

05;10;12

Влияние изменения плотности твердого тела на диффузионную подвижность атомов при облучении мощными наносекундными пучками заряженных частиц

© Г.А. Блейхер, В.П. Кривобоков, О.В. Пащенко, С.Н. Янин

Научно-исследовательский институт ядерной физики, Томск

Поступило в Редакцию 23 июля 1997 г.

Теоретически исследовалось поведение коэффициента диффузии металла, имеющего неравновесную плотность в результате воздействия мощных наносекундных потоков излучения. Показано, что уменьшение плотности образца в результате термомеханических процессов приводит к существенному усилению диффузионной подвижности атомов.

В экспериментах по перемешиванию тонких пленок под действием мощных наносекундных потоков энергии наблюдается очень высокая подвижность атомов с эффективными коэффициентами диффузии на уровне $10^{-2} - 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$, что на несколько порядков превышает коэффициенты диффузии в жидких металлах. Это явление было зафиксировано для ионных (например, [1]), электронных [2] пучков, а также импульсного лазерного излучения [3].

Для объяснения этого явления рассматривались такие механизмы миграции атомов, как диффузия и термодиффузия в расплавленном поверхностном слое образца, гидродинамическое перемешивание, сегрегация примеси в движущемся фронте затвердевания [4]. Однако этот список нельзя считать исчерпывающим — расчеты переноса атомов по рассмотренным механизмам дают, как правило, заниженный по сравнению с экспериментом результат. Поэтому необходим поиск других каналов переноса вещества при воздействии концентрированных импульсных потоков излучения.

Воздействие мощных наносекундных пучков порождает в твердом теле интенсивные термомеханические процессы, в результате которых

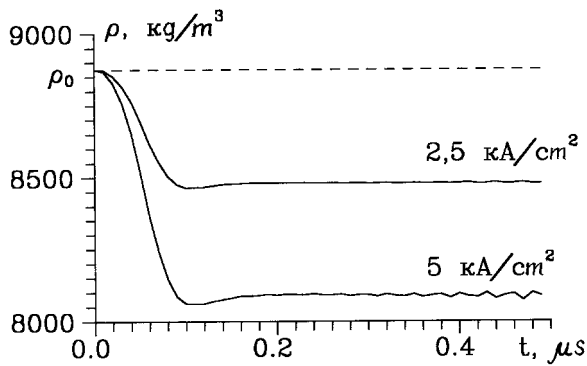


Рис. 1. Эволюция плотности вблизи поверхности медного образца, облучаемого электронным пучком с энергией частиц 0.5 MeV и длительностью импульса 100 ns при разной плотности тока.

вещество в течение микро- и даже миллисекунд имеет плотность ρ , отличающуюся от нормальной ρ_0 на единицы-десятки процентов [5] (рис. 1). Изменение плотности должно повлечь за собой изменение диффузионных характеристик материала. В настоящей работе предпринято теоретическое изучение поведения коэффициента диффузии жидкого металла в условиях неравновесной плотности.

Для этого было выполнено молекулярно-динамическое моделирование диффузионных процессов на примере самодиффузии алюминия.

Использовался потенциал межатомного взаимодействия, полученный на основе метода псевдопотенциала с использованием форм-факторов Хейне–Абаренкова–Анималу. Расчетный кристаллит имел форму куба и состоял из $N = 2048$ подвижных атомов. На всех гранях задавались периодические граничные условия. Температурная зависимость постоянной ГЦК решетки алюминия в диапазоне температур 1000–2500 К определялась выражением $a(T) = a(T_{mel})^3 \sqrt{1 + \beta(T - T_{mel})}$, где $T_{mel} = 934$ К — температура плавления, $\beta = 0.113 \cdot 10^{-3}$ 1/К — коэффициент объемного расширения. Величина постоянной решетки при температуре плавления $a(T_{mel})$ для используемого потенциала была рассчитана с использованием метода искусственного демпфирования и составила 0.42456 nm, что соответствует плотности вещества $\rho_0(T_{mel}) = 2.362$ g/cm³. Для задания

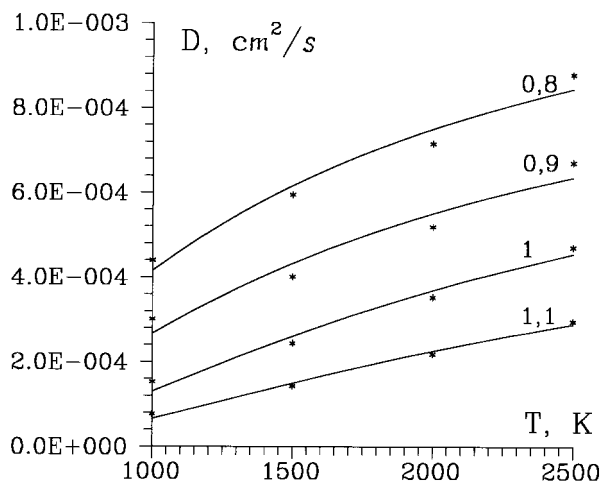


Рис. 2. Рассчитанные методом молекулярной динамики зависимости коэффициента самодиффузии жидкого алюминия от температуры и плотности.

температуры T каждому атому приписывалась скорость в соответствии с распределением Максвелла. Затем решались уравнения движения атомов до момента установления статистического равновесия между потенциальной и кинетической энергиями системы ($\sim 10^{-13}$ s). Только после этого начинался расчет диффузионных характеристик.

В процессе моделирования рассчитывалось среднеквадратичное смещение атомов

$$\langle R^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (R_i(t) - R_0(0))^2,$$

где $R_i(t)$ — положение i -го атома в момент времени t . Приблизительно через 10^{-12} s зависимость $\langle R^2(t) \rangle$ становится линейной, что позволяет вычислить коэффициент диффузии D по формуле

$$D = \langle R^2 \rangle / 6t.$$

Для проверки модели вычисления производились сначала для равновесной плотности жидкого алюминия. Полученные значения коэффициента самодиффузии жидкого алюминия (см. рис. 2 и таблицу) хорошо

Зависимости предэкспоненциального множителя и энергии активации диффузии от плотности алюминия, рассчитанные на основе данных молекулярно-динамического моделирования.

ρ/ρ_0	$D_0, \text{cm}^2/\text{s}$	E_a, eV
0.8	$1.36 \cdot 10^{-3}$	0.102
0.9	$1.13 \cdot 10^{-3}$	0.125
1.0	$1.05 \cdot 10^{-3}$	0.180
1.1	$7.76 \cdot 10^{-4}$	0.213

соответствуют экспериментальным данным [6], что свидетельствует о корректности разработанной модели.

Результаты вычисления коэффициента диффузии при различных температурах и плотностях алюминия приведены на рис. 2. Звездочками обозначены точки, полученные в результате молекулярно-динамического моделирования, сплошными линиями — полученная с использованием метода наименьших квадратов аппроксимация выражением Аррениуса

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right),$$

где D_0 — предэкспоненциальный множитель, E_a — энергия активации диффузии (см. таблицу).

Таким образом, факты свидетельствуют, что уменьшение плотности облучаемого образца в результате термомеханических процессов приводит к существенному усилению диффузионной подвижности атомов, главным образом за счет уменьшения энергии активации диффузии. Поскольку вещество на поверхности в течение микро- и миллисекунд находится в разреженном состоянии [2], рассмотренный механизм дает ощутимый вклад в усиление диффузионного и термодиффузионного потоков, пропорциональных значению коэффициента диффузии.

Подводя итоги, можно сказать, что перенос атомов на поверхности твердого тела при воздействии мощных наносекундных потоков излучения является сложным процессом, протекающим по нескольким каналам. Только комплексный учет всех каналов переноса позволит создать математическую модель, количественно описывающую это явление.

Список литературы

- [1] Диденко А.Н., Кривобоков В.П. // ЖТФ. 1988. Т. 58. В. 10. С. 2002–2009.
- [2] Bataglin G., Garnera A., Donna dalle Rose L.F., Mazzoldi P., d'Anna E., Leggiery G., Luches A. // Thin Solid Films. 1986. V. 145. P. 147–160.
- [3] Miotello A., Donna dalle Rose L.F., Desalvo A. // Appl. Phys. Lett. 1982. V. 40 (2). P. 135–137.
- [4] Кривобоков В.П., Пащенко О.В., Сапульская Г.А. // ЖТФ. 1994. Т. 64. В. 5. С. 37–42.
- [5] Кривобоков В.П., Пащенко О.В., Сапульская Г.А. // Изв. вузов. Физика. 1993. № 12. С. 37–41.
- [6] Вилсон Д.Р. Структура жидких металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1972. 248 с.