

## МЕХАНИЗМЫ, ЛИМИТИРУЮЩИЕ ПОДВИЖНОСТЬ ПЕРЕНОСЧИКОВ ВЕЩЕСТВА В МОДЕЛИ ЭФФЕКТА ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ

© 2016 г. А.В. МАРКИДОНОВ

Филиал Кузбасского государственного технического университета, г. Новокузнецк  
e-mail: markidonov\_artem@mail.ru

Эффект дальнего действия заключается в изменении структуры и свойств твердых тел на глубинах, значительно превышающих область первичного выделения энергии, при взаимодействии энергетических потоков с поверхностью твердых тел. Первоначально эффект дальнего действия был связан с ионной имплантацией, играющей первостепенную роль при изготовлении электронных приборов. Но ионная имплантация применяется не только в качестве инструмента модификации полупроводников, но и при обработке металлов и сплавов. Оказалось, что в данном случае также наблюдается эффект дальнего действия. Большой объем экспериментальных и теоретических данных, подтверждающих описанное выше явление, проанализирован в обзорах [1-3]. Из данного анализа следует, что накопление и распределение радиационных дефектов на расстояниях, превосходящих глубину пробега имплантированного иона, осуществляется даже при низкоэнергетическом облучении.

Теоретические попытки объяснения эффекта дальнего действия свелись к созданию различных моделей, одна из которых получила название ударной [4, 5]. Данная модель базируется на представлениях о создаваемых плотными каскадами соударений упругих волнах, которые либо непосредственно перемещают точечные дефекты вглубь материала [6], либо могут вызывать возбуждение скоплений точечных дефектов и уход их на внутренние и внешние стоки [7]. Кроме того, волны могут инициировать другие процессы в подсистеме дефектов структуры, снижающие ее суммарную свободную энергию. Для данной модели распределение измеряемого параметра во многом зависит от массы падающих ионов. Основная трудность при использовании ударной модели для объяснения эффекта дальнего действия заключается в том, что энергии упругой волны, создаваемой тепловым пиком, после прохождения нескольких десятков микрометров становится недостаточно, чтобы вызывать заметные структурные изменения. Поэтому предполагаются различные механизмы усиления упругих волн за счет, например, суперпозиции волн от отдельных ионов или резонансных явлений при совпадении частоты упругой волны с частотой тепловых колебаний точечных дефектов [8].

Существует еще одна схожая модель, предложенная в работе [9], авторы которой после детального анализа экспериментальных данных выдвигают две гипотезы образования дефектов на больших глубинах: либо перенос самих дефектов вглубь образца за счет различных механизмов взаимодействия, либо перенос энергии в виде упругих колебаний на большие расстояния и последующее образование дефектов за счет перенесенной туда энергии, которая, локализуясь на больших глубинах, инициирует процессы дефектообразования. Таким образом, придерживаясь второй гипотезы, можно предположить, что энергия, перенесенная на значительные глубины в виде потенциальной энергии дефекта, может трансформироваться у противоположной поверхности образца или у границы зерен в энергию упругой волны, которая способна вызвать образование дефектов у поверхности. В соответствии с этими предположениями поверхность может являться источником точечных дефектов. Возможно, и другие протяженные дефекты также являются источником вторичных точечных дефектов.

Для уточнения описанных выше моделей требуется выявить дефекты кристаллической структуры, являющиеся потенциальными переносчиками энергии, которые могут мигрировать на значительные расстояния под воздействием упругих волн в твердом теле, подвергнутому облучению и инициировать образование вторичных волн. Актуальность решения данной задачи обусловлено тем, что на сегодняшний день отсутствует полное понимание эффекта дальнего действия. На роль таких несовершенств, требования к которым описаны выше, по-видимому, могут претендовать множественные межузельные атомы, образующие краудионные комплексы, исследование которых было выполнено авторами в работах [10-13]. Целью данной работы является выявление механизмов диссипации рассматриваемых дефектных образований, что позволит в дальнейшем спрогнозировать процесс их возможной миграции.

Рассматриваемые в работе процессы отличаются высокой скоростью протекания, что затрудняет прямые наблюдения. Поэтому наиболее рациональным видится использование методов компьютерного моделирования. В качестве метода компьютерного моделирования был выбран метод молекулярной динамики, в связи с тем, что он позволяет проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и описывать динамику исследуемых процессов в реальном времени. Исследование проводилось с помощью авторской разработки [14], при этом использовалась расчетная ячейка, имитирующая трехмерный кристаллит алюминия, состоящая из 30000 атомов. Ориентация расчетной ячейки задавалась следующим образом: ось  $X$  была направлена вдоль кристаллографического направления  $\langle 1-10 \rangle$ , ось  $Y$  – вдоль  $\langle 11-2 \rangle$ , а  $Z$  –  $\langle 111 \rangle$ . Поверхностные эффекты исключались использованием периодических граничных условий.

Взаимодействие между атомами описывалось с помощью парного потенциала Морзе. Значение параметров потенциала брались из [15]. Температура расчетной ячейки задавалась через начальные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. Направление скоростей задавалось случайно, но с условием, что суммарный импульс атомов равнялся нулю.

В начале компьютерных экспериментов в расчетной ячейке создавался краудионный комплекс, ориентированный вдоль плотноупакованного направления  $\langle 1-10 \rangle$ , путем внедрения межузельных атомов в соответствующие атомные ряды. После этого следовала процедура структурной релаксации расчетной ячейки путем многократного обнуления скоростей атомов, в результате чего система приходила в состояние с локальным минимумом потенциальной энергии.

Ранее проведенные исследования [10-13] показали, что при создании волн в расчетных ячейках, содержащих скопления межузельных атомов, они инициирует перестройку межузельных атомов в ориентированные по ходу распространения волны комплексы краудионов. Последующие волны могут вызывать смещения таких образований. Особенностью краудионных комплексов является их высокая стабильность. Подобные скопления межузельных атомов не распадаются на отдельные компоненты даже при температурах, близких к температуре плавления. Кроме того, под действием ударных волн они могут смещаться со сверхзвуковыми скоростями и на достаточно большие расстояния. Особенностью данного режима движения является возможность безаннигиляционного преодоления комплексами одиночных вакансий, упругих полей кластеров вакансий, а также, при определенных условиях, и малоугловых зернограничных областей, что делает их потенциальными переносчиками вещества вглубь материала при радиационном воздействии. В связи с этим, краудионные комплексы могут рассматриваться в рамках ударной модели, объясняющей эффект дальнего действия.

Перейдем к рассмотрению процессов, лимитирующих подвижность краудионных комплексов. Рассматриваемые механизмы используются в теории дислокаций, но могут быть использованы при описании любого источника упругого поля [16]. Кроме того, краудионные комплексы могут рассматриваться как фрагменты дислокационных петель, и, следовательно, применяемый подход вполне оправдан. Краудионы в кристалле могут мигрировать из-за наличия напряжений в кристалле или, как показано в [18], в результате прохождения по кристаллу упругой волны. Для изучения процессов миграции комплексов в проводимых компьютерных экспериментах будем присваивать ско-

рость непосредственно краудионам, а точнее группе атомов, образующих ядро краудионного комплекса. Необходимо отметить, что при движении краудиона в кристаллической решетке ему необходимо преодолевать барьеры Пайерлса-Набарро, связанные с периодическим строением кристалла. Данные потенциальные барьеры, разделяющие соседние равновесные положения краудиона, невелики, что позволяет ему легко смещаться вдоль плотноупакованных направлений. Упругая деформация, создаваемая центром краудиона, в основном затрагивает атомы того ряда, в котором он расположен, поэтому энергия активации миграции в данном плотноупакованном ряду мала. Медленно движущиеся краудионы преодолевают потенциальные барьеры с помощью термических флуктуаций. При увеличении скорости, кинетическая энергия краудионов достигает высоты потенциальных барьеров и происходит их динамическое преодоление. В данном случае торможение краудиона осуществляется в результате оттока энергии к различным элементарным возбуждениям в кристалле. Так как атомы одиночного краудиона располагаются вдоль направления с минимальным периодом решетки, то допускается пренебрежение взаимодействием с соседними атомами по сравнению с взаимодействием между атомами, образующими краудион [17], но для краудионного комплекса, по-видимому, такое допущение не приемлемо. Движение комплекса в периодическом потенциале, связанном с дискретностью кристалла, приводит к изменению упругого поля, и, как следствие, излучению фононов или упругих волн. Данный механизм получил название радиационного торможения. При высоких скоростях, когда кинетическая энергия краудионов значительно превосходит потенциальные барьеры, наличие периодического поля приводит к незначительным возмущениям равномерного движения комплекса, и радиационное трение убывает пропорционально квадрату скорости [18].

Подобный механизм торможения краудионного комплекса реализуется при наиболее низких температурах, когда вымораживаются фононные эффекты. Повышение температуры приводит к появлению фононного ветра, который обусловлен асимметрией потока фононов, рассеивающихся на динамическом краудионном комплексе. Импульс, передаваемый фононами краудионам, пропорционален их скорости и направлен в противоположную сторону движения комплекса. При возрастании температуры до дебаевской и выше, начинает проявляться эффект релаксации «медленных» фононов. Вклад данного механизма соизмерим с вкладом фононного ветра.

Необходимо отметить также, что при сверхзвуковом режиме движения краудионов возможно черенковское излучение фононов [19], что, по-видимому, является еще одним механизмом динамического торможения краудионных комплексов, но его исследование выходит за рамки данной работы.

Таким образом, краудионные комплексы, движущиеся со сверхзвуковой скоростью, являются объектами, обладающими целым рядом интересных свойств. Возможность преодоления точечных дефектов, межзеренных границ и упругих полей кластеров дефектов с минимальными энергетическими потерями позволяет рассматривать данные образования как один из возможных транспортов вещества вглубь объема облученного материала. Кроме этого, возможность генерации вторичных ударных волн при встрече со структурными несовершенствами кристаллической решетки позволяет рассматривать краудионные комплексы в рамках уже существующих моделей, описывающих эффект дальнего действия и акустическую эмиссию. Еще одной важной особенностью данных динамических дефектных образований является снижение энергетических потерь при преодолении потенциальных барьеров при миграции в кристалле.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пивоваров А.Л. Эффект дальнего действия при облучении металлов ионно-плазменными потоками // *Металлофизика и новейшие технологии*. - 1994, т.16, №12, с. 3-17.

2. Серов И.Н., Марголин В.И., Жабреев В.А., Тупик В.А., Фантиков В.С. Эффекты дальнего действия в микро- и наноразмерных структурах // Инженерная физика. – 2005, №1, с. 50-67.
3. Хмелевская В.С., Малышкин В.Г. Эффект дальнего действия и коллективные процессы в металлах // Вестник ННГУ. - 2003, №1, с. 173-182.
4. Алалыкин А.С., Крылов П.Н., Шинкевич М.В. Эффект дальнего действия в полупроводниках // Вестник Удмуртского университета. - 2005, №4, с. 141-152.
5. Кривелевич С.А. О выборе параметров порядка при описании дальнего действия влияния ионной имплантации // Вестник ННГУ. - 2003, №1, с.144-151.
6. Перевоицков В.А., Скупов В.Д. Влияние облучения высокоэнергетическими альфа-частицами на свойства тонких слоев диоксида кремния // Тезисы докладов IV Всероссийской конференции по модификации свойств конструкционных материалов пучками заряженных частиц. – Томск, 1996, с. 346–348.
7. Оболенский С.В., Скупов В.Д. Эффект дальнего действия при радиационных воздействиях на полупроводниковые структуры с внутренними границами раздела // Поверхность, синхротронные и нейтронные исследования. - 2000, №5, с. 75-79.
8. Перевоицков В.А., Скупов В.Д. Влияние облучения  $\alpha$ -частицами структур  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  // Неорганические материалы. - 1998, т.34, №9, с. 1145-1147.
9. Мартыненко Ю.В., Московкин П.Г. Эффект дальнего действия и перенос энергии в твердых телах при ионной бомбардировке // Неорганические материалы. - 1998, т.34, №9, с.1142-1144.
10. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Медведев Н.Н., Неверова Т.И., Барчук А.А. Поведение краудионов и их комплексов в слабоустойчивом состоянии материалов // Известия ВУЗов. Физика. - 2011, №11, с. 61-67.
11. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Тихонова Т.А., Барчук А.А. Механизмы трансформации краудионных комплексов при прохождении продольной волны // Нелинейный мир. - 2011, т.9, №12, с. 826-835.
12. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Барчук А.А., Бовкуш С.В. Особенности динамики краудионов в кристаллах с ГЦК решеткой при различных силовых воздействиях // Химическая физика и мезоскопия. - 2012, т.4, №1, с. 46-54.
13. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. – Кемерово: Кузбассвуиздат, 2014 – 191 с.
14. Маркидонов А.В., Яшин А.В., Чаплыгина А.А., Саница Н.В. Моделирование распространения ударных волн в нанобъектах методом молекулярной динамики (ВОЛНА). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013661857 от 17.12.2013.
15. Полетаев Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах / Автореф. дисс. на соиск. уч. ст. д.ф.-м. н. Барнаул, 2008. – 40 с.
16. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций // Успехи физических наук. - 1975, т.115, Вып.1, с. 3-39.
17. Пушкаров Д.И. Квантовая теория краудионов при низких температурах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. - 1973, т.64, Вып.2, с. 634-642.
18. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамика дислокаций // В кн. Проблемы современной кристаллографии. – М.: Наука, 1975. с. 218-238.
19. Пушкаров Д.И. Излучение фононов солитонами в кристаллах при низких температурах // III Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. Дубна. - 1984, т.2, с. 205–210.