

**О.В. Олійник, М.О. Пасічний**

Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького,  
бульвар Шевченка 81, Черкаси, 18031, Україна

**РОЗРАХУНОК КОЕФІЦІЄНТА РАДІАЦІЙНО СТИМУЛЬОВАНОЇ ДИФУЗІЇ  
З УРАХУВАННЯМ БАЛІСТИЧНИХ СТРИБКІВ (МЕТОДИЧНІ НОТАТКИ)**

*The model, which describes the process of radiation-enhanced diffusion taking into account ballistic jumps, is developed. The characteristic temperature dependences of the radiation-enhanced diffusion coefficient are confirmed. The approach suggested within the model allows experimental estimating the ballistic jump frequencies.*

*У роботі створено модель, яка описує процес радіаційно стимульованої дифузії з врахуванням балістичних стрибків. Підтверджені характерні температурні залежності коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії. Запропонований у моделі підхід дає можливість експериментально оцінити значення частоти балістичних стрибків.*

*В работе создана модель, которая описывает процесс радиационно стимулированной диффузии с учетом баллистических прыжков. Подтверждены характерные температурные зависимости коэффициента радиационно стимулированной диффузии. Предложенный в модели подход дает возможность экспериментально оценить частоты баллистических прыжков.*

**Ключові слова:** *радіаційно стимульована дифузія, балістичні стрибки.*

**Вступ**

Однією із серйозних технологічних проблем є зміна фізичних, механічних властивостей та структури конструкційних матеріалів ядерних реакторів [1, 2]. При опроміненні конструкційних матеріалів утворюються дефекти кристалічної решітки, що призводять до зміни властивостей речовини.

Дослідження механізмів формування дефектів під дією опромінення, поведінки дефектів та їх впливу на стан і властивості речовин є важливою проблемою сьогодення [3]. Існуючі експериментальні та теоретичні методи дослідження впливу опромінення на матеріал мають ряд обмежень та наближень [2]. Актуальною залишається проблема побудови фізичних моделей, які б достатньо точно описували процеси, що відбуваються в опроміненому матеріалі. Можливості сучасної обчислювальної техніки дозволяють врахувати необхідні параметри фізичних систем за допомогою чисельних методів.

Цікаві ефекти, які спостерігаються в металах і сплавах при дії опромінення, пов'язують з процесами радіаційно стимульованої дифузії (РСД) [1, 2]. Розрахунок коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії має важливе практичне застосування при прогнозуванні фізичних властивостей матеріалів, які зазнали опромінення: повзучість, крихкість, розпухання та ін. Радіаційно стимульована дифузія відіграє важливу роль у сучасних технологіях, наприклад таких як іонна імплантація.

У роботі проведено дослідження процесу радіаційно стимульованої дифузії. Врахування балістичних стрибків [4] при розрахунку коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії дає змогу пояснити вклад каскадів перемішування у коефіцієнт дифузії, який спостерігається експериментально у низькотемпературній області [1, 5, 6].

### Опис моделі

При радіаційному опроміненні часові залежності концентрацій вакансій та міжвузлових атомів визначаються кінетичними рівняннями [5, 7, 8]:

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = K_0 - K_{iv} C_i C_v - S_v (C_v - C_v^{th}), \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = K_0 - K_{iv} C_i C_v - S_i C_i, \quad (2)$$

де  $C_v$ ,  $C_i$  – концентрації вакансій та міжвузлових атомів,  $S_v (C_v - C_v^{th})$  та  $S_i C_i$  – швидкості зникнення вакансій і міжвузлових атомів на стоках,  $K_{iv} C_i C_v$  – швидкість парних анігіляцій вакансій та міжвузлових атомів,  $C_v^{th}$  – рівноважна концентрація вакансій у випадку відсутності опромінення,  $K_0$  – швидкість утворення точкових дефектів під дією опромінення.

Коефіцієнт радіаційно стимульованої дифузії має вигляд [5, 7, 8]

$$D_{PCD} = f_v D_v C_v + f_i D_i C_i, \quad (3)$$

де  $f_v$ ,  $f_i$  – кореляційні множники. Коефіцієнти дифузії  $D_s$  ( $s = v, i$ ) вакансії та міжвузлового атома залежать від температури та енергії міграції за законом Арреніуса [7]:

$$D_i = D_{0i} \exp\left(-\frac{E_i^m}{kT}\right), \quad D_v = D_{0v} \exp\left(-\frac{E_v^m}{kT}\right). \quad (4)$$

У багатьох випадках значення  $D_{0i}$ ,  $D_{0v}$ ,  $E_i^m$ ,  $E_v^m$  відомі для чистих матеріалів [9].

Коефіцієнт парних рекомбінацій  $K_{iv}$  описується залежністю [5, 7]

$$K_{iv} = \frac{4\pi r_{iv} (D_i + D_v)}{\Omega}, \quad (5)$$

де  $\Omega$  – атомний об'єм;  $r_{iv}$  – радіус сфери взаємодії міжвузлового атома і вакансії.

Швидкості анігіляцій дефектів на стоках визначаються співвідношеннями [5, 7]:

$$S_i = \frac{D_i}{l_i^2}, \quad S_v = \frac{D_v}{l_v^2}. \quad (6)$$

Для простоти припустимо, що стоки для вакансій та міжвузлових атомів одні і ті ж і середня відстань між ними  $l_v = l_i = l$ .

Стаціонарні розв'язки кінетичних рівнянь (1), (2) для концентрацій вакансій та міжвузлових атомів можуть бути знайдені аналітично. Для двох граничних випадків ( $S_s \gg K_{iv}$  – зникнення точкових дефектів відбувається тільки на стоках;  $K_{iv} \gg S_s$  – точкові дефекти зникають лише шляхом рекомбінації) коефіцієнти радіаційно стимульованої дифузії мають вигляд [5, 7]:

$$D_{PCD1} = 2 \frac{K_0}{\rho_d}, \quad (7)$$

$$D_{PCD2} = 2 \sqrt{\frac{K_0 D_{0v} \Omega}{4\pi r_{iv}}} \exp\left(-\frac{E_v^m}{2kT}\right). \quad (8)$$

де  $\rho_d$  – густина дислокацій.

У першому граничному випадку (7) коефіцієнт радіаційно стимульованої дифузії не залежить від температури, а визначається інтенсивністю

опромінення. У другому випадку (8) коефіцієнт радіаційно стимульованої дифузії залежить експоненційно від оберненої температури.

Каскади перемішування атомів під впливом опромінення при низьких температурах характеризуються коефіцієнтом дифузії  $D_{mix}$  [5]

$$D_{mix} \approx 0,83 \cdot K_0 [(3 \div 8) \cdot a_0]^2, \quad (9)$$

де  $a_0$  – параметр ґратки.

Радіаційно стимульована дифузія має характерні температури (рис. 1) [5, 8]:

$$T_{RE} = \frac{2Q_{TAD} - E_v^m}{2k \ln(D_0^{TAD} W^{\frac{1}{2}} / 2(K_0 D_{0v})^{\frac{1}{2}})}, \quad T_c = \frac{E_m^v}{k \ln(\frac{\rho_d^2 D_{0v}^v}{K_0 W})}, \quad T_{mix} = \frac{E_m^v}{k \ln(\frac{4K_0 D_{0v}}{D_{mix}^2 W})}, \quad (10)$$

де  $Q_{TAD}$ ,  $D_0^{TAD}$  – параметри термоактивованої дифузії (ТАД).

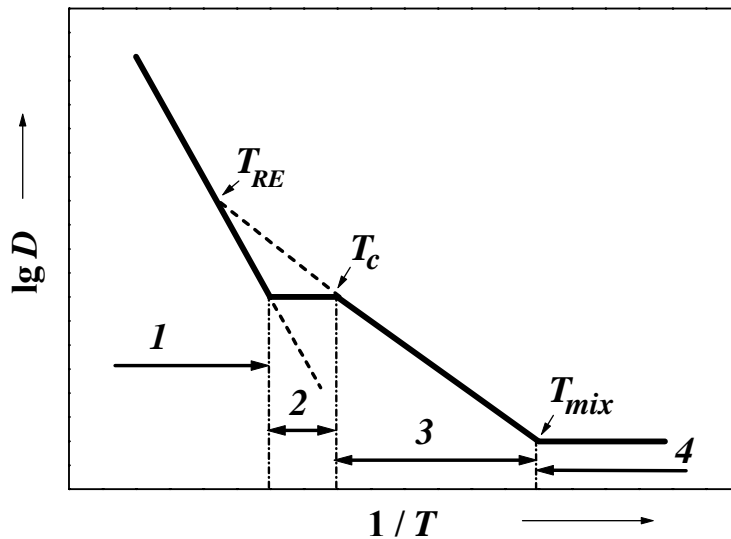


Рис.1. Залежність коефіцієнта РСД від оберненої температури [5]. 1 – термоактивована дифузія (ТАД); 2 – радіаційно стимульована дифузія для випадку зникнення точкових дефектів на стоках, 3 – радіаційно стимульована дифузія у випадку зникнення точкових дефектів шляхом рекомбінації; 4 – вплив каскаду перемішування.

### Чисельні результати

Для стаціонарного випадку, загальний розв’язок (1, 2) можна знайти аналітично:

$$C_i = \frac{S_v}{S_i} \left( \sqrt{\frac{1}{4} \left( C_v^{eq} + \frac{S_i}{K_{iv}} \right)^2 + \frac{K_0 S_i}{K_{iv} S_v}} - \frac{1}{2} \left( C_v^{eq} + \frac{S_i}{K_{iv}} \right) \right),$$

$$C_v = C_v^{eq} + \sqrt{\frac{1}{4} \left( C_v^{eq} + \frac{S_i}{K_{iv}} \right)^2 + \frac{K_0 S_i}{K_{iv} S_v}} - \frac{1}{2} \left( C_v^{eq} + \frac{S_i}{K_{iv}} \right).$$

При чисельному аналізі результатів використано параметри [9]:  $K_0 = 10^{-4} \text{ c}^{-1}$ ,  $E_m^v = 1,32841 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ ,  $E_f^v = 1,7605 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ ,  $E_m^i = 0,208 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ ,  $a = 4,090 \text{ \AA}$ ,  $\nu_i = 5,6977 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$ ,  $\nu_v = 2,06047 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ .

Отримано характерні залежності коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії (рис. 2), що відповідають граничним випадкам (7, 8, 9). Однак,

низькотемпературна ділянка, що відповідає коефіцієнту дифузії  $D_{mix}$  отримується лише за умови врахування даного доданку у явному вигляді:

$$D_{PCD} = f_v D_v C_v + f_i D_i C_i + D_{mix}. \quad (11)$$

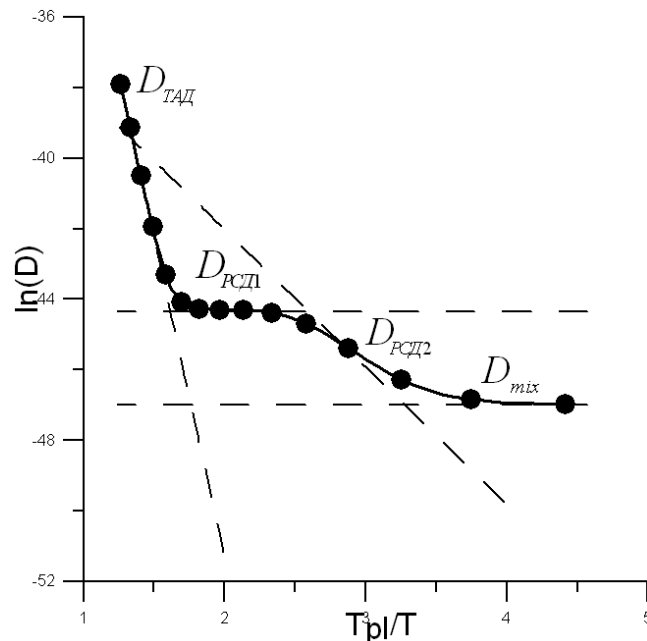


Рис.2. Залежність натурального логарифма РСД від оберненої температури  $T_{pl}/T$ . Чисельний аналіз проведено для параметрів:  $K_0 = 10^{-4} \text{ c}^{-1}$ ;  $\rho_d = 6.4 \cdot 10^{15} \text{ M}^{-2}$ ;  $D_{TAD}$  – термоактивована дифузія;  $D_{PCD1}$  – зникнення точкових дефектів відбувається на стоках (7);  $D_{PCD2}$  – точкові дефекти рекомбінують (8);  $D_{mix}$  – вплив каскадів перемішування (9).

Зі збільшенням швидкості утворення точкових дефектів під дією опромінення  $K_0$  зменшується область температур, яка відповідає анігіляції точкових дефектів на стоках і зникають характерні залежності, що відповідають граничним випадкам (7), (8). Подібний результат отримується при зменшенні густини дислокацій.

Основна ідея роботи полягає у тому, що ми спробуємо описати низькотемпературну область коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії шляхом введення у модель балістичних стрибків без урахування доданку  $D_{mix}$  у явному вигляді.

Під час опромінення матеріалу спостерігається нерівноважний стан атомів у твердому тілі. Тобто спостерігаються нетермічні дифузійні акти. Їх називають балістичними [4]. Вони можуть бути враховані додаванням так званих частот балістичних стрибків у вирази для коефіцієнтів дифузії  $D_s$  ( $s = v, i$ ) вакансії та міжвузлового атома [4]:

$$D_v = \gamma_v \cdot \Delta_v^2 \cdot (v_v + v_{\delta_v}), \quad D_i = \gamma_i \cdot \Delta_i^2 \cdot (v_i + v_{\delta_i}), \quad (12)$$

де  $\gamma_v, \gamma_i$  – геометричні множники,  $\Delta_v, \Delta_i$  – довжини стрибків,  $v_v, v_i, v_{\delta_v}, v_{\delta_i}$  – частоти термічних і балістичних стрибків вакансій та міжвузлових атомів відповідно.

Результати чисельних обчислень приведені на рис. 3. Мета цих обчислень полягала в тому, щоб отримати прямолінійну ділянку у низькотемпературній області, яка відповідає експериментальному значенню коефіцієнта дифузії  $D_{mix}$  [5].

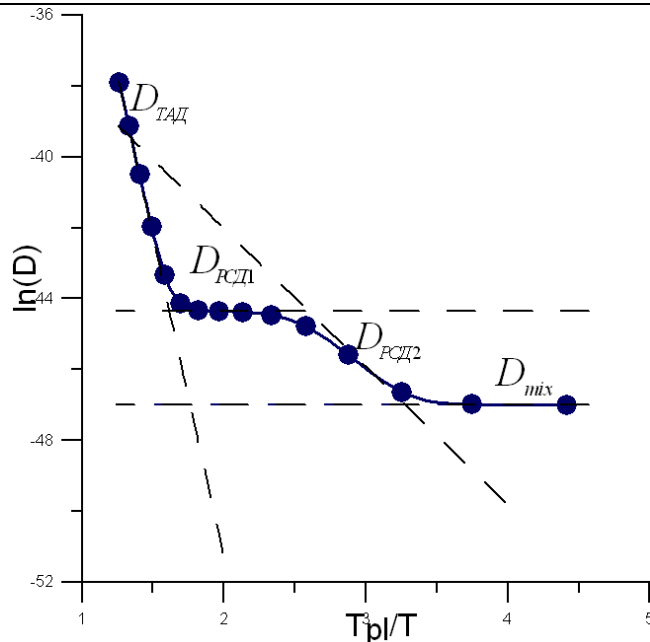


Рис.3. Залежність натурального логарифма коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії від оберненої температури  $T_{pl}/T$  з врахування частоти балістичних стрибків. Чисельні обрахунки проведені для параметрів:  $K_0=17,69 \cdot 10^{-4} \text{с}^{-1}$ ;  $\rho_d=6.4 \cdot 10^{16} \text{м}^{-2}$ ;  $v_{\bar{v}}=v_{\bar{v}i}=85,44 \text{с}^{-1}$ .

Аналіз результатів вказує на те, що врахування балістичних стрибків дає можливість отримати низькотемпературну область коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії  $D_{mix}$ .

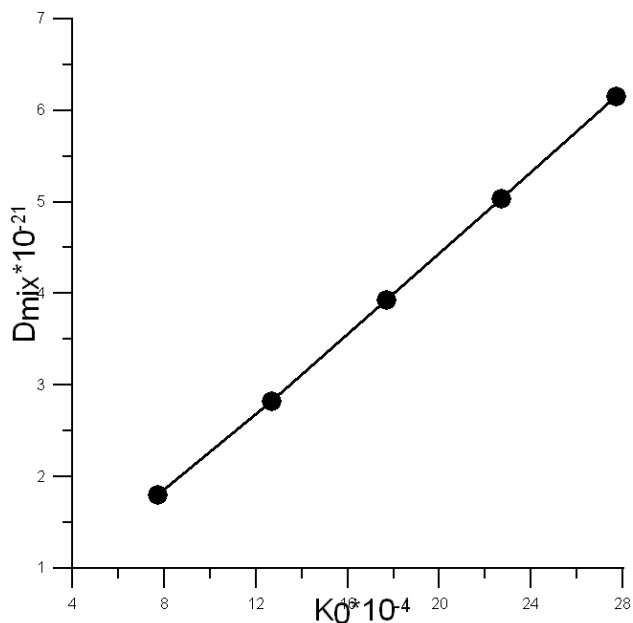


Рис.4. Залежність коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії  $D_{mix}$  від інтенсивності опромінення  $K_0$  з урахування частоти балістичних стрибків при низьких температурах. Чисельний обрахунок проведений для параметрів  $\rho_d=6.4 \cdot 10^{16} \text{м}^{-2}$ ;  $b=4,83 \cdot 10^4$ .

Для аналізу коректності моделі проаналізовано залежність коефіцієнта дифузії  $D_{mix}$  від швидкості утворення точкових дефектів  $K_0$  під дією опромінення (рис. 4). Припустимо, що частота балістичних стрибків пропорційна швидкості

утворення точкових дефектів:

$$v_6 = b \cdot K_0. \quad (13)$$

Зі збільшенням інтенсивності опромінення, коефіцієнт  $D_{mix}$  збільшується лінійно. Отриманий результат підтверджує експериментальну залежність  $D_{mix}$  (9).

**Висновки.** У роботі запропоновано фізичну модель, яка описує процеси радіаційно стимульованої дифузії з урахуванням балістичних стрибків. Підтверджено характерні температурні залежності коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії.

У запропонованій моделі введено балістичні стрибки при розрахунку коефіцієнта радіаційно стимульованої дифузії, що дає змогу пояснити вклад каскадів перемішування у коефіцієнт дифузії, який спостерігається експериментально у низькотемпературній області.

Запропонований підхід дає можливість експериментально визначити частоти балістичних стрибків за значеннями коефіцієнтів радіаційно стимульованої дифузії.

1. Шалаєв А.М. Радиационно-стимулированная диффузия в металлах. –М., 1972. –140с.
2. Кирсанов В.В. Процессы радиационного дефектообразования в металлах. –М., 1985. – 272с.
3. Журавльов А. Х. Дифузія в радіаційно пошкоджених матеріалах. –К., 2002. –58с.
4. Roussel J.-M., Bellon P. // Physical Review B. –2002. –Vol.65. –p.144107.
5. Smirnov E.A., Shmakov A.A. // Defect & Diffusion Forum. –2001. –Vols.194-199. –p.1451-1456.
6. Lam Q. // Surface and interface analysis. – 1988. –Vol.12, –p.65-77.
7. D’Ajello P.C.T. // Defect & Diffusion Forum. –1997. –Vols.148-149. –p.14-47.
8. Gary S. W. Fundamentals of radiation materials science. –Berlin: Springer, 2007. –827p.
9. Rothman S.I., Lam N.Q., Sizmann R., Bisswanger H. // Radiation Effects. –1974. –Vol.20. – p.223-227.

Одержано редакцією 11.11.2008  
Прийнято до публікації 14.11.2008