

РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫЕ ДИФFUЗИОННЫЕ ПОТОКИ
ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В НАПРЯЖЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ
И СВЯЗАННЫЕ С НИМИ ЯВЛЕНИЯ

З. К. Саралидзе

Рассмотрим кристаллическую пластинку толщины $2d$, упругоизогнутую в виде цилиндрического сегмента с радиусом кривизны. Упругая дилатация, возникающая при этом в материале пластинки, может быть записана в виде [1]

$$\varepsilon(x) = (1 - 2\nu)(x/R), \quad (1)$$

где ν — отношение Пуассона, а x — координата, отсчитываемая от средней (нейтральной) плоскости пластинки в сторону растянутой ее половины (изменение объема считается положительным при растяжении). Естественно, следует полагать, что отношение d/R достаточно мало ($< 10^{-2}$), чтобы деформация не превосходила предел упругости кристалла. Гидростатическое давление, соответствующее деформации (1), будет иметь вид

$$p(x) = 2G(1 + \nu)(x/R), \quad (2)$$

где G — модуль сдвига кристалла, а дополнительная энергия точечных дефектов (вакансий (—) и межузельных атомов (+)) в этом поле напряжений в приближении размерного взаимодействия может быть записана в виде [2]

$$E^{(\pm)}(x) = -2G(1 + \nu)\Delta V^{(\pm)}(x/R), \quad (3)$$

где $\Delta V^{(\pm)}$ — локальное изменение объема, связанное с точечным дефектом.

Пусть ρ — плотность дислокаций, K — скорость образования смещений в процессе облучения, $c_0^{(\pm)}$ — равновесные концентрации точечных дефектов в отсутствие напряжений, а $D^{(\pm)}$ — их коэффициенты диффузии. Предположим, что средние стационарные концентрации в процессе облучения $\overline{c_s^{(\pm)}} = K/D^{(\pm)}\rho$ слабозувствительны к наличию поля напряжений и намного превосходят равновесные значения $c_p^{(\pm)}(x) = c_0^{(\pm)} \exp[-E^{(\pm)}/kT]$. Тогда, пренебрегая объемной рекомбинацией (будем полагать, что температура облучения достаточно высокая), для стационарных концентраций $c_s^{(\pm)}(x)$ можно написать диффузионное уравнение

$$\varphi''(x) - \chi\varphi'(x) - \rho A_0\varphi(x) = -K \quad (4)$$

с граничными условиями

$$\varphi(x)|_{x=\pm d} = 0, \quad (5)$$

где $\varphi^{(\pm)}(x) = D^{(\pm)}c_s^{(\pm)}(x)$, $A_0 = 2\pi/\ln(L/r_0) \approx 1$ — коэффициент, фигурирующий в выражении для стационарных потоков точечных дефектов к единице длины дислокации [3] ($L \approx 1/\sqrt{\rho}$ — среднее расстояние между дислокациями, r_0 — радиус ядра дислокации), а $\chi^{(\pm)} = 2G(1 + \nu)\Delta V^{(\pm)}/kTR$ — отнесенный к kT градиент энергии дефектов в поле напряжений. Склонность дислокаций к предпочтительному поглощению межузельных атомов не учитываем, поскольку интересующий нас эффект проявляется независимо от этого свойства дислокаций.

Решая уравнения (4), (5) для диффузионных потоков точечных дефектов к поверхности пластинки, можно получить выражение

$$J^{(\pm)} = \frac{K}{2\rho\omega \operatorname{sh}(2\sqrt{\rho}d)} [2\sqrt{\rho} e^{\chi^{(\pm)}d} - \chi^{(\pm)} \operatorname{sh}(2\sqrt{\rho}d) - \sqrt{\rho} \operatorname{ch}(2\sqrt{\rho}d)], \quad (6)$$

которое с учетом неравенства $2\sqrt{\rho d} \gg 1$, которое хорошо выполняется практически всегда, дает

$$J^{(\pm)} = \frac{K}{\omega \sqrt{\rho}} \left(1 - \frac{x^{(\pm)}}{\sqrt{\rho}} \right), \quad (7)$$

что соответствует существованию стационарных нескомпенсированных потоков вакансий к сжатой поверхности и межузельных атомов к растянутой поверхности, плотности которых можно записать в виде

$$J_0 = \frac{K}{\rho \omega} (x^{(+)} - x^{(-)}) = \frac{K}{\rho \omega} \frac{2G(1+\nu)}{kTR} (\Delta V^{(+)} - \Delta V^{(-)}). \quad (8)$$

При обычных реакторных скоростях образования смещений $K \approx \approx 10^{-6}$ сна/с. Рассмотрим малодислокационные кристаллы (например, полупроводниковые), в которых $\rho \approx 10^4$ см⁻². Если для оценки воспользоваться значениями $\Delta V^{(+)} - \Delta V^{(-)} \approx \omega$, $G = 3 \cdot 10^{11}$ дин/см², $R = 10$ см, то при $T = 700$ К для J_0 получим значение $J_0 = 5 \cdot 10^{13}$ см⁻²·с⁻¹, что соответствует стационарному переносу со сжатой поверхности пластинки на растянутую одного полного атомного слоя примерно за $10 \div 20$ с. Иными словами, если толщина пластинки составляет 0.1 см, то за 100 суток облучения почти все атомы по одному разу будут диффузионными потоками пронесены через толщу пластинки с одной поверхности на другую.

При облучении ускоренными собственными ионами это время может быть уменьшено на два и более порядка.

Направленный поток вакансий вызывает дрейф узловых атомов в противоположном направлении, а поток межузельных атомов (при диффузии по механизму вытеснения узлового атома в соседнее межузлие) — в попутном направлении. Следовательно, при облучении упругоизогнутого кристалла должна идти стационарная самодиффузия узловых атомов от сжатой поверхности к растянутой.

Предположим теперь, что кристалл содержит примеси замещения двух типов, отличающиеся энергиями миграции (энергиями активации перескока атома в соседний вакантный узел или межузлие) от собственных атомов решетки в большую и меньшую сторону. Тогда очевидно, что более подвижные примесные атомы в среднем будут обгонять собственные атомы кристалла, в то время как менее подвижные будут в среднем отставать от них. Это приведет к тому, что при облучении однородно-легированной кристаллической пластинки в напряженном состоянии середина пластинки будет эффективно очищаться от примесей, которые будут перемещаться к поверхности, причем в зависимости от относительной подвижности к выпуклой или вогнутой.

Таким образом, облучение кристаллических материалов в напряженном состоянии может быть использовано для целенаправленного перераспределения примесей в твердом теле как для ускорения диффузионного проникновения в объем кристалла атомов, внедренных в тонкий приповерхностный слой (однородизации), так и для их сепарации по подвижности в сосредоточения вблизи поверхностей. При интенсивном облучении (высоких скоростях образования точечных дефектов) требуемые для этих целей времена облучения не являются нереально большими.

Л и т е р а т у р а

- [1] Тимошенко С. П. Сопротивление материалов, т. 1. М.: Физматгиз, 1960, 379 с.
 [2] Эшлби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИЛ, 1963. 247 с.
 [3] Косевич А. М., Саралидзе З. К., Слезов В. В. ЖЭТФ, 1966, т. 50, № 4, с. 958—970.

Институт физики АН ГССР
Тбилиси

Поступило в Редакцию
24 июня 1987 г.