

## О МЕХАНИЗМЕ ПЕРЕМЕЩЕНИЙ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ЩЕЛОЧНО-ГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ ПОД ВЛИЯНИЕМ ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

© 2010 В. С. Абрамов<sup>1</sup>, В. Л. Бусов<sup>2</sup>, Л. А. Битюцкая<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина, ул. Р. Люксембург 72, 83114 Донецк, Украина

<sup>2</sup> Донбасская государственная машиностроительная академия, ул. Шкадинова 72, 84313 Краматорск, Украина

<sup>3</sup> Воронежский государственный университет, Университетская пл. 1, 394006 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию: 13.09.2010 г.

**Аннотация.** Рассмотрен процесс перемещения междоузельных ионов в галогенидах щелочных металлов под влиянием импульсных магнитных полей. Приведен анализ составляющих энергии активации перемещения таких дефектов. Показано, что наиболее вероятным механизмом образования междоузельных ионов и вакансий при воздействии импульсного магнитного поля является пластическая деформация на стадии двойного поперечного скольжения. Предложена модель перемещения точечных дефектов по междоузлиям при наличии импульсного магнитного поля. Проведена оценка пороговых значений энергии активации массопереноса по тетраэдрическим междоузлиям.

**Ключевые слова:** междоузельные ионы, импульсное магнитное поле, локальные нетепловые фононы, энергия активации массопереноса.

### ВВЕДЕНИЕ

Известно [1—3], что междоузельные катионы в галогенидах щелочных металлов не наблюдаются экспериментально. Наблюдаемыми являются катионные, анионные вакансии и междоузельные анионы. Известно [2], что междоузельный ион в щелочно-галлоидных кристаллах в рамках квазимолекулярной гипотезы может образовать с ближайшими соседями так называемый ян-теллеровский комплекс или JT-молекулу. Совместное рассмотрение энергии электронных состояний и потенциальной энергии ионов комплекса приводит к изменению формы изоэнергетических поверхностей потенциальной энергии для этих состояний. В результате JT-молекула может иметь несколько энергетически эквивалентных конфигураций, а дефект может занять несколько потенциальных ям, обусловленных симметрией междоузлия. Здесь возникают переходы дефекта между конфигурациями, где применяют два модельных рассмотрения: предел медленного и быстрого вращений. В связи с этим в [4] приведена квантовая теория диффузии посредством «решеточно-активированного» процесса, где диффузия происходит из промежуточных минимумов потенциального рельефа в рамках квазимолекулярной гипотезы.

Известно также [5], что короткий когерентный импульс переменного электрического поля может распространяться через среду (диэлектрик) из двухуровневых атомов без потерь. Передний и задний фронты такого импульса выступают в роли доменных стенок сегнетоэлектрика, причем один из фронтов отдает энергию среде, а другой принимает ее обратно: импульс поля по существу является обратимой связью «поле — среда». Механизм распространения аналогичного импульса переменного магнитного поля [6] во многом схож с предыдущим, и описывается двойным синус-уравнением Гордона; передний и задний фронты такого импульса выступают в роли доменных стенок ферродиэлектрика.

За последние более четверти века теоретические модели механизмов диффузии междоузельных катионов, анионов и вакансий в щелочно-галлоидных кристаллах NaCl, KCl в условиях плавных градиентов температур и механических напряжений практически не изменились [7, 8], где основное внимание уделено радиационно-термическому воздействию. В тоже время хорошо известно, что при ударном нагружении (механической ударной волны) металлов [9] имеет место недиффузионный аномальный массоперенос адсорбированных на по-

верхности атомов легирующего элемента через матрицу. Здесь в кристалле «...возникают сильно возбужденные состояния, электронная составляющая которых приводит к появлению дополнительных сил, сдвигающих ядра и сообщающих им дополнительную скорость, на несколько порядков превышающую скорость классической диффузии».

В настоящее время рассмотрение влияния магнитных полей на характер перемещения дефектов связано с рядом направлений исследований: оценкой роста плотности точечных и линейных дефектов при пластических деформациях, анализом параметров внутреннего трения [10], раскрытием механизма преодоления движущейся дислокацией магниточувствительных примесных центров или их комплексов [11] и т. д. В настоящей работе рассмотрены модель и механизмы перемещений междуузельных катионов и анионов в щелочно-галоидных кристаллах при воздействии импульсного магнитного поля.

### МОДЕЛЬ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ МЕЖДОУЗЕЛЬНЫХ ИОНОВ В ОТСУТСТВИИ ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Рассмотрим структуру и значения энергии активации перемещений междуузельных катионов и анионов по цепочке тетраэдрических и гранецентрированных междуузлий при различных зарядовых модификациях точечного дефекта:  $Z_d = 0, -1, +1$ . Для построения модели произведем оценку устойчивости нахождения иона в тетраэдрических и гранецентрированных междуузлиях. Для этого воспользуемся выражением энергии связи иона в узле регулярной решетки [1]:

$$U_c = U_1 - U_2 = z \lambda \exp(-R/\rho) - \frac{\alpha q^2}{R}, \quad (1)$$

где  $U_1, U_2$  — энергии взаимодействия данного иона, соответственно для пар ближайших соседей и для всех прочих пар;  $z$  — число ближайших соседей произвольного иона или координационное число;  $\lambda$  — числовой коэффициент, имеющий размерность энергии;  $\alpha$  — постоянная Маделунга;  $R$  — расстояние от данного иона до ближайших соседей;  $\rho$  — размер области отталкивания. Из (1) следует, что  $U_1 \sim z$ . Согласно [1] энергия  $U_2$  составляет 10% от энергии связи  $U_c$ . Отсюда глубина потенциальной ямы  $\Delta U$  в узле KCl для заряженного иона приближенно составляет 7.26 eV, в тетраэдрическом междуузлии 9.68 eV, в гранецентрированном междуузлии 4.84 eV, и становится ясно, что

энергия тепловых фононов (при комнатной температуре энергия термического возбуждения  $\sim 3/2 kT$  составляет 0.03 eV) не позволяет произвести быстрое перемещение по междуузлиям заряженных междуузельных катионов и анионов в потенциальном рельефе кристалла. Такое перемещение возможно при: 1) нулевой зарядовой модификации; 2) понижении симметрии системы ян-теллеровского комплекса с точечной на аксиальную. Если поместить катион, например, в тетраэдрическое междуузлие, то ближайшие анионы данной элементарной ячейки могут предоставлять свои электроны для образования ионной связи; если в междуузлии находится анион, то такой частицей будет его внешний электрон. В результате возникает возможность образования нескольких эквивалентных конфигураций в виде молекул  $A^+B^-$ , т. е. междуузельный ион и ионы противоположного знака в узлах ячейки образуют гантельные конфигурации с осью гантелей вдоль направлений плотной упаковки:  $\langle 110 \rangle, \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$  [5] (таких эквивалентных конфигураций 2 для гранецентрированного междуузлия, для тетраэдрического междуузлия — 4).

Рассмотрим отмеченный в [2] экспериментальный факт огромной разности порядка 1 eV между оптическим поглощением и испусканием, вызванной решеточной релаксацией. Такая релаксация после безызлучательного процесса может произойти в результате рождения от 10 до 100 тепловых продольных оптических фононов, что маловероятно согласно теории Хуанга-Риса [2], либо одного-двух нетепловых локальных фононов вблизи междуузельного иона. Теория неидеальной решетки [2] допускает превышение максимальной фононной частоты  $\omega_{\max} \sim \frac{v}{a} \approx 10^{13}$  Hz (для NaCl, KCl  $\omega_{\max} = (6.28 - 7.97) \cdot 10^{12}$  Hz)), где  $v$  — скорость распространения фононов ( $\sim 10^3$  м/с),  $a$  — параметр решетки ( $\sim 10^{-10}$  м) за счет увеличения локальной силовой постоянной  $\Delta C_{\alpha\beta} > 0$ . [14] Увеличение жесткости связи может быть вызвано хорошо известной асимметрией потенциальной ямы кривой межатомного взаимодействия: более крутой ее подъем в сторону меньших  $r$  при вклинивании внедренных ионов между равновесными положениями решетки и повышении  $\omega_{\max}$  и энергии нетепловых локальных фононов до 0.1—1 eV. Здесь необходимо отметить, что длинноволновой фонон является квазичастичным эквивалентом возмущения [12], потенциал которого состоит из регулярной составляющей или макроэлектрического поля  $\delta\bar{V}$

и флуктуационной составляющей в виде периодического микрополя  $\delta\tilde{V}$  или деформационного потенциала  $w$ . Для локальных нетепловых фононов в области точечного дефекта макрополе, очевидно, равно нулю, а микрополе модулировано экспоненциальной огибающей  $\exp(-r/\lambda_{p.d.})$ , где  $\lambda_{p.d.} \approx a$ . Это микрополе, отражающее поле смещений ионов вокруг дефекта, не может активировать другую подсистему элементарных возбуждений, например, экситонную, т.к. обладает круговой поляризацией вследствие точечной симметрии дефекта.

Учтем влияние промежуточных минимумов эквивалентных конфигураций JT-молекулы, глубина потенциальных ям  $\Delta U$  которых в модели несвободного ротатора [2] приближенно равна:

$$\Delta U \approx \frac{k\hbar^2}{2J} = \frac{k\hbar^2}{2M_{ion}(\frac{\Delta_w}{2} - r_0)^2}, \quad (2)$$

где  $J$  — момент инерции ротатора;  $k$  — безразмерный параметр ( $k \approx 20$ ). Анализ показывает, что согласно (2) эта глубина изменяется от  $1.6 \cdot 10^{-2}$  eV для катиона Na,  $4.26 \cdot 10^{-2}$  eV для катиона K и для аниона Cl до  $9.8 \cdot 10^{-2}$  eV. Полученные значения являются верхними границами энергий локальных фононов для соответствующих ионов в рамках модели несвободного ротатора.

Рассмотрим перемещение междуузельных катионов и анионов в общем виде в рамках существующих теорий без внешнего поля. Потенциал точечного дефекта в междуузлии  $V$  состоит из кристаллического потенциала  $V_{ic}$ , флуктуационной составляющей потенциала JT-молекулы  $V'$  и деформационного потенциала  $V_\varepsilon$  вблизи линейных (дислокаций) и плоских (границ блоков и свободной поверхности) дефектов:

$$V = V_{ic} + V' + V_\varepsilon. \quad (3)$$

Случайный потенциал  $V'$  определяется соотношением:

$$\langle \bar{V}' \rangle = 0, \quad (4)$$

где усреднение по пространству осуществляется в пределах сферы радиусом  $r_d = 7 - 9a$ , а по времени — в интервале времени жизни JT-молекулы. Понижение точечной симметрии JT-молекулы до аксиальной и перемещение дефекта по междуузлиям в отсутствие внешнего поля становится возможным только вблизи линейных и плоских дефектов, т.е. при  $V_\varepsilon \neq 0$  и наличии градиента плотности точечных дефектов  $n$ .

Для получения условия ненаблюдаемости катионов и анионов в щелочно-галлоидных кристал-

лах воспользуемся описанием распределения точечных дефектов в упругих полях [13]:

$$n = \langle n \rangle - n_d = \langle n \rangle - n_\tau \rho \exp\left(\frac{\Omega_0 \sigma_{kk}}{3T}\right) = 0, \quad (5)$$

где  $\langle n \rangle = n_0$  — средняя плотность точечных дефектов того или иного вида;  $n_d$  — плотность этих дефектов на дислокациях, границах блоков и свободной поверхности;  $n_\tau$  — плотность таких дефектов либо на единицу длины дислокации, либо на единицу площади для границы;  $\rho$  — плотность дислокаций для линейных дефектов либо плотность границ для плоских дефектов;  $T$  — температура по Кельвину;  $\Omega_0 \sim V_0$  — объем точечного дефекта, совпадающий по порядку величины с атомным объемом  $V_0$ ;  $\sigma_{kk}$  — шпур или след тензора напряжений от линейного или плоского дефекта. Наличие заряженных ступенек атомных размеров в ядрах дислокаций и на свободной поверхности приводит к рекомбинации катионов и анионов, осевших на них в результате диффузионных потоков в нейтральные молекулы. Отсюда при условии:

$$\ln \frac{n_0}{n_\tau \rho} \leq \frac{\Omega_0 \sigma_{kk}}{3T} \quad (6)$$

невозможно экспериментально обнаружить катионы и анионы в ионном кристалле. Из неравенства (6) видно, что основными управляющими параметрами быстрой диффузии являются  $n_0$ , плотности дислокаций, границ блоков и температура, а время релаксации  $\tau_r$  зависит от величины пробного объема, определяющей временной интервал эксперимента  $t_{10} = t_1 - t_0$ , и соотношения плотностей точечных дефектов на дислокациях, границах и в объеме:  $\tau_r = t_{10}(n_\tau \rho / n_0)$ . При  $n_0 > n_\tau \rho$  идет миграция точечных дефектов и уплотнение их атмосфер на ядрах линейных и плоских дефектов. При  $n_0 < n_\tau \rho$  возникает поверхностная диффузия, которая может привести к миграции и зернограничному скольжению границ или диффузии вдоль линий дислокаций и появлению скоплений на дислокационных узлах. Здесь необходимо отметить, что влияние термических флуктуаций в системе без термических потоков носит случайный и не направленный характер, и суммарное перемещение внедренных ионов в этом случае в основном согласно (4) в среднем равно нулю.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящее время существует ряд внешних воздействий, позволяющих изменять configura-

цию и концентрацию точечных дефектов: эффект ориентационного или направленного упорядочения (эффект Снука [14]), например, когда цепочки междоузельных атомов стремятся выстроиться вдоль оси растяжения; эффект восходящей диффузии в неоднородном поле напряжений (эффект Горского) [13, 15]; повышение концентрации вакансий и междоузельных ионов путем облучения быстрыми частицами (электронами и т.д.), рентгеновскими и гамма-лучами и т. д.

На первом этапе построения модели приложим к кристаллу постоянное электрическое поле  $E$ , приводящее к штарковскому взаимодействию:

$$V_E = eEx, \quad (7)$$

где  $V_E$  — потенциал взаимодействия; поле  $E$  действует вдоль оси  $X$ ;  $e$  — заряд электрона. Внутрикристаллическое поле порядка  $10^7$  В/м может расщепить электронные уровни JT-молекул на ряд подуровней, отстоящих на  $\Delta E$  порядка сотых долей эВ [2, 16], тем самым понизить симметрию дефекта в междоузлии и вызвать дипольный момент перехода. При постоянной напряженности магнитного поля  $\mathbf{H}$  имеет место зеемановское взаимодействие этого поля с орбитальным ( $\mathbf{L}$ ) и спиновым ( $\mathbf{S}$ ) моментами междоузельного иона:

$$\hat{H}_z = \beta \mathbf{H}(\gamma \mathbf{L} + 2 \mathbf{S}), \quad (8)$$

которое дает расщепление порядка  $10^{-4}$  эВ. Согласно (7) и вышеописанных глубин потенциальных ям в узлах и междоузлиях для образования ион-вакансионной пары необходимо поле  $E$  в интервале значений  $3.82—8.07 \cdot 10^{10}$  В/м т.е. полей электрического пробоя, причем наименьшее значение требуется для перехода по цепочке гранецентрированных междоузлий.

На втором этапе воспользуемся постановкой эксперимента при магнитной обработке образцов из KCl для изменения плотности линейных и точечных дефектов перед плавлением [17], где образцы, полученные путем двойной перекристаллизации, подвергались воздействию импульсов магнитного поля длительностью  $\tau_{im} = 10^{-5}—10^{-6}$  с и амплитудой  $0,08—1$  Т, с частотой следования 50 Нз в течение 30 с. Найдем электрическую составляющую импульса магнитного поля, использованного в эксперименте. С помощью уравнения Максвелла

(закона Фарадея)  $rot \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$  ( $\mathbf{B}$  — магнитная индукция [Т]), соотношения в системе СИ  $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ , ( $\mu_0$  — магнитная постоянная  $1.256 \cdot 10^{-6}$  [Н/м], скорости распространения импульса магнитного

поля в каменной соли  $v = c/n$ ,  $n$  — показатель преломления света в материале 1.54 [18],  $c$  — скорость света в вакууме, произведем оценку амплитуд переменного в магнитном импульсе электрического поля  $E_a = cB_a$  при  $B_a = 0.08—1$  Т ( $H_a = (0.637—7.960) \cdot 10^5$  А/м), получим значения электрического поля  $E_a$  порядка  $10^7—10^8$  В/м, которые согласно (7) обеспечат энергию дефекта  $\varepsilon_{p.d.}$  в интервале  $0.01—0.3$  эВ. Здесь при наложении  $E_a \geq 10^7$  В/м вдоль одной из диагоналей либо грани элементарного куба ячейки, либо всей ячейки возникает индуцированный дипольный момент  $P_{dp}$ , т. е. число эквивалентных конфигураций JT-молекулы для гранецентрированного междоузлия снижается до одного, а для тетраэдрического — до одного-двух. Гранецентрированное междоузлие является устойчивым в плоскости грани куба и неустойчивым вдоль линии, перпендикулярной к этой грани, при этом внедренный ион переходит в более устойчивое тетраэдрическое междоузлие, где и возникает локальное нетепловое колебание с энергией  $\varepsilon_{ph} = 0.07—0.11$  эВ и эквивалентным внутрикристаллическим полем  $E_{eqv} = (1.5—2) \cdot 10^{10}$  В/м.

Опыт показывает [7, 8], что запрещенная зона  $E_g$  щелочно-галогидных кристаллов (например, для NaCl:  $E_g = 8.6$  эВ) содержит верхнюю экситонную полосу (длина волны  $\lambda_{ex} = 100—128$  нм, нижний край полосы 5.9 эВ) и ряд нижних собственных ( $F$  — центры окраски: 465—624 нм, 1.1—1.5 эВ соответственно) и примесных отщепленных уровней как выше середины запрещенной зоны (электронные центры), так и ниже ее (дырочные центры). Спектр поглощения состоит из высокой экситонной линии и фоновой крыла с отдельными линиями дефектов. Отсюда ясно, что в данном случае возбуждение экситонов в верхней полосе не имеет места; возможно возбуждение собственных уровней центров окраски, JT-молекул. Для последних имеет место воздействие микрополя локального фона, созданного импульсным магнитным полем.

Рассмотрим схему одного из возможных механизмов массопереноса, где внедренный катион под влиянием переменного в магнитном импульсе электрического поля  $E_a$  в направлении близком к  $\langle 111 \rangle$ , образует JT-молекулу  $A^+B^-$ , энергия образования которой по существу совпадает с энергией активации массопереноса  $U_{ac}$ . Эта энергия состоит из энергии локального нетеплового фона  $\varepsilon_{l.ph.} = \hbar \omega_{l.ph.}^{(0)}$  и суммарной работы  $A_{\Sigma}$ , включающей работу поля  $E_a$  последовательно на всех этапах по перемещению катиона из одного междоузлия в соседнее: 1) работу  $A_{g.m.} \approx eE_a u \approx 10^{-4}—10^{-6}$  эВ; в ре-

зультате степень ионной связи катиона и аниона повышается до образования молекулы  $A^+B^-$  и рождения локального фонона микрополе  $E_{eqv}$ , которого в конце времени его жизни «раздвигает» молекулу до  $r_0$ , т. е. перемещает узельный анион в направлении соседнего междузлия, при этом это микрополе одновременно «подтягивает» сам междузельный катион; здесь внутрикристаллическое поле  $E_{eqv}$  порядка  $10^{10}$  V/m может образовать вакансию узельного иона т.к. энергия вакансии в 6 раз меньше энергии междузельного иона [19] или энергии образования ион-вакансионной пары; 2) работу  $A_{rot.m.}$ , где образовавшаяся узельная анионная вакансия является неустойчивым состоянием (потенциальным «горбом») для внедренного катиона. В этом случае даже незначительное несовпадение направления переменного в магнитном импульсе электрического поля и линии, соединяющей два соседних тетраэдрических междузлия, приводит к появлению момента электростатических сил, который поворачивает молекулу на  $180^\circ$ , т. е. приводит к обмену местами составляющих молекулу ионов. Работа момента сил  $A_{rot.m.}$  может составлять для вышеуказанного диапазона значений переменного в магнитном импульсе электрического поля  $\approx (0.1—1) eE_a \approx 10^{-4}—10^{-2}$  eV; затем узельный анион «сваливается» в родной узел, а внедренный катион — в более устойчивое соседнее тетраэдрическое междузлие и т.д. Анализ показывает, что значение  $A_\Sigma$  лежит в пределах  $(0.05—0.1) \varepsilon_{l.ph.}$ . В случае внедренного аниона в тетраэдрическом междузлии NaCl необходимо учитывать упругую энергию  $U_{el}$ :

$$U_{el} = \frac{C}{2} [\Delta_w - 2r_0(C\Gamma)]^2, \quad (9)$$

где  $C$  — жесткость связи JT-молекулы;  $\Delta_w$  — верхняя граница поперечника междузлия;  $r_0(C\Gamma)$  — радиус аниона. Для аниона в NaCl в тетраэдрическом междузлии:  $U_{el} = 5.88 \cdot 10^{-3}$  eV. Здесь вышеописанный механизм массопереноса сохраняется и для внедренного катиона. Отсюда выражение пороговой энергии массопереноса  $U_{ac}$  по тетраэдрическим междузлиям можно представить в виде:

$$U_{ac} = A_{g.m.} + \Xi + A_{rot.m.} + U_{el}, \quad (10)$$

где  $\Xi = \varepsilon_{l.ph.}$  — релаксационная (диссипативная) составляющая и закон дисперсии локальных фононов  $\omega_{l.ph.}(\mathbf{q})$  имеет комплексный характер [20] типа:

$$\omega_{l.ph.} = iD_{p.d.} \sum_{k=1}^n c_k \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_{0k}), \quad (11)$$

где  $\mathbf{q}_{0k}$  — волновой вектор обратной решетки кристалла, значение которого изменяется от  $2\pi/a$  до

$2\pi/r_d$  без учета поля смещений ионов вокруг междузельного иона;  $D_{p.d.}$  — коэффициент диффузии по междузлиям данного иона;  $c_k$  — весовой коэффициент для вектора  $\mathbf{q}_{0k}$ . Согласно закону Фика  $D_{p.d.}$  можно представить в виде [1]:

$$D_{p.d.} = \omega_{l.ph.}^{(0)} a^2 \exp(-U_{ac} / kT), \quad (14)$$

где  $\omega_{l.ph.}^{(0)}$  — собственная частота колебаний в JT-молекуле-гантели типа  $A^+B^-$  [Hz]. Отметим, что: 1) релаксационная составляющая приближенно может быть выражена как произведение вариаций жесткости связи JT-молекулы  $\delta C$  и локальных фононных смещений  $\xi_{l.ph.}$ , т. е.

$$\Xi \approx \delta C (\delta \xi_{l.ph.})^2 \quad (15)$$

закон дисперсии (11) отражает характерные особенности спектральной линии поглощения для данного точечного дефекта [21].

Анализ показывает, что согласно (9), (10)  $U_{ac} \approx (2.57—3.57) kT$ .

Кроме того, приложенное в эксперименте импульсное магнитное поле согласно (7) не может образовать ион-вакансионные пары («катион-вакансия», «анион-вакансия») в объеме кристалла, а значит изменить начальную плотность точечных дефектов, т. к. для этого необходимо поле  $E_a$  на два порядка больше:  $10^{10}$  V/m. Возможным и наиболее вероятным механизмом образования точечных дефектов является процесс пластической деформации на стадии двойного поперечного скольжения [22—24], где имеет место размножение дислокаций, и перегибы (kink) дислокаций создают шлейфы из вакансий или междузельных ионов. Возникновение пластической деформации под действием постоянного электрического поля порядка  $10^5$  V/m экспериментально подтверждено в ряде работ [25, 26]. Если силу, действующую на единицу длины дислокационной линии кристалла  $F_i^{sc}$ , записать в виде произведения предела текучести  $\tau_T$  на вектор Бюргерса  $b$   $\tau_T = 50—65$  Г/мм<sup>2</sup> [22];  $\tau_T = 125$  Г/мм<sup>2</sup> [26],  $b_{KCl} = 1.27 \cdot 10^{-10}$  м [22]) и приравнять кулоновской силе  $E \frac{e}{2a}$ , то можно произвести оценку поля, при котором начинается пластическая деформация:  $1—2.5 \cdot 10^5$  V/m, что не противоречит известным экспериментальным данным. Применяемое в эксперименте [17] значение поля  $E_a$  заведомо приведет к стадии двойного поперечного скольжения.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Наиболее вероятным механизмом образования междузельных ионов и вакансий при воздей-

ствии импульсного магнитного поля является пластическая деформация на стадии двойного поперечного скольжения.

2. Предложена следующая схема механизма массопереноса междуузельных ионов в щелочно-галоидных кристаллах под влиянием импульсного магнитного поля: 1) снижение симметрии точечного дефекта до аксиальной симметрии путем образования выделенной конфигурации ян-теллеровского комплекса при наложении постоянного или переменного в магнитном импульсе электрического поля; 2) рождение локального нетеплового (когерентного) продольного оптического фона; 3) «выталкивание» полем  $E_{eqv}$  самой JT-молекулы узлового иона в пространство соседней ячейки до тех пор, пока расстояние между катионом и анионом не совпадет с равновесным  $r_0$ ; 4) вследствие неустойчивости нового состояния JT-молекулы обмен местами катиона и аниона; 5) «сваливание» всей JT-молекулы в соседнюю ячейку в направлении переменного в магнитном импульсе электрического поля до тех пор, пока междуузельный ион не перейдет в соседнее тетраэдрическое междуузелье, а узловой не возвратится в «родной» узел; и процесс повторяется снова. Такая схема механизма массопереноса междуузельных ионов возможна при переменных в магнитном импульсе электрических полях  $E_a = 10^7$ — $10^9$  V/m.

3. Принципиальным отличием массопереноса внедренных ионов по междуузлиям щелочно-галоидных кристаллов под влиянием импульсного магнитного поля является перемещение этих ионов только в потенциальном рельефе локальных нетепловых фононов, созданных этим полем. Значение энергии активации перемещения данного междуузельного иона по междуузлиям в основном определяется релаксационной или диссипативной составляющей, и поэтому закон дисперсии локальных нетепловых фононов имеет комплексный характер, формирующий спектральную линию поглощения для этого иона, причем частота локального фонона  $\omega_{l.ph.}^{(0)} = \tau_{l.ph.}^{-1}$  по существу является релаксационной частотой или показателем Ляпунова, а время жизни фонона  $\tau_{l.ph.}$  — временем релаксации процесса перемещения иона из данного в соседние междуузлия.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.
2. Стоунхэм А. М. Теория дефектов в твердых телах. Электронная структура точечных дефектов в диэлектриках и полупроводниках. 1978. Т. 1. М.: Мир, 570 с.
3. Стоунхэм А. М. Теория дефектов в твердых телах. Сравнение теории с экспериментом. 1978. Т. 2. М.: Мир, 357 с.
4. Flynn C. P., Stoneham A. M. // Phys. Rev. 1970. V. B1. P. 3960.
5. Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М.: Мир, 1978. 222 с.
6. Абрамов В. С. Распространение короткого импульса переменного поперечного магнитного поля внутри ферродизэлектрика // Материалы и реактивы для современной техники / М.: Изд-во НИИТХЭМ, 1987. С. 70.
7. Кац М. Л. Люминисценция и электронно-дырочные процессы в фотохимически окрашенных кристаллах щелочно-галоидных соединений. Изд-во Саратовского университета, 1960. 280 с.
8. Кочубей В. И. Формирование и свойства центров люминисценции в щелочно-галоидных кристаллах. М.: Физматлит, 2006. 188 с.
9. Егорушкин В. Е., Панин В. Е., Савушкин Е. В., Хон Ю. А. // Изв. Вузов. Физика. 1987. № 1. С. 9.
10. Белозерова Э. П., Красников В. Л., Светашов А. А. Влияние магнитного поля на внутреннее трение и размножение дислокаций в щелочно-галоидных кристаллах / докл. на 6-й межд. конф. Действие электромагнитных полей на пластичность и прочность материалов. Воронеж, 2006.
11. Головин Ю. И. // ФТТ. 2004. Т. 48. № 5. С. 769.
12. Гантмахер В. Ф., Левинсон И. Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984. 350 с.
13. Косевич А. М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка, 1981. 327 с.
14. Постников В. С. Внутреннее трение в металлах. М.: Металлургия, 1969. 330 с.
15. Шувалов Л. А., Урусовская А. А., Желудев И. С. и др. Современная кристаллография (в четырех томах). Т. 4. Физические свойства кристаллов. М.: Наука, 1981. 496 с.
16. Физический энциклопедический словарь // Гл. ред. Прохоров А. М. / М.: Изд-во Советская Энциклопедия, 1984. 944 с.
17. Битюцкая Л. А., Машкина Е. С., Бутузов И. Ю. // Журн. физ. Химии. 2004. Т. 78. № 12. С. 2132.
18. Кузьмичев В. Е. Законы и формулы физики (Справ-к). Киев: Наукова думка, 1989. С. 418.
19. Миркин Л. И. Физические основы прочности и пластичности. М.: Изд-во МГУ, 1968.
20. Бусов В. Л. // Физ. Мезомех. 2009. Т. 12. № 6. С. 17.
21. Пригожин И., Стенгерс И. Время. Хаос. Квант. К решению парадокса времени. М.: Изд-во КомКнига, 2005. С. 125.
22. Смирнов Б. И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. Л.: Наука, 1981. 235 с.
23. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М.: Мир, 1974. 496 с.
24. Зув Л. Б., Громов В. Е., Нарожный А. Н. Влияние электрического поля на подвижность дислокаций в кристаллах NaCl, определяемую по релаксации напря-

жений и прямыми методами // Динамика дислокаций / Киев: Наукова думка, 1975. С. 76.

25. Белозерова Э. П. Движение дислокаций в щелочно-галлоидных кристаллах // Динамика дислокаций / Киев: Наукова думка, 1975. С. 218.

26. Бойко Ю. Ф., Лубинец С. В., Остапчук Е. И. О структуре и динамике дислокационных ансамблей, возникающих вблизи концентраторов в кристаллах KCl // Динамика дислокаций / Киев: Наукова думка, 1975. С. 145.

---

*Абрамов Валерий Сергеевич* — д.ф.-м.н., старший научный сотрудник, Донецкий физико-технический институт; тел.: (0626) 3110570, e-mail: [dima\\_busov@mail.ru](mailto:dima_busov@mail.ru)

*Бусов Владимир Львович* — доцент, машиностроительная академия; тел. (0626) 481344, e-mail: [dima\\_busov@mail.ru](mailto:dima_busov@mail.ru)

*Битюцкая Лариса Александровна* — доцент, кафедра физики полупроводников и микроэлектроники, физический факультет, Воронежский государственный университет; тел.: (4732) 208481, e-mail: [me144@phys.vsu.ru](mailto:me144@phys.vsu.ru)

*Abramov Valery S.* — PhD, senior researcher, Donetsk Physico-Technical Institute; tel.: (0626) 3110570, e-mail: [dima\\_busov@mail.ru](mailto:dima_busov@mail.ru)

*Busov Vladimir L.* — assistant professor, Engineering Academy; tel.: (0626) 481344, e-mail: [dima\\_busov@mail.ru](mailto:dima_busov@mail.ru)

*Bityutskaya Larisa A.* — assistant professor, Department of «Physics of Semiconductors and Microelectronics», Voronezh State University; tel.: (4732) 208481, e-mail: [me144@phys.vsu.ru](mailto:me144@phys.vsu.ru)