

УДК 538.971

DOI: 10.17223/00213411/62/4/115

*В.В. УГЛОВ<sup>1,2</sup>, Н.Т. КВАСОВ<sup>1</sup>, Н.Д. КОМАРОВ<sup>1</sup>, И.В. САФРОНОВ<sup>1</sup>*

### ОСОБЕННОСТИ МАССОПЕРЕНОСА В ОБЛУЧАЕМЫХ МАТЕРИАЛАХ

Диссипация кинетической энергии ускоренных заряженных частиц при их движении в материале приводит к формированию реакции вещества на внешнее радиационное воздействие, что, в свою очередь, может существенно повлиять на кинетику процессов массопереноса. Впервые рассматривается влияние потоков электронов и неравновесных фононов, сформированных в поле градиента температур, на миграцию дефектов. Проведены оценки температуры разогрева в окрестности трека, градиента температуры, сил, действующих на междоузельные атомы и их соответствующие перемещения.

**Ключевые слова:** явления переноса, недиффузионный массоперенос, перемещение дефектов, радиационный разогрев.

#### Введение

В работе [1] показано, что упругая и термоупругая реакции решетки на радиационные воздействия формируют силовые факторы, влияющие на эволюцию дефектно-примесной системы, что оказывается особенно существенным для наноразмерных объектов. Однако аналогичные эффекты, обусловленные сильными градиентами температуры (что, очевидно, имеет место в этих процессах), практически не исследованы. Касаясь разогрева материала в области торможения ионов, следует отметить, что скорость нарастания давления в окрестности трека значительно превышает предел динамического разрушения материала и, очевидно, в этом случае имеет место переход соответствующего ансамбля атомов даже не в «расплавленное», а в «газообразное» состояние [2]. Существует ряд подходов к расчёту температуры в области и в окрестности трека, учитывающих, в частности, взаимодействие между электронной и ионной подсистемами материала (см., например, цитируемую литературу в [2]). Однако, беря во внимание незначительное количество атомов в рассматриваемой системе (классическое определение температуры здесь неприменимо), можно, не поступаясь точностью оценки, считать весь трек областью разогрева, поглотившей энергию иона по механизмам упругого и неупругого торможения. В этом случае температура  $T(r, t)$  определяется из решения традиционного уравнения теплопроводности:

$$T(r, t) = T_0 + \frac{N(S_n + S_e)}{4\pi\mu} \frac{e^{-\frac{r^2}{4Dt}}}{t}, \quad (1)$$

где  $r$  – расстояние от поверхности трека;  $t$  – время;  $T_0$  – температура окружающей среды;  $N$  – концентрация атомов мишени;  $S_n$  и  $S_e$  – сечения упругого и неупругого торможения соответственно;  $\mu$  – коэффициент теплопроводности;  $D$  – коэффициент диффузии тепла. Зависимость (1) весьма удобна для дальнейших расчётов.

Для средних энергий  $E$  ионов ( $E \leq 1$  МэВ) можно использовать следующие простые выражения для  $S_n$  и  $S_e$ :

$$S_n = \frac{\pi e^2 a_B z_1 z_2 m_1}{10.87 \varepsilon_0 (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{1/2} (m_1 + m_2)}; \quad (2)$$

$$S_e = \frac{2 a_B \xi z_1 z_2 e^2}{\varepsilon_0 (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{3/2} v_B} \sqrt{\frac{2E}{m_1}}, \quad (3)$$

где  $a_B$  – боровский радиус;  $z_1$  и  $z_2$  – зарядовые числа налетающего иона и атома решётки материала соответственно;  $m_1$  и  $m_2$  – соответствующие массы атомов;  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная;  $\xi = z^{1/6}$ ;  $e$  – заряд электрона;  $v_B$  – скорость электрона на первой боровской орбите;  $E$  – энергия налетающего иона. На рис. 1 приведены зависимости  $T(r)$  для различных энергий ионов никеля, имплантируемого в решётку железа для  $t = 10^{-13}$  с.

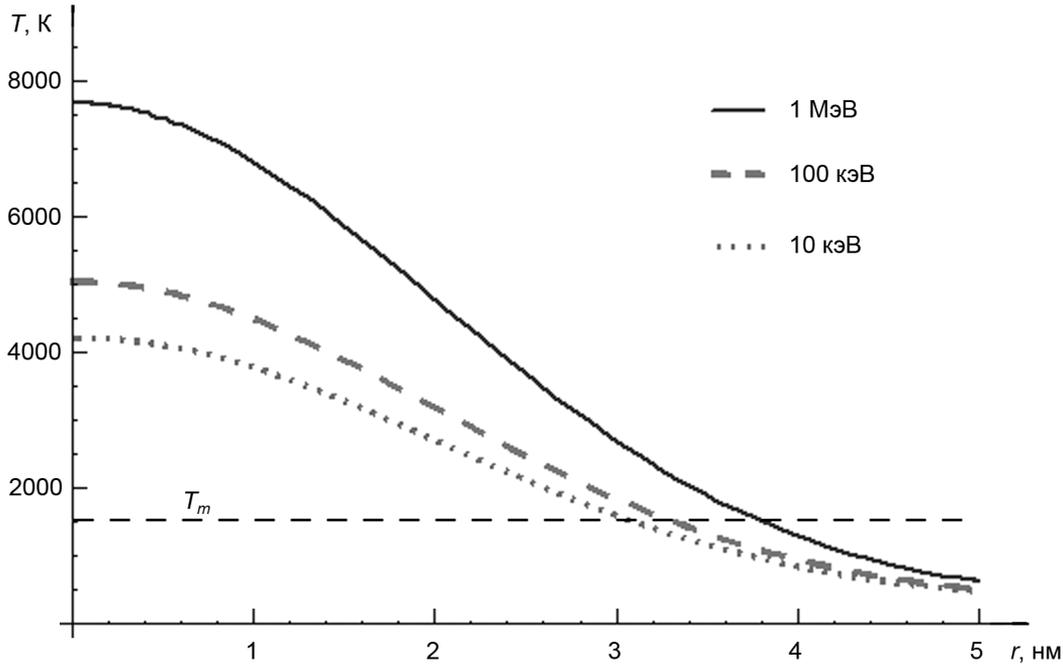


Рис. 1. Пространственное распределение температуры на расстоянии  $r$  от поверхности трещины,  $T_m$  – температура плавления железа

Наличие градиента температуры будет приводить к формированию потоков сильно неравновесных фононов и электронов (в металлах) [3, 4]. Силу  $\bar{F}_1$  фононного давления на дефект (примесный или междоузельный атом) можно определить из следующего соотношения:

$$\bar{F}_1 = -3\nu\gamma Nk_B \bar{\nabla}T, \quad (4)$$

где  $\nu$  – объем атома;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $\gamma$  – постоянная Грюнайзена. Аналогичная сила со стороны потока электронов  $\bar{F}_2$  выражается следующей формулой:

$$\bar{F}_2 = -\frac{50k_B^2}{\varepsilon_F} T \bar{\nabla}T, \quad (5)$$

где  $\varepsilon_F$  – энергия Ферми.

Перемещение  $L$  дефекта под действием сил  $\bar{F}_1$  и  $\bar{F}_2$  можно рассматривать как движение в среде с трением, характеризуемым коэффициентом  $\zeta$ :

$$\frac{d^2L}{dt^2} + \zeta \frac{dL}{dt} = \frac{F}{m} \chi(F - F_k), \quad (6)$$

где  $F = F_1 + F_2$ ;  $\chi(x)$  – функция Хэвисайда;  $F_k = 2U_m/a$ ,  $U_m$  – энергия миграции;  $m$  – масса дефекта;  $a$  – расстояние между атомами;  $\zeta = NQ/m$ . Для полупроводников и диэлектриков величина  $Q$  оценивается в рамках модели Фирсова:

$$Q = \frac{13.88e^2 a_B z_2}{4\pi\varepsilon_0 \nu_B}. \quad (7)$$

Для металлов при этих же условиях использовалась модель движения дефекта в электронной ферми-жидкости и величина  $Q$  определяется из следующего выражения:

$$Q = \frac{10\hbar n_e^{2/3}}{N}, \quad (8)$$

где  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  – постоянная Планка;  $n_e$  – концентрация свободных электронов. На рис. 2 и 3 приведены соответственно зависимости  $F(r)$  и  $L(t)$  для энергии ионов никеля 1 МэВ, имплантируемого в решётку железа.

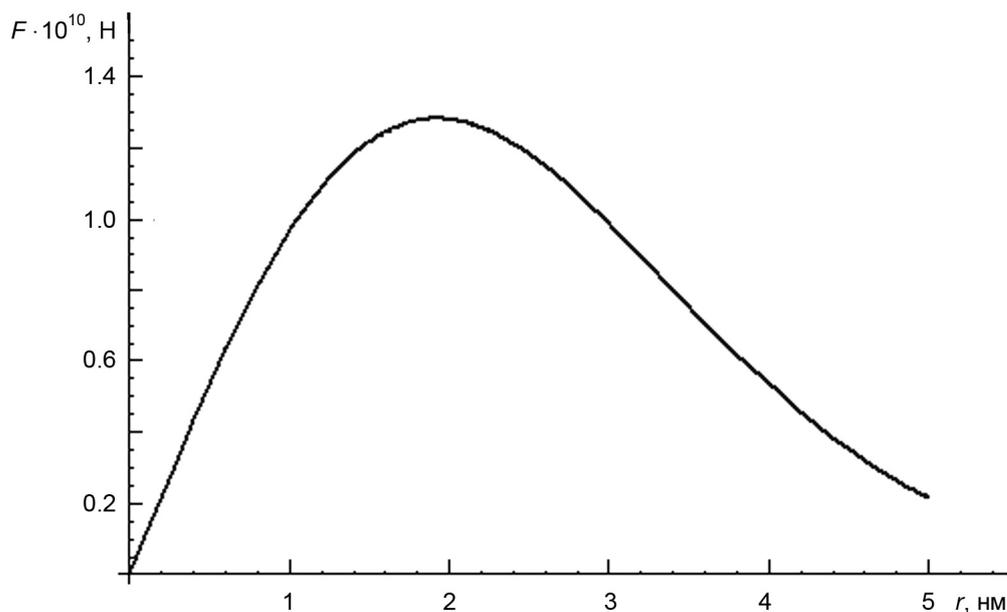
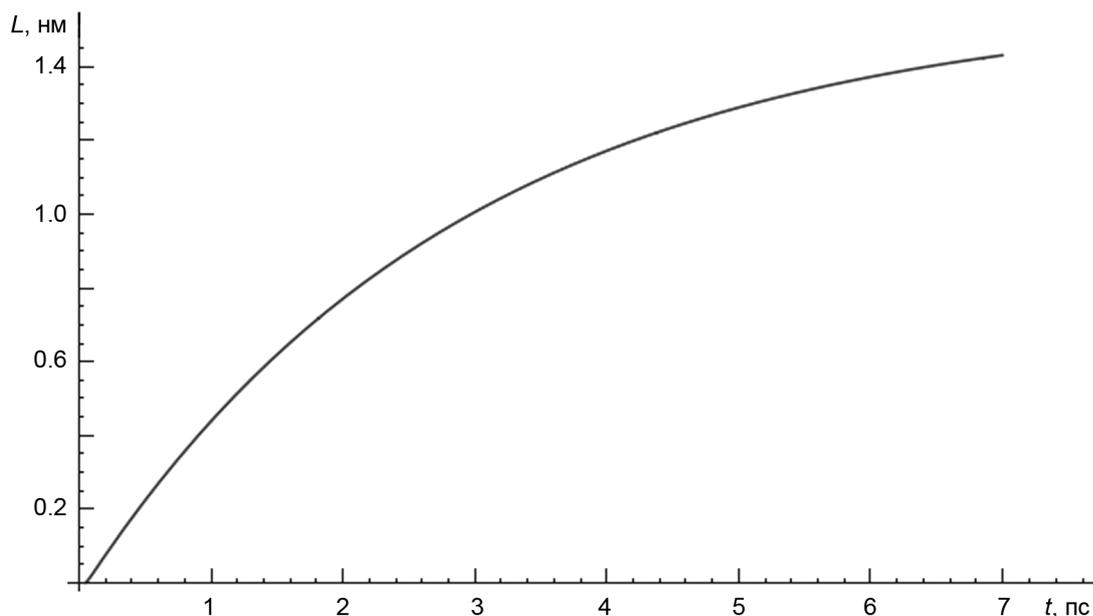
Рис. 2. Зависимость силы  $F$  от расстояния до поверхности трека для  $t = 10^{-13}$  с

Рис. 3. Недиффузионное перемещение дефекта, находящегося на расстоянии 1 нм от поверхности трека

Очевидно, что рассмотренные здесь эффекты, как уже указывалось выше, будут играть существенную роль только в объектах, имеющих наномасштабные размеры, что следует учитывать при формировании наноструктурированных материалов. Соотнося величины перемещений  $L$  дефектов и размеры нанообластей, можно добиться их определенного «самоочищения». Особенно эффективно это будет иметь место в многослойных наноструктурах, где роль стоков для дефектов играют границы раздела.

### Выводы

В работе рассмотрены эффекты, связанные с недиффузионным перемещением дефектов в облучаемых материалах. Это обусловлено формированием потоков электронов и неравновесных фононов в поле градиента температуры. Расчёты проводились для случая единичного трека, имеющего высокую температуру. Очевидно, что интенсивное облучение вещества (множество темпера-

турных вспышек), а также учёт генерации импульсов упругих деформаций солитонного типа [1] будет существенно усиливать данные миграционные процессы. Эти механизмы массопереноса следует учитывать при разработке архитектуры наноструктурированных материалов, используемых в зонах радиационного воздействия, с целью повышения их стойкости к воздействию ионизирующих излучений.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Углов В.В., Ремнев Г.Е., Квасов Н.Т., Сафронов И.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2014. – № 7 – С. 1–6.
2. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твердые тела. – М.: Технопринт, 2001. – 393 с.
3. Кузьменко П.П. // УФЖ. – 1970. – Т. 15. – № 12. – С. 1982–1991.
4. Бокштейн Б.С., Бокштейн С.З., Жуховицкий А.А. Термодинамика и кинематика диффузии в твердых телах – М.: Металлургия, 1974. – 280 с.

Поступила в редакцию 28.11.18.

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет, г. Минск, Республика Беларусь

<sup>2</sup> Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

---

**Углов** Владимир Васильевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. физики твердого тела БГУ, ст. науч. сотр. каф. физики наноразмерных систем ЮУрГУ, e-mail: uglov@bsu.by;

**Квасов** Николай Трофимович, д.ф.-м.н., профессор, гл. науч. сотр., e-mail: kvasov@bsu.by;

**Комаров** Николай Дмитриевич, инженер, e-mail: fiz.komarovnd@bsu.by;

**Сафронов** Игорь Васильевич, мл. науч. сотр., e-mail: safronov@bsu.by.