

Лабораторная работа 1

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРОГОВОЙ ЭНЕРГИИ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В МЕТАЛЛАХ

Цель: ознакомиться с особенностями смещения атомов из узлов кристаллической решетки.

При облучении материалов в результате передачи энергии налетающими частицами атомам мишени образуются дефекты кристаллической решетки — вакансии и междоузельные атомы (возможно также образование энергетических дефектов — фононов, плазмонов, экситонов). Также в мишени образуются и более сложные дефекты — вакансионные и междоузельные кластеры, дислокационные петли, аморфные зоны, трехмерные дефекты. На поверхности дефекты могут быть в форме адатомов и кратеров.

Процесс радиационных повреждений описывается рядом физических параметров. К числу основных из них можно отнести:

- пороговую энергию смещения атомов E_d ;
- дифференциальное сечение смещения $\frac{d\sigma(E, T)}{dT}$;
- каскадную функцию $\nu(T_d)$, определяемую как число смещенных атомов на первично выбитый атом (ПВА) с энергией \bar{T} .

Величину E_d можно определить экспериментально и рассчитать теоретически методом молекулярной динамики.

Пороговая энергия смещения атомов — важная характеристика как в экспериментальном радиационном материаловедении, так и в теоретической радиационной физике твердого тела. Она определяется как минимальная энергия, переданная налетающей частицей атому и необходимая для образования стабильного дефекта (устойчивой пары Френкеля) в кристаллической решетке. При образовании устойчивой пары Френкеля переданная энергия затрачивается на разрыв связей с атомами ближайшего окружения и на удаление выбитого атома от образовавшейся вакансии за пределы объема спонтанной рекомбинации. Объем (зона) спонтанной рекомбинации — это такая область в кристалле около вакансии (междоузельного атома), в которой междоузельный атом (вакансия) аннигилирует с имеющимся там дефектом противоположного вида. Большая часть переданной атому энергии расходуется именно

на движение междоузельного атома, поскольку в этом участвует значительное число атомов мишени. Знание пороговой энергии смещения весьма важно для оценки радиационной повреждаемости материалов.

Сечение смещения можно с достаточной точностью рассчитать, используя различные потенциалы взаимодействия.

Рассматривая процесс передачи энергии налетающей частицей атому кристаллической решетки, можно выделить следующие моменты. Переданная энергия T_d мала, и атом, получив ее, не покидает своего положения в узле решетки. Во втором случае, когда переданная энергия лежит в интервале $E_d < T_d < 2E_d$, образуется пара Френкеля (устойчивая или неустойчивая). В третьем случае, когда энергия движущейся частицы значительно больше пороговой энергии смещения, первично выбитый атом способен смещать другие атомы решетки, которые, в свою очередь, способны смещать последующие атомы. Такой процесс характеризуется лавинообразным смещением атомов и называется каскадом смещений (рис. 1).

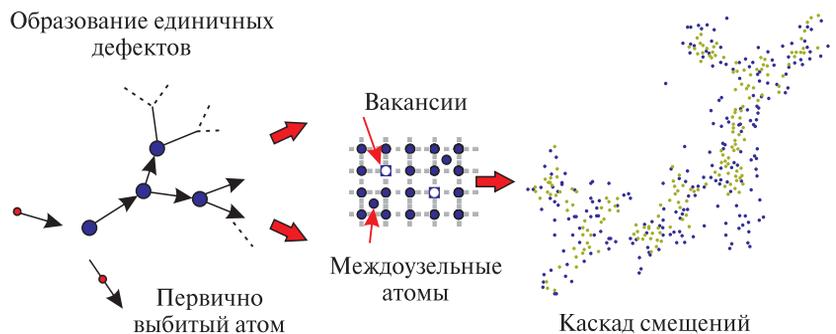


Рис. 1. Схема развития каскада смещений

Уже в первых моделях каскадов смещений было показано, что, если энергия первично выбитого атома (ПВА) больше 40 кэВ, происходит расщепление каскадных областей на отдельные не связанные между собой группы, которые получили название субкаскадов.

Первая оценка каскадной функции была сделана Г. Н. Кинчиным и Р. С. Пизом, а к настоящему времени существует ряд модифицированных моделей. В основу модели Кинчина – Пиза положен ряд допущений:

- каскадный процесс интерпретируется как совокупность последовательных двух соударений (модель бинарных соударений);

- соударения независимы друг от друга;
- кинетическая энергия при каждом соударении сохраняется;
- потерями энергии на возбуждение электронов пренебрегают.

Согласно этой модели, каскадную функцию можно описать следующим выражением:

$$v(T_d) = \begin{cases} 0, & T_d < E_d, \\ 1, & E_d < T_d < 2E_d, \\ \frac{T_d}{2E_d}, & 2E_d < T_d < \infty. \end{cases}$$

Принимая во внимание баллистические процессы, учитывающие рекомбинацию вакансий и междоузельных атомов, получаем выражение

$$v(T_d) = \begin{cases} 0, & T_d < E_d, \\ 1, & E_d < T_d < \frac{2E_d}{0,8}, \\ \frac{0,8T_d}{2E_d}, & \frac{2E_d}{0,8} < T_d < \infty, \end{cases}$$

известное как *TRN*-уравнение.

Среднее число смещений одного атома мишени из своего положения равновесия за все время облучения называется «смещение на атом» (сокр.: с. н. а. — в русскоязычной литературе, *dpa* (*displacement per atom*) — в англоязычной). Величину *dpa* можно определить следующим образом:

$$dpa(\text{с. н. а.}) = \frac{\text{число смещенных атомов в единице объема по TRN-стандарту}}{\text{число атомов мишени в единице объема}}.$$

Оценить число смещений можно, воспользовавшись выражением

$$\text{с. н. а.} = \sigma_d \Phi,$$

где σ_d — сечение смещения атома из положения равновесия; Φ — доза (флюенс).

Такой подход позволяет оценить концентрацию вакансий и междоузельных атомов в предположении, что они не уходят на поверхность и другие стоки. Еще одним достоинством такого подхода является возможность сравнения уровня радиационных повреждений, вызванных различными видами облучения.

В общем случае число смещенных атомов

$$N = \varphi t \int_{E_d}^{T_d} v(T_d) \frac{d\sigma}{dT_d} dT_d,$$

где φ – плотность потока ($\varphi t = \Phi$, где t – время облучения); $\frac{d\sigma}{dT_d}$ – дифференциальное сечение смещения.

К настоящему времени установлено, что процессы образования и взаимодействия дефектов достаточно хорошо разделяются по времени (рис. 2).

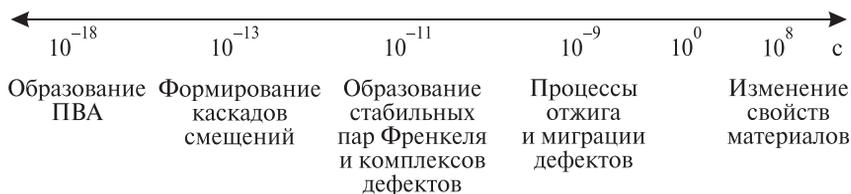


Рис. 2. Временная шкала процессов, протекающих в мишени при облучении

Развитие каскада закончится, когда все смещенные атомы замедлятся настолько, что их энергия станет меньше E_d .

Кроме потерь на смещения, движущиеся атомы теряют энергию и на возбуждение электронной подсистемы кристалла. Однако при энергиях меньше 100 кэВ, которые вносят основной вклад в формирование каскадов, эти потери незначительны. Движение атомов в мишени может быть неориентированным и ориентированным (динамические краудины, каналы, фокусоны). За создание радиационных дефектов в основном ответственно неориентированное движение атомов. Ориентированно движущиеся атомы приводят к понижению числа дефектов в каскаде, поскольку часть энергии тратится не на смещения атомов из узлов решетки.

Возвращаясь к пороговой энергии смещения, следует заметить, что ее величина зависит от направления в кристаллической решетке, что обусловлено анизотропией сил связи. Так, например, в ГЦК-решетке легче сместить атом из узла в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$, чем в $\langle 111 \rangle$ (рис. 3).

Проводя измерения на поликристаллических образцах, можно получить средние (минимальные) значения пороговой энергии смещения, а эксперименты на монокристаллах позволяют определить зависимость

**Значения пороговой энергии смещения E_d для меди
при различных температурах T**

Материал	T , К	E_d , эВ
Cu	4,2	19
	300	18
	475	15
	575	12

Наличие примесей усложняет процессы дефектообразования по сравнению с чистыми металлами, при этом необходимо учитывать так называемые подпороговые смещения, радиационно-стимулированное образование и разрушение сегрегаций и выделений, переходы «порядок – беспорядок». Атомы примесей могут иметь различные значения пороговой энергии смещения, что приводит к преимущественному выбиванию более легких компонент. Радиационно-стимулированное образование сегрегаций обусловлено преимущественным объединением растворенных атомов и радиационных дефектов. В ходе распространения каскадов смещений возможно также и баллистическое растворение наноразмерных выделений.

Экспериментальное определение величины пороговой энергии смещения проводят, измеряя свойства металла, облученного частицами в таком диапазоне энергии, в котором создаются единичные пары Френкеля. Обычно для этого используют моноэнергетические электронные пучки, поскольку они создают в мишени дефекты вакансионного типа (пары Френкеля). Для определения пороговой энергии смещения часто применяют высоковольтные электронные микроскопы. Кроме того, с целью уменьшить влияние термически активируемых процессов облучение проводят при низких температурах. Исследуют изменение электросопротивления, параметров решетки, образование кластеров точечных дефектов. В этом случае для уменьшения многократного рассеяния электронов используют тонкие (≈ 10 – 20 мкм) образцы.

В качестве примера рассмотрим случай измерения электросопротивления. На рис. 4 приведена зависимость скорости повреждения поликристаллических образцов платины от энергии пучка электронов. При облучении электронами максимально переданная первично выбитому атому энергия

$$T_{\max} = \frac{2E(E + 2m_e c^2)}{Mc^2},$$

где E – энергия электронного пучка; m_e – масса электрона; c – скорость света; M – масса атома мишени.

После подстановки постоянных величин можно записать (E в МэВ):

$$T_{\max} [\text{эВ}] = \frac{2147,8E(E + 1,022)}{M}.$$

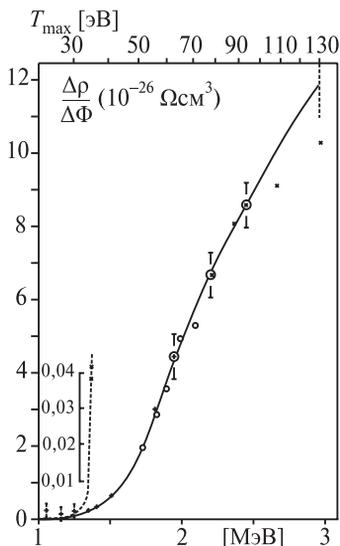


Рис. 4. Зависимость электросопротивления поликристаллического образца платины от энергии пучка электронов

На оси абсцисс отложены значения энергии электронного пучка и максимальной (при лобовом столкновении) энергии, переданной атому мишени. По оси ординат отложены значения $\frac{\Delta\rho}{\Delta\Phi}$. Можно видеть, что заметное увеличение скорости повреждений начинается при энергии примерно 34 эВ. Таким образом, пороговая энергия смещения для платины равна 34 эВ.

ЗАДАНИЯ

- Получить у преподавателя экспериментальные значения изменения электросопротивления облученных образцов для различных:
 - материалов;
 - кристаллографических ориентаций;
 - температур облучения.
- Рассчитать значения переданной энергии.

3. Построить зависимость $\frac{\Delta\rho}{\Delta\Phi}$ от энергии пучка электронов.
4. Определить значения E_d для различных направлений и температур.

Контрольные вопросы

1. Почему рекомбинационный объем имеет не сферическую форму?
2. По какой причине в модели Кинчина – Пиза пренебрегают потерями на возбуждение электронов?
3. Как следует рассматривать E_d в сплаве или химическом соединении?
4. Чем обусловлена зависимость E_d от направления?
5. Почему для определения E_d используют пучки электронов?

Список литературы

- Вас, Г. С.* Основы радиационного материаловедения. Металлы и сплавы / Г. С. Вас. М. : Техносфера, 2014. 992 с.
- Лейман, К.* Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов / К. Лейман. М. : Атомиздат, 1979. 296 с.
- Evolution of effective threshold displacement energies and other data required for the calculation of advanced atomic displacement cross-sections / A. Yu. Konobeev [et al.] // Nuclear Energy and Technology. 2017. № 3. P. 169–175.
- Primary radiation damage: a review of current understanding and models / K. Nordlund [et al.] // J. of Nuclear Materials. Vol. 512. 2018. P. 450–479.