское движение во внешнем поле. Именно этот подход будем использовать для описания диффузии в кристалле с протяженными структурными дефектами.

1. СТОХАСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДИФфуЗИИ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ И ПЕРЕХОД К МАКРОСКОПИЧЕСКОМУ ДИФфуЗИОННОМУ УРАВНЕНИЮ

В работе [10] было предложено рассматривать движение внедренной примесной частицы в твердом теле (матрице) как броуновское и описывать его стохастическим дифференциальным уравнением (уравнением Ланжевена) :

$$m\ddot{\vec{z}} + m\gamma\dot{\vec{z}} + \nabla U(\vec{z}) = \vec{f}(t), \quad (1)$$

где $\vec{z}$ и m - координата и масса диффундирующей частицы; γ - коэффициент трения; $U(\vec{z})$ - потенциал, действующий на диффундирующую частицу со стороны частиц матрицы; $\vec{f}(t)$ - случайная сила (тепловой шум) .

Все сведения о структуре решетки содержатся в потенциале $U(\vec{z})$. Уравнение (1) можно использовать в случае произвольной (непериодической) зависимости $U(\vec{z})$ при определенных ограничениях, которые будут обсуждены ниже. Это уравнение удобно для анализа диффузии в кристалле с дефектами, т.к. позволяет единым образом описать движение частицы в области ядра дефекта и в идеальной решетке на больших расстояниях от ядра.

В работе [10] уравнение (1) вводилось феноменологически, однако такой стохастический подход можно строго обосновать, используя технику проекционных операторов [11], и получить в рамках теории линейного отклика обобщенное стохастическое уравнение движения [12]. В этом случае вместо коэффициента трения в уравнении фигурирует интегральный оператор, т.е. уравнение движения становится немарковским:

$$m\ddot{\vec{z}} + m \int \hat{\mathcal{K}}(t-\tau) \dot{\vec{z}}(\tau) d\tau + \nabla U(\vec{z}) = \vec{f}(t). \quad (2)$$

Функция памяти $\hat{\mathcal{K}}(t)$ релаксирует за время τ_c . Этот параметр существенно зависит от свойств фононного газа, с которым взаимодействует примесная частица. Для акустических фононов и легких примесей $\tau_c \sim \omega_D^{-1}$ (ω_D - дебаевская частота кристалла) и

работает марковская аппроксимация [12]:

$$\mathcal{K}(t) \approx 2\gamma \delta(t), \quad (3)$$

где $\gamma = \int \mathcal{K}(t) dt$ и $\hat{\mathcal{K}}(t) = \hat{J} \mathcal{K}(t)$; $\hat{J}$ — единичный тензор. Однако в случае взаимодействия с оптическими фононами марковское приближение (3) неприменимо, т.к. $\tau_0 \gg \omega_D^{-1}$ [12].

В дальнейшем мы будем рассматривать только одноатомные решетки, в которых отсутствуют оптические моды, и пользоваться уравнением (1). Пределы применимости этого уравнения обсуждаются в разделе 3.

Хорошо известно [13], что уравнение (1) приводит к уравнению Фоккера-Планка для функции распределения $P(\vec{z}, \vec{p}, t)$:

$$P(\vec{z}, \vec{p}, t) \equiv \langle \delta(\vec{z} - \vec{z}(t)) \delta(\vec{p} - \vec{p}(t)) \rangle, \quad (4)$$

где угловые скобки означают усреднение по реализациям случайной силы $\vec{f}(t)$. В диффузионных задачах представляет интерес пространственное распределение частиц на достаточно больших временах, поэтому в дальнейшем будем рассматривать функцию распределения в координатном пространстве $P(\vec{z}, t) \equiv \langle \delta(\vec{z} - \vec{z}(t)) \rangle$, которая есть интеграл от $P(\vec{z}, \vec{p}, t)$ по переменной $\vec{p}$. При условии

$$|\nabla^2 U(\vec{z})| / m\gamma^2 \ll 1 \quad (5)$$

и $t \gg \omega_D^{-1}$ для функции $P(\vec{z}, t)$ можно получить уравнение движения с оператором эволюции $\hat{L}$ [14] (уравнение Смолуховского):

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{z}, t) = \hat{L} P(\vec{z}, t), \quad (6)$$

$$\hat{L} = \nabla D_0 (\nabla + \nabla U(\vec{z}) / kT), \quad (6a)$$

где $D_0 = kT / m\gamma$ — коэффициент свободной диффузии (в отсутствие поля $U(\vec{z})$). Мы будем пользоваться уравнением (6), считая условие (5) выполненным. В разделе 3 будет произведена оценка параметров, фигурирующих в (5), для конкретных систем матрица-примесь, а также рассмотрен вопрос о выходе за рамки этого условия.

Уравнение Смолуховского (6) микроскопическое в том смысле, что функция $P(\vec{z}, t)$ отслеживает все детали потенциала $U(\vec{z})$ с атомным разрешением. На практике приходится иметь дело с макроскопической функцией распределения, которая с точностью до нормировки совпадает с концентрацией диффундирующих частиц и представляет

собой усредненную по физически бесконечно малому объему функцию $P(\vec{z}, t)$. Будем обозначать усреднение функции распределения тильдой: $\tilde{P}(\vec{z}, t)$.

Если частица диффундирует в идеальной кристаллической решетке ($U(\vec{z}) \equiv U_c(\vec{z})$), существует общий метод перехода от точной функции распределения $P_0(\vec{z}, t)$, удовлетворяющей уравнению Смолюховского, к огрубленной функции $\tilde{P}_0(\vec{z}, t)$, которая удовлетворяет макроскопическому уравнению диффузии [15]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}_0(\vec{z}, t) = \frac{\partial}{\partial z_i} D_{ij} \frac{\partial}{\partial z_j} \tilde{P}_0(\vec{z}, t), \quad (7)$$

где D_{ij} — макроскопический тензор диффузии.

Идея метода [15] такова: уравнение (6) сводится к кинетическому уравнению с эрмитовым оператором эволюции (оператор $\hat{L}$ неэрмитов), а затем используются свойства спектра и собственных функций эрмитова оператора. Необходимое преобразование уравнения (6) достигается простой заменой

$$P_0(\vec{z}, t) = \exp(-U_c(\vec{z})/2kT) \Psi_0(\vec{z}, t). \quad (8)$$

Подставляя (8) в уравнение (6), получим:

$$-\hat{D}_0^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\vec{z}, t) = \hat{H}_0 \Psi_0(\vec{z}, t), \quad (9)$$

где

$$\hat{H}_0 = -\nabla^2 + U_c^*(\vec{z}), \quad (9a)$$

$$U_c^*(\vec{z}) = (\nabla U_c/2kT)^2 - \nabla^2 U_c/2kT. \quad (9b)$$

Легко заметить, что (9) с точностью до обозначений совпадает с уравнением Шредингера с мнимым временем. Уравнения (6) и (9) будем называть сопряженными.

В силу эрмитовости и периодичности оператор $\hat{H}_0$ имеет чисто релаксационный зонный спектр, а его собственные функции образуют полный ортогональный набор [15]. Функция $\Psi_0(\vec{z}, t)$ запишется в виде

$$\Psi_0(\vec{z}, t) = \sum_n \int_{3B} d\vec{k} C_n(\vec{k}) e^{-D_0 E_n^0(\vec{k}) t} \psi_n^0(\vec{k}, \vec{z}), \quad (10)$$

где ψ_n^0 и E_n^0 — собственные функции и собственные значения оператора $\hat{H}_0$ в n -ой энергетической зоне; C_n — константы, зависящие от волнового вектора $\vec{k}$; интегрирование ведется по пер-

вой зоне Бриллюэна, порождаемой периодическим потенциалом $U_0^*(\vec{z})$. При больших временах в (10) можно учитывать вклад только нижней энергетической зоны ($n=1$), т.к. относительный вклад остальных слагаемых экспоненциально мал. Кроме этого, при интегрировании существенны лишь малые значения $\vec{k}$. Разлагая функции, входящие в (10), в окрестности $\vec{k}=0$, окончательно получим:

$$P_0(\vec{z}, t) = e^{-\frac{U_0}{kT}} (\pi D_0 t)^{-d/2} (\det \varepsilon_{ij}) \exp\left(\frac{z_i \varepsilon_{ij}^{-1} z_j}{4 D_0 t}\right) (1 + o(1/t)), \quad (11)$$

где

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_1^0(\vec{k}=0)}{\partial k_i \partial k_j}, \quad (12)$$

При получении (11) использовалось начальное условие $P(\vec{z}, 0) = \delta(\vec{z})$.

Итак, на больших временах ($t \gg \alpha^2 D_0^{-1} \max\{\varepsilon_{ij}\}$) точная функция Грина $P_0(\vec{z}, t)$ распадается на произведение осциллирующего с периодом α множителя $\exp(-U_0/kT)$ и медленно меняющейся на расстоянии порядка α огибающей, которая удовлетворяет уравнению диффузии (7) и является, таким образом, усредненной функцией распределения $\tilde{P}_0(\vec{z}, t)$. Из соотношений (11) и (12) следует, что

$$D_{ij}^0 = \frac{D_0}{2} \frac{\partial^2 E_1^0(\vec{k}=0)}{\partial k_i \partial k_j}, \quad (13)$$

т.е. макроскопический тензор диффузии определяется законом дисперсии $E_1^0(\vec{k})$ в нижней энергетической зоне, порождаемой сопряженным потенциалом $U_0^*(\vec{z})$, а также микроскопическим коэффициентом D_0 . Так как $D_0 = kT/m\gamma$, то выражение (13) есть по сути введение тензора обратной эффективной массы:

$$D_{ij}^0 = \frac{kT}{\gamma} \left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij}^0, \quad (14)$$

где

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij}^0 = \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 E_1^0(\vec{k}=0)}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (14a)$$

Легко обнаружить, что оператор (9a) аналогичен одноэлектронному гамильтониану в идеальной решетке и выражение (14 а) с точностью до постоянного множителя совпадает с соотношением, определяющим тензор обратной эффективной массы электрона в периодическом потенциале. Ввиду указанной аналогии описанный способ вычисления D_{ij} позволяет использовать всю совокупность методов зонной теории твердого тела [16]. В дальнейшем будем употреблять такие понятия электронной теории, как "волновая функция", "гамильто-

ниан", "основное состояние" и т.д., подразумевая описанную выше аналогию. Следует помнить, что эта аналогия формальна, но позволяет развить удобный метод огрубления точной функции распределения путем перехода к приближению эффективной массы в сопряженной задаче и тем самым вычислить макроскопический тензор диффузии.

Как уже отмечалось, макроскопическая функция распределения $\tilde{\rho}(\vec{z}, t)$ есть результат усреднения точной функции $\rho(\vec{z}, t)$ по физически бесконечно малому объему

$$\tilde{\rho}(\vec{z}, t) = \frac{1}{V(\vec{z})} \int_{V(\vec{z})} \rho(\vec{z}', t) d\vec{z}', \quad (15)$$

где $V(\vec{z}) \approx \ell^d$ — объем усреднения. Характерный размер ℓ представляет собой масштаб грубых пространственных переменных, в которых измеряется усредненная функция $\tilde{\rho}(\vec{z}, t)$.

В случае одномерной стационарной диффузии ($d = 1$) можно легко определить макроскопический коэффициент диффузии путем непосредственного использования соотношения (15) [6]. Это обусловлено тем, что плотность стационарного потока в одномерном пространстве не зависит от координаты. Результаты в этом случае совпадают с результатами метода эффективной массы [15]. Однако применение усреднения (15) для вычисления D_{ij} при $d > 1$ осложняется зависимостью плотности стационарного потока от координат и не может быть проведено в общем случае. Минимальная размерность среды, в которой может быть создан протяженный дефект (один из размеров дефекта совпадает с размером системы), равна двум, поэтому мы будем использовать электронную аналогию для описания диффузии в такой среде.

2. ДИФФУЗИЯ В КРИСТАЛЛЕ, СОДЕРЖАЩЕМ СТРУКТУРНЫЕ ДЕФЕКТЫ

Рассмотрим кристаллическую решетку, содержащую дефект, и представим потенциал $U(\vec{z})$, в котором движется диффундирующая частица, в виде

$$U(\vec{z}) = U_0(\vec{z}) + U_d(\vec{z}), \quad (16)$$

где $U_0(\vec{z})$ — потенциал идеальной решетки; $U_d(\vec{z})$ — дополнительный потенциал, наведенный дефектом.

В случае границы зерен (межфазной границы) под $U_0(\vec{z})$ мы под-

разумеваем следующую функцию:

$$U_0(\vec{z}) = \begin{cases} U_0^I(\vec{z}), & \vec{z} \in \Omega_I, \\ U_0^{II}(\vec{z}), & \vec{z} \in \Omega_{II}, \end{cases} \quad (17)$$

где $U_0^I(\vec{z})$ и $U_0^{II}(\vec{z})$ — потенциалы идеальной решетки, занимающей все пространство и ориентированной в соответствии с базисом I-го и II-го зерна; Ω_I и Ω_{II} — области пространства, занятые зернами I и II соответственно и разделенные плоскостью границы. Очевидно, что в случае межфазной границы вид потенциала в каждой из областей вообще говоря различен, а для межзеренной границы

$$U_0^{II}(\vec{z}) = U_0^I(\hat{T}\vec{z}), \quad (18)$$

где $\hat{T}$ — матрица разворота зерен относительно друг друга.

Точная функция распределения $P(\vec{z}, t)$ в дефектном кристалле удовлетворяет уравнению (6) с потенциалом (16). Используя подстановку $P(\vec{z}, t) = \exp(-U(\vec{z})/2kT) \Psi(\vec{z}, t)$, осуществим переход к сопряженной задаче, гамильтониан которой обозначим через $\hat{H}$:

$$\hat{H} = -\nabla^2 + U^*(\vec{z}). \quad (19)$$

Для потенциала $U^*(\vec{z})$ получим следующее выражение (см. (96)):

$$U^*(\vec{z}) = U_0^*(\vec{z}) + U_d^{**}(\vec{z}), \quad (20)$$

где U_d^{**} — потенциал дефекта в сопряженной задаче:

$$U_d^{**}(\vec{z}) = U_d^* - \nabla U_0(\vec{z}) \nabla U_d(\vec{z}) / 2(kT)^2. \quad (21)$$

Таким образом, гамильтониан $\hat{H}$ имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U_d^{**}(\vec{z}), \quad (22)$$

где $\hat{H}_0$ — одночастичный гамильтониан в случае идеальной решетки с периодическим потенциалом $U_0^*(\vec{z})$.

Итак, решение микроскопического кинетического уравнения (6) в дефектном кристалле определяется (с точностью до множителя $\exp(-U(\vec{z})/2kT)$ и замены $t \rightarrow i t$) решением одноэлектронного уравнения Шредингера в кристалле с дефектом той же размерности. Для расчета спектра и собственных функций гамильтониана $\hat{H}$ можно воспользоваться соответствующими методами, развитыми в электронной теории примесных и поверхностных состояний [16, 17]. Мы будем использовать трансляционные свойства потенциала для получения

результатов. Для конкретного дефекта расчеты могут быть проведены с использованием соответствующих приближений, продиктованных характером потенциала дефекта. Это, в частности, метод эффективного гамильтониана (при плавном изменении $U_d^{**}(\vec{z})$), метод сильной связи, метод Костера-Слэтера [16] и т.д.

Как уже отмечалось, при больших временах поведение функции распределения определяется низкоэнергетической структурой спектра оператора $\hat{H}$. Заметим, что в силу нормированности функции $P(\vec{z}, t)$ энергию основного состояния надо положить равной нулю. В противном случае интеграл от $P(\vec{z}, t)$ по объему расходится (при $E_1(0) > 0$) или стремится к нулю (при $E_1(0) < 0$) на больших временах. Из стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом (22) легко определить волновую функцию основного состояния ($E = 0$):

$$\psi_0(\vec{z}) = \sqrt{C} \exp\left(-\frac{U_0(\vec{z}) + U_d(\vec{z})}{2kT}\right), \quad (23)$$

где C — нормировочная константа. Тогда стационарная функция распределения, как и следовало ожидать, есть просто распределение Больцмана:

$$P(\vec{z}, t \rightarrow \infty) = \psi_0^2(\vec{z}) = C \exp\left(-\frac{U_0 + U_d}{kT}\right). \quad (24)$$

Для решения в общем виде уравнения Смолуховского или сопряженного ему уравнения Шредингера необходимо знать потенциал $U_d(\vec{z})$ или использовать определенные модельные представления об этом потенциале. Такие данные могут быть получены из независимого расчета структуры дефекта, что выходит за рамки настоящей работы. К этому вопросу мы еще вернемся в разделе 3.

Как уже отмечалось, практический интерес представляет усредненная функция распределения (15). Ниже будет показано, каким образом подобное усреднение можно провести в кристалле с протяженными дефектами. На больших масштабах ($l \gg z_0$, z_0 — радиус локализации потенциала дефекта) все особенности диффузии мы будем описывать с помощью дополнительного локального потока частиц, вызванного наличием дефекта. Такой подход применяется в электродинамике при феноменологическом описании диэлектрических свойств поверхности твердого тела в случае больших длин волн [18]. В нашем подходе роль длины волны играет масштаб l грубых пространственных переменных, в которых измеряется усредненная функция распределения.

2.1. ДИФФУЗИЯ ПО ГРАНИЦЕ ЗЕРЕН

Рассмотрим бикристалл с ГЗ-наклона, лежащей в плоскости (y, z) . Ось наклона ориентирована вдоль $\vec{e}_z$ (рис.1).

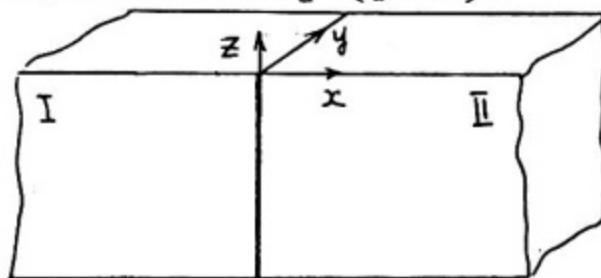


Рис. 1

Как показано выше, кинетическое уравнение в кристалле, содержащем дефект, сводится к уравнению Шредингера, гамильтониан которого включает в себя потенциал дефекта (см. (21), (22)). В данном случае $U_d(\vec{r}) \equiv U_{GB}(\vec{r})$ — потенциал ГЗ. Как отмечалось в разделе 1, переход к макроскопическому уравнению диффузии есть ничто иное как запись сопряженного уравнения Шредингера в приближении эффективной массы. Но если потенциал $U_{GB}^*(\vec{r})$ (21) имеет радиус локализации по оси x порядка межатомного расстояния, то в непосредственной близости от ГЗ мы не можем пользоваться приближением эффективной массы для движения вдоль x и говорить об усредненной по этой переменной функции распределения. Однако в плоскости (y, z) ГЗ не ограничена и потенциал $U_{GB}(\vec{r})$ можно считать периодическим по y и z . Мы не будем конкретизировать вид потенциала $U_{GB}(\vec{r})$, но отметим, что его периодичность безусловна для специальных ГЗ. При произвольных углах разворота потенциал $U_{GB}(\vec{r})$ квазипериодичен и в данном случае мы считаем, что зернограничные дислокации равноудалены [5]. Для малых углов разворота зерен полагаем, что ядра дислокаций, образующих ГЗ, лежат на равном расстоянии друг от друга. Случай произвольного (непериодического) потенциала $U_{GB}(\vec{r})$ будет рассмотрен в отдельной работе.

Ввиду периодичности $U_{GB}^*(\vec{r})$ по переменным y и z , вблизи $x=0$ возникают двумерные энергетические зоны, которые будем называть поверхностными. Они похожи на истинные электронные зоны, появляющиеся вблизи свободной поверхности и границ раздела [17].

Обозначим закон дисперсии в поверхностных зонах через $E_n^{62}(k_x, k_y)$.

Проще всего выявить свойства дефекта в стационарном состоянии, поэтому предположим, что наша система имеет конечный размер L по оси y (рис.1) и на поверхностях $y=0$ и $y=L$ поддерживаются равновесные (большмановские) значения функции распределения:

$$P(x, 0, z) = C_1 \exp(-U(x, 0, z)/kT), \quad (25a)$$

$$P(x, L, z) = C_2 \exp(-U(x, L, z)/kT). \quad (25b)$$

Причем L выбирается так, что $U(y=0) = U(y=L)$.

Граничные условия (25a, б) равносильны наложению однородного внешнего поля

$$V(y) = \alpha y. \quad (26)$$

Это легко показать, если представить $P(x, y, z)$ в виде

$$P(x, y, z) = C_1 \exp \left[- \frac{U(y=0) + (kTL^{-1} \ln C_1 / C_2) y}{kT} \right]. \quad (27)$$

Из (27) следует, что $\alpha = kTL^{-1} \ln C_1 / C_2$. В дальнейшем будем считать поле $V(y)$ слабым, т.е. $|\alpha| \ll kTL^{-1}$.

Пусть в каждой из областей I и II эффективная масса частицы изотропна, т.е. изотропен макроскопический тензор диффузии в идеальной решетке. Случай анизотропной массы и возникающие вследствие этого эффекты будут рассмотрены в отдельных работах.

Существование поверхностных зон в плоскости (y, z) в окрестности $x=0$ позволяет произвести сглаживание функции распределения, воспользовавшись приближением эффективной массы для направлений y и z . Заметим, что эффективная масса в поверхностной зоне в общем случае анизотропна при любых углах разворота зерен. Характер ориентации плоскости ГЗ (рис.1) позволяет нам утверждать, что тензор обратной эффективной массы в поверхностной зоне диагонален в изображенной на рисунке системе координат. Таким образом, в стационарном состоянии под действием поля $V(y)$ в системе возникает ток частиц вдоль оси y , причем для вычисления этого тока можно использовать приближение эффективной массы. Плотность тока j_y в области ГЗ в общем случае зависит от x и z . В приближении эффективной массы

$$j_y = -m n \alpha, \quad (28)$$

где m — подвижность частицы, связанная с коэффициентом диффу-

зии соотношением Эйнштейна $D = \mu kT$; n — плотность диффундирующих частиц.

В нашей системе частицы распределены между поверхностной зоной, в которой они имеют подвижность $\mu_{\text{св}}$, и объемной зоной, где подвижность равна μ_v и имеет то же значение, что и в идеальной решетке. Приближение эффективной массы, которым мы пользуемся для движения вдоль оси y , означает сглаживание функции распределения по этой переменной [16]. Следовательно, плотность частиц в стационарном состоянии, входящая в (28), зависит лишь от переменных x и z . В итоге

$$\dot{j}_y = -(\mu_{\text{св}} n_{\text{св}}(x, z) + \mu_v n_v(x, z)) \alpha, \quad (29)$$

где $n_{\text{св}}(x, z)$ и $n_v(x, z)$ — усредненная по переменной y плотность частиц в поверхностной и объемной зоне соответственно. Заметим, что в идеальной решетке плотность равна $n_v^0(x, z)$ и не совпадает с $n_v(x, z)$. Все указанные выше плотности выражаются через сглаженные функции распределения в стационарном состоянии в отсутствии внешнего поля $V(y)$. Как станет ясно в дальнейшем, способ нормировки не играет роли, поэтому для плотностей имеем следующие выражения (см. (23), (24)):

$$n_v^0(x, z) = C \langle (\psi_0^0(z))^2 \rangle_y = C \langle \exp(-\frac{U_c(z)}{kT}) \rangle_y, \quad (30)$$

$$n_{\text{св}}(x, z) + n_v(x, z) = C \langle (\psi_0(z))^2 \rangle = C \langle \exp(-\frac{U(z)}{kT}) \rangle_y, \quad (31)$$

где $\langle \dots \rangle = L^{-1} \int_0^L \dots dy$.

В (31) определена только сумма плотностей $n_{\text{св}}$ и n_v . Для непосредственного нахождения $n_{\text{св}}(x, z)$ надо вычислить волновую функцию основного состояния в поверхностной зоне. Для этого можно использовать соответствующие методы зонной теории [16, 17]. Зависимость n_v^0 , n_v и $n_{\text{св}}$ от z периодическая в силу периодичности $U_c(z)$ и $U_d(z)$ по этой переменной. Если нас интересует макроскопический ток через образец, т.е. размеры кристалла по осям x и z много больше периода решетки, то можно усреднить соответствующие плотности тока в пределах a_z (a_z — период потенциала по переменной z). В результате

$$\tilde{j}_y(x) = -[\mu_{\text{св}} \langle n_{\text{св}} \rangle_z + \mu_v \langle n_v \rangle_z] \alpha, \quad (32)$$

$$\tilde{j}_y^0(x) = -\mu_v \langle n_v^0 \rangle_z \alpha, \quad (33)$$

где $\tilde{j}_y^0(x)$ — усредненная по z плотность тока в идеальном кристалле.

Найдем изменение плотности тока, которое вносит граница зерен. Абсолютная величина этого изменения неудобна, т.к. зависит от приложенного поля, поэтому будем рассматривать отношение

$$\Delta = (\tilde{j}_y - \tilde{j}_y^0) / \tilde{j}_y^0. \quad (34)$$

Подставляя в (34) выражения (32) и (33), после простых преобразований получим:

$$\Delta = \left(\frac{M_{GB}}{M_V} - 1 \right) \frac{\langle n_{GB} \rangle_z}{\langle n_V^0 \rangle_z} + \left(\frac{\langle n_V \rangle_z + \langle n_{GB} \rangle_z}{\langle n_V^0 \rangle_z} - 1 \right). \quad (35)$$

Из соотношения Эйнштейна и приведенного в разделе 1 выражения (13) следует, что

$$\frac{M_{GB}}{M_V} = \frac{D_{GB}}{D_V} = \frac{\partial^2 E_1^{GB}(k_x=k_y=0)}{\partial k_y^2} \left(\frac{\partial^2 E_1^0(\vec{k}=0)}{\partial k_y^2} \right)^{-1}. \quad (36)$$

Безразмерный параметр Δ зависит от x и определяет относительное локальное отклонение от плотности потока $\tilde{j}_y^0$. Заметим, что в общем случае от координаты x зависит и отношение M_{GB}/M_V . Проинтегрируем выражение (35) по x и получим относительное изменение полного потока, которое вносит ГЗ (размер кристалла по оси z равен единице):

$$B_{GB} \equiv \int \Delta(x) dx = B_F + B', \quad (37)$$

$$B_F = \int \left(\frac{\partial^2 E_1^{GB}(0)}{\partial k_y^2} / \frac{\partial^2 E_1^0(0)}{\partial k_y^2} - 1 \right) \gamma(x) dx, \quad (38)$$

$$B' = \int (\rho(x) - 1) dx, \quad (39)$$

где

$$\gamma(x) = \langle n_{GB} \rangle_z / \langle n_V^0 \rangle_z, \quad (40)$$

$$\rho(x) = (\langle n_V \rangle_z + \langle n_{GB} \rangle_z) / \langle n_V^0 \rangle_z. \quad (41)$$

Параметр B_{GB} имеет размерность длины и его можно назвать эффективной диффузионной шириной границы зерен. Эта величина определяет ширину полосы в идеальной решетке, которая несет ток, равный полному избыточному току в зернограницной области. Выражения (37)–(41) являются обобщением параметра, фигурирующего в модели Фишера [5,19]:

$$\bar{b}_F = \gamma \delta (D_{\text{св}}/D_v - 1), \quad (42)$$

где γ — коэффициент адсорбции, определяющий интенсивность взаимодействия примесной частицы с границей зерен. В нашем случае параметр $\bar{b}_F$, непосредственно обобщающий b_F^0 , является функционалом локального коэффициента адсорбции $\gamma(x) = \langle n_{\text{св}} \chi n_v \rangle$. Кроме этого, появляется дополнительное слагаемое (39). Эта величина вводится впервые и до настоящего времени не обсуждалась в литературе. Параметр b' определяет дополнительный зернограничный поток даже в том случае, когда $D_{\text{св}} = D_v$, но диффундирующая частица взаимодействует с границей. Появление дополнительного потока вызвано изменением плотности n вблизи ГЗ.

Перейдем к анализу нестационарной диффузии. Уравнение движения для $\tilde{P}(\vec{r}, t)$ можно получить из закона сохранения числа частиц:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \tilde{P}(\vec{r}, t) d\vec{r} = - \oint_S \vec{j} d\vec{S}, \quad (43)$$

где объем Ω пересекает плоскость границы зерен, а S — поверхность, окружающая этот объем. Будем полагать, что усреднение функции $P(\vec{r}, t)$ производится по объему V (см. (15)) с характерным размером l , значительно превышающим ширину функции $\Delta(x)$, т.е.

$$[\Delta''_{xx}(0)]^{-1/2} \ll l. \quad (44)$$

Оценки ширины границы зерен [5] показывают, что $(\Delta''_{xx}(0))^{-1/2} \sim 10 \text{ \AA}$, т.е. неравенство (44) выполняется для существующих экспериментальных методов изучения диффузии, в которых измеряется именно функция $\tilde{P}(\vec{r}, t)$. При выполнении (44) можно считать, что весь дополнительный зернограничный поток сосредоточен в плоскости $x=0$. Это означает, что в грубых переменных

$$\Delta(x) \approx b_{\text{св}} \delta(x). \quad (45)$$

С учетом (34), (37) и (45) интеграл в правой части (43) запишется в виде

$$\oint_S (1 + b_{\text{св}} \delta(x)) \vec{j}_0 d\vec{S}. \quad (46)$$

Преобразуя (46) по теореме Гаусса и используя (43), приходим к следующему уравнению диффузии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{P}(\vec{z}, t) = \nabla D_v (1 + \delta(x) \epsilon_{\text{св}}) \nabla \tilde{P}(\vec{z}, t). \quad (47)$$

Это означает, что в нашей модели макроскопический коэффициент диффузии следующим образом зависит от координат:

$$D(x) = D_v (1 + \delta(x) \epsilon_{\text{св}}). \quad (48)$$

Параметр $\epsilon_{\text{св}}$ не является феноменологическим, а выражается через микроскопические характеристики системы примесь-матрица. Очевидно, что также легко можно прийти и к модели Фишера. Для этого вместо сосредоточения потока в одной плоскости необходимо "размазать" его по некоторой области конечной ширины δ . Однако при крупномасштабном описании диффузии логично сконцентрировать весь локальный поток в плоскости ГЗ, т.к. использование представлений о сплошной среде на расстояниях порядка межатомного некорректно.

Решение уравнения (47) при различных начальных и граничных условиях можно найти с помощью интегральных преобразований, что приводит к громоздким выражениям, аналогичным решениям Уиппла [19] или Сузуоки [20], полученным в модели Фишера. Вычислим более простую и наглядную величину - среднеквадратичное смещение частицы вдоль ГЗ за время t при диффузии с поверхности $y=0$ в полупространство $y>0$. Легко заметить, что

$$\langle y^2 \rangle_t = -\tilde{P}^{-1}(x=0, k=0, z=0) \frac{\partial^2}{\partial k^2} \tilde{P}(x=0, k=0, z=0),$$

где $\tilde{P}(x, k, z)$ - фурье-образ функции $\tilde{P}(x, y, z)$ по переменной y . В итоге

$$\langle y^2 \rangle_t = 2 D_v t + 2 \epsilon_{\text{св}} \sqrt{\pi D_v t}. \quad (49)$$

При этом предполагалось, что $P(t=0) = \delta(y)$. Величина $(\langle y^2 \rangle_t)^{1/2}$ определяет глубину проникновения диффузанта в образец по границе зерен. Несложно показать, что $\langle y^2 \rangle_t$ описывается формулой (49) и при граничном условии $P(x, y=0, z, t) = \text{const}$.

В заключение этого раздела приведем одно утверждение, которое непосредственно следует из нашей интерпретации коэффициента диффузии в терминах эффективной массы: до тех пор, пока потенциал ГЗ периодичен по переменной y , можно строго определить закон

дисперсии и эффективную массу по этой оси, т.е. применим проведенный выше анализ. Следовательно, для всех периодических потенциалов на больших временах ($t \gg D_v^{-1} a_y^2$, a_y — период потенциала $U_{\text{кр}}(z)$ по переменной y) справедлива зависимость (49). Поэтому утверждения об аномальном характере диффузии вдоль малоугловой ГЗ-наклона ($\langle y^2 \rangle_t - 2D_v t \sim \ln t$ [4] следует признать несостоятельными.

2.2. ДИФФУЗИЯ ПО КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ

Рассмотрим диффузию в кристалле, содержащем краевую дислокацию, линия которой ориентирована вдоль оси y . По аналогии с проведенным выше анализом введем параметр ζ_D , который определяется как отношение избыточного стационарного потока частиц, вызванного присутствием дислокации, к плотности потока в идеальной решетке. Не будем останавливаться на деталях вычислений, которые выполняются так же, как и для ГЗ, а сразу запишем окончательные выражения:

$$\zeta_D = \zeta_D^0 + \zeta_D', \quad (50)$$

$$\zeta_D^0 = \int (D_D/D_v - 1) \gamma_D(x, z) dx dz, \quad (51)$$

$$\zeta_D' = \int (\rho(x, z) - 1) dx dz, \quad (52)$$

где

$$D_D/D_v = \frac{\partial^2 E_1^D(k_y=0)}{\partial k_y^2} / \frac{\partial^2 E_1^0(\vec{k}=0)}{\partial k_y^2}, \quad (53)$$

$$\gamma_D(x, z) = n_D(x, z) / n_v^0(x, z), \quad (54)$$

$$\rho_D(x, z) = (n_D(x, z) + n_v(x, z)) / n_v^0(x, z). \quad (55)$$

Используя те же рассуждения, что и в предыдущем разделе, представим коэффициент диффузии в решетке, содержащей дислокацию, в виде

$$D(z) = D_v (1 + \delta(x) \delta(z) \zeta_D). \quad (56)$$

Это выражение справедливо при крупномасштабном описании диффузии, т.е. когда характерный масштаб усреднения l (см. (15)) много боль-

ше радиуса ядра дислокации. Решая уравнение диффузии в полупространстве $y > 0$ с начальным условием $\tilde{P}(x, y, z, t=0) = \delta(y)$ или с граничным условием $\tilde{P}(x, 0, z, t) = \text{const}$, находим $\langle y^2 \rangle_t$:

$$\langle y^2 \rangle_t = 2 D_v t + \frac{6D}{4\pi} \ln \left[\frac{\pi D_v}{6D} \left(\frac{D_v}{D_v - 1} \right) t \right]. \quad (57)$$

Величина $(\langle y^2 \rangle_t)^{1/2}$ определяет глубину проникновения диффузанта в кристалл по линии дислокации. При вычислении (57) полагалось, что $(D_v t)^{1/2} \gg z_0$, где z_0 — радиус ядра дислокации.

Выражения (50)–(55) могут быть использованы не только для анализа диффузии вдоль изолированной дислокации, но и как параметры трубочной модели зернограницной диффузии [3]. При этом для расчета долговременного поведения макроскопической функции распределения можно воспользоваться выражением

$$D(z) = D_v \sum_n \left(1 + 6D \delta(x) \delta(z - z_n) \right), \quad (58)$$

которое обобщает (56) и определяет коэффициент диффузии в кристалле, содержащем стенку дислокаций в плоскости $x=0$. Линии дислокаций параллельны оси y . Если дислокации в стенке равноудалены, то $z_n = \lambda n$ (λ — расстояние между линиями дислокаций). Анализ диффузионных уравнений с коэффициентом (58) будет выполнен в последующих работах.

3. НЕКОТОРЫЕ ОЦЕНКИ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Наш анализ диффузии в решетке с протяженными дефектами базировался на уравнении Смолуховского (6) в предположении, что $|v^2 U| \ll m y^2$. Произведем оценки, определяющие применимость уравнения (6) для описания конкретных систем примесь-матрица. Будем исходить из аналитического результата (21), полученного в пределе $E/kT \gg 1$ (E — энергия активации диффузии) из уравнения Фоккера-Планка, играющего в данном случае роль точного уравнения:

$$D = D_0 \exp(-E/kT), \quad (59)$$

$$D_0 = \frac{a^2 \omega_A}{2\pi \omega_c} \left[\left(\left(\gamma/2 \right)^2 + \omega_c^2 \right)^{1/2} - \gamma/2 \right], \quad (60)$$

где ω_A — частота колебаний частицы у дна потенциальной ямы; ω_c — частота колебаний на вершине потенциального барьера. Ввиду того, что $E \sim 1 \text{ эВ}$ (10^4 К), выражения (59) и (60) применимы

вплоть до температур $T \sim 10^3$ К. После простых преобразований из условия применимости уравнения Смолуховского (см. (5)) и выражения (60) получим:

$$D_c \ll a \left(E/m \right)^{1/2}. \quad (61)$$

Это неравенство определяет класс систем, в которых справедливо описание примесной диффузии в координатном пространстве с помощью кинетического уравнения (6), если случайные динамические переменные $\vec{z}$ и $\dot{\vec{z}}$ удовлетворяют уравнению (1). Выход за рамки приближений (5), (60) состоит в учете большего числа слагаемых при получении кинетического уравнения для $P(\vec{z}, t)$ из уравнения Фоккера-Планка. В частности, приближение второго порядка по γ^{-1} дает следующее уравнение [14]:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{z}, t) = \nabla D_c \left(1 - \frac{\nabla^2 U(\vec{z})}{m \gamma^2} \right) \left(\nabla + \frac{\nabla U(\vec{z})}{kT} \right) P(\vec{z}, t). \quad (62)$$

Это уравнение Смолуховского с периодическим коэффициентом диффузии $D_c(\vec{z}) = D_c \left(1 - \nabla^2 U / m \gamma^2 \right)$. Использование уравнения (62) вместо обычного уравнения Смолуховского (6) не меняет смысла результатов, полученных в работе, т.к. эволюционный оператор в (62) по-прежнему периодичен и может быть сведен к периодическому эрмитову оператору, имеющему релаксационный зонный спектр [15]. Макроскопический тензор диффузии, как и прежде, определяется соотношением (13), но закон дисперсии задается более сложным уравнением, нежели стационарное шредингеровское.

До сих пор, говоря о применимости кинетических уравнений (6) или (62), мы имели в виду идеальную решетку. Предполагается, что эти же уравнения справедливы и при наличии в системе протяженных дефектов. Дело в том, что понижение плотности частиц в области ядра дефекта приводит к смягчению потенциала $U(\vec{z})$, облегчая тем самым выполнение критерия (5).

Отметим еще одно существенное обстоятельство. При описании движения диффундирующей частицы не учитывалась деформация решетки, поэтому результаты работы с большим основанием применимы к диффузии в полупроводниках, нежели в металлах. Искажения решетки вблизи примеси или вакансии приводят к тому, что вместо потенциала $U(\vec{z})$ в стохастическом уравнении движения (1) появляется потенциал $\tilde{U}(\vec{z})$, учитывающий сдвиг атомов матрицы (поляронный эффект). Такая замена справедлива для движения в пределах одной по-

тениальной ямы. При переходе в соседнюю яму необходим учет релаксации решетки, которая осуществляется за характерное время τ_r . Очевидно, что $\tau_r \geq \omega_m^{-1}$, где ω_m — верхняя граница колебательно-го спектра матрицы. Для легких примесей используется адиабатическое приближение, т.е. решетка во время перехода считается замороженной [22]. Это приближение применимо, если $\omega_l^{-1} \ll \tau_r$ ($\omega_l^{-1} \ll \omega_m^{-1}$), где ω_l — частота локальных колебаний примесной частицы. Для большинства легких примесей (за исключением водорода) $\omega_l \geq \omega_m$. Однако и в этом случае при высоких температурах ($T \gg T_D$, T_D — дебаевская температура матрицы), как следует из [23], можно использовать адиабатическое приближение. Таким образом, при диффузии в металлической (деформируемой) матрице вместо $U(\vec{z})$ надо использовать потенциал $\tilde{U}(\vec{z})$, который обладает той же трансляционной симметрией, что и $U(\vec{z})$. Следовательно, сохраняется форма всех соотношений, полученных в работе. В результате замены $U \rightarrow \tilde{U}$ происходит перенормировка высот потенциальных барьеров. В частности, для автолокализуемых примесей пренебрежение поляронным эффектом приводит к завышению коэффициента диффузии.

Отметим еще одно ограничение на область температур, в которой справедливо исходное стохастическое уравнение (1), т.е. работает марковская аппроксимация (3). В силу флуктуационно-диссипационной теоремы [24] приближение (3) равносильно утверждению о том, что случайная функция $\vec{f}(t)$ является гауссовым белым шумом. Это означает, что в спектре случайной силы должно быть задействовано наибольшее число фононных мод. Поэтому приближение (3) справедливо для температур, значительно превышающих дебаевскую температуру кристалла. Как видим, это условие совпадает с условием применимости адиабатического приближения.

Перечисленным выше требованиям удовлетворяют, например, следующие системы примесь-матрица: H-Ge, He-Ge, Li-Ge, Si-Ge, Fe-Se, Zn-Se и т.д. [25] (полупроводниковая матрица); N-Fe_α, N-Fe_γ, O-Zr_α, C-Nb и т.д. [26] (металлическая матрица) с учетом замечаний по поводу поляронного эффекта. При этом выполняется условие (61) и применимо обычное уравнение Смолуховского (6). Использование уравнения (62) позволяет значительно расширить перечень описываемых систем.

Для непосредственного вычисления параметра $B_{\epsilon\epsilon}$ или B_D на-

до знать потенциал дефектной решетки $U(\vec{r})$ (16). В приближении парного взаимодействия

$$U(\vec{r}) = \int v(\vec{r} - \vec{r}') \rho_m(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (63)$$

где $v(\vec{r})$ – потенциал взаимодействия атома примеси с атомом матрицы; $\rho_m(\vec{r}) = \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)$ – микроскопическая плотность матрицы, которая определяется структурой решетки, содержащей протяженный дефект. Например, для ГЗ функция $\rho_m(\vec{r})$ может быть вычислена методом вариации кластеров [27], а также путем молекулярно-динамического моделирования структуры [28].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выше проведен анализ диффузионных процессов в кристалле с протяженными структурными дефектами. Показано, каким образом параметр σ_{GB} (σ_D), характеризующий диффузионную проницаемость ГЗ (дислокации), выражается через потенциал взаимодействия примесной частицы с решеткой. При этом установлено, что существует дополнительный поток частиц в области дефекта даже при постоянном по всему объему макроскопическом коэффициенте диффузии, но при существовании взаимодействия между примесной частицей и ГЗ (дислокацией).

Предлагаются новые зависимости макроскопического коэффициента диффузии от координат (48), (56) и (58), которые применимы при крупномасштабном описании диффузии в решетке, содержащей ГЗ, дислокацию и стенку дислокаций соответственно.

Выяснены пределы применимости результатов к конкретным системам примесь–матрица и указан путь расширения этих пределов.

Предлагаемый в работе подход к описанию диффузии в кристаллах с протяженными дефектами позволяет сочетать преимущества аналитических и машинных расчетов.

Авторы выражают благодарность М.И.Рязанову и В.Д.Борману за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бокштейн Б.С., Бокштейн С.З., Жуховицкий А.А. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах. М.: Металлургия, 1974.

2. Fisher J.C. J. Appl. Phys., 1951, v.22, p.74.
3. Turnbull D., Hoffman R. Acta Met., 1954, v.2, p.419.
4. Smoluchowski R. Phys. Rev., 1952, v.87, p.482.
5. Глейтер Г., Чалмерс Б. Большеугловые границы зерен. М.: Мир, 1975.
6. Любов Б.Я. Диффузионные процессы в неоднородных твердых телах. М.: Наука, 1981.
7. Vineyard G.H. J. Phys. Chem. Solids, 1957, v.3, p.121.
8. Rise S. Phys. Rev., 1958, v.112, p.804.
9. Gosar P. Nuovo Cim., 1964, v.31, p.781.
10. Weiner J.H., Forman R.E. Phys. Rev., 1974, v.B10, p.315.
11. Форстер Д. Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980.
12. Minakata T. Progr. Theor. Phys., 1985, v.73, p.570.
13. Кляцкин В.И. Статистическое описание динамических систем с флуктуирующими параметрами. М.: Наука, 1975.
14. Wilenski G. J. Stat. Phys., 1976, v.14, p.153.
15. Festa R., d'Agliano E.G. Physica A, 1978, v.90, p.229.
16. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир, 1969.
17. Литовченко В.Г. Основы физики полупроводниковых слоистых систем. Киев: Наукова думка, 1980.
18. Рязанов М.И. ЖЭТФ, 1987, т.93, 1281.
19. Whipple R.T.P. Phil. Mag., 1954, v.45, p.1225.
20. Suzuoka T. J. Phys. Soc. Japan, 1965, v.20, p.1259.
21. Kramers H.A. Physica, 1940, v.7, p.287.
22. Ipatova I.P., Subashiev A.V., Maradudin A.A. Ann. Phys. (N.Y.), 1969, v.53, p.376.
23. Павлович В.Н., Рудько В.Н. Неадиабатическая теория диффузии примесей внедрения в кристаллах. Киев: Препринт/КИЯИ, 1977, 77 - 5.
24. Kibo R. Rep. Progr. Phys., 1966, v.29, p.225.
25. Болтакс Б.И. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. Л.: Наука, 1972.
26. Таблицы физических величин: Справочник/Под ред. Кикоина И.К. М.: Атомиздат, 1976.
27. Kikuchi R., Cahn J.W. Phys. Rev., 1980, v.B21, p.1893.
28. Ciccotti G., Guillope M., Ponticis V. Phys. Rev., 1983, v.B27, p.5576.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
1. Стохастическое описание диффузии в твердом теле и переход к макроскопическому диффузионному уравнению....	4
2. Диффузия в кристалле, содержащем структурные дефекты....	8
2.1. Диффузия по границе зерен.....	11
2.2. Диффузия по краевой дислокации.....	17
3. Некоторые оценки и обсуждение результатов.....	18
Заключение.....	21
Литература.....	21

Игорь Stanisлавович Брановицкий
Сергей Александрович Кохтев

Диффузия в кристаллах с протяженными структурными дефектами

Рукопись поступила в издательский отдел 16.11.88

Ответственный за выпуск И.С.Брановицкий

Л. - 50828	Подписано в печать 8/хII-88г.	Формат 60x84 1/16
П.л. 1,5	Уч.-над.л. 1,5	Тираж 120 экз.
Изд. № 086-88	Заказ 3484	Цена 10 коп.

Типография МИФИ, Каширское шоссе, д.31