

©1994 г.

ЭВОЛЮЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МАТЕРИАЛАХ

В.И.Архипов, И.А.Перова, А.И.Руденко

Московский инженерно-физический институт,
105023, Москва, Россия

(Получена 28 мая 1992 г. Принята к печати 22 февраля 1994 г.)

Рассматривается модель, описывающая диффузию радиационных дефектов в разупорядоченных материалах. В модели учитывается рекомбинация диффундирующих частиц и их захват на распределенные по энергии локализованные состояния. Получены стационарные пространственные распределения радиационных дефектов для различных начальных и граничных условий задачи.

В настоящей работе рассматривается модель, описывающая диффузию радиационных дефектов в разупорядоченных материалах. Эта модель учитывает рекомбинацию частиц, а также их захват на распределенные по энергии локализованные состояния. Процесс диффузии дефектов описывается как последовательность прыжков этих частиц, прерываемая их захватом на локализованные состояния и возобновляющаяся в результате термической делокализации [1,2]. Важно отметить, что локализованные состояния в аморфных материалах имеют широкий спектр активации и поэтому на длительном временном интервале диффузия происходит в условиях неустановившегося термически равновесного распределения локализованных частиц по энергии (так называемый режим «дисперсионного» транспорта).

Математическая постановка задачи в случае плоской геометрии имеет вид

$$\partial C(x,t)/\partial t - D [\partial^2 C_d(x,t)/\partial x^2] = -RC_d(x,t)B(x,t), \quad (1)$$

$$\partial B(x,t)/\partial t = -RC_d(x,t)B(x,t), \quad (2)$$

где x — координата, t — время, B и C — полные плотности частиц, C_d — плотность делокализованных частиц, D — коэффициент диффузии, R — константа рекомбинации. При записи уравнений (1) и (2) предполагалось, что коэффициент диффузии частиц одного типа существенно превышает коэффициент диффузии частиц другого типа, и,

следовательно, последние можно считать неподвижными. Кинетика локализации и делокализации частиц, определяющая связь между плотностями C и C_d , в режиме сильно неравновесной диффузии описывается следующими выражениями [3]:

$$C_d(x, t) = (\partial/\partial t) [\tau(t)C(x, t)]. \quad (3)$$

$$\tau(t) = \tau_0 \left\{ \int_{\mathcal{E}_*(t)}^{\infty} d\mathcal{E} [g(\mathcal{E})/N_t] \right\}^{-1}, \quad \mathcal{E}_*(t) = kT \ln(\nu_0 t), \quad (4)$$

где $\tau(t)$ — «переменное время жизни» делокализованных частиц до захвата на «глубокие» локализованные состояния с активационной энергией большей, чем $\mathcal{E}_*(t)$; \mathcal{E} — энергия локализованного состояния; $g(\mathcal{E})d\mathcal{E}$ — плотность локализованных состояний с энергиями в интервале от \mathcal{E} до $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$; N_t — полная плотность локализованных состояний; τ_0 — время жизни делокализованных частиц до захвата на ловушки; ν_0 — частотный фактор термического освобождения частиц; T — температура образца; k — постоянная Больцмана.

В зависимости от реальных условий генерации радиационных дефектов их начальное распределение в объеме образца может быть различным. Сначала рассмотрим случай однородного распределения

$$C(x, 0) = B(x, 0) = B_0. \quad (5)$$

Граничные условия задачи могут быть двух типов:

$$C(-L/2, t) = C(L/2, t) = 0 \quad (6)$$

или

$$\left. (\partial C/\partial x) \right|_{x=-L/2} = \left. (\partial C/\partial x) \right|_{x=L/2} = 0. \quad (7)$$

Реализация того или иного типа граничных условий определяется свойствами материала образца. Так, например, если в данном материале подвижными частицами являются вакансии, то граничные условия запишутся в виде (6). Если же подвижностью межузельных атомов значительно превышает подвижность вакансий, то выполняются условия (7), так как межузельные атомы не могут покидать границы образца.

Подставляя в уравнение (2) соотношение (3) и интегрируя это уравнение по времени [при этом учитываем начальное условие (5) и тот факт, что $\tau(0) = 0$], выражаем плотность подвижных частиц $C(x, t)$ через плотность неподвижных частиц $B(x, t)$:

$$C(x, t) = - [1/R\tau(t)] \ln [B(x, t)/B_0]. \quad (8)$$

Решая систему уравнений (1), (2) с учетом начального условия (5) и соотношений (3), (8), получаем уравнение, описывающее распределение неподвижных частиц $B(x, t)$ в объеме образца в произвольный момент времени t :

$$\begin{aligned} & \partial^2 B(x, t)/\partial x^2 - [1/B(x, t)] [\partial B(x, t)/\partial x]^2 - [1/D\tau(t)] \times \\ & \times B(x, t) \ln [B(x, t)/B_0] - (R/D)B^2(x, t) = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Рассмотрим стационарное распределение неподвижных дефектов, устанавливающееся после релаксации подвижных дефектов. Выполняя предельный переход $t \rightarrow \infty$ в уравнении (9), получаем уравнение, описывающее стационарное распределение неподвижных частиц $B_{st}(x)$:

$$d^2 B_{st}(x)/dx^2 - [1/B_{st}(x)][dB_{st}(x)/dx]^2 - (R/D)B_{st}^2(x) = 0. \quad (10)$$

Решение данного уравнения и учет симметрии задачи относительно плоскости $x = 0$ ($[dB_{st}(x)/dx]_{x=0} = 0$) приводят к следующему виду функции $B_{st}(x)$:

$$B_{st}(x) = B_* \left\{ \cos \left[Q \pm (RB_*/2D)^{1/2} x \right] \right\}^{-2}. \quad (11)$$

Здесь B_* — остаточная плотность дефектов в центре образца (при $x = 0$), Q — некоторая неизвестная константа интегрирования. Подставляя в (11) значение $x = 0$, видим, что $\cos^2 Q = 1$, т.е. $Q = \pm n\pi$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Таким образом, мы можем записать решение (11) в виде

$$B_{st}(x) = B_* \left\{ \cos \left[(RB_*/2D)^{1/2} x \right] \right\}^{-2}. \quad (12)$$

Величина остаточной плотности дефектов в центре образца B_* находится из граничных условий задачи. Сначала рассмотрим условия (6): $C(\pm L/2, t) = 0$. Используя формулу (8), связывающую плотность подвижных дефектов с плотностью неподвижных дефектов, находим, что должно выполняться условие $B_{st}(\pm L/2) = B_0$. Отсюда следует, что величина B_* определяется из трансцендентного уравнения

$$B_0(x) = B_* \left\{ \cos \left[(RB_*/2D)^{1/2} (L/2) \right] \right\}^{-2}. \quad (13)$$

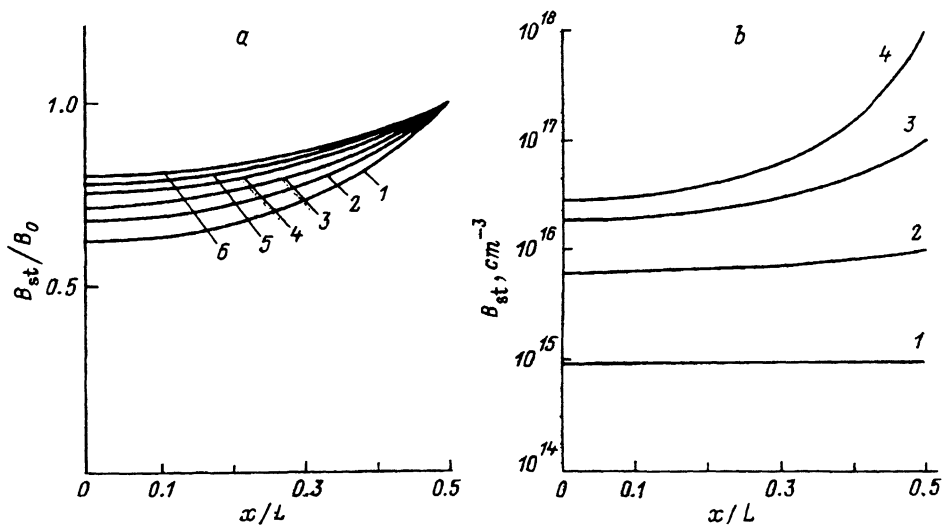


Рис. 1. Стационарное распределение неподвижных дефектов при однородном начальном распределении.

a — T , К: 1 — 300, 2 — 400, 3 — 500, 4 — 600, 5 — 700, 6 — 800. $B_0 = 10^{16} \text{ см}^{-3}$.
 b — B_0 , см^{-3} : 1 — 10^{15} , 2 — 10^{16} , 3 — 10^{17} , 4 — 10^{18} . $T = 300$ К.

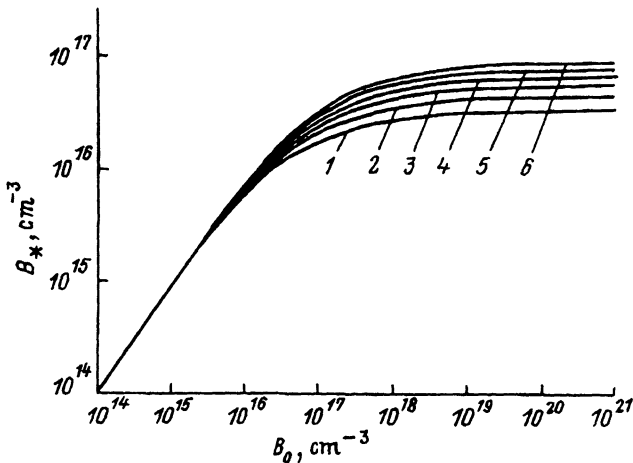


Рис. 2. Зависимость остаточной плотности дефектов в центре образца от начальной плотности дефектов.

T, K : 1 — 300, 2 — 400, 3 — 500, 4 — 600, 5 — 700, 6 — 800.

Заметим, что в случае больших значений начальной плотности B_0 [$B_0 \gg (2\pi^2 D/RL^2)$] уравнение (13) дает для величины V_* следующую простую формулу: $V_* = (2\pi^2 D/RL^2)$.

Результаты расчета, выполненного по формулам (12), (13), показывают, что после завершения релаксации подвижных дефектов в образце возникает существенно неоднородное распределение неподвижных дефектов, плотность которых наиболее высока вблизи поверхностей образца, причем неоднородность выражена тем более явно, чем ниже температура образца и выше плотность начального распределения дефектов B_0 (рис. 1). Это связано с тем, что стационарное распределение дефектов в объеме образца является результатом конкуренции двух процессов: с одной стороны, ухода диффундирующих частиц за пределы образца и, с другой стороны, их рекомбинации с неподвижными частицами. Первый процесс контролируется температурой, а второй — плотностью дефектов, поэтому стационарное значение плотности неподвижных дефектов в любой плоскости образца определяется двумя параметрами — температурой образца и начальной плотностью дефектов (рис. 2).

Теперь рассмотрим граничные условия (7). В этом случае величина остаточной плотности дефектов в центре образца V_* определяется выражением

$$(RB_*/2D)^{1/2} \operatorname{tg} \left[(RB_*/2D)^{1/2} (L/2) \right] = 0 \quad (14)$$

и, следовательно, равна нулю, поэтому, согласно формуле (12), в образце с граничными условиями (7) существование отличного от нуля стационарного распределения неподвижных дефектов невозможно. Этот результат достаточно очевиден: если подвижные дефекты не могут покинуть пределы образца, то релаксация будет происходить до тех пор, пока все имеющиеся дефекты не рекомбинируют.

Другим часто встречающимся на практике начальным распределением дефектов в объеме образца является экспоненциальное распределение

$$C(x, 0) = B(x, 0) = B_0 \exp(-x/x_0), \quad (15)$$

где x_0 — характерный параметр распределения. Выражение (15) записано в предположении, что поверхности образца имеют координаты $x = 0$ и $x = L$. При таком выборе начала отсчета координаты x граничные условия (6) и (7) переписутся в виде

$$C(0, t) = C(L, t) = 0, \quad (16)$$

$$\left. (\partial C / \partial x) \right|_{x=0} = \left. (\partial C / \partial x) \right|_{x=L} = 0. \quad (17)$$

Как и в случае однородного начального распределения дефектов, находим связь плотности подвижных частиц с плотностью неподвижных

$$C(x, t) = -[1/R\tau(t)] \left(\ln [B(x, t)/B_0] + (x/x_0) \right) \quad (18)$$

и уравнение, описывающее распределение неподвижных частиц $B(x, t)$ в объеме образца в произвольный момент времени t :

$$\begin{aligned} \partial^2 B(x, t) / \partial x^2 - [1/B(x, t)] [\partial B(x, t) / \partial x]^2 - [1/D\tau(t)] B(x, t) \times \\ \times \left(\ln [B(x, t)/B_0] + (x/x_0) \right) - (R/D) B^2(x, t) = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Выполняя в этом уравнении предельный переход $t \rightarrow \infty$, получаем уравнение, описывающее стационарное распределение неподвижных частиц $B_{st}(x)$:

$$d^2 B_{st}(x) / dx^2 - [1/B_{st}(x)] [dB_{st}(x) / dx]^2 - (R/D) B_{st}^2(x) = 0. \quad (20)$$

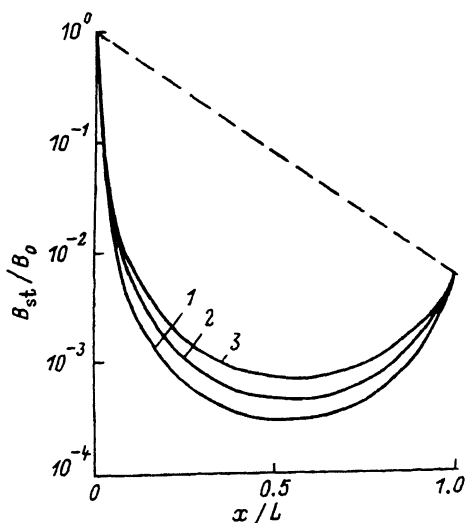


Рис. 3. Стационарное распределение неподвижных дефектов при экспоненциальном начальном распределении. T, K : 1 — 300, 2 — 500, 3 — 800. Штриховой линией показано начальное распределение. $B_0 = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $x_0 = 2 \cdot 10^{-6} \text{ см}$.

Решая это уравнение, находим вид функции $B_{st}(x)$:

$$B_{st}(x) = (2DA^2/R) \left\{ \cos [Q_1 + Ax] \right\}^{-2}. \quad (21)$$

Значения констант A и Q_1 определяются граничными условиями задачи. Для условий (16) эти константы могут быть найдены из решения следующей системы трансцендентных уравнений:

$$\cos^2 Q_1 = 2DA^2/RB_0, \quad (22)$$

$$\cos^2 (Q_1 + AL) = (2DA^2/RB_0) \exp (L/x_0). \quad (23)$$

По формулам (21)–(23) проводился численный расчет. По результатам расчета построены стационарные распределения неподвижных дефектов для различных значений температуры образца (рис. 3).

Рассмотрим теперь граничные условия (17). В этом случае получаем следующие уравнения для определения констант A и Q_1 :

$$2A \operatorname{tg} Q_1 + (1/x_0) = 0,$$

$$2A \operatorname{tg} (Q_1 + AL) + (1/x_0) = 0.$$

Сравнивая эти соотношения, находим, что $A = 0$ и, согласно формуле (21), $B_{st}(x) = 0$. Следовательно, как и в случае с однородным начальным распределением, в образце с граничными условиями (17) стационарная плотность дефектов равна нулю.

Список литературы

- [1] E.A. Lebedev, E. Nebauer, P. Süptitz. Phys. St. Sol. (a), **51**, K207 (1979).
- [2] В.И. Архипов, А.И. Руденко. ФТП, **13**, 1203 (1979).
- [3] В.И. Архипов, А.И. Руденко, А.М. Андриеш и др. *Нестационарные инжекционные токи в неупорядоченных твердых телах* (Кишинев, 1983).

Редактор В.В. Челдышев

Evolution of the Spatial Distribution of Radiation-Induced Defects in Disordered Materials

V.I. Arkhipov, I.A. Perova, and A.I. Rudenko

Moscow Institute for Physics and Engineering, 105023, Moscow, Russia