

МЕХАНИЗМЫ ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ В МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МИШЕНИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ МОЩНЫХ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

THE MECHANISMS OF ENERGY DISSIPATION IN A METAL TARGET UNDER THE INFLUENCE OF POWERFUL IONIZING RADIATION

Г. А. Блейхер, В. П. Кривобоков, С. Н. Янин
G. A. Blykher, V. P. Krivobokov, S. N. Yanin

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Tomsk polytechnic university

На основе метода псевдо потенциалов исследовалось межатомное взаимодействие в металле при наличии ионизированных состояний. Параметры форм факторов определялись методом квантовых дефектов по спектроскопическим термам свободных ионов. Показано, что ионизация приводит к существенному изменению межатомного взаимодействия. Атомы попадают на ветвь отталкивания потенциальной функции, в результате чего кристаллическая решетка переходит в неравновесное состояние. Экранирующие свойства электронов проводимости сильно зависят от их концентрации, что может приводить к локальному изменению упругих свойств вещества в области трека быстрой заряженной частицы. На базе псевдо потенциального подхода построены уравнения состояния, учитывающие наличие ионизированных атомов.

Calculations of the interatomic potentials in metal containing ionized states were based on the Pseudo potential method with parameters which were determined from spectroscopic terms of free ions following the method of quantum defect. Ionization leads to the strong decrease in the depth of the first minimum of the potential function. The local growth of conduction electron concentration causes to "softening" of crystalline lattice and configuration with smaller interatomic distance becomes the equilibrium one. The equations state for metal were provided on the basis of the pseudo potential method when part of the ionic cores further ionized. The isotherms were obtained for different degrees of the atoms ionization on the example of aluminium.

При воздействии ионизирующих излучений на материалы происходят различные физические явления, которые могут приводить к изменению потенциалов межатомного взаимодействия. В частности, в области трека быстрой заряженной частицы, а также вблизи поверхности твердого тела при интенсивном облучении возникают ионизированные атомы, потенциалы взаимодействия которых с окружающими частицами существенно изменяются. Для изучения поведения частично или полностью ионизированного вещества необходимо знать соответствующие потенциалы межатомного взаимодействия.

В настоящее время изучению такой возможности не уделяется должного внимания, так как потенциалы взаимодействия, обычно используемые в машинных моделях, не учитывают изменения свойств твердого тела в условиях облучения. В этой связи требуется метод, позволяющий рас-

считывать потенциалы "из первых принципов" с учетом изменения свойств твердотельных структур под действием излучения.

Нами использовался модельный псевдо потенциал Хейне – Абаренкова – Анималу, характеризующий энергию взаимодействия электрона проводимости с ионным остовом. Энергетические уровни E_{nl} отдельного электрона в поле положительных ионов с электронными оболочками, аналогичными сферически-симметричным электронным оболочкам инертных газов, в частности Na^+ , Mg^{2+} , Al^{3+} , Si^{4+} , P^{5+} , S^{6+} , Cl^{7+} , удовлетворяют соотношению [1]

$$E_{nl} = -Z^2 / (n - \delta_{nl})^2 + \Delta_{nl},$$

где Z – заряд ионного остова; δ_{nl} , Δ_{nl} – квантовые дефекты, характеризующие отклонение атомного потенциала данной конфигурации оболочек

инертного газа от кулоновского, обусловленного зарядом $|Ze|$.

Как видно из рис. 1, соотношение величины спектроскопических термов рассмотренного атомного ряда от квадрата заряда ионного остова хорошо описывается линейной зависимостью.

Оказалось, что существуют аналогичные зависимости и для дополнительно ионизированных остовов (рис. 2). Здесь будет реализован следующий ряд: Na^{2+} , Mg^{3+} , Al^{4+} , Si^{5+} , P^{6+} , S^{7+} , Cl^{8+} .

На основе этого эмпирического закона мы определили параметры форм фактора для дополнительного ионизированных остовов, связав их с энергиями $\epsilon_{nl} = E_{nl} - \Delta_{nl}$, как это было сделано в работе [2] для переходных металлов.

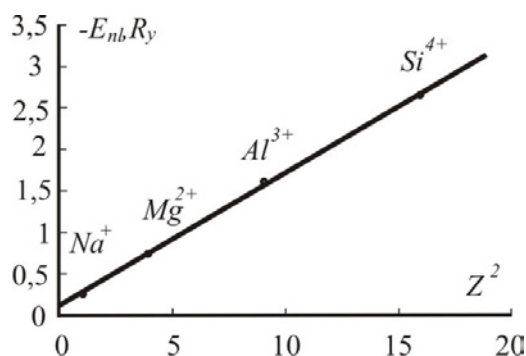


Рис. 1. Зависимость энергетических уровней электронов E_{3p} в поле положительных ионов от квадрата заряда ионного остова

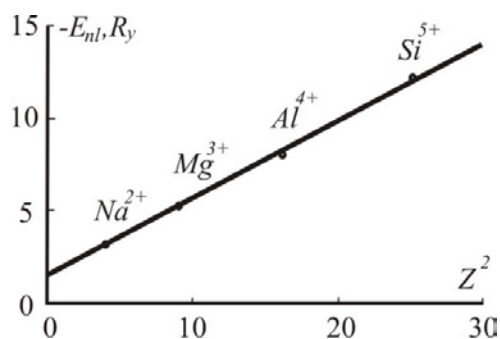


Рис. 2. Зависимость энергетических уровней электронов E_{2p} в поле положительных ионов от квадрата заряда ионного остова

Путем приравнивания логарифмических производных решений радиального волнового уравнения с модельным потенциалом, описывающим движение электрона, были найдены параметры, характеризующие глубину потенциальной ямы A_l [2].

Величины термов ϵ_{nl} определялись по таблицам спектроскопических данных. Параметры A_l являются функцией энергии $\epsilon = \epsilon_{nl}$ при фиксированном l и могут быть точно определены только для тех энергий, которые соответствуют наблюдаемым линиям в спектрах излучения электрона в потенциале остова. Функция $A_l(\epsilon_{nl})$ при этом выбирается таким образом, чтобы модельный потенциал давал собственные значения, совпадающие с ϵ_{nl} . Поэтому сначала определяются A_l для стольких значений энергии, сколько существует экспериментальных линий, а затем производится линейная интерполяция или экстраполяция к энергии Ферми.

Важной величиной, используемой в расчетах потенциала взаимодействия, является радиус ионного остова R_c , который вычислялся из условий равенства логарифмических производных волновых функций электрона внутри и вне остова.

В таблице даны в сравнении параметры модельного потенциала для алюминия в обычном зарядовом состоянии, взятые из литературы и полученные нами для дополнительного ионизированного остова. Все размерные величины представлены в атомных единицах.

Таблица 1

Параметры модельного потенциала

Z	A_0	A_1	A_2	R_m	R_c	α
3	1,38	1,64	1,92	2	1,08	0,024
4	1,45	1,756	1,46	2	1,05	0,022

Здесь α – параметр, характеризующий эффективный заряд электрона проводимости, R_M – модельный радиус.

Константы форм фактора псевдо потенциала Хейне – Абаренкова – Анималу, представленные в таблице, являются основными исходными данными для вычисления потенциалов межатомного взаимодействия. На их основе можно найти потенциальные функции для ионов с трех- и четырехкратной ионизацией. Параметры для ионов большей зарядности могут быть найдены аналогичным образом.

На рис. 3 показаны рассчитанные на основе данных табл. 1 потенциалы межатомного взаимодействия в алюминии для различных зарядовых состояний. Расчет выполнен для случая, когда концентрация ионизированных атомов невелика и, следовательно, концентрация электронов проводимости не отличается от обычной.

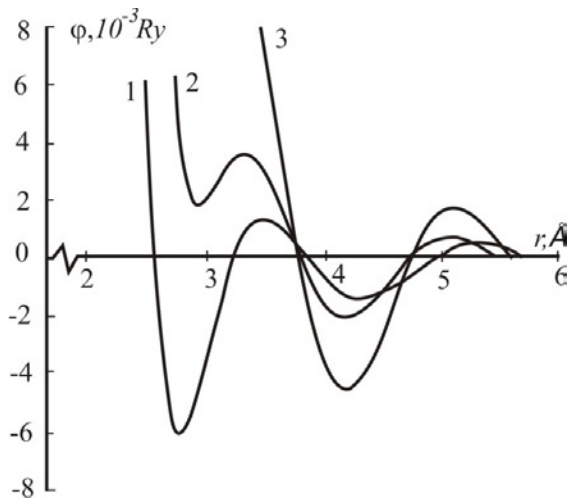


Рис. 3. Потенциалы межатомного взаимодействия для алюминия: 1 – для двух трехзарядных ионов; 2 – для трех- и четырех зарядного ионов; 3 – для двух четырехзарядных ионов

Как видно из рисунка, ионизация приводит к тому, что глубина первого минимума потенциальной функции, соответствующего расстоянию между ближайшими соседями для трех- и четырехзарядного ионов, существенно уменьшается по сравнению со случаем нормальных трехзарядных состояний. Более того, для пары четырехзарядных частиц первый минимум вообще исчезает. Атомы попадают на ветвь отталкивания потенциала взаимодействия, в результате чего кристаллическая решетка переходит в неравновесное состояние.

Благодаря тому, что нами были получены потенциалы взаимодействия в ионизированном состоянии, появилась возможность провести молекулярно – динамическое моделирование распыления с учетом этих явлений.

Моделирование производилось на расчетном кристаллите в форме параллелепипеда, содержащем 1268 атомов, 741 из которых были неподвижными с целью задания «жестких» граничных условий на пяти гранях. Распыление происходило на открытой поверхности (100). Быстрая заряженная частица входила в кристалл перпендикулярно поверхности и ионизировала атомы в области цилиндра Дебая с радиусом, равным расстоянию между ближайшими соседями.

Ускоренный ион двигался в режиме каналирования для того, чтобы устранить эффект распыления, обусловленный каскадными процессами. Таким образом, моделировалось только распыление, вызванное ионизацией. В результате расчета установлено: часть атомов приобретает высокие скорости и покидает кристаллит за время порядка

10^{-13} с, что соизмеримо с длительностью существования ионизированных состояний в металле.

Значительная часть энергии быстрой заряженной частицы в металле затрачивается на ионизацию атомов и возбуждение электронов проводимости. Электроны, ускоряющиеся в поле заряженной частицы, тормозятся, передавая свою энергию электронам проводимости в пространстве, ограниченном радиусом порядка десяти межатомных расстояний от трека. Например, в области траектории осколка деления плотность энергии электронов достигает 10^{12} эрг/см³ [3], что соответствует увеличению энергии свободных электронов над фермиевской у алюминия примерно вдвое.

Хотя сам факт изменения характера межатомного взаимодействия при возбуждении электронной подсистемы не вызывает сомнения, экспериментальное наблюдение его является весьма непростой задачей. В работе [4] предлагается анализ этого явления на основе экспериментальных данных по пороговой энергии смещения атома из положения равновесия E_d , который определяется по изменению значения какой – либо физической величины, зависящей от концентрации точечных дефектов (например, электропроводности), при изменяющейся энергии падающих частиц.

Порог смещения определялся в большом числе работ. В различных экспериментах для одних и тех же элементов получались различные значения даже для поликристаллических материалов. Сопоставление экспериментальных результатов указывает на существование некоторой зависимости величины E_d от интервала энергий бомбардирующих частиц.

Анализ работ, перечисленных в [4], позволил сделать заключение о том, что пороговая энергия смещения тем меньше, чем ниже используемый нижний предел энергии бомбардирующих частиц (в рассматриваемом диапазоне энергий 0,1 – 3 МэВ). Особенности поведения E_d в зависимости от энергии налетающей частицы можно объяснить изменением характера межатомного взаимодействия в металле в условиях возбуждения электронной подсистемы.

Во время движения быстрая заряженная частица теряет энергию передавая ее свободным электронам и электронам ионного остова, а при столкновении с ионом остова, непосредственно ему. Можно предположить, что волна возбуждения движется перед ускоренной частицей. Таким образом, еще до столкновения с быстрой заряженной частицей первично выбитый атом и окру-

жающие его ионы находятся в состоянии, отличным от равновесного.

Для того, чтобы выяснить, возможно ли существование подобного рода области, рассмотрим времена перераспределения энергии в металле. В соответствии с [5], характерное время релаксации возбуждения отдельного электрона составляет порядка 10^{-15} с, характерное время передачи возбуждения от электронного газа ионной подсистеме составляет 10^{-12} с (характерное время изменения температуры решетки от момента появления трека быстрой заряженной частицы, связанное с обменом энергией между фермиевскими электронами и ионными остовами). Время установления равновесия между электронным газом и решеткой порядка 10^{-12} с. Таким образом, если период перескока атома из одного положения равновесия в другое обратно пропорционален дебаевской частоте, что составляет примерно 10^{-13} с, то за время существования возбужденного состояния возможно достаточно большое количество перемещений ионов в окружении электронов с повышенной энергией.

В работе [4] представлены пороговые энергии смещения, полученные экстраполяцией, в сравнении с графиками потерь энергии первичных электронов на ионизацию и возбуждение свободного электронного газа. В экспериментах по определению порога смещения толщина мишени намного меньше длины свободного пробега электрона, поэтому поглощенная электронами энергия пропорциональна удельным потерям энергии. Там наблюдается корреляция между потерями на электронное торможение и величиной порога смещения. Чем больше энергии передается в электронную подсистему, тем меньше экспериментально наблюдаемая величина порога смещения. Эффект зависимости порога смещения от энергии, внесенной в электронную подсистему, наблюдается и при исследовании монокристаллических образцов в зависимости от кристаллографического направления.

Явления, связанные с неупругим распылением металлов ионной бомбардировкой рассмотрены в работе [5]. В качестве одной из причин аномально высокого коэффициента распыления осколками деления рассматривался локальный разогрев электронной подсистемы, который приводит к изменению сил межатомного взаимодействия.

Кроме того, экспериментально обнаружено, что гамма- и электронное излучение сравнительно слабой интенсивности оказывают существенное влияние на фазовые превращения в металлах и

сплавах [6]. В частности, под действием гамма – излучения сдвигается температура упорядочения сплава β -Cu – Zn. Была высказана гипотеза, что гамма-излучение вызывает «размягчение» кристаллической решетки, то есть уменьшение модулей упругости, которое проявляется в сдвиге температуры упорядочения. Поскольку плотность точечных дефектов, создаваемых излучением, крайне мала и наблюдаемый эффект зависит не столько от дозы, сколько от интенсивности облучения, можно предположить, что данное явление обусловлено отклонением функции распределения электронов от термодинамически равновесного, обусловленное воздействием излучения.

Таким образом, повышение температуры электронов проводимости в металлах приводит к изменению потенциалов межатомного взаимодействия и, следовательно, к снижению потенциальных барьеров для перемещения ионов. Природа этого явления заключается, на наш взгляд, в усилении экранировки ионных остовов фермиевскими электронами.

В работе [7] сделана попытка рассчитать функцию распределения электронов в непериодических металлах в условиях воздействия гамма – излучения на основе кинетического уравнения и с ее помощью в псевдо потенциальном приближении вычислить изменение модуля сдвига металла. Отклонение функции электронного распределения от фермиевской непосредственно учитывалось в изменении поляризационного оператора через некоторую добавку, приводящую к декомпенсации прямого кулоновского взаимодействия между ионами посредством электронов проводимости. Затем, вычислялись модули упругости исходя из изменений характера межатомных взаимодействий. Был сделан вывод о том, что изменение модулей упругости невелико, из-за малого количества надфермиевских электронов.

Нами была предпринята попытка выяснить влияние эффекта теплового размытия поверхности ферми на потенциалы межатомного взаимодействия путем прямых вычислений. С этой целью мы модернизировали функцию Линдхарда, полученную в приближении сферы Ферми включив в подынтегральное выражение функцию распределения электронов проводимости по импульсам.

Вычисления потенциалов межатомного взаимодействия с этой функцией показали, что температура слабо влияет на экранирующие свойства электронов проводимости. В то же время, экранирующие свойства сильно зависят от их концентрации. На рис. 4 показаны потенциалы межатомного

взаимодействия для нормального состояния и для случая, когда концентрация валентных электронов на 30 % превышает нормальную (в этом случае импульс электронов на поверхности Ферми возрастает на 10 %). Подобный локальный рост концентрации может возникать в области трека быстрой заряженной частицы и приводить к «размягчению» кристаллической решетки.

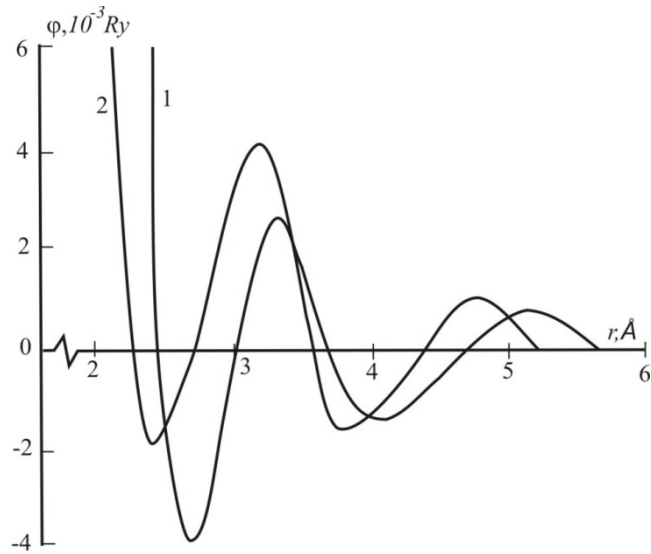


Рис. 4. Потенциалы межатомного взаимодействия для алюминия: 1 – в нормальном состоянии; 2 – импульс электронов проводимости на 10 % превышает фермиевский

В задачах по анализу результатов воздействия мощных импульсных потоков на вещество, в частности для исследования процесса разрушения поверхности, следует решать уравнение термоупругости. Здесь, в свою очередь, необходимо знать уравнение состояния вещества.

Нами на примере алюминия были построены уравнения состояния металлов с учетом ионизированных состояний на базе псевдо потенциального подхода с использованием полученных ранее параметров форм фактора.

Энергия связи в модели второго порядка по псевдо потенциалу имеет вид:

$$E(\Omega) = E_e^{(0)} + E_e^{(1)} + E_e^{(2)} + E_i.$$

Здесь Ω – атомный объем; $E_e^{(0)}$ – энергия однородного электронного газа, включающая в себя кинетическую, обменную и корреляционную энергию электронов проводимости; $E_e^{(1)}$ – энергия, обусловленная неточечностью ионов; $E_e^{(2)}$ – энергия зонной структуры; E_i – энергия Эвальда.

Учет дополнительно ионизированных атомов осуществлялся по методике, разработанной для сплавов замещения. Для вычисления $E_e^{(1)}$ и $E_e^{(2)}$ использовались полученные нами параметры модельного потенциала [4]. Более подробно методика расчётов изложена в работе [8].

На рис. 5 представлены вычисленные по изложенной методике изотермы алюминия при нулевой температуре для различной степени ионизации.

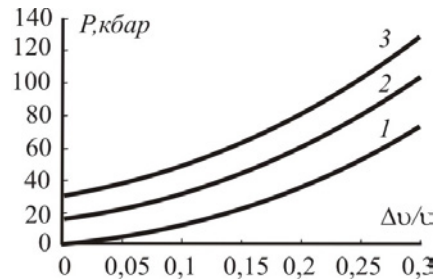


Рис. 5. Изотермы алюминия при нулевой температуре: 1 – в нормальном состоянии; 2–10 % ионизированных атомов; 3–20 % ионизированных атомов

Как следует из рисунка, даже десяти процентная ионизация вещества приводит к возникновению внутреннего давления, равного 15 кбар.

В результате работы на базе метода квантовых дефектов разработан способ расчета параметров форм фактора псевдо потенциала для дополнительно ионизированных ионных остовов. Вычислены параметры форм-фактора Хейне – Абаренкова – Анималу и на их основе получены парные потенциалы межатомного взаимодействия для ионных остовов различной зарядности. Проанализировано поведение потенциалов межатомного взаимодействия в условиях возбуждения электронной подсистемы. Обнаружено, что тепловое размытие поверхности Ферми не приводит к существенному изменению сил межатомного взаимодействия. В то же время локальное увеличение концентрации электронов проводимости вызывает «размягчение» кристаллической решетки, когда равновесной становится конфигурация с меньшим межатомным расстоянием. Рассчитаны потенциалы межатомного взаимодействия для этого случая. Получены уравнения состояния для металлов, имеющих дополнительно ионизированные атомы, которые могут быть использованы для исследования поведения металлов в условиях воздействия мощных пучков заряженных частиц. Таким образом, изменение потенциалов межатомного взаимодействия, обусловленное ионизирующим излу-

чением, вызывает различные физические явления, такие, как интенсификация диффузионных процессов, распыление поверхности из области трека быстрой заряженной частицы и т. д. Эти явления могут быть изучены посредством математического моделирования, в частности, методом молекулярной динамики.

Список литературы

1. Animaly A. O. E. Electronic Structure of Transition Metals. 1. Quantum Defects and Model Potential // *Phys. Rev. B*. 1973. Vol. 8. N 8. P. 3542–3554.

2. Кривобоков В. П., Янин С. Н. Влияние ионизации на межатомное взаимодействие в металле. // *Известия РАН. Серия физическая*. 1992. Т. 56, № 6. С. 12–16.

3. Борин И. П. Реакторное материаловедение. Т. 1. М.: ЦНИИ атоминформ. 1978.

4. Шалаев А. М., Адаменко А. А. Радиационно-стимулированное изменение электронной структуры. М.: Атомиздат, 1977.

5. Анисимов С. И., Имас Я. А., Романов Г. С. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1979.

6. Баранов И. А., Мартыненко Ю. В., Цепелевич С. О., Явлинский Ю. Н. Неупругое распыление твердых тел ионами. // *Успехи физических наук*. 1988. Т. 156. Вып. 3. С. 477–511.

7. Бакай А. С., Сергеева Г. Г., Фатеев М. П. Влияние гамма-излучения на электронную структуру металлов. // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение*. 1983. Вып. 3 (26). С. 32–35.

8. Krivobokov V. P., Yanin S. N. Matter states equation under strong radiation // *Eurasian Physical Technical Journal*. 2005. Vol. 2, N 2(4). P. 39–46.