

01

Диффузия трансмутационного изотопа в керамике YBaCuO

© Р.Ш. Малкович

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
E-mail: malkovich@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 7 июня 2004 г.

Выполнен математический анализ диффузии трансмутационного изотопа, созданного в керамике YBaCuO облучением высокоэнергетичными заряженными частицами. Модель основана на предположении, что изотоп, создаваемый в приповерхностной области зерен керамики, при отжиге выходит в межзеренные прослойки и по ним быстро диффундирует в глубь материала, проникая при этом в объем зерен.

При облучении твердого тела высокоэнергетичными заряженными частицами в нем создается локальный источник радиоактивной трансмутационной примеси [1]. В работе [2] этот источник был использован для исследования диффузии трансмутационного изотопа меди в керамике YBaCuO. Полученные при этом значения коэффициента диффузии оказались, однако, существенно меньше значений, найденных с использованием уравнения Фика традиционным способом — из слоя меди, нанесенного на поверхность керамики.

Указанное противоречие было качественно интерпретировано в рамках предложенной в работе [2] модели, согласно которой трансмутационный изотоп создается преимущественно в зернах керамики, откуда при отжиге он выходит в межзеренные прослойки и по ним быстро диффундирует в объем керамики, проникая при своем движении в зерна. Лимитирующей стадией процесса является при этом медленная диффузия в объеме зерен. Напротив, при диффузии из слоя, нанесенного на поверхность, примесь сразу поступает в межзеренные прослойки и быстро диффундирует по ним, одновременно проникая в объем зерен. Настоящее сообщение посвящено математическому анализу процесса миграции трансмутационного изотопа в керамике YBaCuO.

По аналогии с представлениями Фишера [3] мы рассматриваем керамику как полубесконечное тело $x \geq 0$, разделенное на две части тонкой

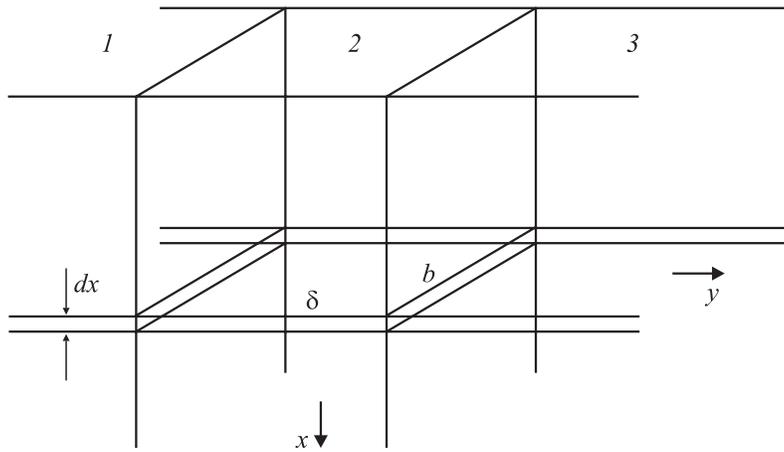


Рис. 1. Схема модели диффузии в керамике YBaCuO: 1,3 — зерно, 2 — прослойка.

плоской прослойкой, перпендикулярной плоскости $x = 0$. Мы считаем, что скорость диффузии в прослойке намного выше, чем в самом теле. Мы считаем также, что диффузия в прослойке сопровождается уходом примеси в тело (в зерна). Используются важные допущения, что скорость диффузии в прослойке очень велика, а толщина прослойки δ весьма мала, так что градиент концентрации примеси поперек прослойки, в направлении y , отсутствует и концентрация примеси по сечению прослойки постоянна. Таким образом, диффузия в прослойке носит одномерный характер. Учитывая большую скорость диффузии в прослойке, мы также пренебрегаем диффузией примеси в зерне в направлении x , т.е. мы считаем, что диффузия примеси в зерне также носит одномерный характер и происходит только в направлении y . Мы предполагаем далее, что зерна одинаковы, а коэффициенты диффузии в зерне D и в прослойке D_1 постоянны. Считается также, что как в зерне, так и в прослойке выполняется закон Фика. Граница зерно–прослойка считается неподвижной. Используя указанные допущения, запишем уравнения, описывающие диффузию в зерне и в прослойке, а также условие на границе зерно–прослойка ($y = 0$).

Рассмотрим элемент объема прослойки $b\delta dx$ (рис. 1), концентрация примеси в котором $c(x, t)$. Из этого элемента объема примесь проникает в зерно, но и из зерна примесь также поступает в этот элемент объема. Поскольку концентрация примеси в этом элементе объема благодаря высокой скорости диффузии и малой толщине прослойки по всему сечению x одинакова, естественно считать, что количество примеси dQ_c , проникающей за время dt в оба зерна через границу площадью $b\delta x$, будет пропорционально общему количеству примеси в элементе объема:

$$dQ_c = gc(x, t)b\delta dx dt, \quad (1)$$

где g — коэффициент пропорциональности.

Далее мы считаем, что количество примеси dQ_s , покидающей оба зерна и переходящей за время dt в прослойку через границу площадью $b\delta x$, пропорционально концентрации примеси в зерне $S(x, 0, t)$ в сечении x на границе $y = 0$:

$$dQ_s = 2kS(x, 0, t)b\delta x dt, \quad (2)$$

где k — коэффициент пропорциональности.

Учитывая, что изменение количества примеси в элементе объема прослойки, вызванное диффузией в прослойке, выражается соотношением

$$dQ_D = D_1 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} b\delta dx dt, \quad (3)$$

запишем

$$dQ = dQ_D + dQ_s - dQ_c, \quad (4)$$

где dQ — изменение общего количества примеси в элементе объема за время dt . Поскольку

$$dQ = dc b\delta dx, \quad (5)$$

то из соотношений (1)–(5) получаем

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + hS(x, 0, t) - gc, \quad (6)$$

где $h = 2k/\delta$. Уравнение (6) описывает диффузию в прослойке с учетом ухода примеси в зерно и проникновения примеси из зерна в прослойку.

Уравнение диффузии примеси в зерне имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S}{\partial y^2}, \quad (7)$$

где $S = S(x, y, t)$ — концентрация примеси в зерне.

При выводе граничного условия — условия на границе раздела прослойка–зерно, $y = 0$, воспользуемся предположением о балансе между количеством примеси, поступающей в граничную плоскость зерна $y = 0$ и выходящей из нее. Количество примеси dQ_0 , поступающей в эту плоскость за время dt из объема зерна через участок площадью bdx , равно:

$$dQ_0 = D \left. \frac{\partial S}{\partial y} \right|_{y=0} bdx dt, \quad (8)$$

а количество примеси dQ_c , поступающей в эту плоскость за время dt из элемента объема прослойки, выражается соотношением (1). В то же время количество примеси dQ_{s1} , покидающей граничную плоскость и переходящей в прослойку, выражается соотношением, аналогичным (2):

$$dQ_{s1} = k S(x, 0, t) bdx dt. \quad (9)$$

Используя равенство

$$dQ_0 + dQ_c = dQ_{s1}, \quad (10)$$

находим

$$-D \frac{\partial S}{\partial y} + kS(x, y, t) = g \delta c(x, t), \quad y = 0. \quad (11)$$

Соотношение (11) является обобщенным граничным условием [3], учитывающим переход примеси как из прослойки в зерно, так и из зерна в прослойку.

Другие граничные условия, использованные при решении уравнений (6) и (7), имеют вид

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = 0 \quad \text{и} \quad x = \infty; \quad \frac{\partial S}{\partial y} = 0, \quad y = \infty. \quad (12)$$

Предполагалось, что в исходном состоянии примесь в прослойке отсутствует:

$$c(x, 0) = 0, \quad x \geq 0. \quad (13)$$

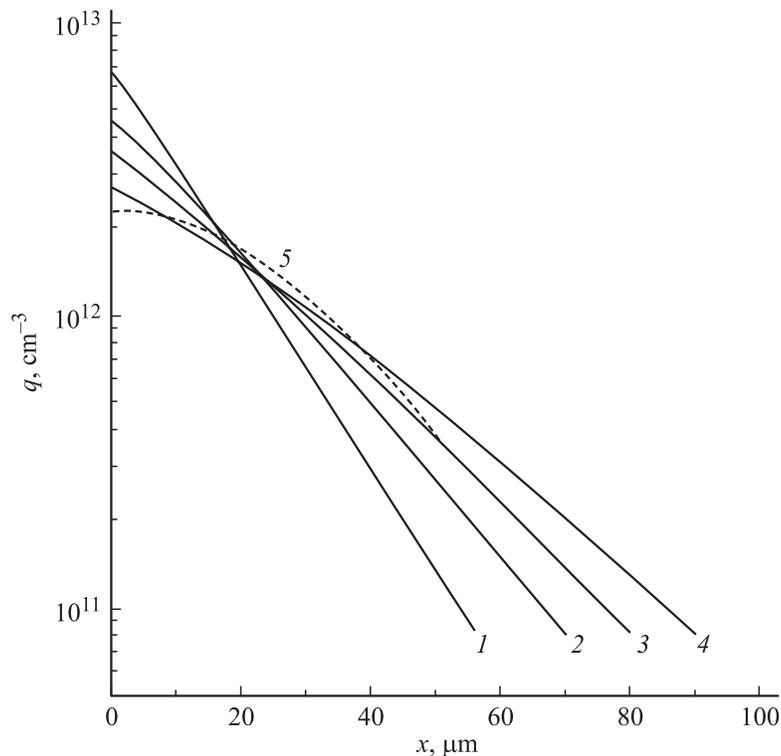


Рис. 2. Профиль объемной концентрации примеси в зерне: 1 — исходный профиль, 2–4 — расчетные данные. t, h : 2 — 2.75, 3 — 5.5, 4 — 8.25; $D = 8 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $D_1 = 3 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $g = 0.25$, $h = 0.4$. 5 — экспериментальный диффузионный профиль ^{64}Cu в YBaCuO.

Начальное условие для концентрации примеси в зерне соответствовало распределению трансмутационного изотопа меди, созданному в керамике YBaCuO в результате облучения высокоэнергетичными дейтонами [2], $S = S(x, y, 0)$, при этом для фиксированного значения $x = l$ $S(l, y, 0) = S_0(l) = \text{const}$.

Уравнения (6) и (7) с учетом граничных условий (11) и (12) и начальных условий для функций $c(x, t)$ и $S(x, y, t)$ решались методом

конечных разностей. В результате вычислений были определены концентрации примеси в зерне $S(x, y, t)$ и в прослойке $c(x, t)$, а также объемная концентрация примеси в зерне $q(x, t)$ в сечении x . Отметим, что мы пренебрегали при этом количеством примеси в прослойке, поскольку толщина прослойки предполагалась малой.

Как видно из рис. 2, со временем объемная концентрация примеси в зоне источника убывает, а в глубине тела, напротив, увеличивается. Нетрудно видеть также, что данные вычислений (кривая 4) удовлетворительно согласуются с результатами эксперимента.

Таким образом, математический анализ модели подтверждает сделанное в работе [2] предположение о том, что трансмутационный изотоп, созданный в приповерхностной области зерен керамики $YBaCuO$, при отжиге выходит в межзеренные прослойки и по ним диффундирует в глубь материала, проникая при этом в объем зерен.

Автор выражает признательность Е.А. Скорятиной за ряд ценных замечаний.

Список литературы

- [1] Дидик В.А., Козловский В.В., Малкович Р.Ш. и др. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 12. С. 19–20.
- [2] Didik V.A., Malkovich R.Sh., Skoryatina E.A. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2000. V. 160. P. 387–396.
- [3] Kaur I., Gust W. Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion. Stuttgart: Ziegler Press, 1989. (Пер. Каур И., Густ В. Диффузия по границам зерен и фаз. М.: Машиностроение, 1991. С. 33).
- [4] Малкович Р.Ш. Математика диффузии в полупроводниках. СПб.: Наука, 1999. С. 62.