

Лекция 6. Ақаулардың пайда болуы туралы бастапқы мәліметтер. Нүктелік ақаулар. Нүктелік ақаулардың түзілу механизмі. Нүктелік ақаулар кешендері

Лекцияның мақсаты: Нүктелік ақаулардың түзілу механизмі мен энергиясын, олардың миграциялық қасиеттерін және кристалл торындағы тепе-теңдік концентрациясын түсіндіру. Радиациялық әсерлер нәтижесінде пайда болатын Френкель және Шотки ақауларының түрлерін сипаттау.

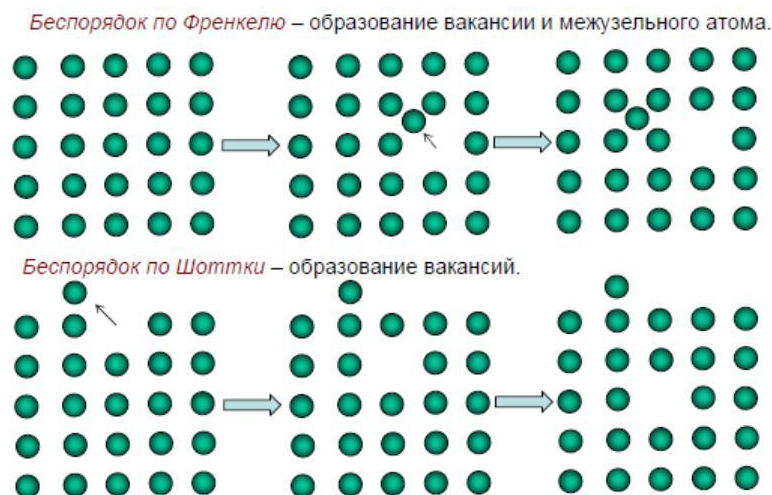
Негізгі сұрақтар

1. Нүктелік ақаулардың негізгі түрлері және олардың физикалық табиғаты.
2. Френкель және Шотки ақауларының түзілу механизмі.
3. Вакансия мен түйінаралық атомдардың миграция энергиясы.
4. Тепе-теңдік концентрациясының температураға тәуелділігі.
5. Нүктелік ақаулар кешендері және олардың тұрақтылығы.
6. Радиациялық әсерден туындайтын ақаулар мен ығысулар каскады.

Қысқаша мазмұны

Кристалл торының түйінінен атомның ығысуы вакансия немесе түйінаралық атом (ТАА) пайда болуына әкеледі. Бұл ақаулар кристалдық тордың серпімді өрісінде деформация тудырады және материалдың физикалық қасиеттерін өзгертеді. **Вакансия** — атомның өз орнынан кетуінен туындайтын бос орын, ал ТАА — атомның көршілес түйін арасына орналасуы.

Вакансия мен түйінаралық атомның жұбы **Френкель жұбы** деп аталады. Ал егер катион мен анион бірдей мөлшерде кристалдан шығып кетсе, онда бұл **Шотки ақауы** деп аталады. Бұл ақаулардың түзілу энергиясы вакансия үшін шамамен 1–1.2 эВ, ал ТАА үшін 2–3 эВ. Нүктелік ақаулардың тепе-теңдік концентрациясы температурамен экспоненциалды түрде артады: $c = \exp(-E_0 / kT)$. Мұнда E_0 – түзілу энергиясы, k – Больцман тұрақтысы, T – абсолют температура.

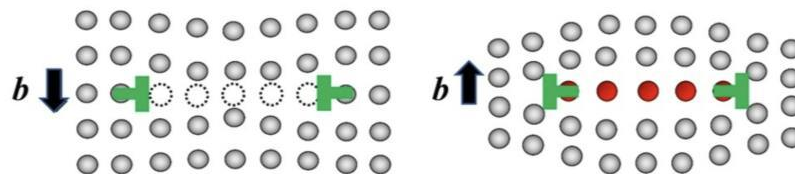


Сурет 1. Френкель және Шотки бойынша нүктелік ақаулардың түзілуі

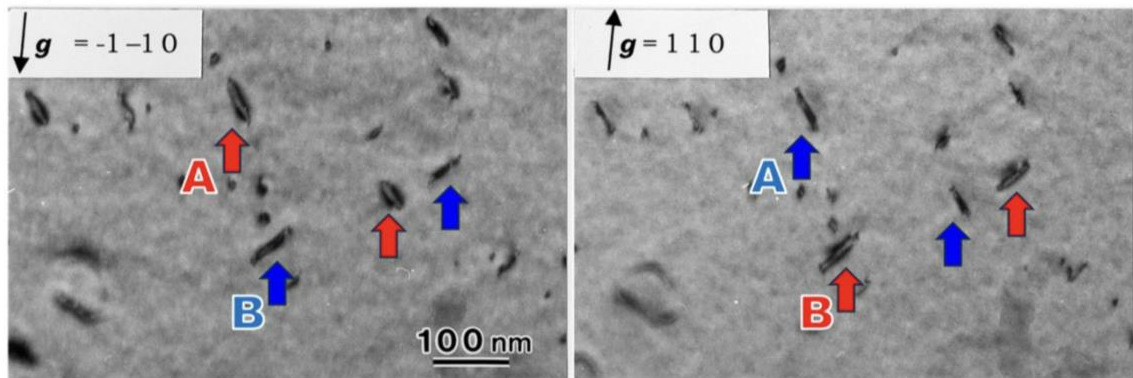
Вакансиялар мен ТАА миграциясы атомдардың орын ауыстыру секірулері арқылы жүреді. Бұл процестің энергетикалық кедергісі миграциялық энергия деп аталады және шамамен 1 эВ құрайды. Нүктелік ақаулар қозғалысы материалда диффузиялық үрдістердің жүруіне ықпал етеді.

Радиациялық әсер кезінде алғашқы ығысу актісінен кейін каскадты ығысулар пайда болады. Кинчин–Пиза моделіне сәйкес ығысулар саны $\nu = k \cdot E / 2E_d$ формуласымен есептеледі, мұнда $k \approx 0.8$, E – бөлшек энергиясы, E_d – ығысу энергиясы. Бірінші әсерлесуден шыққан атомдар (БҰА) жаңа атомдарды орнынан ығыстырып, каскадты үрдіс туғызады.

Жалпы металдың ақаулы құрылымының бірдей маңызды сипаттамасы *салыстырмалы үлес* болып табылады, яғни оның көлемінде бір нүктелі ақаулардың және олардың кешендерінің концентрациясы мен таралуының үлесі. Кейбір жағдайларда олардың таралуы біркелкі болмауы мүмкін. Нүктелік ақаулар қоспаларға және ақаулардың басқа түрлеріне жабысуы мүмкін. Сондай-ақ белгілі бір көлемде нүктелік ақаулардың концентрациясы көрші торлы кеңістікке қарағанда бірнеше рет жоғары болуы мүмкін. Мұндай көлемдердің геометриясы жазық (екі өлшемді) немесе көлемді (үш өлшемді) болуы мүмкін. Бірінші жағдай вакансияларға, ТАА және басқа түзілімдер, ал екінші жағдайда – тек вакансиялар. Жаппай жинақталған вакансиялардың типтік шоғырлануы 1-40% аралық шамасында болады. Мұндай көлемдік ақауларды *сарқылу аймақтары* (обедненными зонами) деп те атайды. Вакансиялардың концентрациясының кейбір мәндерден асып кетуі *кеуектердің* немесе *дислокациялық ілмектер* (сурет 3 және 4) деп аталатын жазық түзілімдерге айналуына әкеледі.



Сурет 3. Призмалық дислокациялық ілмектің схемасы. (а) вакансия түрі және (б) түйінаралық атом түрі. Көрсеткілер Бюргерс векторларының бағыттарын көрсетеді. Ақ нүктелі шеңберлер вакансияларды көрсетеді, ал қызыл шеңберлер торлар арасында ТАА немесе гетероатомдарды көрсетеді.



Сурет 4. Гелий иондарымен сәулелендіру арқылы алынған темір үлгісіндегі призматикалық дислокациялық ілмектердің суреттері (дифракциялық контраст). (JEOL JEM-2010 микроскопы мен Симанэ университетіндегі иондық үдеткіш арқылы алынған)
[К. Аракава и др. Дж. Прил. Физика. 894752-4757 (2001)]

Бақылау сұрақтары

1. Вакансия және түйінаралық атом дегеніміз не?
2. Френкель және Шотки ақауларының айырмашылығын түсіндіріңіз.
3. Нүктелік ақаулардың түзілу энергиясы нені сипаттайды?
4. Миграциялық энергия дегеніміз не және оның шамасы қандай?
5. Нүктелік ақаулар концентрациясы температурамен қалай өзгереді?

Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті. Қатты дене физикасы және жаңа материалдар технологиясы кафедрасы. Физика техникалық факультеті.
Радиациялық материалтану пәні. Мархабаева А.А.

6. Радиациялық әсерден пайда болатын каскадты ығысуларды сипаттаңыз.

Ұсынылатын әдебиеттер

1. Бекбосынов Б.Б. Радиациялық физика негіздері. – Алматы: ҚазҰУ, 2016.
2. Черепанов В.В. Радиационное материаловедение. – М.: Энергоатомиздат, 2002.
3. Knoll G.F. Radiation Detection and Measurement. – Wiley, 2010.
4. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Том 5. – М.: Наука, 2007.



Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті
Факультет: физика-техникалық
Қатты дене және бейсызық физика кафедрасы

**Ақаулардың пайда болуы туралы
бастапқы мәліметтер. Нүктелік
ақаулар. Нүктелік ақаулардың түзілу
механизмі. Нүктелік ақаулар
кешендері**

Мархабаева А.А

Нүктелік ақаулардың түрлері

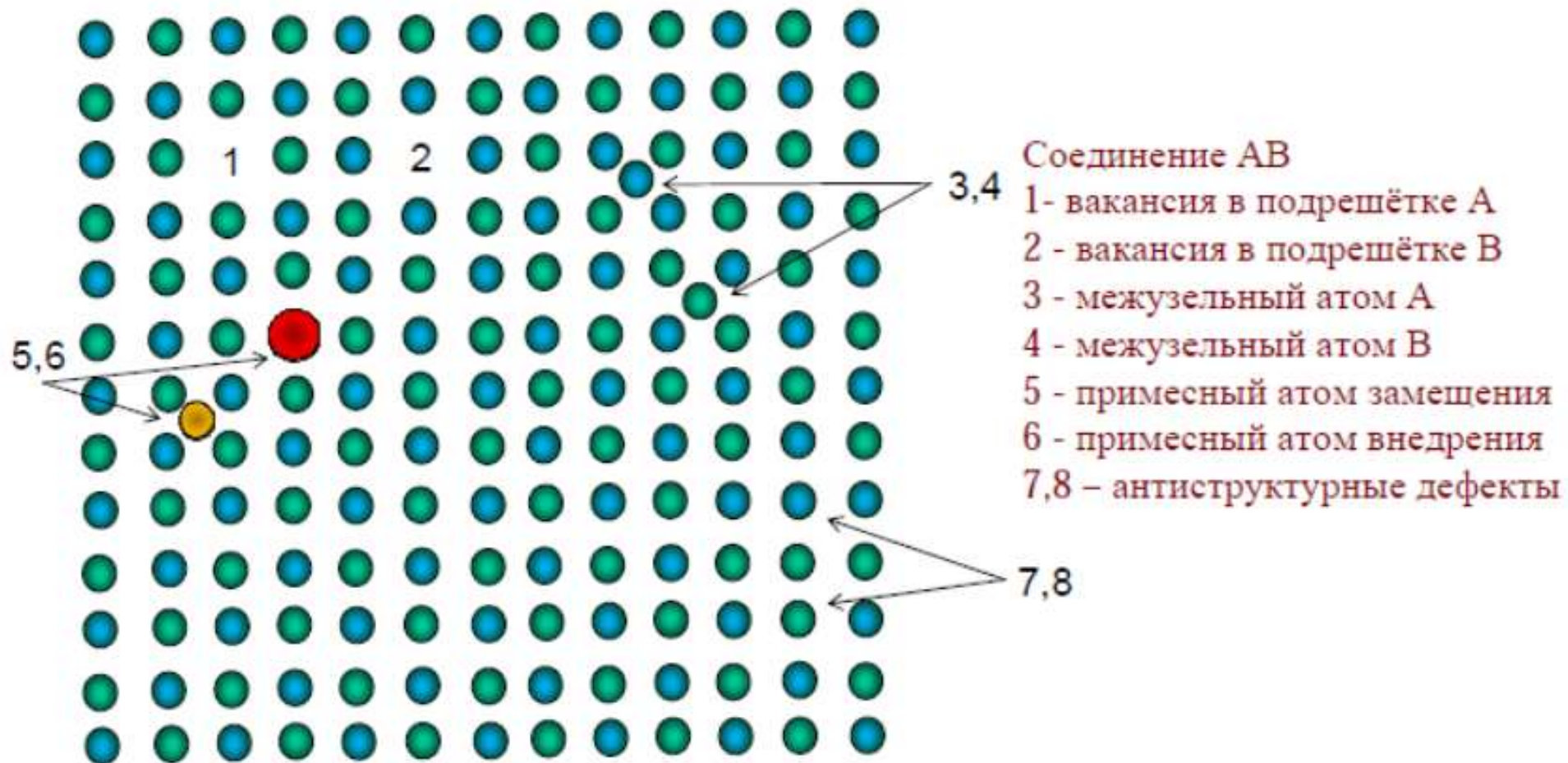
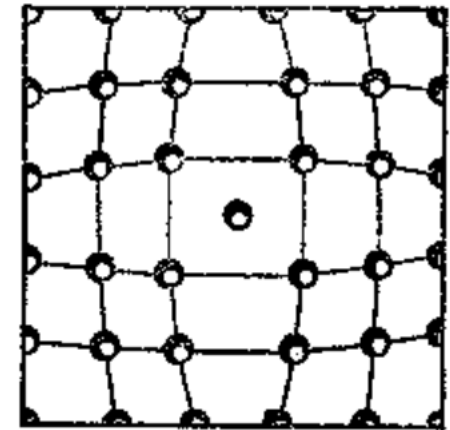
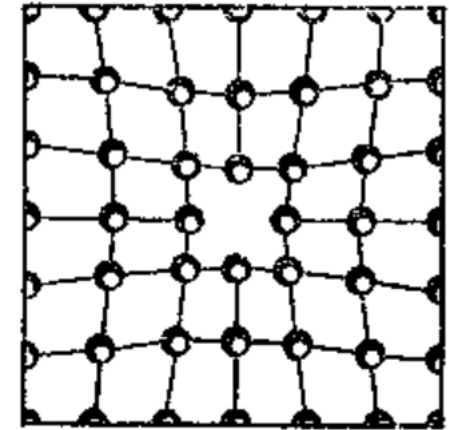


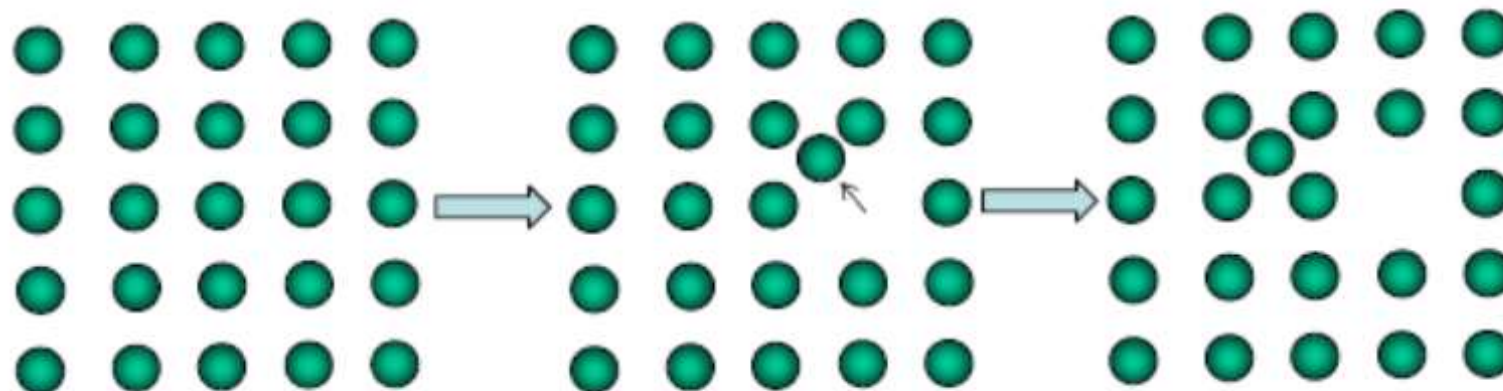
Рис. 2. Разновидности точечных дефектов

Нүктелік ақаулардың түрлері

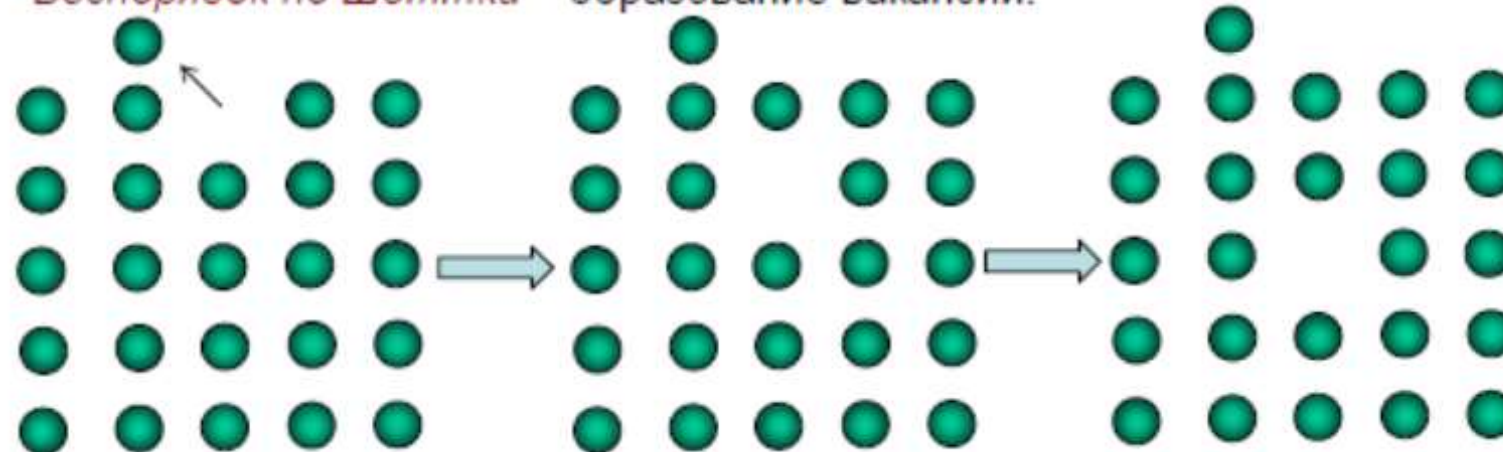
- Вакансиялардың пайда болуынан көрші атомдар ығысып кристалдық тор шиеленісте болады. Вакансияны жан-жақты созылу (растяжение) орталығы ретінде қарастыруға болады, ал түйінаралық атом – қысу (сжатие). Тордың мұндай қозу орталығында бұзылу және деформация $1/r^3$ қашықтыққа пропорционал азаяды. Бұл серпімді кернеулік 1-2 атом диаметрі қашықтықта ғана жоғалады деген сөз.
- Ионды кристалдарда анионды және катионды вакансиялар болады.
- Нүктелік ақаулар жылулық флуктуациялар нәтижесінде пайда болуы мүмкін. Нәтижесінде атом белгілі барьерді өтіп, түйінаралық жерге көшуі мүмкін. Бұл кезде екі нүктелік ақау: түйінаралық атом және вакансия бірге түзіледі. Мұндай комбинацияны **Френкель жұбы** деп атайды.



Беспорядок по Френкелю – образование вакансии и межузельного атома.



Беспорядок по Шоттки – образование вакансий.



Катиондар мен аниондардың бірдей саны кристалдың бетіне шығып, беткі түйіндерге отыруы мүмкін. Кристалдың беткі қабатында вакансиилар пайда болады. Кристалды тастап кеткен атом беткі қабатта болғандықтан, кристалда тек вакансия ғана қалады. Мұндай ақау түрін **Шотки ақауы** деп атайды.

Рис. 3. Механизмы образования точечных дефектов по Шоттки и по Френкелю

Нүктелік ақаулардың жиынтығы

Нүктелік ақаулар кешендерге (комплекс) біріктірілуі мүмкін. Бұл кешендер де бір-бірімен қосылып, комплекстер кешенін құра алады. Нүктелік ақаулардың қарапайым кешендері екі және үш есе еселенген. Қос бос орындар дивакансиялар деп аталады. Үш есе – тривакансия. Үш нүкте арқылы жазықтық жүргізуге болғандықтан, қарапайым жағдайда нүктелік ақаулардың жиынтығы сызықты немесе жазық түзілімдер (плоские образования) болып табылады.

Моновакансияны түзуге қарағанда дивакансияны түзу үшін аз энергия қажет. Дивакансиялар моновакансияларға қарағанда кристалдық торда мобильді қозғалғыш. Моно- және дивакансиялардың түзілу энергияларының айырымы кешендегі екі вакансияның байланыс энергиясына тең және $\Delta E = 0,1 - 0,5$ эВ құрайды.

Бос орындар концентрациясының кейбір мәндерден асып кетуі *кеуектердің* немесе *дислокациялық ілмектер* деп аталатын жазық түзілімдерге айналуына әкеледі.

Сызықты ақаулар

- Сызықтық ақауларға дислокациялар, микрожарықтар, нүктелік ақаулар тізбегі түріндегі тұрақсыз түзілімдер жатады.
- Дислокациялар кристалдардың пластикалық деформациясы кезінде және оларды одан әрі механикалық өңдеу кезінде пайда болады.
- Дислокацияның негізгі түрлері жиек және бұрандалы болып табылады

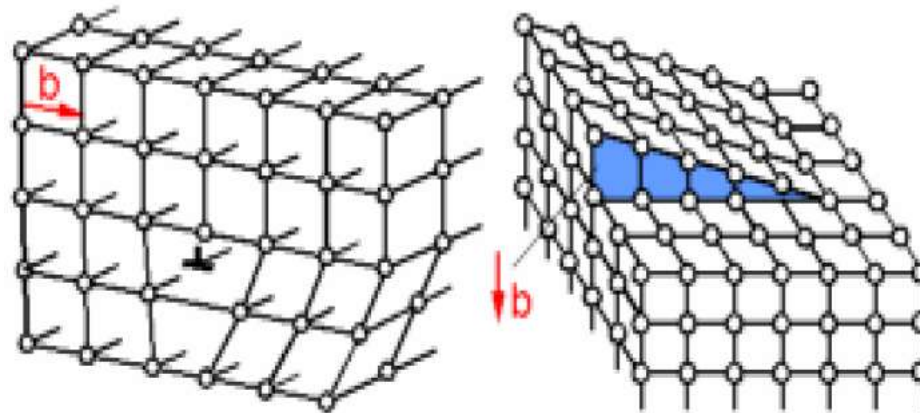
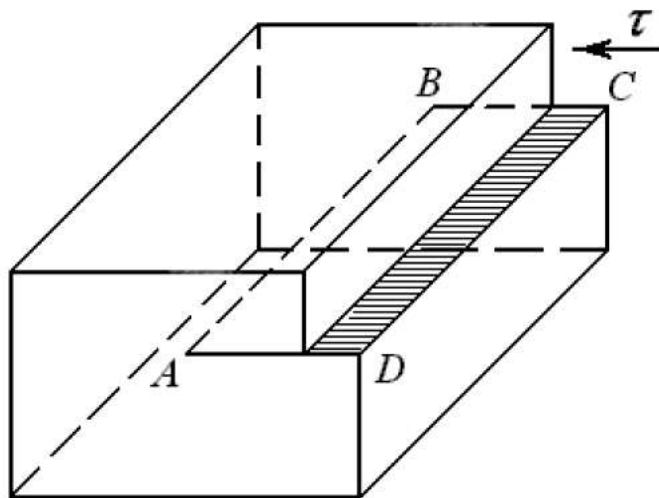


Рис. 4. Краевые (а) и винтовые (б) дислокации

Сызықты ақаулар

- Жиекті дислокациялар – толық емес атомдық жазықтықтың шекаралары. Мұндай дислокация ортасында тор параметрі өзгерген қашықтықтардың тұратын жазықтық болады. Бұрандалы дислокацияны түсіну үшін төмендегі параллелепипедті қарастыруға болады, оның жоғарғы бөлігі төменгі бөлікке қатысты атомаралық қашықтыққа ығысқан. Бұл жағдайда ығысу сырғанау жазықтығының бір бөлігін ғана жауып тұр. Мұнда ABCD – ығысу болған сырғанау жазықтығының кесіндісі, AB – осы қиманың шекарасы.



- Дислокации теориясын қарастыру кезінде **Бюргерс контуры** және *Бюргерс векторы* ұғымдары жиі қолданылады. Бюргерс контуры - бұл бұрмаланбаған материал аймағындағы кристалда сызылған және сызықтық тор ақауын қамтитын жабық контур.
- А суретте идеал кристалдағы Бюргерс контуры көрсетілген, Б суретте дислокациясы бар тордағы контур.

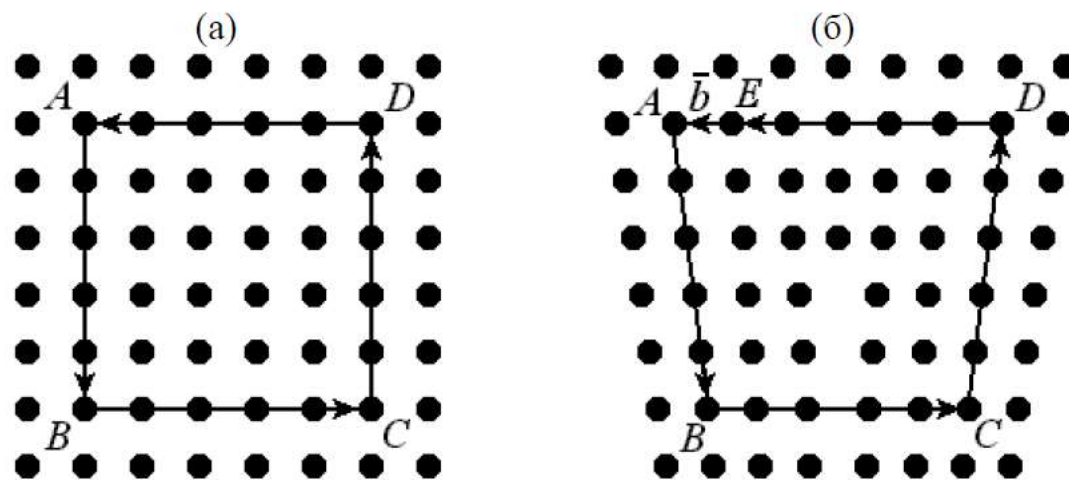
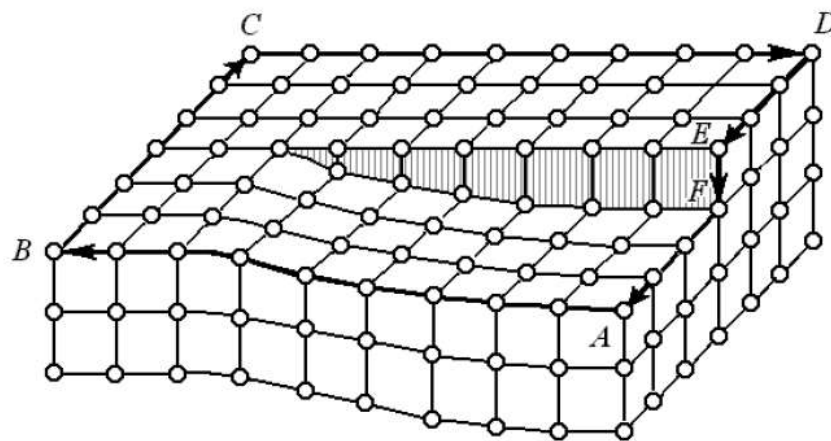


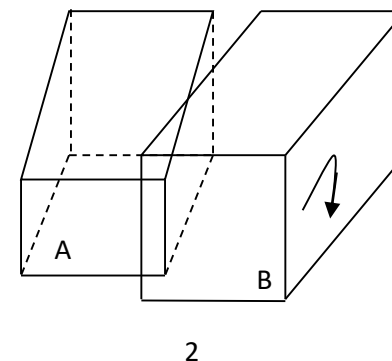
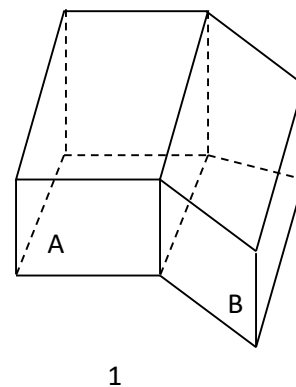
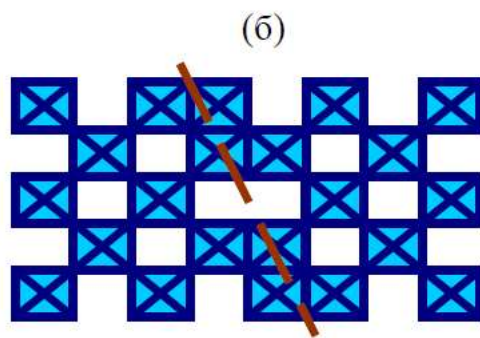
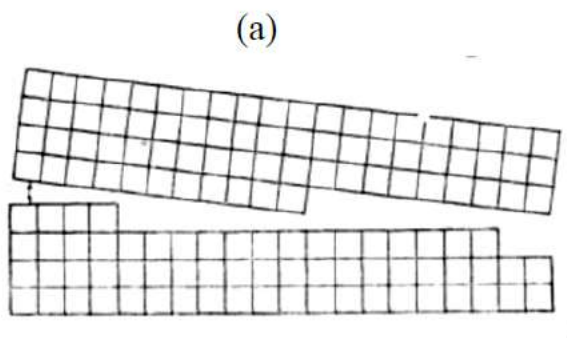
Рис. 6. Контур Бюргерса в совершенном кристалле (а) и кристалле, имеющем линейный дефект (б)

- Суретте көріп тұрғандай бұрандалы дислокация Бюргерс контурын салу үшін, тірек нүктесі ретінде А түйіні алынады. Бұранда дислокациясы бар кристалдың беті бойымен ретімен қозғалып, контурды тұрғызайық. Бұл жағдайда Е позициясына жеткенде, бастапқы А нүктесіне оралу үшін бір атомаралық қашықтыққа (EF) төмен жылжу қажет болады.



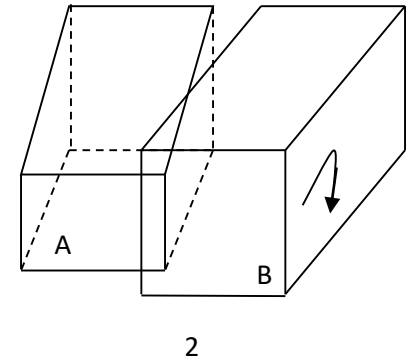
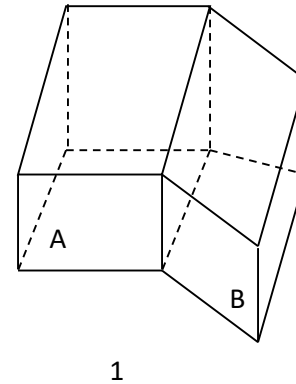
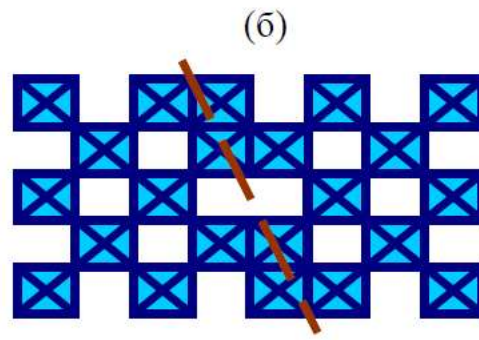
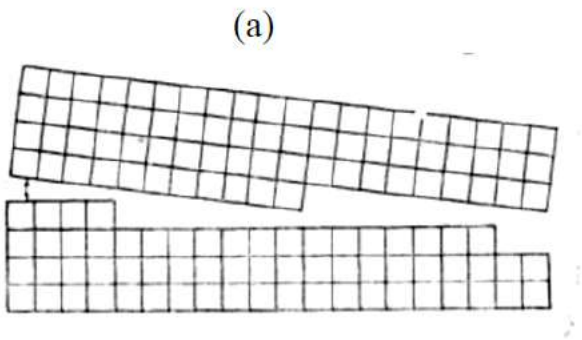
Беттік ақаулар

- Мұндай ақаулар тек бір өлшемде шағын және тор параметрінен бірнеше есе үлкен екі өлшемдерге ие. Оларға түйін шекаралары (границы зерен) кристалдық егіздер (двойники), мозаикалық блоктар, қабаттасудың ақаулары және кристалдың өзі жатады.
- А суретте түйін шекаралары және Б суретте кристалдық ығысудың құрылымы көрсетілген.
- Әдеттегі металдар полкристаллдардан тұратындықтан монокристаллдар арасында шекаралар болуы мүмкін. 1 суретте түйін шекарасын түсіндіруге арналған схема көрсетілген. Мұнда бір түйіннің екіншісіне қатысты шекара жазықтығында жатқан ось бойымен айналуы көрініп тұр. Екі кристалдың жабысқан жері *жиекті дислокациялардың* жиынтығы болады.
- Екінші схемада бір түйіннің екіншісіне қатысты шекара жазықтығында перпендикуляр ось бойымен айналуы көрініп тұр. Қабаттасу аумағында бұрандалы дислокациялар болады.



Беттік ақаулар

- Сонымен, кез келген поликристалды материалда көршілес түйіндер (зерна) бөлетін *ішкі шекаралар* (беттер) болады. Көршілес екі түйіннің (зерна) әдетте сәйкес келмейтін кристаллографиялық бағыты бар.



Радиациялық ақаулардың пайда болуы туралы алғашқы мәліметтер

Қазіргі заманғы материалдар электрондардың, жеңіл және ауыр иондардың, нейтрондардың, сәулеленудің және т.б бөлшектердің әсеріне тап болуы мүмкін. Әсіресе ядролық реакторлардың, қуатты үдеткіштердің, ғарыш аппараттарының құрылымдық элементтерінің материалдары. Материалдар үшін ядролық бөлшектермен сәулелену ізсіз өтпейді. Бұл бөлшектердің жеткілікті энергиясымен олардың материал атомдарымен соқтығысуы **радиациялық ақаулардың** пайда болуына әкеледі. Біртіндеп жинала отырып, олар материалдардың қасиеттерін өзгертеді. Бұл процестің өзіндік ерекшеліктері бар және оны басқа жолмен қайталауға болмайды. Металдарда радиациялық ақаулардың пайда болуы әдетте екі кезеңге бөлінеді – бірінші және екінші ретті. Бірінші ретті актта атом кристал түйінінен шығып вакансия және түйінаралық атомдар пайда болады.

Екінші сатыға нүктелік ақаулардың кешендерге қосылуы, таусылған (обедненных) аймақтардың, дислокациялық ілмектердің қалыптасуы және т.б жатады.

Радиациялық ақаулардың пайда болуы туралы алғашқы мәліметтер

Металға ұшып бара жатқан атқылаушы бөлшек кристалдық тордың атомдарымен әрекеттеседі. Бұл әрекеттесу екі жақты сипатта болуы мүмкін - *серпімді емес және серпімді*. Серпімсіз әрекеттесу кезінде атомдардың ионизациясы немесе ядролық реакция жүреді. Металдағы ионизация процесі тез бейтараптанады, ал ядролық реакция кезінде кез келген бөлшектің бөлінуімен жаңа ядро түзілуі мүмкін. Серпімді әрекеттесу кезінде белгілі бір кинетикалық энергия матрица атомының ядросына (демек, жалпы атомға) беріледі. Егер оның мәні жеткілікті болса, яғни тордағы атомдардың байланыс энергиясынан үлкен болса, ол кристалдық тордағы орнындағы ығыстырылып, берілген импульс бағытына қарай ығысады.

Радиациялық ақаулардың пайда болуы туралы алғашқы мәліметтер

Энергиясы бірнеше МэВ ауыр зарядталған бөлшек (протон, ион) металл арқылы өте отырып, өз энергиясын серпімсіз әрекеттесулерге жұмсайды, тек анда-санда тор атомдарын ығыстыруы мүмкін. Егер тасымалданатын энергиясы E_1 тор энергиясынан E_d әлдеқайда көп болса, ал ығысқан атомдар жақын маңдағы түйінаралық позицияларда тұрып қалмайды, тор бойымен айтарлықтай қашықтыққа жылжиды. Мұндай атомдар **бірінші кезекте ұшқан атомдар (первично выбитые атомы)** деп аталады. Қозғалыс барысында бірінші кезекте ұшқан атомдар (БҰА) жаңа атомдарды орындарынан ығыстырып, екінші, үшінші және т.б. ретті үрдістерді туғызады.

- Бірнеше осындай бірінші кезекте ұшқан атомдардың ығысуын (БҰА) **каскадты ығысулар** (каскадные смещения) деп атайды.
- Каскадтар энергиямен E' және ығысқан түйінаралық атомдар санымен сипатталады, ол каскадтық функция деп аталады. Бірінші жуықтауда бұл мәнді американдық физиктер Кинчин мен Пиз шығарған қарапайым қатынас арқылы анықтауға болады:

$$\nu = k \frac{E'}{2Ed} \quad k = 0,7 \div 0,8.$$

- Металда бірте-бірте баяулай отырып, өз жолының соңында атқылаушы бөлшек соңғы ығысуды жасайды және тоқтайды. Онда ол кептеліп қалады және тор үшін бейтарап бөгде атомға айналады. Бұл жағдайда бөлшектің өзі де кез келген қоспа атомы сияқты ақауға айналады. Осылайша, атқылаушы бөлшектің жолында атомдық **ығысу каскадтары** дамиды.

Әрбір бірінші кезекте ұшқан атомдар (БҰА) екінші, үшінші және т.б. ығысулардың тұтас тізбегін (каскадты) БҰА –ның энергиясы E_d -ге дейін төмендегенше түзе береді. Ығысуды қалыптастыру үшін шектік энергия E_d шамамен 25 эВ. Кинчин-Пиза моделіне сәйкес, энергиясы $E < E_i$ бар БҰА $\nu = E/E_d$ Frenkel жұптарын түзеді. Осылайша, t мезгіл уақытта материал бірлік көлемінде ығысулардың саны келесі түрде анықталады:

Мұндағы N_0 бірлік көлемдегі атомдар саны, ϕ нейтрондардың ағыны, σ микроскопиялық қима,

$$d = N_0 \phi \sigma \nu t.$$