

ПОРОГОВАЯ ЭНЕРГИЯ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ: ФИЗИЧЕСКАЯ ПРИРОДА И МЕТОДИКА РАСЧЕТА

THRESHOLD DISPLACEMENT ENERGY OF ATOMS IN SOLIDS: THE NATURE AND METHOD OF CALCULATION

*В. В. Углов^{1,2)}, Н. Т. Квасов^{1,2)}, Г. Е. Ремнев²⁾, В. И. Шиманский^{1,2)}
V. V. Uglov, N. T. Kvasov, G. E. Remnev, V. I. Shymanski*

¹⁾Белорусский государственный университет
Belarusian State University

²⁾Томский политехнический университет
Tomsk Polytechnic University

Впервые предложена компьютерная методика оценки пороговой энергии смещения E_d атомов из узлов решетки при радиационном воздействии на твердые тела. Структура E_d определена на основе анализа процессов, сопровождающих подпороговое движение выбитого из узла решетки атома (когда энергия W , полученная атомом, не превышает E_d). Показана связь E_d с физическими свойствами твердых тел и параметрами их кристаллических решеток. Пороговая энергия смещения атомов в твердых телах при радиационном воздействии складывается из энергии E_s , передаваемой решетке движущимся атомом при столкновениях и работы сил электростатического и упругого взаимодействий между вакансией и междоузельным атомом.

The method of evaluation of threshold displacement energy E_d in radiation influence in solids is proposed. The structure of the value E_d was determined by analysis of sub-threshold moving of atom (the energy W less than E_d). The relation between E_d and physical properties of solids and its structure is discussed. It was shown that threshold displacement energy E_d consists of energy E_s transferring during the interaction and the work of both electrostatic and elastic interaction between the vacancies and interstitials.

Защита различных объектов от разрушающего воздействия ионизирующих излучений является одной из актуальных проблем радиационной физики твердого тела. В первую очередь это касается приборов и устройств автоматического управления работой ядерных реакторов, систем связи между Землей и искусственными спутниками и межпланетными станциями, космическими кораблями и управляемыми аппаратами, доставляемыми на поверхности других планет, обеспечения жизнедеятельности космонавтов и персонала, работающего с источниками ядерного излучения.

Повышение радиационной стойкости материалов лежит, в частности, на пути увеличения значения пороговой энергии смещения E_d – основной характеристики, определяющей процессы деформирования в твердом теле. Нами показано, что аналитическое выражение для E_d имеет сложную структуру, и компоненты его составляющие определяются энергией связи, работой сил электростатического и упругого взаимодействия движущегося междоузельного атома со своей вакансией. При движении имеют место также и

диссипативные потери энергии, характеризующиеся коэффициентом внутрикристаллического трения ξ , определяемого, в свою очередь, из дополнительных соображений. Как показали дальнейшие исследования, представление E_d в виде суммы независимых слагаемых и вычисление каждого из них оказывается весьма затруднительным в связи с необходимостью знания ряда микроскопических параметров радиационного процесса, которые необходимо рассчитывать дополнительно. Особенно это касается величины ξ , модельно представляющей потери энергии на столкновения выбитого из узла решетки атома, получившего энергию W ($W < E_d$) и движущегося в области зоны неустойчивости, характеризующейся, в свою очередь, «радиусом» R .

В этой связи представляется целесообразным разработать новую методику оперативного определения E_d , минуя стадии оценки ее компонент и используя при этом возможности компьютерной техники.

Решению этой проблемы может способствовать анализ динамики движения подпорогового

($W < E_d$) движения междоузельного атома (i), когда он, не покидая пределов зоны неустойчивости, безактивационно аннигилирует с собственной вакансией (v). Изучение этого процесса представляется важным не только в теоретическом аспекте, но и в практическом отношении, поскольку размер зоны неустойчивости R , наряду с пороговой энергией смещения, является одним из основных критериев оценки радиационной стойкости: чем больше R материала, тем выше его радиационная стойкость. Согласно мнению В. М. Кошкина [1] причиной возникновения зон неустойчивости в металлах является упругое, а в диэлектриках и полупроводниках – электростатическое взаимодействие вакансии и собственного междоузельного атома. Следует отметить, однако, что для интервалов времени $10^{-13} - 10^{-11}$ с, характерных для динамики неустойчивых пар, такое разделение не представляется достаточно обоснованным. Ведь очевидно, что за это время в металле вакансии своим полем отрицательного заряда ve (v – валентность, e – заряд электрона) будет препятствовать релаксационным процессам в электронной подсистеме в области зоны неустойчивости, в связи с чем здесь необходимо учитывать также и электростатическое взаимодействие. Упругое же взаимодействие «включается» только на значительных расстояниях ρ между вакансией и движущимся междоузельным атомом, когда i и v становятся автономными (и полноценными) центрами дилатации с соответствующими объемами ΔV_i и ΔV_v . Но вместе с этим при $\rho > a_0$ (a_0 – постоянная решетки) сила упругого взаимодействия, пропорциональная ρ^{-4} , крайне мала и недостаточна для возврата междоузельного атома в свою вакансию. Это дает основание полагать, что роль упругого взаимодействия между компонентами неустойчивой пары в металлах не является определяющей.

Закон сохранения энергии для динамической пары вакансии – междоузельный атом можно записать в следующем виде:

$$W - \frac{mv^2}{2} = A_e(\rho) + A_{el}(\rho) + E_S, \quad (1)$$

где m – масса атома, $A_e(\rho) = \int_x^\rho F_e(\rho) d\rho$,

$A_{el}(\rho) = \int_x^\rho F_{el}(\rho) d\rho$, $F_e(\rho)$ и $F_{el}(\rho)$ – силы электрического и упругого взаимодействия,

$$E_S = \frac{\mu\sigma_s Nm}{2} \int_0^l v^3 dt, \quad \sigma_s = 0,5\pi R_a^2, \quad R_a = \left(\frac{3}{4\pi N}\right)^{1/3},$$

N – концентрация атомов решетки, μ – коэффициент, определяющий долю переданной при столкновении энергии ($\mu \sim 0,3$). Начальные условия для уравнения (1) определяются следующим образом:

$$\rho(t=0) = x, \quad v(t=0) = \left(\frac{2(W - U_b)}{m}\right)^{1/2}.$$

При решении уравнения (1) полагалось, что максимально возможное удаление R_0 атома от своей вакансии определяется из условия $F_e(R_0) + F_{el}(R_0) = \frac{2U_m}{a}$,

$$\text{где } R_0 = \left(\frac{\alpha}{2} + \left(\frac{\alpha^2}{4} + \beta\right)^{1/2}\right)^{1/2}, \quad \alpha = \frac{ve^2 a_0}{8\pi\epsilon_0 U_m},$$

$$\beta = \frac{3Ka_0\Delta V_i\Delta V_v}{2U_m}. \quad v(t=\tau) = 0 \quad \text{при} \quad \rho(\tau) = R,$$

τ – время достижения пределов зоны неустойчивости.

Радиус же зоны неустойчивости R при известном значении E_d можно определить из следующего уравнения:

$$R^4 + b_1 R^3 - b_2 R^2 - b_3 = 0, \quad (2)$$

$$\text{где } b_1 = \frac{1}{\mu E_d \sigma_s N} \left(\frac{ve^2}{4\pi\epsilon_0 x} + \frac{K\Delta V_i\Delta V_v}{x^3} - E_d' \right),$$

$$b_2 = \frac{ve^2}{4\pi\epsilon_0 \mu E_d \sigma_s N}, \quad b_3 = \frac{K\Delta V_i\Delta V_v}{\mu E_d \sigma_s N}, \quad E_d' = E_d - U_b,$$

U_b – энергия связи, ϵ_0 – электрическая постоянная, K – модуль всестороннего сжатия, U_m – энергия миграции.

Компьютерный анализ выражения (1) проводился путем определения формы зависимости $\rho(t)$ при изменении энергии W в направлении ее увеличения (рис. 1).

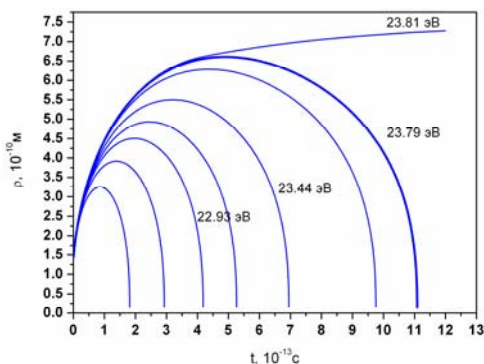


Рис. 1. Зависимость $\rho(t)$ для атомов в кристаллической решетке железа

При этом величина скорости $v(\tau)$ (для разных W) проходит область нулевых значений до момента, когда $v > 0$. Энергия W , соответствующая этому, есть пороговая энергия смещения E_d , что фиксируется компьютером. В табл. 1 приведены значения E_d , полученные в рамках данной методики в сравнении с данными экспериментами [3-5].

Очевидно, что физические свойства твердых тел определенным образом связаны друг с другом, что свидетельствует о едином «фундаменте», на котором они (свойства) формируются. В этой связи рассмотрим соответствие радиационной стойкости материалов (уровень E_d) их физико-механическим и теплофизическим свойствам.

С этой целью были сопоставлены численные значения E_d со справочными данными для модулей упругости Юнга E , энергией сублимации U_s , температуры Дебая T_D , энергией связи атомов в

решетке U_b и коэффициентом температурного расширения α_T простых материалов С, Al, Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Zr, Mo, Cd, Ta, W, Au, Bi. Представляет интерес также связь E_d с параметрами элементарных ячеек этих материалов, так как они (параметры) определенным образом отражают энергетическое состояние системы объединившихся в решетку атомов.

На рис. 2 – 7 приведены соответствующие кривые (это значения E_d , E , U_s , T_m , T_D , U_b , α_T и параметра ячейки a различных элементов, расположенных в порядке возрастания их зарядового числа Z). Прямые линии, соединяющие точки на рисунках, проведены с целью улучшения зрительного восприятия характера поведения соответствующих физических характеристик.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы:

Таблица 1

Результаты расчета пороговой энергии смещения E_d для некоторых материалов

Материал	$a, 10^{-10}$ м	$N, 10^{28}$	$B, 10^9$ Па	$\tau, 10^{-12}$ с	$R, 10^{-9}$ м	E_d , эВ (расчет)	E_d , эВ (эксперимент)
С	3,57	15,81	286,8	0,61	1,7	46,5	34,0
Al	4,05	6,03	78,9	0,97	1,2	15,1	15,0 32,0
Si	5,43	5,00	83,3	1,2	1,3	16,8	22,0
Ti	2,95	5,68	109,4	1,07	1,6	24,14	19,2 30,0
V	3,03	7,05	165,5	1,13	1,3	25,9	23,6 40,0
Cr	2,80	8,33	145,6	1,12	1,5	27,76	25,3 40,0
Fe	2,87	8,49	171,1	1,13	1,2	24,39	17,0 40,0
Co	2,50	9,10	167,1	1,05	1,2	28,6	23,0 40,0
Ni	3,52	9,15	175,0	1,34	1,6	22,54	23,0 40,0
Cu	3,61	8,49	93,3	1,46	1,0	17,8	18,0 30,0
Zr	3,23	7,05	253,1	1,61	1,3	24,6	14,5 40,0
Mo	3,15	6,42	47,3	1,64	1,4	33,05	32,4 60,0
Cd	2,98	4,64	211,1	1,69	1,0	19,16	19,0 40,0
Ta	3,31	5,54	316,0	2,35	1,2	34,6	26,7 90,0
W	3,16	6,34	350,0	2,27	1,6	40,16	40,0 90,0
Au	4,08	5,91	70,0	2,1	1,4	17,49	33,5 40,0
Bi	4,75	2,82	31,4	0,7	0,8	12,10	12,3 13,0

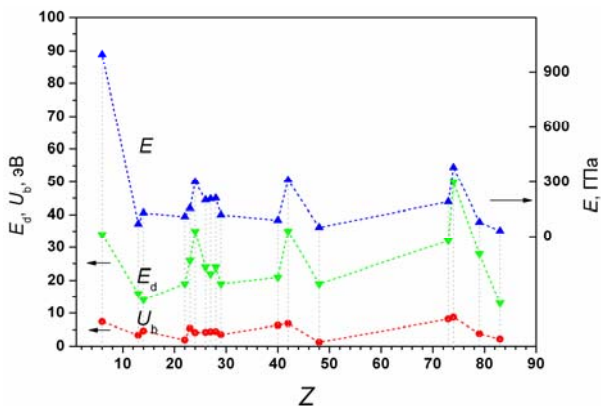


Рис. 2. Корреляционные кривые пороговой энергии смещения (E_d), энергии связи (U_b) и модуля Юнга (E) для ряда металлов. Значения E_d взяты из [1]

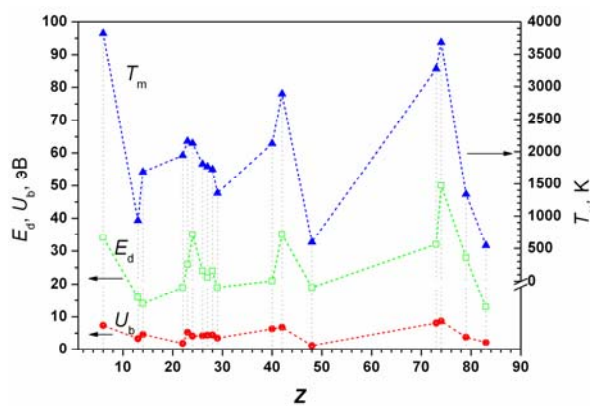


Рис. 3. Корреляционные кривые пороговой энергии смещения (E_d), энергии связи (U_b) и температуры плавления (T_m) для ряда металлов

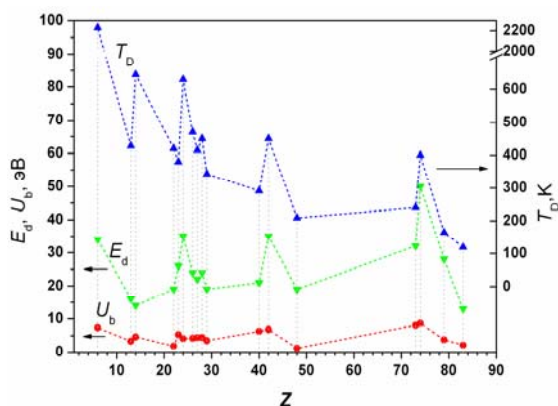


Рис. 4. Корреляционные кривые пороговой энергии смещения (E_d), энергии связи (U_b) и температуры Дебая (T_D) для ряда металлов

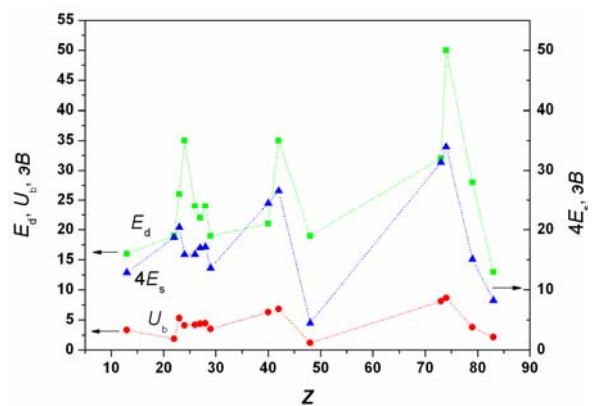


Рис. 5. Корреляционные кривые пороговой энергии смещения (E_d), энергии связи (U_b) и $4E_s$ (E_s – энергия сублимации) для ряда металлов

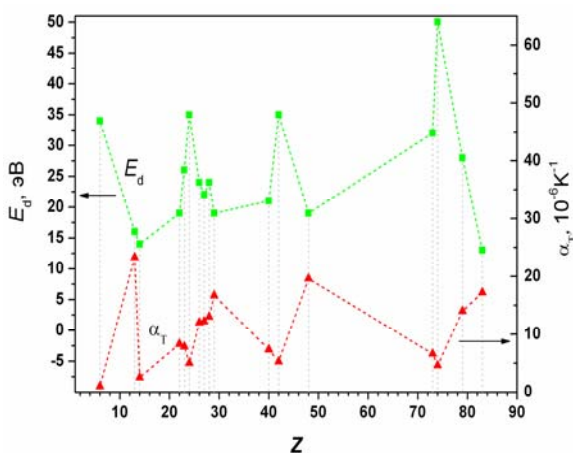


Рис. 6. Анतिकорреляционные кривые пороговой энергии смещения (E_d) и коэффициента температурного расширения (α_T) для ряда металлов

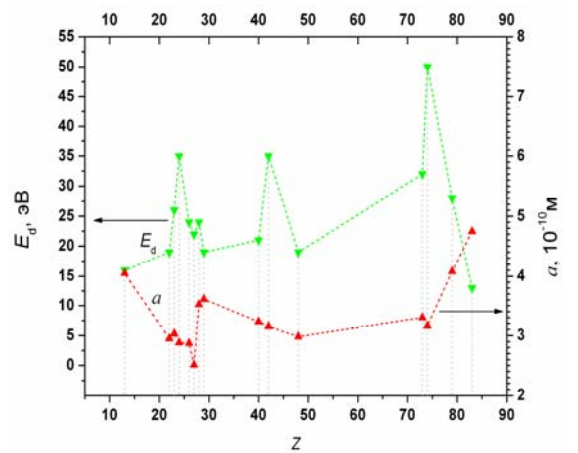


Рис. 7. Анतिकорреляционные кривые пороговой энергии смещения (E_d) и постоянной решетки a для ряда металлов

1. Пороговая энергия смещения E_d коррелирует с энергией связи U_b , хотя U_b составляет для металла в среднем 15 % от значения E_d . Это ука-

зывает на то, что и оставшаяся часть E_d каким-то образом определяется энергией U_b .

2. С энергией смещения E_d также коррелиру-

ют значения E , T_m , E_S , T_D , которые очевидно напрямую связаны с энергией U_b .

3. Особый интерес вызывают неочевидные антикорреляционные соотношения E_d и U_b с коэффициентом температурного расширения α_T и постоянной решетки a .

В связи с этим проведем качественные оценки зависимости упругих и тепловых характеристик некоторых металлов от энергии связи, используя для простоты вычислений потенциальную энергию парного взаимодействия атомов в решетке в форме Леннарда-Джонса (проблема точности здесь непринципиальна):

$$U(r) = A(Br^{-12} - r^{-6}), \quad (3)$$

где $r = a_0 + x$, a_0 – равновесное значение постоянной решетки, x – смещение атома из узла решетки, вызванное механическим или температурным воздействием.

Сила реакции решетки $F(r)$ в этом случае может быть записана следующим образом:

$$F(\varepsilon) = -\beta_1 \varepsilon + \beta_2 \varepsilon^2 + \dots, \quad (4)$$

где $\beta_1 = 6Aa^{-7}(26Ba^{-6} - 7)$,

$\beta_2 = 6Aa^{-7}(182Ba^{-6} - 28)$, $\varepsilon = \frac{x}{a_0}$ – относительная

деформация решетки, $B = \frac{1}{2}a_0^6$.

Для смещений x в формуле (4) можно записать как

$$F(x) = -\beta'_1 x + \beta'_2 x^2 + \dots, \quad (5)$$

где $\beta'_1 = 36Aa^{-8}$, $\beta'_2 = 378Aa^{-9}$. При этом величина A определяется следующей формулой:

$$A = \frac{2U_b a_0^6}{m_k}, \quad (6)$$

где m_k – координационное число, a_0 – равновесное значение постоянной решетки.

Из (5) можно получить формулу для модуля упругости Юнга:

$$E \approx \Theta U_b, \quad (7)$$

где $\Theta = \frac{36,2N^{2/3}}{m_k a_0}$.

Коэффициент температурного линейного расширения α_T оценивается по следующей формуле:

$$\alpha_T = \frac{\bar{\delta}(T)}{a_0(T)}, \quad (8)$$

где $\bar{\delta}$ – среднее смещение узла кристаллической решетки при ее нагревании, T – температура. В свою очередь:

$$\bar{\delta}(T) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{\frac{U(x)}{k_B T}} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{U(x)}{k_B T}} dx}, \quad (9)$$

где $U(x) = \int F(x) dx$, k_B – постоянная Больцмана. С учетом формул (5), (8) и (9) получим:

$$\alpha_T = 1,07 \times 10^{-24} \frac{m_k}{U_b}. \quad (10)$$

Обратная пропорциональность α_T и U_b удовлетворительно описывает антикорреляционный характер поведения α_T и E_d (так как значение E_d прямо пропорционально U_b).

Связь температуры Дебая с энергией связи легко получить из известной формулы [6]:

$$T_D = \frac{h}{k_B} \left(0,716N \frac{v_l^3 v_t^3}{2v_t^3 + v_l^3} \right)^{1/3}, \quad (11)$$

где h – постоянная Планка, k_B – постоянная Больцмана, v_l и v_t – продольная и поперечная скорости распространения упругих волн в твердом теле. С учетом формулы (7) получим:

$$T_D \sim E^{1/2} \sim U_b^{1/2}. \quad (12)$$

Из эмпирической формулы Линдемманна ($T_m = AMV^{2/3}T_D^2$, где A – постоянная величина, V и M – молярные объем и масса вещества) и выражения (12) следует $T_m \sim U_b$, что, в общем-то, очевидно.

Температура плавления, коэффициент всестороннего сжатия, постоянная решетки и постоянная Грюнайзена γ связаны между собой соотношением:

$$\frac{k_B T_m}{Ka_0^3} = \frac{1}{72\gamma^2}. \quad (15)$$

Отсюда можно получить:

$$K = \frac{72k_B \gamma^2 T_m}{a_0^3}, \quad (16)$$

и, как следствие:

$$K \sim E \sim U_b \sim a_0^{-3}. \quad (17)$$

Такая же зависимость следует из формулы (7), если положить $a_0^3 = \frac{2}{N}$. Обратная пропорциональность между U_b и a_0^3 получается также исходя из формулы для энергии металлического кристалла, полученной в рамках теории псевдопотенциала [8].

Так как пороговая энергия смещения коррелирует с U_b , то из вышеприведенных рассуждений (формулы (7), (10), (12), (14), (17)) следует удовлетворительная интерпретация представленных на рис. 2–7 графиков.

Выводы

1. Пороговая энергия смещения атомов в твердых телах при радиационном воздействии складывается из энергии E_S , передаваемой решетке движущимся атомом при столкновениях и работы сил электростатического и упругого взаимодействий между v и i .

2. Установленная в работе связь пороговой энергии смещения с физико-механическими и теплофизическими характеристиками твердых тел позволяет определенным образом прогнозировать радиационную стойкость материалов.

Следует предположить, что динамические дефекты $i - v$, существующие в материале 10^{-11} с при облучении, могут оказывать существенное влияние на эволюцию дефектно-примесной системы, ускорять диффузионные процессы, изменять упругие, теплофизические, электрические, магнитные и оптические свойства вещества.

Это новое перспективное направление в радиационной физике.

Список литературы

1. Кошкин В. М. Зоны неустойчивости и короткоживущие дефекты в физике кристаллов // Физика низких температур. 2002. Т. 28, № 819. С. 963–977.
2. Ахизер И. А., Давыдов Л. Н. Введение в теоретическую радиационную физику металлов и сплавов. Киев: «Навукова думка», 1985.
3. Зеленский В. Ф., Неклюдов И. М., Черняева Т. П. Радиационные дефекты и набухание металлов. Киев: «Навукова думка», 1988.
4. ASTM E521-96 Standard Practice for Neutron Radiation Damage Simulation by Charged-Particle Irradiation. West Conshohocken: ASTM International, 1996.
5. Комаров Ф. Ф., Новиков А. П., Соловьев В. С., Ширяев С. Ю. Дефекты структуры в ионноимплантированном кремнии. Минск: Университетское, 1990.
6. Яворский Б. М., Детлаф А. А. Справочник по физике. М.: Наука, 1979.
7. Штремель М. А. Прочность сплавов. Ч. 1. Дефекты решетки. М.: Металлургия, 1982.