

кой области значений. В таблице приведены расчетные данные для G_x^∞ , G_{ix}^∞ некоторых двух-компонентных систем.

Процессы теплообмена между неодинаково разогреваемыми излучением компонентами определяют зависимость от времени плотности поглощенной во включениях и матрице энергии $\epsilon_{1, 2}$, что в свою очередь приводит к изменениям во времени функции генерации. Характеристики акустического импульса оказываются зависимыми от соотношения между временем формирования акустического импульса t_s и характерным временем теплообмена t_T [3, 7]. Если эффективный размер включений мал и $t_T \ll t_s$, то формирование акустического импульса происходит практически при выравненных температурах включений и матрицы, тогда $\alpha \gg 1$, $G_x \approx G_x$, $G_{ix} \approx 0$. Наоборот, в случае включений больших размеров, когда $t_T \gg t_s$ и $\alpha \approx 0$, влияние эффектов гетерогенности, проявляющихся в различиях по величине компонентов тензорной функции Грюнайзена и генерации поперечной акустической волны, может быть значительно.

Автор выражает благодарность В. Т. Лазурику за постановку вопроса о генерации поперечных термоакустических волн в композитах.

Список литературы

- [1] Perry F. C. // J. Comp. Mat. 1972. Vol. 6. N 1. P. 2—12.
- [2] Давыдов А. А., Калининченко А. И., Лазурик В. Т. // Проблемы ядерной физики и космических лучей. 1984. № 21. С. 43—49.
- [3] Давыдов А. А., Лазурик В. Т. // Акуст. журн. 1985. Т. 31. С. 705—706.
- [4] Кристенсен Р. Введение в механику композитов. М.: Мир, 1982. 334 с.
- [5] Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИЛ, 1963. 247 с.
- [6] Новацкий В. Теория упругости. М.: Мир, 1975. 650 с.
- [7] Давыдов А. А., Корчиков С. Д., Лазурик В. Т. // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 9. С. 1850—1851.

Харьковский государственный университет им. А. М. Горького

Поступило в Редакцию
29 января 1990 г.

05

Журнал технической физики, т. 61, в. 3, 1997

© 1991 г.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА АТОМОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ИОННОМ ОБЛУЧЕНИИ

В. П. Кривобоков, О. В. Пащенко

Введение

При облучении твердого тела пучками ионов имеют место три взаимосвязанных процесса, приводящих к переносу атомов: распыление поверхности, баллистическое ионное перемешивание (БИП) и радиационно-стимулированная диффузия (РСД). Цель данной работы — объединить их описание с учетом взаимного влияния в рамках единой математической модели, которую можно использовать в практике прогнозирования пространственного распределения концентрации атомов при имплантации и ионном перемешивании тонкослойных металлических структур, образующих твердые растворы.

Нами предложена модель, построенная на принципе суперпозиции перечисленных процессов, которая предполагает решение системы уравнений баланса вещества типа

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - U \frac{\partial}{\partial x} \right) C_i = -\nabla (j_{bi} + j_{di} + C_i j_m) \quad (1)$$

относительно концентрации C_i . Здесь $i=1, 2, \dots, n$ — индекс каждого сорта атомов в смеси из n компонентов; U — скорость распыления; j_{bi} — плотность потока атомов i -й компоненты, переносимых в режиме БИП; j_{di} — аналогичная величина для РСД; j_m — плотность потока гидродинамического течения матрицы, вызванного нарушением равновесия плотности вещества вследствие ненулевых значений j_{bi} и j_{di} .

Таким образом, для вычисления $C_i(x, t)$ необходимо знать U, j_{bi}, j_{di} и j_m в любой момент времени в каждой точке пространства. Рассмотрим методику вычисления этих величин.

1. Скорость распыления многокомпонентного вещества со слабыми химическими связями (твердого раствора) может быть представлена следующим образом:

$$U = \frac{\Phi}{N} \sum_{i=1}^n Y_i C_i, \quad (2)$$

где Φ — плотность потока ионов; N — ядерная плотность вещества; Y_i, C_i — соответственно коэффициент распыления и относительная концентрация его i -й компоненты.

В области невысоких температур коэффициенты распыления хорошо исследованы экспериментально и могут быть взяты из работы [1].

2. Процесс БИП описывается уравнением баланса [2], которое в системе координат, связанной с распыляемой поверхностью, выглядит так:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - U \frac{\partial}{\partial x} \right) C_i = \int_z [C_i(x-z) \Sigma_i(x-z \rightarrow x) - C_i(x) \Sigma_i(x \rightarrow x-z)] dz, \quad (3)$$

где t — время; $\Sigma_i(x \rightarrow z) dz$ — вероятность того, что в результате единичного флюенса ($\Phi t = 1 \text{ см}^{-2}$) атом сорта i , находящийся на глубине x , переместится на глубину в интервале $[z, z+dz]$.

Оценке величин Σ_i в простом приближении теории Линдхарда, Шарффа и Шютта посвящена работа [3]. Нами этот метод был модифицирован расчетом пробегов падающих ионов и первично выбитых атомов, а также профилей генерации первично выбитых атомов по глубине образца по модели Брайса [4, 5].

Раскладывая подынтегральное выражение в (3) в ряд по степеням z и применяя теорему Остроградского—Гаусса, находим j_{bi} [6]

$$j_{bi} = N [V_{bi} C_i - \nabla (D_{bi} C_i)], \quad (4)$$

где V_{bi} и D_{bi} — формально введенные баллистическая скорость дрейфа и коэффициент диффузии (следует иметь в виду, что БИП не является диффузионным по своей природе)

$$V_{bi}(x) = \Phi \int_x z \Sigma_i(x \rightarrow x+z) dz \quad \text{и} \quad D_{bi}(x) = \frac{\Phi}{2} \int_x z^2 \Sigma_i(x \rightarrow x+z) dz.$$

3. Кинетика переноса в режиме РСД определяется разогревом образца в результате облучения и увеличением числа дефектов кристаллической решетки, генерируемых тормозящимися ионами. Плотность потока диффундирующих атомов описывается следующим выражением:

$$j_{di} = -N D_{di} \nabla C_i, \quad (5)$$

где D_{di} — коэффициент РСД, являющийся суммой коэффициентов диффузии по различным механизмам.

Мы сосредоточим свое внимание на диффузии по вакансиям, поскольку для растворов замещения она является доминирующей [7]. В этом случае справедливо выражение $D_{di} = f C_v D_{vi}$, где f — фактор корреляции, характеризующий отклонение направления прыжков диффундирующего атома от случайного, C_v — концентрация вакансий, $D_{vi} = C_i D_{vvi} \exp(-H_{vi}^m/kT)$ — коэффициент диффузии вакансий по атомам сорта i , D_{vvi} — предэкспоненциальный множитель, H_{vi}^m — теплота миграции вакансий, k — постоянная Больцмана, T — температура.

$C_v(x, t)$ описывается уравнением диффузии

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - U \frac{\partial}{\partial x} \right) C_v = \nabla (D_v \nabla C_v) - \frac{C_v}{\tau} + Q_v. \quad (6)$$

Здесь $D_v = \sum_{i=1}^n D_{vi}$ — суммарный коэффициент диффузии вакансий; $Q_v(x, t)$ — скорость генерации вакансий тормозящимися ионами, которая может быть рассчитана, в частности, по модели Брайса [4, 5]; $\tau(x, t)$ — среднее время их жизни. Поскольку при ионном облучении очень велика концентрация межузельных атомов и вакансий, то рекомбинация является основным механизмом их исчезновения. При этом

$$\tau = \frac{L_{dv}^2}{D_p} \approx \frac{1}{D_p} ((NC_p)^{-1/2} - R_0)^2, \quad (7)$$

где L_{dv} — длина диффузионного пути вакансии; R_0 — радиус зоны рекомбинации, принимаемый равным радиусу четвертой координационной сферы [8].

Коэффициенты диффузии по дефектам других типов могут быть рассчитаны аналогично.

4. Найдем плотность потока атомов, движущихся вследствие гидродинамического течения матрицы. Для каждого соотношения концентраций C_1, C_2, \dots, C_n существует некоторая равновесная ядерная плотность N_m . Если приписать i -му типу атомов фиксированный объем v_i , то

$$N_m = \left(\sum_{i=1}^n v_i C_i \right)^{-1}.$$

Если в результате баллистических или диффузионных процессов локальная ядерная плотность становится отличной от равновесной, то возникает гидродинамическое течение матрицы с потоком j_m [6], стремящееся вернуть систему к равновесному состоянию.

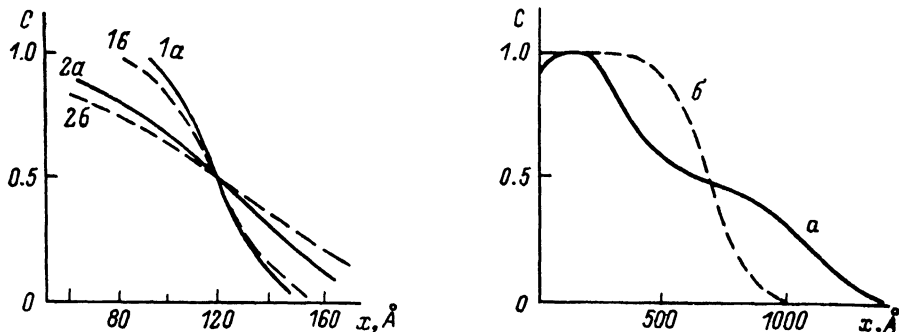


Рис. 1. Концентрационные профили меди в вольфраме после облучения пленки толщиной 120 Å ионами аргона с энергией 30 кэВ до дозы 10^{16} (1), 10^{18} ионов/см² (2).

a — экспериментальные результаты, b — расчетные кривые.

Рис. 2. Концентрационные профили титана в никеле после облучения пленки толщиной 900 Å ионами аргона с энергией 150 кэВ до дозы 10^{17} ионов/см².

a — экспериментальные результаты, b — расчетные кривые.

Найдем j_m . Изменение ядерной плотности i -го компонента ΔN_i за время Δt составит

$$\Delta N_i = - \frac{\partial j_i}{\partial x} \Delta t.$$

Здесь j_i — суммарная плотность потока атомов по всем механизмам переноса, т. е. $j_i = j_{bi} + j_{di} + C_i j_m$. С другой стороны, справедливо выражение

$$\sum_{i=1}^n \Delta N_i = \Delta N_m = \sum_{i=1}^n \frac{\partial N_m}{\partial C_i} \Delta C_i. \quad (8)$$

Подставляя N_m и ΔN_i в (8), получим уравнение, связывающее гидродинамический поток с баллистическими и диффузионными потоками всех компонентов,

$$\sum_{i=1}^n \left(1 + N_m \sum_{k=1}^n v_k \frac{\partial C_k}{\partial C_i} \right) \frac{\partial}{\partial x} (j_{bi} + j_{di} + C_i j_m) = 0, \quad (9)$$

где

$$\frac{\partial C_k}{\partial C_i} = \frac{C_k}{C_i - 1}$$

для $i \neq k$.

Таким образом, j_m не является независимым потоком, а зависит от j_{bi} и j_{di} . Система (1) теперь полностью определена. Решая ее относительно C_i , можно найти пространственное распределение атомов в твердом теле, подвергнутом воздействию ускоренных ионов.

Мы реализовали модель в виде компьютерной программы для случая бинарных смесей, которые имеют наибольшее практическое значение. Работоспособность ее проверена путем сравнения результатов расчета и экспериментов.

На рис. 1 в качестве примера приведены рассчитанные кривые $C(x)$ для меди, которая из тонкой (120 Å) пленки переносится в поликристаллический образец вольфрама под действием ионов аргона (30 кэВ, 10^{15} и 10^{17} ионов/см²) при температуре радиационного разогрева 100 °С. Здесь же представлены результаты экспериментов для аналогичных условий (пространственное распределение меди определялось методом резерфордского обратного рассеяния), опубликованные авторами [9]. Наблюдается хорошее совпадение концентрационных профилей. Оно получено и для других пар металлов, не образующих интерметаллических соединений.

К сожалению, значительное расхождение имеет место в случае растворов со стабильными фазами. На рис. 2 представлен профиль концентрации титана в никеле после облучения пленки толщиной 900 Å ионами аргона (150 кэВ, 10^{17} ионов/см²) [10]. На границе раздела образовался слой фазы NiTi толщиной около 500 Å, который на кривой $C(x)$ выглядит в виде плато. Расчетный профиль такого плато не имеет.

Это связано с тем, что в общем случае диффузионный поток j_{di} пропорционален не градиенту концентрации, а градиенту химического потенциала. При наличии химических сил в выражении для j_{di} должны появиться дополнительные члены, отвечающие за этот процесс, а кинетика диффузии будет определяться кинетикой роста фаз.

Практика применения предложенной модели для описания процессов ионного перемешивания тонких, химически не взаимодействующих слоев показала ее корректность и сравнительно небольшую трудоемкость при использовании.

Список литературы

- [1] Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бернша. М.: Мир, 1984. 335 с.
- [2] *Gras-Marti A., Jimenez-Rodriguez J. J., Peon-Fernandez J., Rodriguez-Vidal M.* // *Phil. Mag.* 1982. Vol. A45. P. 191—203.
- [3] *Sigmund P., Gras-Marti A.* // *Nucl. Instr. and Meth.* 1981. N 182/183. P. 25—41.
- [4] *Brice D. K.* // *J. Appl. Phys.* 1975. Vol. 48. N 8. P. 3385—3394.
- [5] *Ганн В. В., Юдин О. В.* // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений. 1979. № 1 (9). С. 37—42.
- [6] *Collins R., Marsh T., Jimenez-Rodriguez J. J.* // *Nucl. Instr. and Meth.* 1983. N 209/210. P. 147—156.
- [7] *Бокштейн Б. С.* Диффузия в металлах. М.: Металлургия, 1978. 248 с.
- [8] *Баллуфи Р. В., Кинг А. Г.* // Фазовые превращения при облучении / Под ред. Ф. В. Нолфи. Челябинск: Металлургия, 1989. С. 118—150.
- [9] *Бабаев В. П., Заболотный В. Т., Комиссаров А. П., Мазлин Н. А.* // Физ. и хим. обраб. матер. 1987. № 2. С. 3—7.
- [10] *Saito K., Iwaki M.* // *Nucl. Instr. and Meth.* 1985. Vol. B7/8. P. 626—631.

Научно-исследовательский институт
ядерной физики
при Томском политехническом институте
им. С. М. Кирова

Поступило в Редакцию
25 января 1990 г.