

# Дефекты в кристаллах

Каждый материал не является идеальным.

Изначально в нем содержатся различные дефекты.

Самый простейший вид дефектов – точечные дефекты.

Вакансии – отсутствие атома в узле кристаллической решетки. (пустота)

Междоузельный атом – вблизи узла решетки находится два атома или атом находится в одной из пустот (тетраэдрической, октаэдрической или другой) данной решетки.

# Вакансии и собственные междоузельные атомы в кристаллах

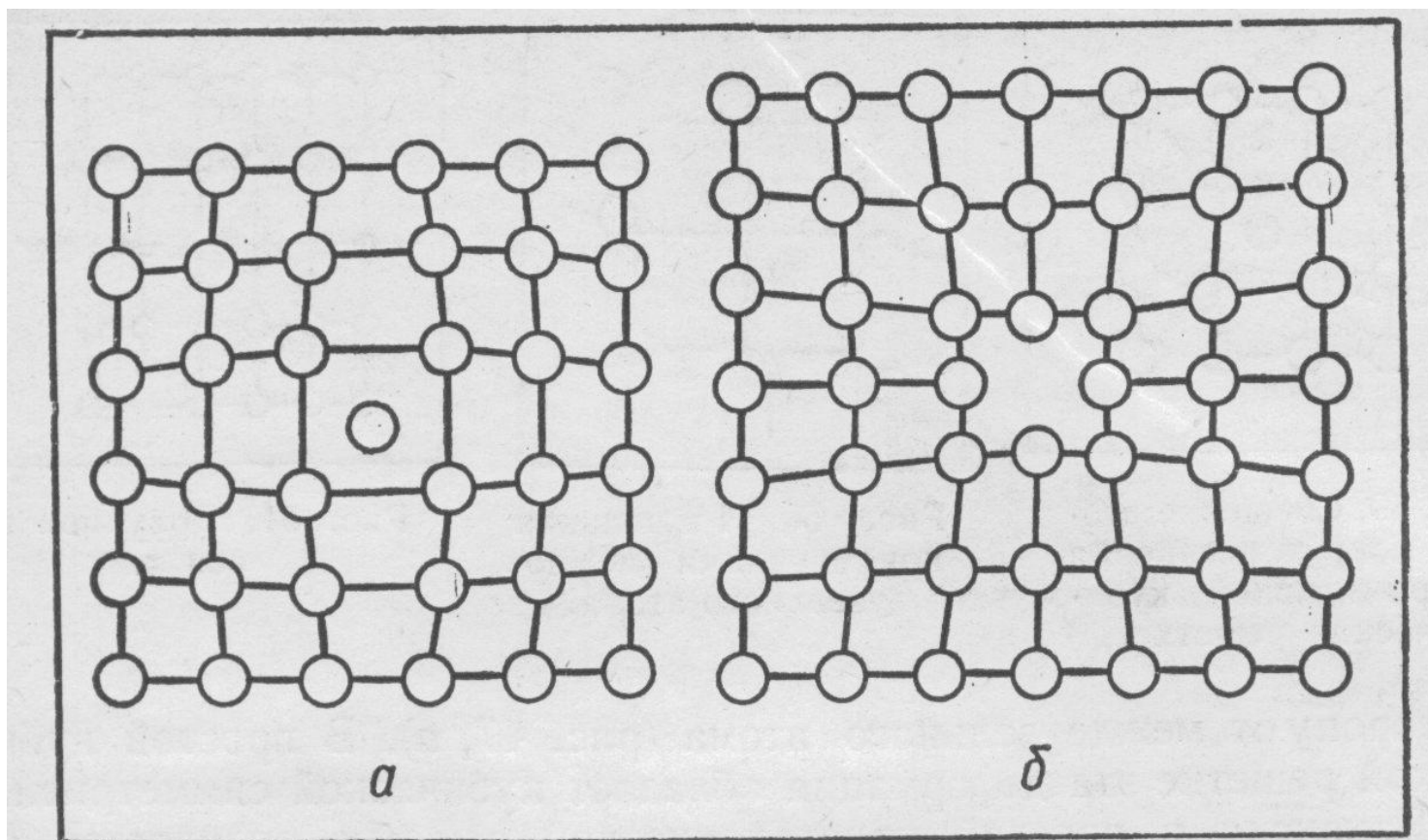


Рис. 47. «Собственные» дефекты кристаллической решетки:  
*a* — междоузельный атом; *б* — вакансия.

# Создание дефектов под облучением

Облучение создает большое количество неравновесных точечных дефектов, концентрация которых существенно отличается от термически равновесной.

Термически равновесная концентрация дефектов типа  $i$  равна

$$C_i = \exp(-\Delta S_i / k) \exp(-E_i^F / kT)$$

$E_i^F$  – энергия образования дефекта типа  $I$

$k$  - постоянная Больцмана

$T$  – температура

$\Delta S_i$  - изменение энтропии

# Создание дефектов под облучением

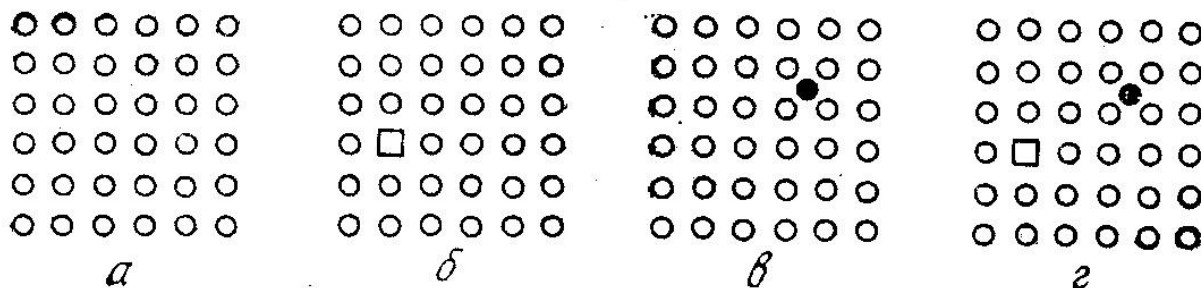
Под облучением создаются термически неравновесные точечные дефекты

Количество создаваемых в единицу времени дефектов зависит от

- типа облучаемых частиц,
- их энергии
- плотности тока частиц

# Первичные процессы дефектообразования.

Первичный процесс – это взаимодействие между излучением и твердым телом, ведущее к выбиванию атома из его места в решетке. При попадании частицы в вещество она, взаимодействуя с атомами мишени, создает **первично выбитый атом (ПВА)**.



Р и с. 7.1. Схематическое изображение точечных дефектов в кристаллической решетке:

*a* — идеальная решетка; *б* — решетка с вакансией (отсутствует один атом); *в* — решетка с межузельным атомом (один атом лишний); *г* — решетка с дефектом Френкеля (с парой вакансий — межузельный атом)

Если атом имеет достаточную энергию – образуется по крайней мере одна **пара Френкеля** (вакансия + междуузельный атом).



# Рекомбинационный объем

Рис. 7.3. Рекомбинационный объем  $V_0$  для межузельного атома (пары) и вакансии в меди (сечение соответствует плоскости  $\{100\}$ ). Для вакансий, расположенных в узлах решетки внутри области  $V_0$ , дефект Френкеля неустойчив, для узлов снаружи он устойчив [532, 964].

Аналогично можно рассмотреть рекомбинационный объем вокруг вакансий, а не вокруг межузельного атома. Однако в этом случае придется учесть три возможные  $\langle 100 \rangle$  ориентации межузельной пары



При нахождении междоузельного атома в этом объеме происходит их аннигиляция. При этом восстанавливается структура решетки.

# Анизотропия в образовании пар Френкля

меньше, можно получить интересную поверхность с

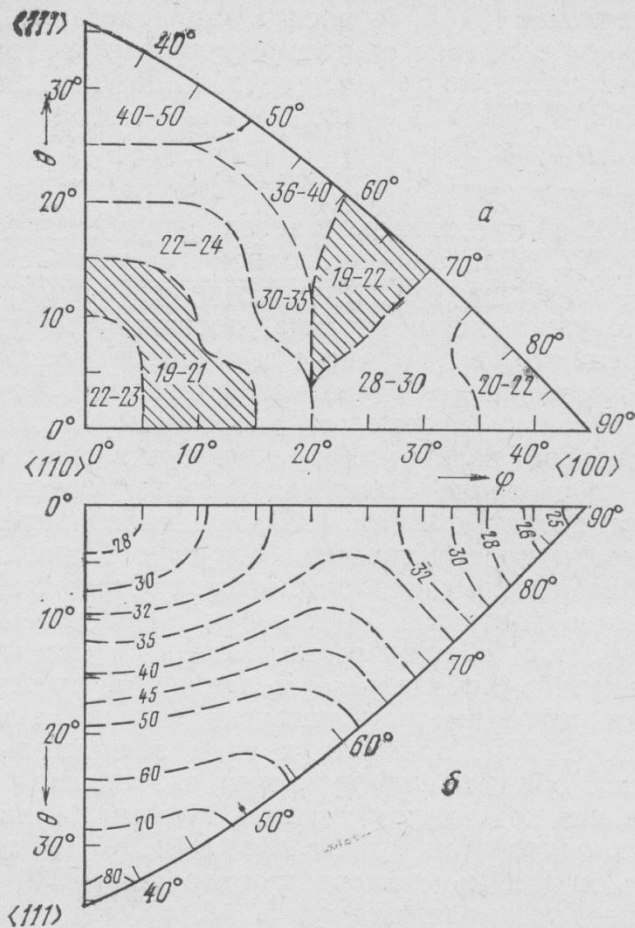


Рис. 7.5. Поверхность пороговой энергии  $T_a(\theta, \varphi)$  для меди внутри ориентационного треугольника для кубических решеток: а — экспериментальные значения [635]; б — результаты машинного моделирования [532]

В различных направлениях требуется различная энергия ПВА для образования устойчивой Френкелевской пары



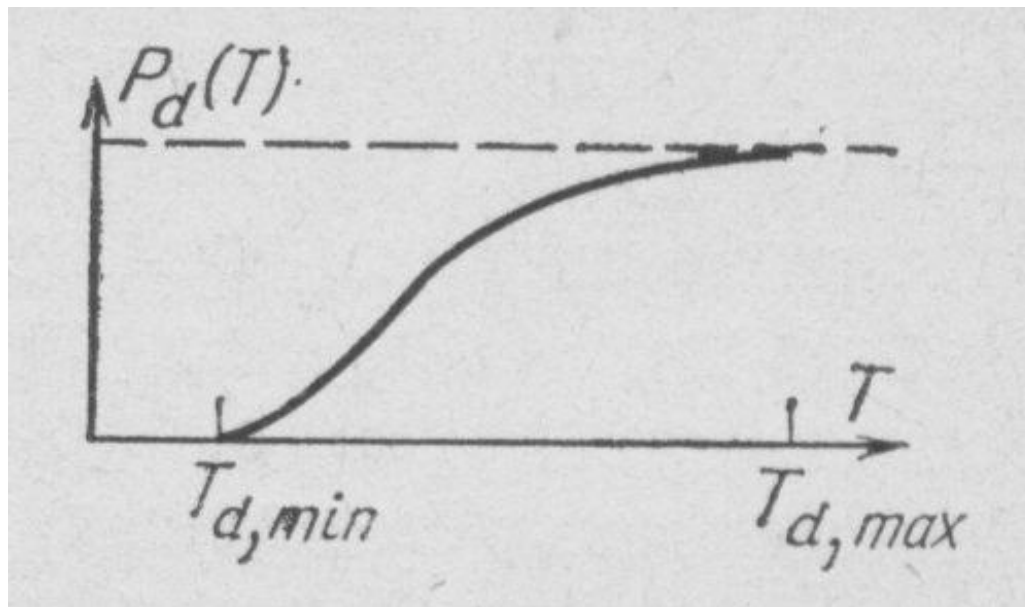
# Пороговая энергия смещения.

Минимальная энергия необходимая для создания в твердом теле Френкелевской пары.

Почему пороговая?

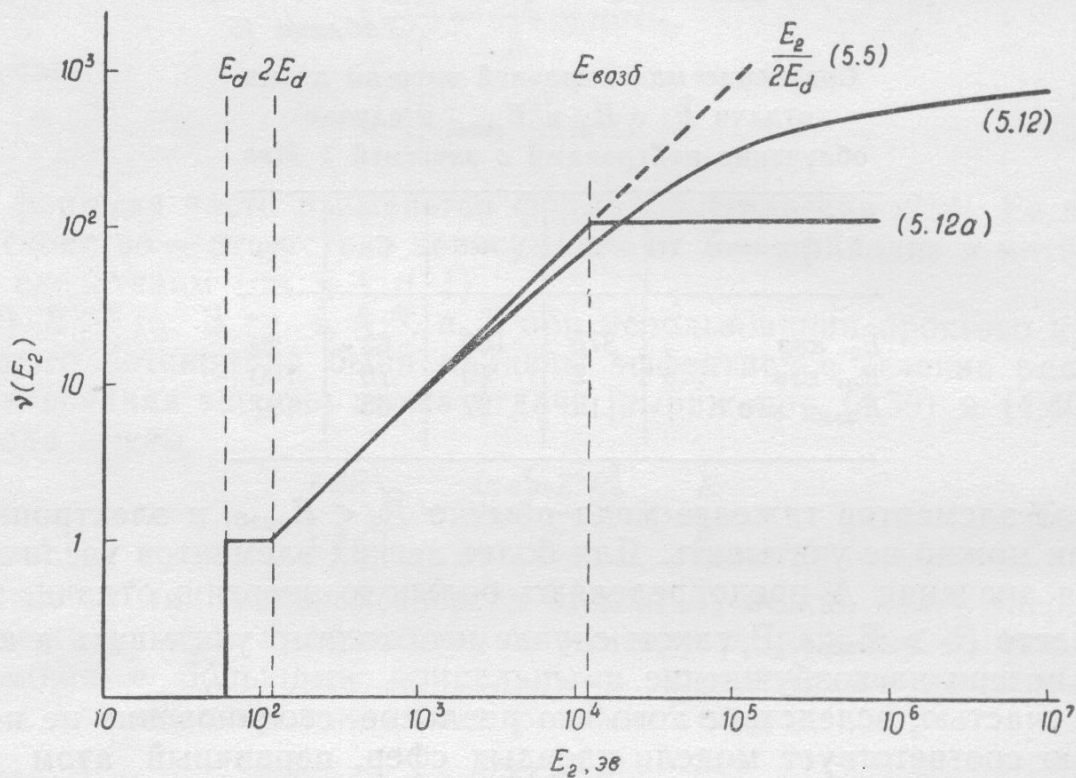
Потому что до этого значения наблюдается только сдвиг атомов из равновесного состояния и потом возврат на прежнее место.

Переданная энергия идет на возбуждение колебаний решетки (фононы) и затем в конечном счете на нагрев материала. Структурные дефекты при этом не возникают.



Р и с. 7.6. Пороговая функция, которая дает вероятность смещения атома после того, как он получил энергию  $T$  и начал двигаться в произвольном направлении

щение атомов, очень медленно возрастает с ростом  $E_2$ .



Ф и г. 55. Число смещенных атомов  $\nu(E_2)$ , приходящихся на один первичный атом отдачи с энергией  $E_2$ .

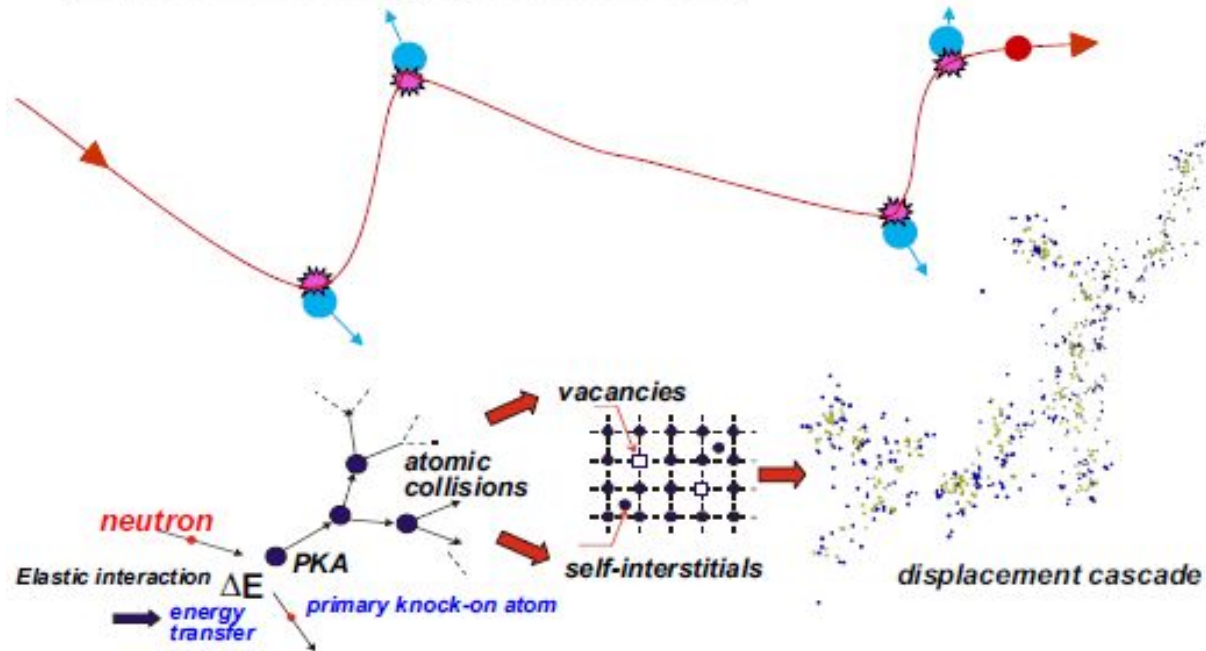
Рассчитано для углерода при помощи выражений (5.12) и (5.12a) с использованием экспериментальных данных фиг. 54.

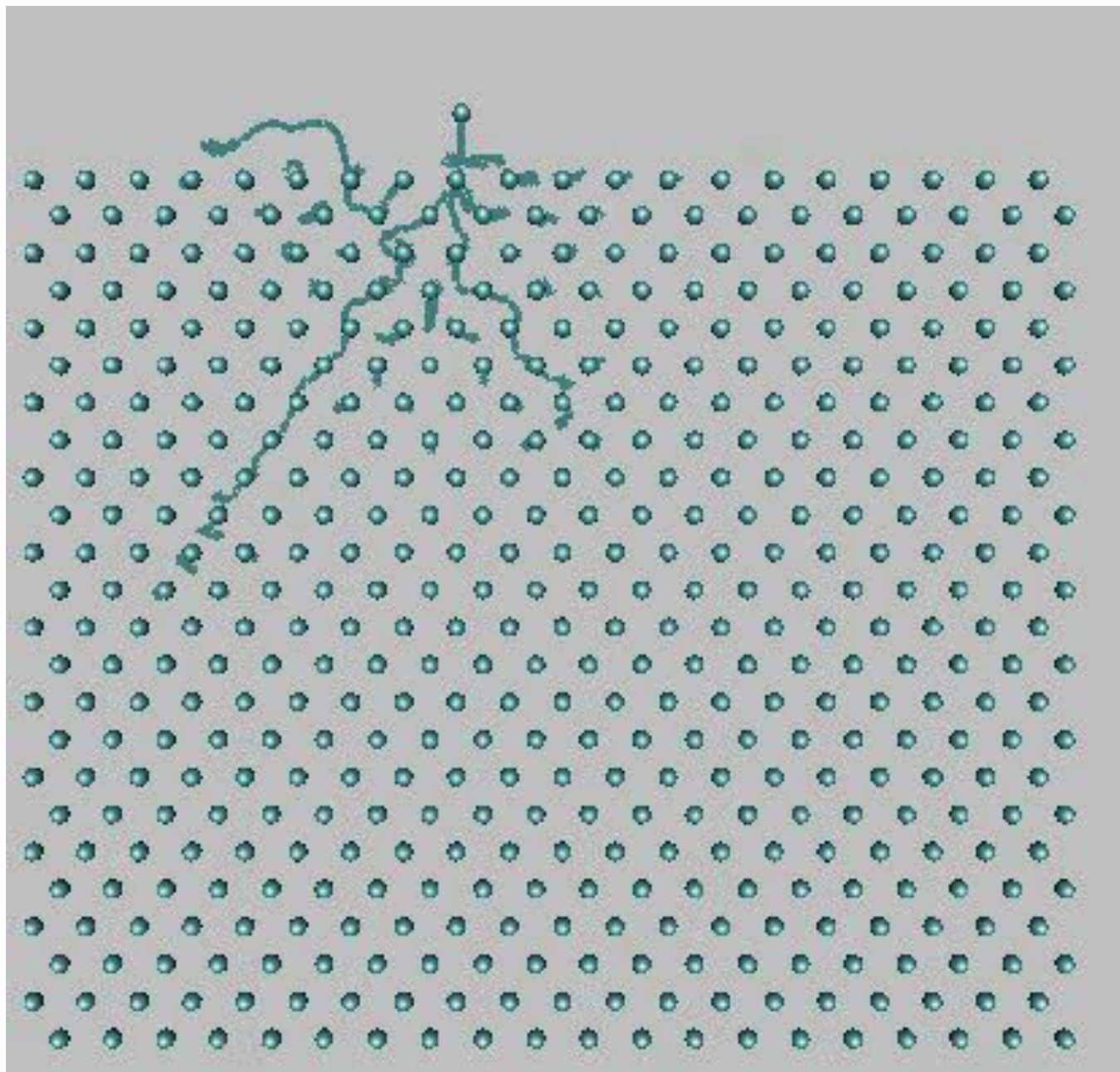
## ... It all starts with a neutron hitting an atom ...

Neutrons = uncharged particles  $\Rightarrow$  can travel long distances in matter

When reacting with nuclei of atoms they can produce

- Activation
- Transmutation
- Displacement damage (elastic collisions)



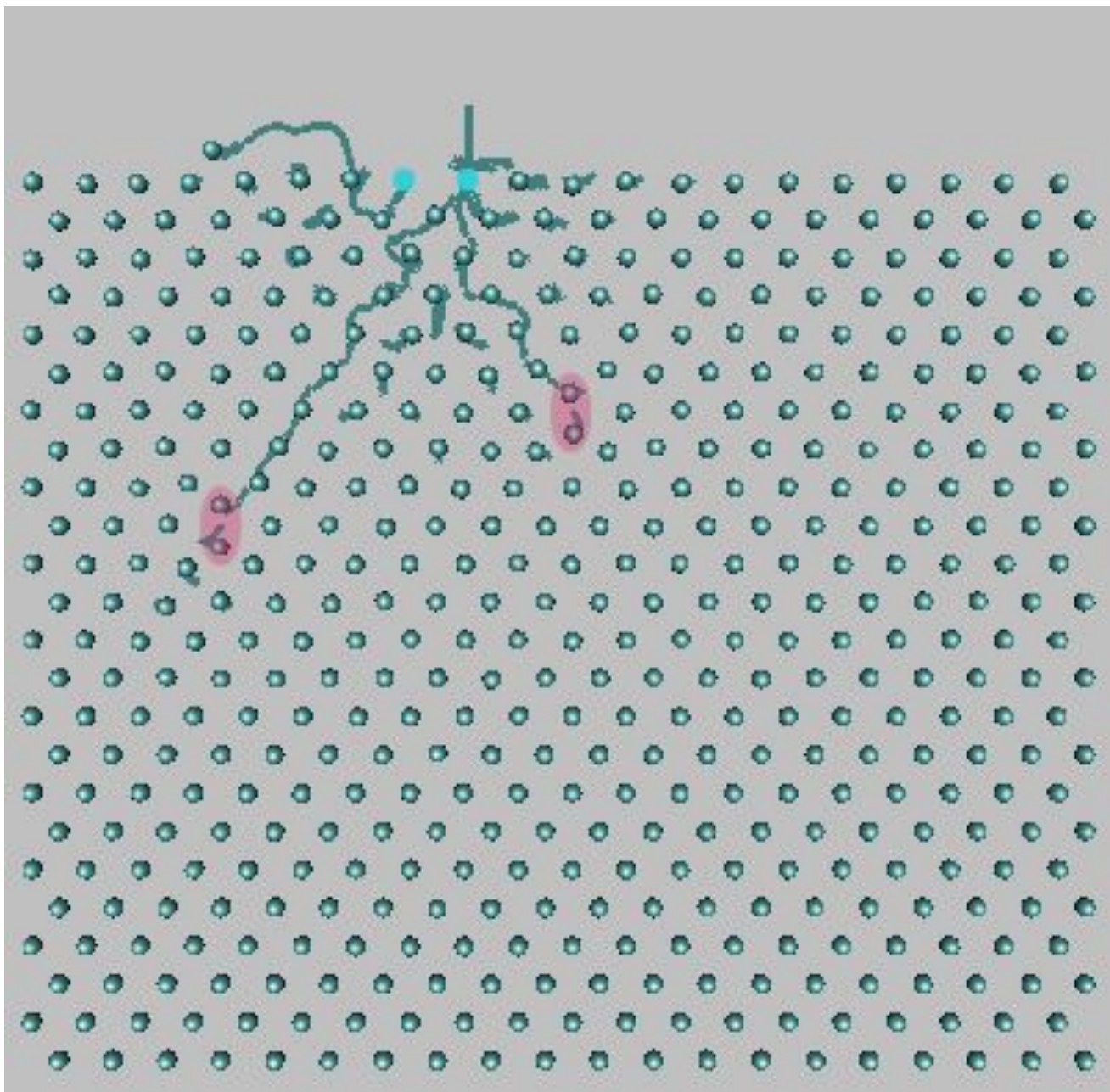


Пример образования точечных дефектов при взаимодействии Налетающего на поверхность атома ниобия с материалом.

На рисунке видно распространение смещений вдоль плотноупакованных направлений.

В результате этого процесса образуются 2 междоузельные гантели. На следующем рисунке выделены красным и 2 поверхностные вакансии – выделены голубым.

$N_b > N_b$   
 $E = 100\text{eV}$



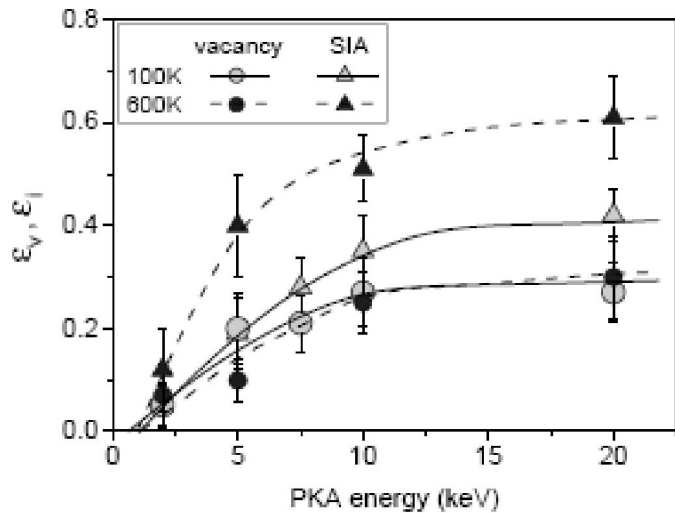
# Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

- В результате упругого соударения происходит перераспределение кинетической энергии между сталкивающимися атомами.
- При этом рассеивающийся атом не только теряет часть своей кинетической энергии, но и меняет направление своего движения.
- Получающий энергию атом вещества мишени может покинуть свою позицию и также начать двигаться в веществе.
- Упругое взаимодействие ускоренных ионов с ядрами атомов, как правило, описывают с помощью представления о последовательных парных столкновениях иона с отдельными атомами. Связь между этими атомами не учитывается.

Примечание. Такое приближение справедливо, если:

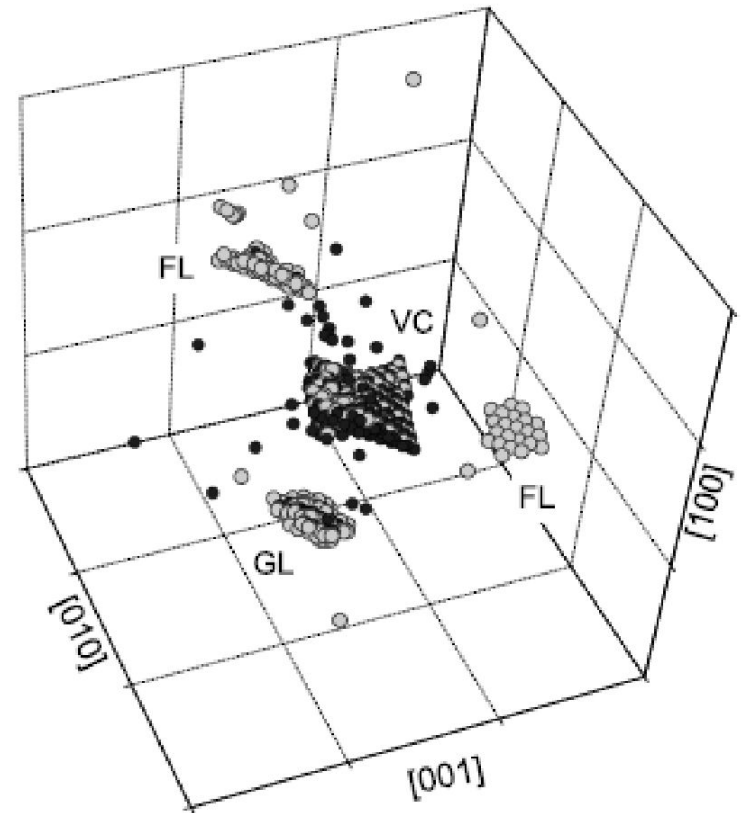
- 1) расстояния между ионом и атомом, на которых происходят основные изменения состояний сталкивающихся частиц, меньше, чем расстояния между соседними атомами среды;
- 2) энергия, передаваемая при каждом столкновении, больше энергии связи атомов в веществе.





The fractions of vacancies ( $\epsilon_v$ ) and interstitials ( $\epsilon_i$ ) surviving in clusters containing  $\geq 3$  point defects vs. PKA energy,  $E_p$ , in Cu at either 100 or 600K

Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, B.N. Singh, J. Nucl. Mater. 307–311 (2002) 866.

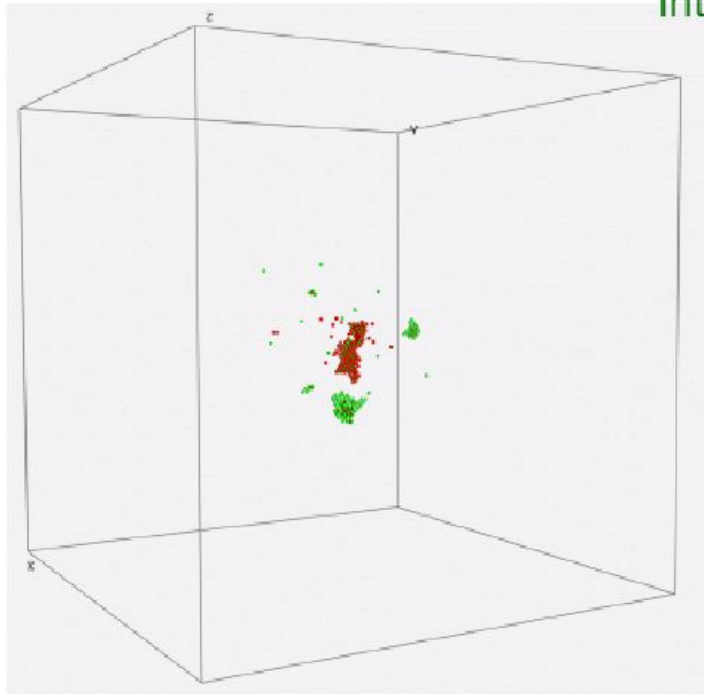


The vacant sites (dark spheres) and atoms in interstitial sites (light spheres) created in a 25 keV cascade in a model of copper at 100K

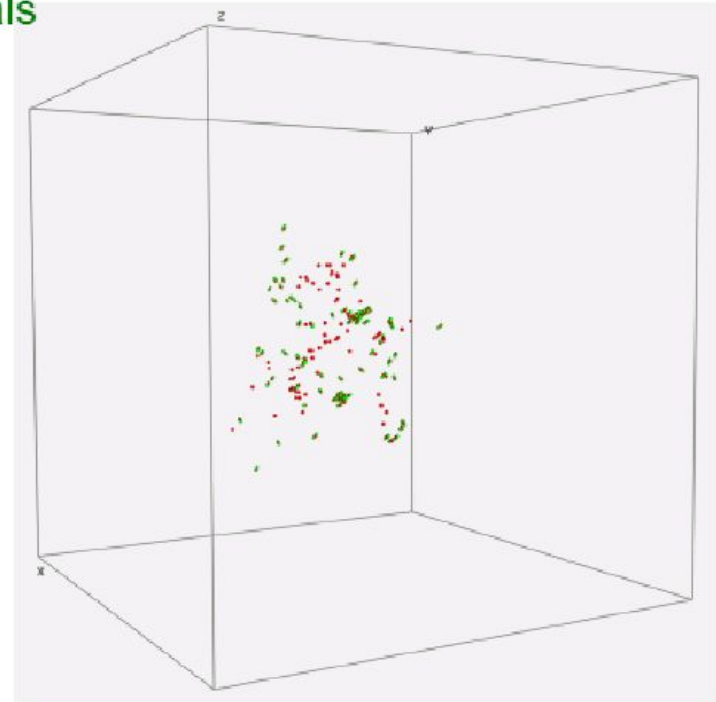
D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Inter. Mater. Rev. 47 (2002)

# Comparison of surviving defects in a 25 keV displacement cascade in FCC (Cu) and BCC (Fe) metals

Vacancies  
interstitials



Cu



Fe

- Large vacancy clusters are not directly formed in BCC metal displacement cascades

OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY

U. S. DEPARTMENT OF ENERGY

*Yu. N. Osetsky and R.E. Stoller*



## Каскадная функция $\nu(E)$

среднее количество смещенных атомов, образованных атомом отдачи с энергией  $E$

Если поток бомбардирующих частиц равен  $\Phi \text{ см}^{-2}\text{сек}^{-1}$

облучение продолжается в течение  $t \text{ сек}$

атомная концентрация смещенных атомов

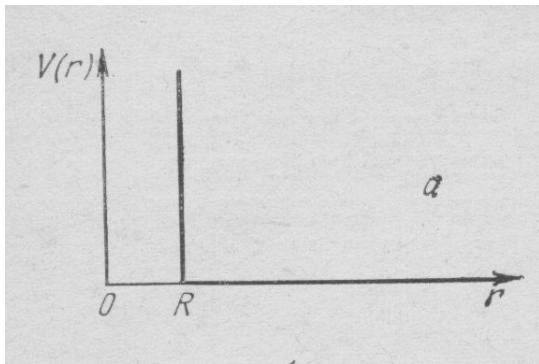
$$C_d = t\Phi \int_{E_d}^{E_0} \nu(E) \frac{d\sigma}{dE} dE$$

# Модель Кинчина-Пиза

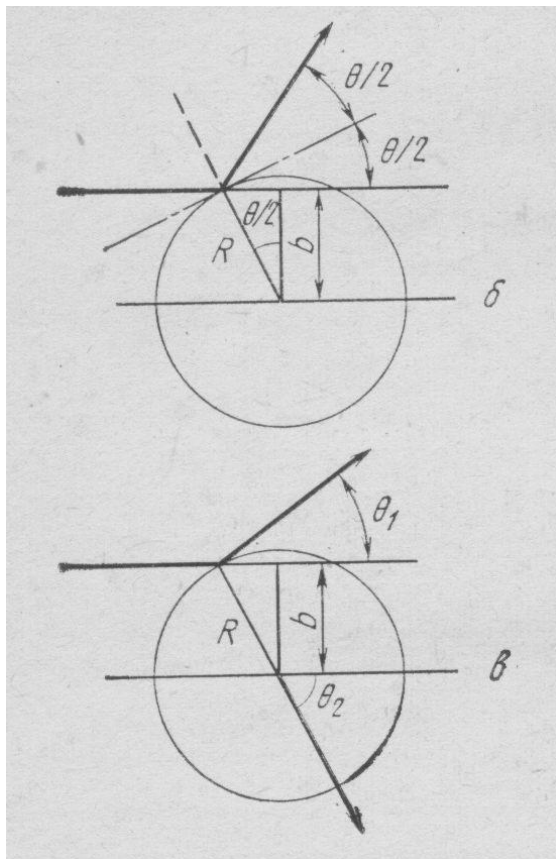
включает следующие предположения:

1. Атомы при соударении ведут себя как твердые сферы
2. Все соударения упругие, и на электронное возбуждение энергия не теряется
3. Каскад представляет собой совокупность парных столкновений  
$$E = E' + E''$$
4. Энергия решетке не передается
5. Соударения не зависят друг от друга, кристаллическая структура не учитывается
6. Атом, получивший энергию меньше пороговой энергии смещения не смещается и в дальнейшем не дает вклада в каскад

# Потенциал жесткой сердцевины



$$V(r) = \left\{ \begin{array}{l} \infty \dots \dots r \leq R = r_1 + r_2 \\ 0 \dots \dots r > R \end{array} \right\}$$



Р и с. 1.11. Рассеяние жесткой сердцевиной:

$a$  — потенциал жесткой сердцевины,  $R$  — ее радиус;  $b$  — рассеяние жесткой сердцевиной в относительной системе,  $b$  — прицельное расстояние;  $\vartheta$  — рассеяние жесткой сердцевиной в лабораторной системе,  $\theta_1$  — угол отклонения,  $\theta_2$  — угол отдачи

$$\theta = \pi - 2p \int_{r_0=R}^{\infty} \frac{dr}{r^2 g(r)} = \pi - 2p \int_{r_0=R}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_r}}} =$$

$$= \pi - 2 \arcsin\left(\frac{b}{R}\right)$$

$$\sigma(\theta) = pR \sin \theta / 2 \sin \theta = R^2 / 4$$

$$\sigma(E_1, E_2) = 4\pi\sigma(\theta) / E_1 = \pi R^2 / E_1$$

$$\sigma_{\text{полн}}(E) = \pi R^2$$

$$v(E) = 0 \quad E < E_d$$

$$v(E) = 1 \quad E_d < E < 2E_d$$

Для соударения твердых сфер :

$$\frac{d\sigma}{\sigma} = \frac{dE'}{E} \quad \frac{d\sigma}{\sigma} = \frac{dE''}{E}$$

Среднее число смещенных  
атомов от  
рассеянного атома

$$\int_{E_d}^E v(E') \frac{dE'}{E}$$

Среднее число смещенных  
атомов от атома отдачи

$$\int_{E_d}^E v(E'') \frac{dE''}{E}$$

$$\nu(E) = \int_{E_d}^E \nu(E'') \frac{dE'}{E} + \int_{E_d}^E \nu(E') \frac{dE'}{E} = \frac{2}{E} \int_{E_d}^E \nu(x) dx$$

$$\nu(E) = \frac{2}{E} \int_{E_d}^E \nu(x) dx$$

При  $E \gg E_d$

Решение уравнения:  $\nu(E) = kE$



Из условия  $\nu(2E_d) = 1$   $k = \frac{1}{2E_d}$

$$\nu(E) = \frac{E}{2E_d}$$

Стандарт  
NRT:

$$\nu(E) = \frac{0.8E}{2E_d}$$

*M.J. Norgett, M.T. Robinson, I.M. Torrens,  
Nucl. Eng. Des. 33 (1975) 50.*

- Розрахувати по Кінчену-Пізу середню кількість зміщених атомів викликаних ПВА з енергією 10КэВ у міді. Вважати що порогова енергія дорівнює 25 еВ
- Розрахувати по NRT стандарту середню кількість зміщених атомів у залізі викликаних ПВА з енергією 700КэВ. Вважати що порогова енергія дорівнює 35 еВ
- Вирахувати співвідношення середніх кількостей утворених дефектів викликаних ПВА з енергією 100КэВ у залізі та вуглецю. Вважати що порогова енергія у залізі дорівнює 30 еВ, а в вуглецю – 15 еВ.