Письма в ЖТФ, том 19, вып. 11 12 июня 1993 г.

01; 05

РАДИАЦИОННОЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В СРЕДАХ С АНОМАЛЬНО БОЛЬШОЙ ВЕЛИЧИНОЙ ПАРАМЕТРА Де-БУРА

Н.А. Лапина, Б.Л. Оксенгендлер, Н.Н. Тураева, Ю.В. Пахаруков

Проблема образования дефектов при радиационном воздействии к настоящему времени изучена очень подробно [1], однако применительно лишь к твердым телам, для которых величина параметра Де-Бура, представляющего собой отношение амплитуды нулевых колебаний к межатомному расстоянию ($\lambda = a_0/a$) [2], очень мала ($\lambda \ll 1$). Что касается квантовых кристаллов [3], либо сред, содержащих водород [4], для которых $\lambda < 1$, то применительно к ним проблема радиационного дефектообразования (РДО) в экспериментальном и теоретическом планах находится на начальном этапе [5, 6].

Цель данной работы – теоретический анализ проблемы РДО по механизму упругого смещения с учетом квантовой диффузии компонентов образующейся пары Френкеля. Как известно [7, 8], наиболее современной моделью РДО является диффузионная модель, согласно которой регулярный атом, смещенный при рассеянии на нем быстрой сторонней частицы, двигаясь в зоне неустойчивости радиуса R_0 (см. [9]) путем случайных блужданий и тратя при этом избыток своей энергии $E-U_0$ (см. рис. 1), лишь только при выходе за пределы зоны неустойчивости образует стабильный дефект. Таким образом, сечение РДО определяется [8] как

$$\sigma_d = \int\limits_{U_0}^{E_{max}} \frac{d\sigma}{dE} \left\{ \int\limits_{\{\omega\}} \omega(R,E)\, d^3R \right\} dE, \qquad (1)$$

где $d\sigma = \frac{d\sigma}{dE} dE$ – дифференциальное сечение передачи при рассеянии сторонней частицы смещаемому атому энергии в диапазоне $E \div E + dE$, $\omega(R,E)$ – плотность вероятности смещенному атому остановиться в шаровом слое объемом $4\pi R^2 dR$ после потери избытка энергии $E-U_0$ в $n = \frac{E-U_0}{\mathcal{E}}$ столкновениях ($\mathcal{E}$ – потеря энергии смещенного атома в одном столкновении с атомами зоны неустойчивости). В случае, когда смещенный атом легкий и амплитуда его туннелирования отнюдь не мала ($\sim e^{-1/\lambda}$), то выход смещенного атома за пределы зоны неустойчивости ($R > R_0$) еще не гарантирует образование стабильного дефекта. Требуется, чтобы после

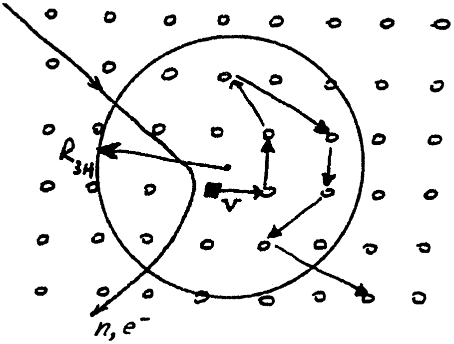

Рис. 1. Диффузионная модель РДО.

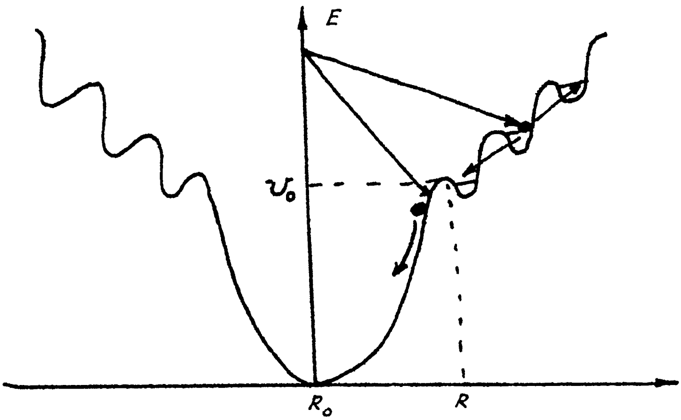

Рис. 2. Квантовая диффузия смещенного атома (туннелирование).

вылета в слой объема $4\pi R^2 dR$ смещенный атом не вернулся к своей вакансии путем квантовой диффузии ($R \to R_0$), см. рис. 2. Поэтому сечение РДО приобретает иной вид:

$$\sigma_d=\int\limits_{U_0}^{E_{max}} \frac{d\sigma}{dE}\left\{\int\limits_{(\omega)} \omega(R,E)\left[1-\Omega(R)\right]d^3R\right\}dE, \qquad (2)$$

где $\Omega(R)$ – вероятность квантового отжига при разделении между компонентами пары Френкеля, равном R. Здесь принципиально новой является величина $\Omega(R)$ для расчета которой мы применим уравнение Колмогорова в дискретном варианте [10]:

$$\Omega_n=\sum_j K_{nj}\Omega_j \,. \qquad (3)$$

Здесь Ω_j – вероятность квантового отжига с j-позиции, т.е. при разделении между смещенным атомом и вакансией, равном

$R_j = ja\left(j > \frac{R_0}{a}\right)$; K_{nj} – относительная вероятность перехода атома из n–позиции в j–позицию. При квантовой диффузии атома в поле существенными оказываются два механизма: спонтанной эмиссии фонона (Андреев – Мейерович [3]) и рассеяния фонона (Каган–Максимов [4]), согласно которым получаем

$$K_{n,n+1} = \frac{\omega_{K-M}}{2\omega_{K-M} + \omega_{A-M} + \tilde{\Sigma}}, \quad K_{n,n-1} = \frac{\omega_{K-M} + \omega_{A-M}}{2\omega_{K-M} + \omega_{A-M} + \tilde{\Sigma}}.$$

Здесь $\omega_{A-M} = \left(\frac{\Delta^2}{\hbar\theta}\right)\left(\frac{\hbar\omega}{\theta}\right)^3$, $\omega_{K-M} = \left(\frac{\Delta^2}{\hbar\theta}\right)\left(\frac{T}{\theta}\right)^7$ – вероятности реализации механизмов Андреева–Мейеровича и Кагана–Максимова соответственно (см. [3]), Δ – амплитуда туннелирования атома между соседними позициями, θ – температура Дебая, T – температура эксперимента, $\hbar\omega$ – энергия фонона, спонтанно эмиттированного при атомном переходе, $\tilde{\Sigma}$ – вероятность атомных прыжков за пределы соседних положений. Нетрудно показать, что

$$K_{n,n+1} = \frac{\beta}{2\beta + \alpha/n^m + \tilde{\Sigma}}, \quad K_{n,n-1} = \frac{\beta + \alpha/n^m}{2\beta + \alpha/n^m + \tilde{\Sigma}},$$

причем в случае упругого взаимодействия между смещенным атомом и вакансией $m = 12$, $\alpha = \frac{\Delta^2}{\hbar\theta}\left(\frac{V_0}{\theta}\right)^3$; в случае же кулоновского взаимодействия $m = 6$, $\alpha = \frac{\Delta^2}{\hbar\theta}\left(\frac{z^2}{\varepsilon a\theta}\right)^3$. Учитывая, что $n > n_0 = R_0/a \gg 1$, перейдем в (3) к континуальному приближению. Тогда

$$\Omega(n) \simeq \exp\left[-\int \frac{1 - K_{n,n+1} - K_{n,n-1}}{K_{n,n-1} - K_{n,n+1}}\, dn\right]. \tag{4}$$

Соответственно, для упругого и кулоновского взаимодействия для вероятностей квантового отжига получим

$$\Omega^e(R) = \exp\left(-\frac{\tilde{\Sigma}}{13a^{13}\alpha}\left(R^{13} - R_0^{13}\right)\right),$$

$$\Omega^c(R) = \exp\left(-\frac{\tilde{\Sigma}}{7a^7\alpha}\left(R^7 - R_0^7\right)\right). \tag{5}$$

Существенное упрощение дальнейших расчетов можно получить на основе δ–функционального приближения:

$$4\pi\omega(R,E)R^2 \to \delta(R-\bar{R}). \qquad (6)$$

Для диффузионной модели [6–8]:

$$\omega(R,E)=\frac{\mathcal{E}^{3/2}}{(4\pi)^{3/2}a^3(E-U_0)^{3/2}}\, l^{-\frac{\mathcal{E}R^2}{4a^2(E-U_0)}}, \qquad (7)$$

и мы получим $\bar{R}=2a\sqrt{\frac{E-U_0}{\mathcal{E}}} > R_0$.

Комбинируя (5), (6), (7), (2), получим выражение для сечения РДО для случаев рассеяния твердых шаров $\left(\frac{d\sigma}{dE}=\frac{\pi\rho_0}{E_{max}}\right.$ – нейтронное облучение) и кулоновского рассения $\left(\frac{d\sigma}{dE}=4\pi\sigma_0\frac{E_m}{E^2}\right.$ – электронное облучение) [1]:

1. Нейтронное облучение, упругое взаимодействие между вакансией и смещенным атомом:

$$\sigma_d=\sigma_{d0}\cdot f_1(\tilde{\Sigma},\alpha), \quad \sigma_{d0}=\pi\rho_0^2\left(1-\frac{U_0+\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2}{E_m}\right),$$

$$f_1(\tilde{\Sigma},\alpha)=\frac{\tilde{\Sigma}}{13\alpha}n_0^{13}\left[\frac{2^{14}}{15n_0^{13}\mathcal{E}^{13/2}}\left(\frac{(E_m-U)^{15/2}-\mathcal{E}^{15/2}\left(\frac{n_0}{2}\right)^{15}}{E_m-U_0-\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2}\right)-1\right].$$

II. Нейтронное облучение, кулоновское взаимодействие между вакансией и смещенным атомом:

$$\sigma_d=\sigma_{d0}\cdot f_2(\tilde{\Sigma},\alpha),$$

$$f_2(\tilde{\Sigma},\alpha)=\frac{n_0^7}{7}\,\frac{\tilde{\Sigma}}{\alpha}\left[\frac{2^8}{9\mathcal{E}^{7/2}n_0^7}\,\frac{(E_m-U_0)^{9/2}\,\mathcal{E}^{9/2}\left(\frac{n_0}{2}\right)^9}{E_m-U_0-\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2}-1\right].$$

III. Электронное облучение, упругое взаимодействие между вакансией и смещенным атомом:

$$\sigma_d=\sigma_0\frac{4\pi E_m\tilde{\Sigma}}{13a^{13}\alpha}\left\{\frac{2a^{13}}{\mathcal{E}^{13/2}}\left[\frac{(E_m-U_0)^{15/2}}{U_0E_m}-\frac{\mathcal{E}^{15/2}\left(\frac{n_0}{2}\right)^{15}}{U_0\left(U_0+\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2\right)}-\frac{13}{2U_0}\left(\sum_{\nu=0}^{5}\frac{(E_m-U_0)^{7-\nu}}{13-2\nu}\right.\right.\right.\times$$

$$\times(-U_0)^\nu-\sum_{\nu=0}^{5}\frac{\left(\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2\right)^{7-\nu}}{13-2\nu}(-U_0)^\nu+U_0^6\left(2(E_m-U_0)^{1/2}-\mathcal{E}^{1/2}n_0+2U_0^{1/2}\operatorname{arctg}\frac{\mathcal{E}^{1/2}n_0}{2U_0^{1/2}}\right.-$$

$$-2U_0^{1/2}\,\mathrm{arctg}\,\frac{(E_m-U_0)^{1/2}}{U_0^{1/2}}\Bigg)\Bigg]-R_0^{13}\left(\frac{1}{U_0+\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2}-\frac{1}{E_m}\right)\Bigg\}.$$

1У. Электронное облучение, кулоновское взаимодействие между вакансией и смещенным атомом:

$$\sigma_d=\sigma_0\frac{4\pi E_m\tilde{\Sigma}}{7a^7 d}\left\{\frac{2a^7}{\mathcal{E}^{7/2}}\left(\frac{(E_m-U_0)^{9/2}}{U_0E_m}-\frac{\mathcal{E}^{9/2}\left(\frac{n_0}{2}\right)^9}{U_0\left(U_0+\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2\right)}-\frac{7}{2U_0}\left[\sum_{\nu=0}^{2}\frac{(E_m-U_0)^{4-\nu}}{7-2\nu}\times\right.\right.\right.$$

$$\times(-U_0)^{\nu}-\sum_{\nu=0}^{2}\frac{\left(\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2\right)^{4-\nu}}{7-2\nu}(-U_0)^{\nu}-U_0^3\Big(2(E_m-U_0)^{1/2}-\mathcal{E}^{1/2}n_0+2U_0^{1/2}\,\mathrm{arctg}\,\frac{\mathcal{E}^{1/2}n_0}{2U_0^{1/2}}-$$

$$\left.\left.\left.-2U_0^{1/2}\,\mathrm{arctg}\,\frac{(E_m-U_0)^{1/2}}{U_0^{1/2}}\Big)\right]\right)-R_0^7\left(\frac{1}{U_0+\mathcal{E}\left(\frac{n_0}{2}\right)^2}-\frac{1}{E_m}\right)\right\}.$$

Во всех 4-х случаях сечение РДО зависит от параметров материала и свойств радиации: R_0, U_0, $\mathcal{E}$, a, $\tilde{\Sigma}$, θ, ρ_0, E_m и температуры Т. При переходе от обычных объектов к средам с аномально большими величинами параметра Де-Бура принципиально новыми являются зависимости σ_d от $\tilde{\Sigma}(\lambda)$ и Т. Анализ зависимостей $d\sigma_d/d\lambda$ и $d\sigma_d/dT$ показывает, что сечение РДО с увеличением квантовой ситуации (роста) возрастает. Физически это связано с облегчением разделения смещенного атома и вакансии при возрастании диффузионной способности смещенного атома. Этот вывод согласуется с известной работой Онзагера [11] по вычислению вероятности разделения кулоновски притягивающихся зарядов в приближении их классической диффузии в терминах Онзагера и его последователей [11, 12] эквивалентна в представленной здесь теории величине $P(R)=1-\Omega(R)$, поэтому получение $P(R)$ можно рассматривать и как обобщение теории Онзагера на случай зависимого коэффициента диффузии от R.

Авторы благодарят А.Ф. Андреева, К.А. Кикоина, Б.В. Петухова, В.М. Кошкина, а также А.Е. Кива и участников Одесского международного семинара по компьютерному моделированию дефектов и свойств конденсированных сред за внимание и полезное обсуждение работы.

Список литературы

[1] Radiation Effectsin Crystalls. In: Modern Problem of Condensed Mat. / Ed by Jonson, A. Orlov. V. 13. n-Holl, 1986.

[2] Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка, 1981.

[3] А н д р е е в А.Ф. // УФН. 1976. Т. 118. Вып. 2. С. 251.
[4] K a g a n Yu.M. // Defects in Insulating crystalls / Ed by V. M.. Tuchkevich and K.K. Shvarts. Riga: Zinatne. 1981. P. 15.
[5] К о п е л и о в и ч М. Автореф. канд. дис. Москва: Инст. физ. проблем, 1989.
[6] О к с е н г е н д л е р Б. Автореф. докт. дис. Ташкент, ИЯФ АН РУз, 1990.
[7] В и н е ц к и й В.Л., Е н т и н з о н И.Р., Х о л о д а р ь Г.А. // ФТТ. 1980. В. 3. С. 709.
[8] О к с е н г е н д л е р Б.Л. В сб.: Влияние несовршенств структуры на свойства кристаллов / Под ред. Л.П. Хизниченко. Ташкент: ФАН, 1979. С. 11-38.
[9] К о ш к и н В.М., З а б р о д с к и й Ю.Р. // ДАН СССР. 1976. Т. 227. В. 6. С. 1323-1326.
[10] В а н К а м п е н. Стохастические процессы в физике и химии. М.: Высшая школа, 1990.
[11] O n z a g e r L. // Phys. Rev. 1938. V. 54. N 8. P. 554-557.
[12] H u m m e l A., S c h m i d t W.F. // Radiat. Res. Revs. 1974. V. 5.

Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент

Поступило в Редакцию 18 апреля 1993 г.