

$\neq 0$ при T ниже перехода.¹ (Величины сигналов, соответствующих R_K и $R_{норм}$ не зависели от частоты и совпадали с аналогичными величинами на постоянном токе). В таблице приведены отношения величин $U_{ост} / U_{норм}$ керамики $YBa_2Cu_3O_{7-8}$ ($U_{ост}$ - сигнал при температуре жидкого азота T_N) в зависимости от частоты.

ν , кГц	0,5	4,0	7,5	9
$U_{ост} / U_{норм}$ в %	~ 2	20	40	45

Надежность установления факта существования $U_{ост} = 0$ на переменном токе определяется отношением измеряемого сигнала $U_{ост}$ к шумовому сигналу $U_{ш}$. Для $\nu = 4$ кГц $U_{ост} \approx 2 \cdot 10^{-6}$ В, $U_{ш} = 10^{-8}$ В. Отношение $U_{ост} / U_{ш} \approx 200$. Таким образом, принятые меры по устранению наводок² и использование чувствительного малозумящего прибора с $U_{ш} \approx 10^{-8}$ В позволили надежно установить факт наличия $U_{ост} \neq 0$ на переменном токе при $T = T_N$ у исследованной нами керамики $YBa_2Cu_3O_{7-8}$.

Физический институт
им. П.Н. Лебедева АН СССР

Поступило в Редакцию
22 марта 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 9

12 мая 1989 г.

05.1

РАДИАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Р.Д. Д о х н е р

Радиационно-стимулированные процессы в многокомпонентных кристаллах определяются их структурой, параметрами составляющих их атомов (в частности, массами и размерами) и их взаимодействием. Для выяснения особенностей этих процессов проведено их моделирование на ЭВМ в двухкомпонентных кристаллах типа $NaCl$, характеризующихся простой структурой (ГЦК) подрешеток и простым межйонным взаимодействием (Кулоновским и Борн-Майеровским для ближайших соседей). Исследовались процессы радиационного

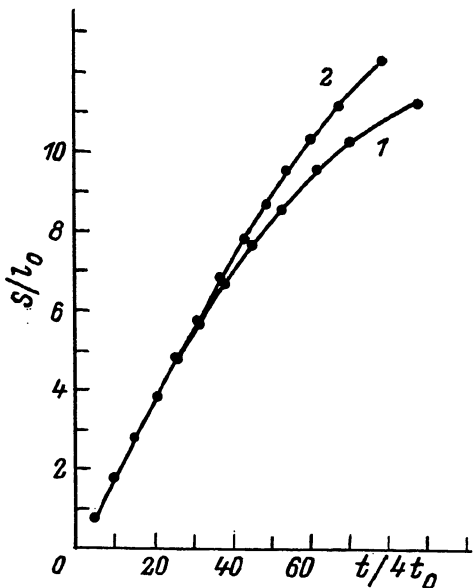
¹ Сопротивление ниже T_C при измерении на постоянном токе $= 0$ с точностью 0,1-1% (точность измерения напряжения 10^{-7} В, ток - 10 мА).

² Для контроля отсутствия наводок на каждой частоте проверялась линейная зависимость сигнала от R на омических сопротивлениях, сигнал с которых того же порядка, что и $U_{ост}$ исследуемой керамики.

Рис. 1. Кинетические кривые $S(t)$ для динамических краудионов в тяжелой (1) и в легкой (2) подрешетках (l_0 - межионное расстояние в направлении [011], t_0 - единица времени).

дефектообразования, а именно, генерации дефектов Френкеля (ДФ) по краудионно механизму, в идеальном кристалле и в кристалле, содержащем дефекты структуры (вакансии, межузельные ионы, их комплексы, дислокации).

Моделирование по методу молекулярной динамики позволяет исследовать динамику и кинетику радиационных повреждений. Изучение кинетики смещений из узлов ионов цепочки соударений дало возможность определить скорость распространения возбуждения по цепочке и исследовать кинетику динамического краудиона. Полученные кинетические кривые $S(t)$ представлены на рис. 1, где точки изображают смещения S_i в направлении оси цепочки каждого последовательного иона цепочки (i - номер иона цепочки), достигаемые в моменты времени, соответствующие уменьшению скоростей ионов v_i до их минимальных значений. Анализ этих кривых показывает, что они описывают замедленное движение с возрастающим по абсолютной величине ускорением. Определяя скорости динамических краудионов по этим кривым и зная соответствующие значения энергий краудионов, можно определить эффективные массы динамических краудионов, $m^* = \alpha m$ (m - масса иона). Так, на рис. 1 изображены результаты, полученные для краудионов, распространяющихся при малых углах вылета первично выбитого иона (ПВИ) к направлению [011] ($\alpha = 50^\circ$, при котором пороговая энергия E_d минимальна), т.е. для цепочек соударений в рядах одноименных ионов (при надпороговой энергии ПВИ); при этом кривые 1, 2 соответствуют цепочкам соударений в подрешетках с массами атомов m_1 и m_2 , причем $k = \frac{m_2}{m_1} = 2$. В этом случае получаем $\alpha = 0.6$ и $\alpha_2 = 0.9$, т.е. $k = \frac{m_2^*}{m_1^*} = 3$. Таким образом, различие в эффективных массах краудионов в различных подрешетках еще более сильное, чем различие в массах соответствующих атомов. Это приводит к понижению E_d и к повышению длины пробега краудиона L_c с уменьшением массы атомов подрешетки (рис. 2). В кристалле, облученном в напряженном состоянии, более сильные изменения E_d и L_c претерпевают в



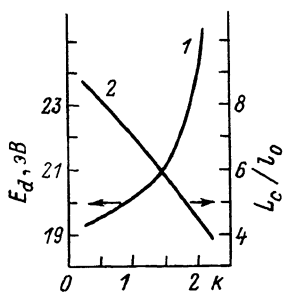


Рис. 2. Зависимость пороговой энергии E_d образования дефекта Френкеля (1) и длины пробега l_c краудиона (2) в подрешетке с массой ионов m_1 от отношения масс ионов подрешеток k .

более легкой подрешетке, т.е. в тех рядах одноименных ионов, в которых динамический краудион легче образуется, он легче и подавляется приложением внешнего напряжения.

При $m_1 = m_2$ для изолированного краудиона $\alpha = 0.35$, что хорошо согласуется со значением α , вычисленным согласно [1]. Однако характер изменения α с ростом m , описываемый в [1] и полученный при моделировании, не согласуется, по-видимому, из-за того, что в [1] не учитываются многочастичность задачи и динамические эффекты (в частности различное изменение амплитуды периодического потенциала, описывающего взаимодействие атомов цепочки соударений с соседними атомными рядами, при распространении краудиона в атомных рядах с разными атомными массами).

Полученные результаты дают возможность исследовать методом молекулярной динамики процессы генерации не только заряженной пары Френкеля ($\alpha - \Gamma$ -центры), но и нейтральной ($F - H$ -центры). Если рассматривать нейтральный краудион как электронно-дырочный, то эффективная масса такой квазичастицы $m^* = \alpha m$, где $\alpha = 0.7/N^3$ (N - число узлов решетки в направлении оси краудиона, по которым распределен лишний атом) [2]. Из результатов моделирования $N = 4$, следовательно, $m^* \approx 0.01 m$, что приводит к понижению E_d для нейтрального ДФ по сравнению с заряженным.

Влияние межионного взаимодействия проявляется в ряде эффектов, как динамических, так и статических. В частности, кулоновское взаимодействие вызывает дефокусирование в цепочке ион-ионных соударений, распространяющихся в направлении $[011]$. Это приводит к повышению E_d и к понижению скорости генерации ДФ в кристалле, состоящем из двухвалентных ионов (например, MgO по сравнению с KCl). Таким образом, ослабление ударного механизма образования ДФ в оксидах двухвалентных металлов по сравнению со щелочно-галогенидными кристаллами является еще одним фактором, ответственным за повышение радиационной стойкости первых, помимо понижения эффективности механизма зарождения ДФ за счет распада электронных возбуждений [3].

Другое следствие кулоновского межионного взаимодействия - более высокая вероятность образования нейтральных комплексов дефектов по сравнению с заряженными. Так, в кристаллах KCl, MgO при малых углах α относительно направления $[001]$, в котором расположены знакочередующиеся ионы и величина E_d максимальна, образуются бикраудионы, распространение которых приводит к генерации нейтральных ДФ - вакансионного и межузельного диполонов [4].

Образование нейтральных вакансионных и межузельных комплексов больших размеров, вплоть до дислокационных петель, является энергетически более выгодным и реализуется с большей вероятностью, чем образование заряженных дефектов как в динамической, так и в статической ситуациях.

Дефекты решетки, вследствие их электрического и упругого взаимодействий с краудионом, по-разному влияют на их распространение в разных подрешетках. Так, вакансия захватывает краудион, распространяющийся в одноименной с вакансией подрешетке, и рассеивает краудион, распространяющийся в разноименной подрешетке, с передачей энергии краудиона фокусонам; в обоих случаях скорость генерации ДФ понижается, E_d повышается. Межузельный ион понижает скорость распространения и длину пробега краудиона и фокусона и повышает E_d , т.е. понижает скорость генерации ДФ за счет перекачки энергии краудиона и миграции из окрестности ПВИ; кроме того, повышается вероятность образования межузельного диполона. Захват краудиона на дислокации, на краю эксиррапловости, с образованием ступеньки, происходит без нарушения правильного чередования разноименных ионов [5].

Таким образом, моделирование простой системы – двухкомпонентного кристалла с ионной связью – позволило обнаружить некоторые закономерности протекания радиационно-стимулированных процессов в таких системах, например, повышение скорости генерации дефектов Френкеля в более легкой подрешетке и тенденция к сохранению подрешеток без их перемешивания за счет взаимодействия краудионов с полем кристалла и с полями дефектов при малых энергиях ПВИ. Обнаруженные закономерности должны иметь место и в более сложных многокомпонентных соединениях с различными типами связей между компонентами, в которых имеются выделенные направления легкого перемещения атомов.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] К о с е в и ч А.М., К о в а л е в А.С. В сб.: Радиационные и другие дефекты в твердых телах. Тбилиси: ИФ АН ГССР, 1974, т. 1, с. 186–210.
- [2] В и н е ц к и й Б.Л. В сб.: Моделирование на ЭВМ кинетики дефектов в кристаллах. Л.: ФТИ АН СССР, 1985, с. 107–115.
- [3] L u s h c h i k ' Ch.B. In: Physics of Radiation Effects In Crystals. Ed. by Johnson R.A. and Orlov A.N. Amsterdam: Elsevier, 1986. P. 473–525.
- [4] Д о х н е р Р.Д. В сб.: Вопросы теории дефектов в кристаллах. Л.: Наука, 1987. С. 145–159.
- [5] Д о х н е р Р.Д. // Изв. АН Латв. ССР, Серия физических и технических наук. 1987. № 4. С. 67–77.