

1) НИИЯФ МГУ, Москва, Россия

2) НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Радиационные дефекты

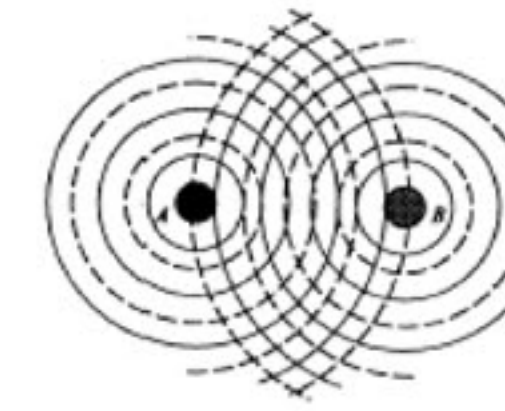
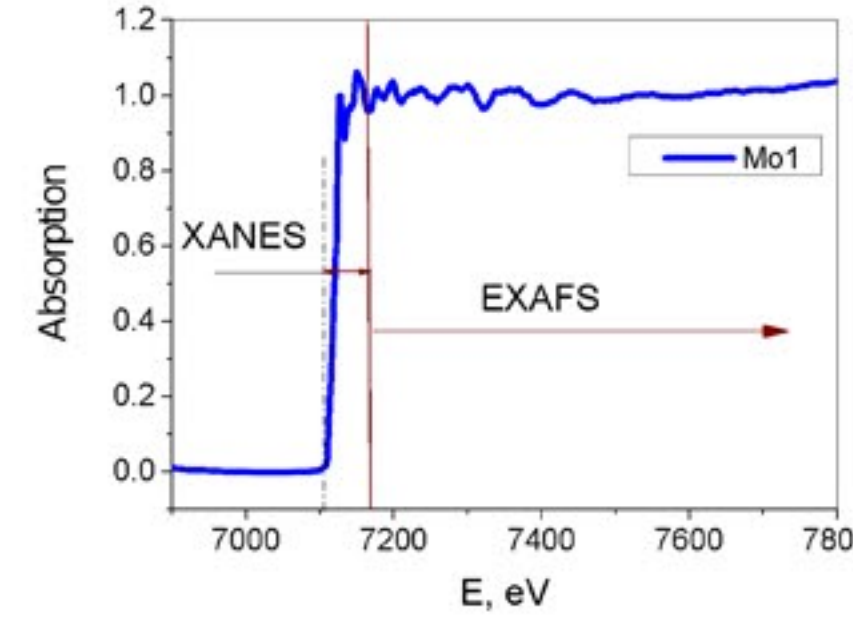
- Атомы внедрения и вакансии.
- Кластеры.
- Дислокации и петли дислокаций.
- Вакансионные поры.
- Выпадение фаз.

Экспериментальные методы изучения локальной атомной структуры

- Мессбауэровская спектроскопия
- Метод Возмущенных угловых корреляций
- Метод EXAFS:
 - Непосредственные данные об атомном окружении.
 - Возможность исследовать окружение любых атомов
- Метод EXELFS

EXAFS = Extended X-ray Absorption Fine Structure

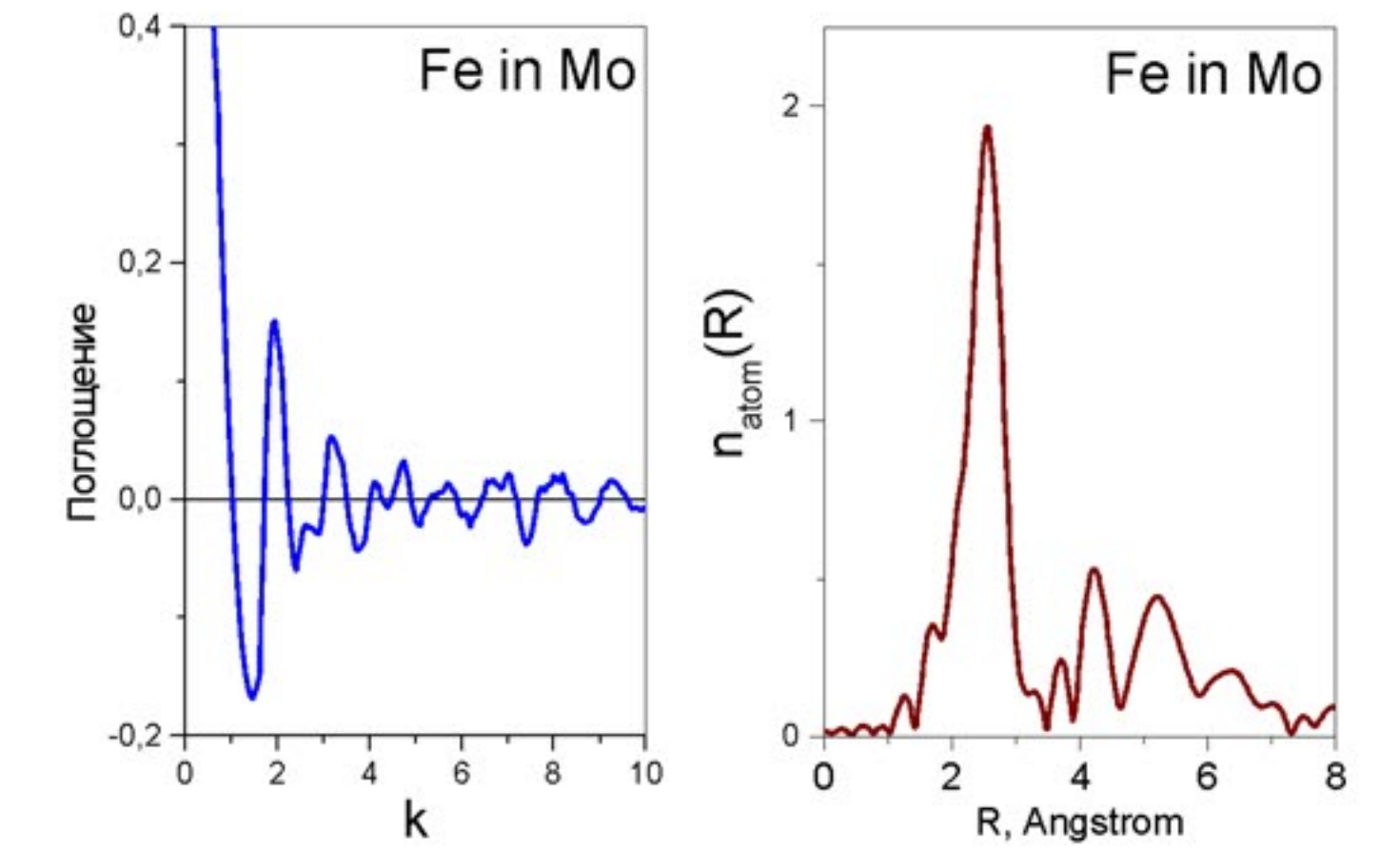
Тонкая структура поглощения рентгеновских лучей при энергиях превышающих энергию связи s-электронов



$$\chi(k) = \sum_j \frac{S(k)N_j}{kr_j^2} |f_j(k, \pi)| \sin(2kr_j + \varphi_j(k)) e^{-2\sigma_j^2 k^2} e^{-2r_j/\lambda(k)}$$

k – the wave number of a photoelectron, $k=p/\hbar$, N_j – the number of atoms in the j -th coordination sphere, r_j – the radius of the i -th sphere, $f_j(k, \pi)$ и $\lambda(k)$ – the scattering amplitude and the free path length of the electron.

Данные EXAFS в волновом и координатном представлении



Расстояние в Ангстремах

EXAFS – Fe в Mo

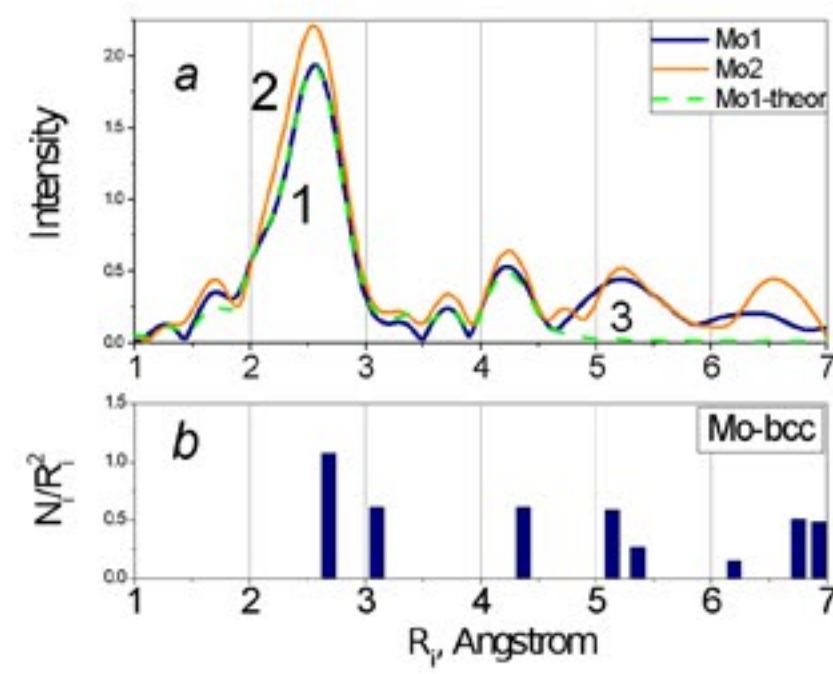
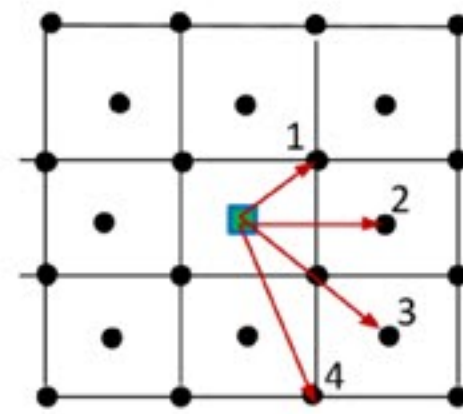


Рис 3. Спектры EXAFS для атомов Fe имплантированных Mo. а) Экспериментальные данные и расчетная кривая. б) Распределение атомов по координатным сферам в ОЦК решетке.

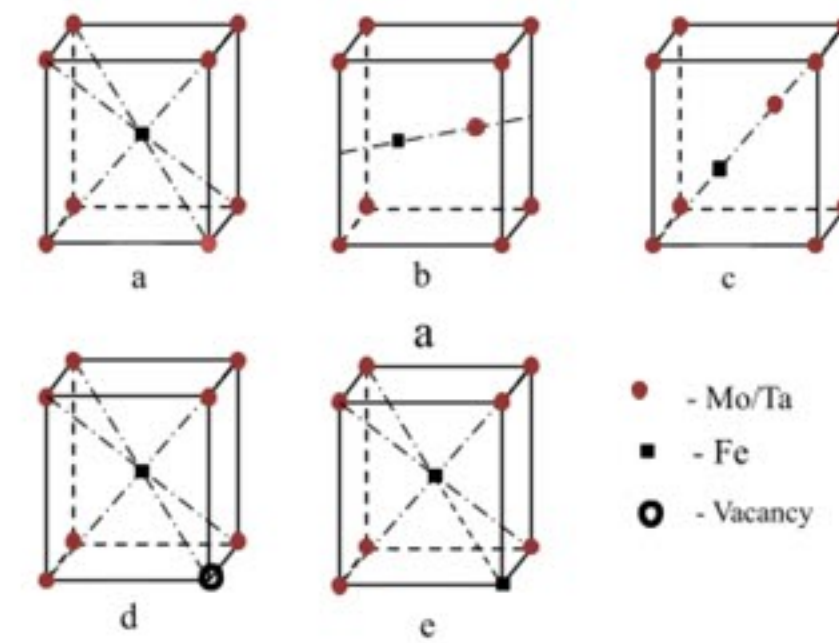


Атомы Fe занимают в Mo позиции замещения. Концентрация вакансий равна 24 at. %

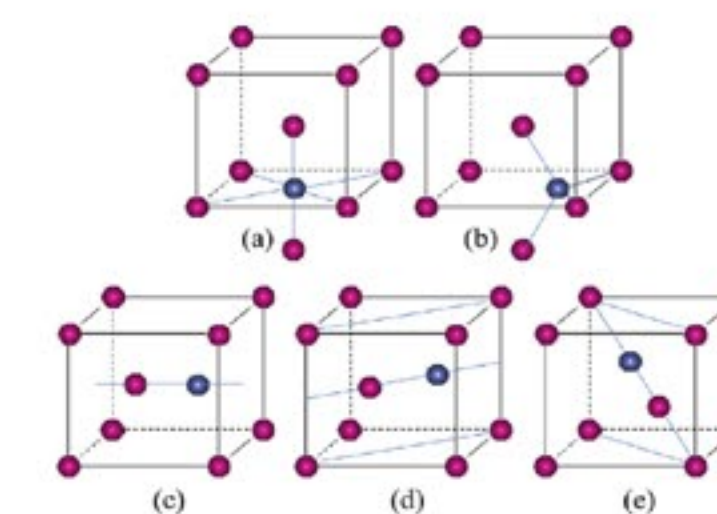
Atoms in the i -th coordination sphere of the Fe atom c	$R_i, \text{Å}$	Coordination number N_i	N_{ex}	$\Delta N_i = \text{Vac.}$
$i=1, \text{Mo}$	2.70	5.8	8	1.9
$i=1, \text{Fe}$	2.59	0.3		
$i=2, \text{Mo}$	3.08	4.6	6	1.4
$i=3, \text{Mo}$	4.43	8.7	12	3.3

EXAFS – Fe в Ta

Позиции атомов Fe, имплантированных в Ta



Позиции внедрения в ОЦК кристаллической решетке



Позиции локализации атомов Fe при имплантации в ОЦК решетку Ta

Релаксация (деформация) локального окружения атомов Fe в Ta

Радиусы атомов: $R(\text{Fe}) = 1.22 \text{ Å}$, $R(\text{Mo}) = 1.36 \text{ Å}$, и $R(\text{Ta}) = 1.43 \text{ Å}$
 Расчеты окружения атомов Fe в Ta теорией функционала электронной плотности.

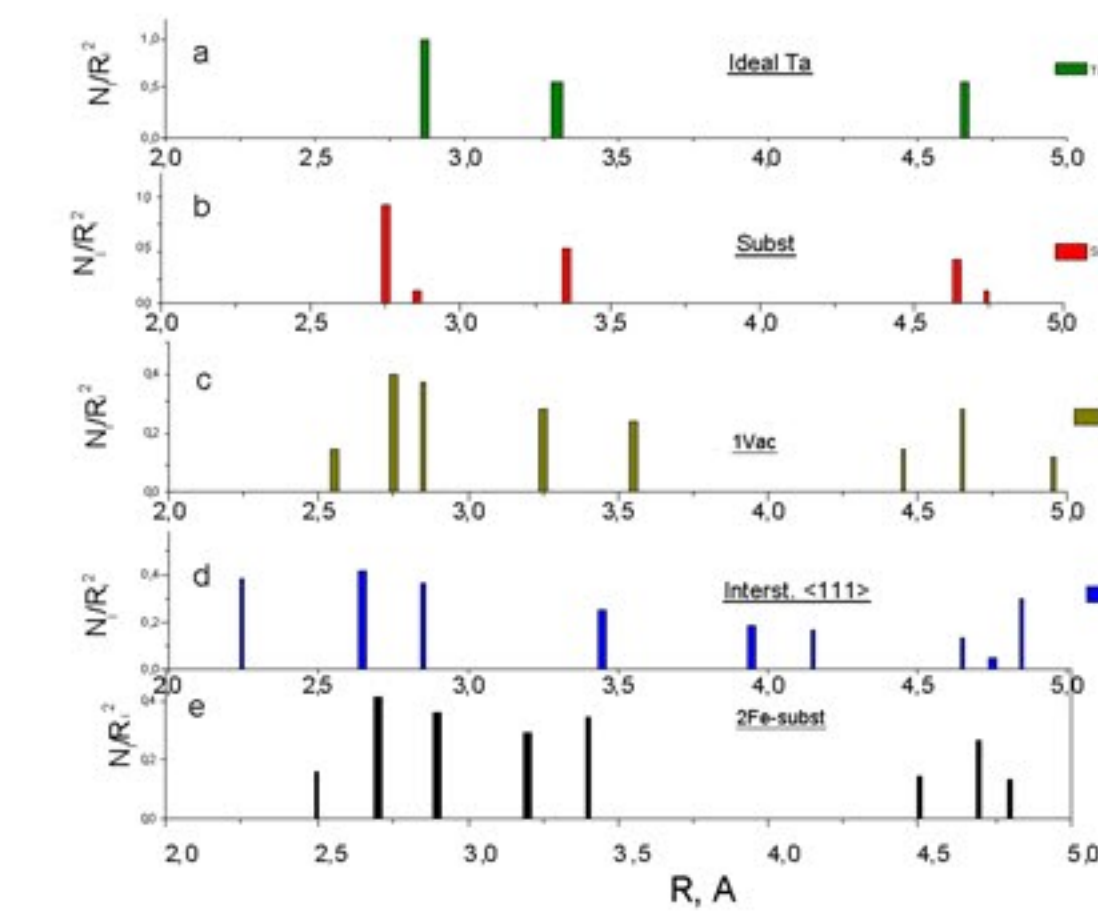
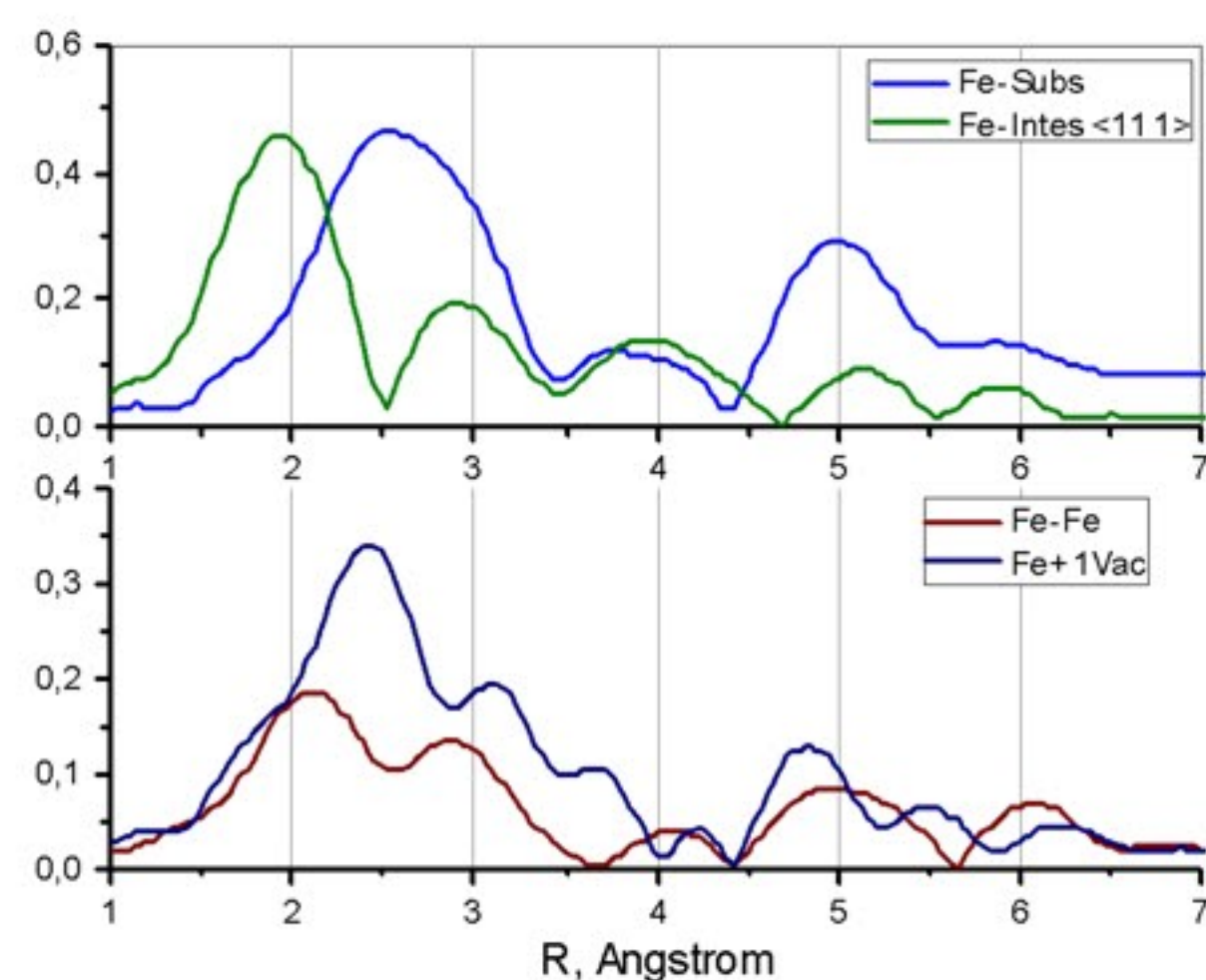


Рис. 5. Позиции атомов Ta вокруг атома Fe для различных типов дефектов с учетом релаксации кристаллической решетки.

а - Для идеального Ta;
 б – позиция замещения Fe в Ta;
 с- позиция замещения с 1 вакансией;
 d - позиция внедрения: гантель Fe-Ta вдоль направления <111>

EXAFS спектры для различных позиций атома Fe в Ta (расчет)



Декомпозиция экспериментальных спектров EXAFS на компоненты, отвечающие различным позициям Fe

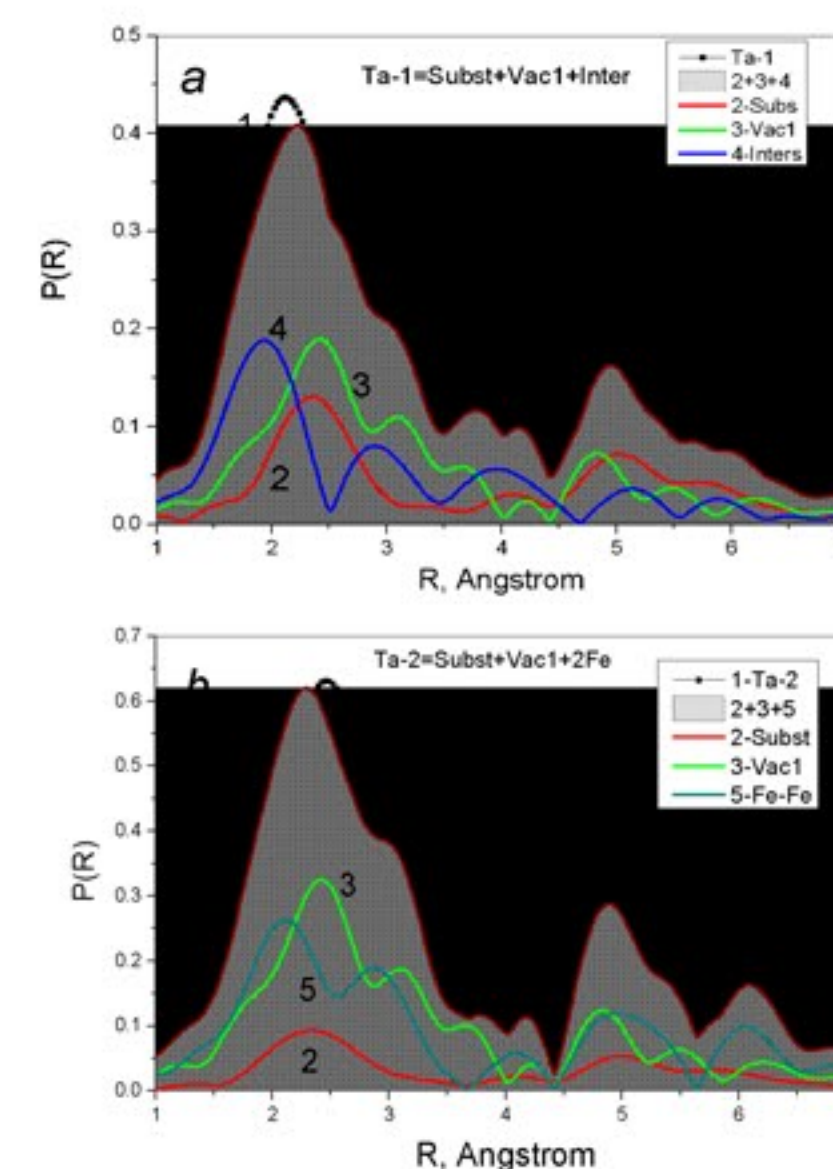


Рис.8 Разложение экспериментальных спектров на 3 компонента. а) Та-1, спектр после облучения; б) Та-2, спектр после облучения и отжига при 700 С. Кривая 1 – экспериментальные данные. Кривая 2 (красная) – спектр для Fe в позиции замещения. Кривая 3 (зеленая) - спектр для Fe в позиции замещения с одной вакансией в ближайшем окружении. Кривая 4 (синяя) - спектр для Fe в позиции внедрения, гантель вдоль диагональ <111>. Кривая 5 (темно-зеленая) соответствует EXAFS спектру для двух соседних атомов Fe atoms в позициях замещения. Кривая 6 – сумма 3-х компонент.

Заключение

1. Метод EXAFS позволяет получить данные о локальной атомной структуре радиационных дефектов. В том числе, определить концентрацию вакансий. Сегрегацию атомов и образование кластеров.
2. EXAFS измерения могут быть проведены практически для любых атомов.
3. Анализ данных позволяет выделить вклады нескольких различных типов дефектов.