

УДК 539.736.14...669.849

ЛОКАЛИЗАЦИЯ АТОМОВ УГЛЕРОДА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ НИКЕЛЯ

В.М. Шершнев, Н.А. Скакун, П.А. Светашов

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
ул. Академическая, 1, Харьков, 61108

Поступила в редакцию 10 июня 2004 г.

С помощью резонансной ядерной реакции $^{13}\text{C}(p, \gamma)^{14}\text{N}$ ($E_{\text{рез}} = 1,7476$ МэВ, $\Gamma_{\gamma} = 70$ эВ), которая возбуждалась протонами, каналированными вдоль плотноупакованных атомами никеля осей $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ и плоскости (100), определялось местоположение углерода в монокристаллическом растворе Ni – 0,18 ат.%C, обогащенном изотопом ^{13}C . В узком интервале углов ($\pm 0,4^\circ$), по мере совмещения направления импульса пучка протонов и выделенного кристаллографического направления, наблюдалось сильное изменение выхода γ -квантов из реакции. Показано, что атомы углерода в никеле, при концентрации 0,18 ат.% и комнатной температуре, занимают октаэдрические междуузлия.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: каналирование, ядерная реакция, ядерный резонанс, местоположение примеси.

Металлы и сплавы в относительно больших количествах растворяют газообразующие примесные элементы – водород, азот, кислород, а также углерод. Эти элементы часто образуют твердые растворы внедрения, оказывают существенное влияние на физические свойства металлов и, в частности, на радиационное нарушение конструкций, которые работают в полях сильных излучений.

Атомы внедрения в кристаллической решетке занимают определенные энергетически выгодные позиции. Наиболее выраженными в металлах с ГЦК решеткой позициями, которые могут занимать атомы внедрения, являются октаэдрические и тетраэдрические пустоты. В процессе облучения металла атомы внедрения могут захватывать смещенные из узлов решетки собственные атомы или вакансии, что приводит к образованию простейших дефектов. На рис.1 показаны некоторые из таких дефектов, которые могут образовываться в металлах с ОЦК решеткой в зависимости от условий облучения и отжига. В результате такого захвата и образо-

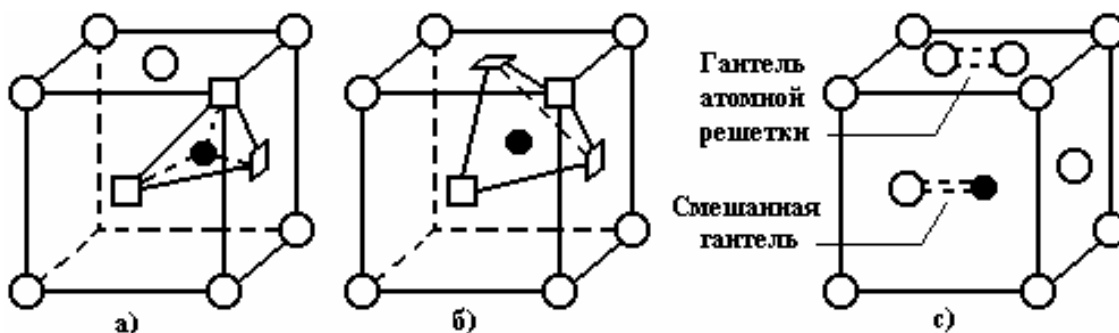


Рис.1 Точечные дефекты в кристаллах

а) тривакансия – примесный атом (●); б) тетравакансия – примесный атом; в) конфигурации типа гантель.

вания дефектов атомы внедрения с неизбежностью смещаются из равновесных позиций. Ядерно-физические методы в сочетании с использованием каналированных частиц и ориентационных эффектов позволяют получить сведения о смещении примесного атома, с точностью до $0,1 \text{ \AA}$ [1] из положения, которое он занимал до радиационного нарушения кристалла, идентифицировать образующийся дефект, установить его пространственную конфигурацию и геометрию, исследовать распад и аннигиляцию этого дефекта [2].

Однако для идентификации радиационного дефекта с участием примесного атома внедрения необходимо иметь надежные сведения о местоположении примесного атома в ячейке решетки металла до его облучения. В настоящее время экспериментальные данные о местоположении углерода в никеле отсутствуют. Поэтому, прежде чем приступить к исследованию влияния радиационных дефектов на расположение атомов в решетке, необходимо выполнить измерения и получить надежные данные о локализации углерода в кристаллической решетке.

Данные о локализации примесных атомов внедрения также необходимы для изучения особенностей выхода излучений ядерных реакций, которые возбуждаются каналированными частицами в кристаллах и, в частности, для исследования перераспределения потока положительно заряженных частиц в канале [3].

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРЕМЕНТА

Применялись образцы монокристаллического никеля с высоким относительным электрическим сопротивлением. Электроискровым способом перпендикулярно кристаллографическим направлениям $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ вырезали диски размером $\varnothing 6$ мм и толщиной 1,5 мм. Механическую шлифовку и полировку поверхности дисков проводили с целью удаления нарушенного и деформированного слоев. Последующее электрохимическое травление позволяло устранить остатки нарушенного слоя. Разориентация элементов структуры кристаллов не превышала $0,0028^\circ$.

Методом термодиффузии из твердой фазы в вакууме и последующего закаливания в атмосфере очищенного гелия образцы насыщались углеродом, обогащенным изотопом ^{13}C до концентраций 0,18 ат.%, что значительно ниже предела растворимости углерода в никеле [4]. Перед насыщением образцы отжигались и обезжиривались, после насыщения подвергались дополнительной электрополировке и тщательно промывались в деионизованной воде. В результате этих операций они имели зеркальную поверхность.

Изготовленные образцы крепили на гониометрической головке в камере ядерных реакций. Гониометр позволял вращать кристалл относительно трех взаимно перпендикулярных осей и производить угловое сканирование осей и плоскостей с шагом $0,05^\circ$.

Определение позиций, которые занимают атомы изотопа ^{13}C в никеле, осуществлялось с помощью пучка протонов с энергией 1,758 МэВ и угловой расходимостью не хуже $0,03^\circ$. Измеряли зависимость выхода γ -квантов реакции $^{13}\text{C}(p, \gamma)^{14}\text{N}$ от угла при сканировании в окрестности плотноупакованных атомами цепочек $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ и атомных плоскостей (111) и (100) [3].

Использовался сильный изолированный резонанс реакции ($E_{\text{рез}} = 1,7476$ МэВ, $\sigma_{\text{рез}} = 300$ мбарн, $\Gamma_\gamma = 70$ эВ [5]). При определении позиций атомов изотопа ^{13}C в никеле одновременно измерялась зависимость выхода упруго рассеянных на ядрах никеля протонов и γ -квантов из реакции $^{13}\text{C}(p, \gamma)^{14}\text{N}$ от угла между направлением импульса пучка и выбранным кристаллографическим направлением. Выходы рассеянных протонов и γ -квантов нормировали к результатам измерений выходов при полной разориентации кристалла относительно пучка протонов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис.2 показана экспериментальная зависимость выхода γ -квантов из реакции $^{13}\text{C}(p, \gamma)^{14}\text{N}$ при энергиях протонов от $E_{\text{рез}} = 1,7476$ МэВ и выше. Постоянство выхода γ -квантов от энергии для кривой (о) показывает, что в пределах интервала энергии, представленном на рис.1, возбуждается только один резонанс, и атомы внедрения расположены в кристалле гомогенно. Увеличение выхода γ -квантов из реакции более чем в два с половиной раза при энергии протонов выше резонансного значения, кривая (●), свидетельствует о том, что атомы углерода в кристалле никеля являются примесью внедрения.

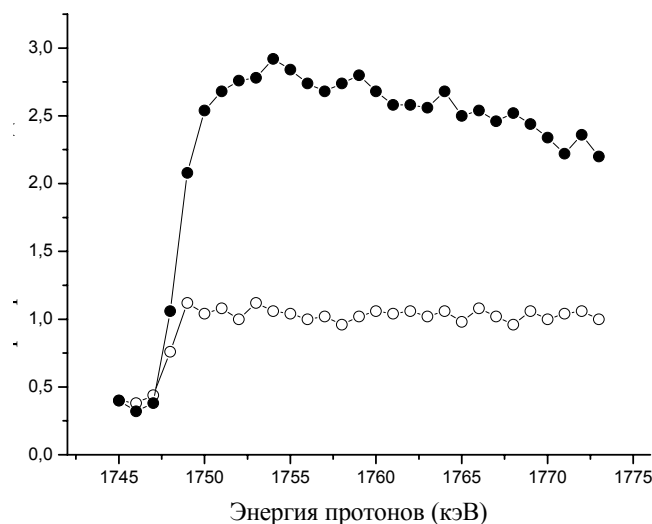


Рис.2. Зависимость выхода γ -квантов от энергии протонов.

(●) — направление импульса пучка совпадает с осью $\langle 110 \rangle$.

(о) — пучок разориентирован относительно плотноупакованных кристаллографических направлений.

При каналировании протонов вдоль кристаллографических направлений вблизи к поверхности кристалла происходит динамическое перераспределение плотности потока частиц в поперечной плоскости канала [6]. Статистическое равновесие потока наступает на глубинах, превышающих (1500 – 2000 Å) от поверхности

кристалла [7]. Поэтому угловое сканирование в окрестности кристаллографических осей и плоскостей, измерение при этом выхода γ -квантов и определение местоположения атомов углерода в никеле осуществляли при энергии протонов 1,758 МэВ.

Результаты измерений угловой зависимости выхода γ -квантов и рассеянных протонов показаны на рис. 3. Выход рассеянных на ядрах никеля протонов при совпадении направления импульса пучка ($\varphi_{\text{вх}} = 0$) и наиболее плотно упакованных атомами никеля цепочек $\langle 110 \rangle$ составил всего 4% от нормированного выхода, что свидетельствует о высоком качестве использовавшихся кристаллов и удовлетворительной подготовке образцов.

По мере совмещения направления импульса пучка с каждой из указанных на рис.3 осью или плоскостью выход γ -квантов существенно изменялся. Это объясняется, во-первых, специфическим расположением атомов ^{13}C в решетке никеля, во-вторых, сильной угловой зависимостью перераспределения плотности потока протонов, которые каналируют в пределах выделенного направления. На рис.3 приведены вставки, на которых показаны проекции атомов никеля (о – цепочки, — - плоскости), а также проекции октаэдрических (\square) и тетраэдрических (\blacksquare) междуузлий на плоскость, нормальную к соответствующему осевому или плоскостному направлению. Появление сильного пика при совмещении направления пучка протонов с осью $\langle 110 \rangle$ свидетельствует о том, что углерод в никеле при концентрациях, меньших предела растворимости, является примесью внедрения, которая размещается в середине канала, т.е. в одном из обозначенных на рис.3 (ось $\langle 110 \rangle$) междуузлий.

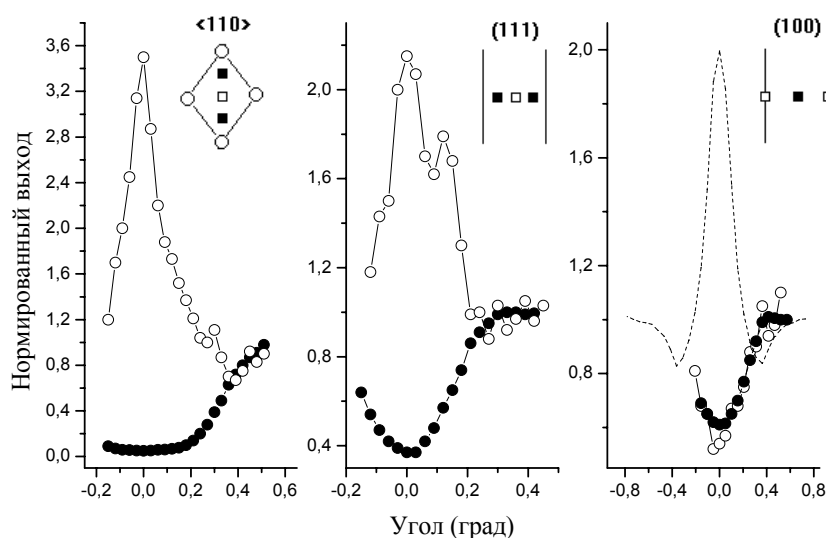


Рис.3. Экспериментальные угловые зависимости выхода γ -квантов (о) и рассеянных протонов (•). Компьютерное моделирование выхода γ -квантов (---).

Для плоскости (100) угловая зависимость выхода γ -квантов из реакции близка к угловой зависимости выхода упруго рассеянных протонов. Это свидетельствует о размещении атомов углерода в окта-междуузлиях, так как проекции атомов углерода находятся в плоскостях (100) атомов никеля. Действительно, если бы углерод размещался в тетра-междуузлиях (\blacksquare), в угловой зависимости выхода γ -квантов, согласно вставке к этой плоскости, с неизбежностью в эксперименте наблюдался бы пик (пунктирная линия), так как тетра-междуузлия образуют плоскость, которая размещается в центре канала.

Таким образом, совпадение выходов γ -квантов реакции и рассеянных протонов при угловом сканировании вблизи плоскости (100) показывает, что в твердом растворе Ni – 0,18 ат.%C основная доля атомов углерода занимают октаэдрические пустоты.

ВЫВОДЫ

Упруго рассеянные на ядрах никеля протоны и резонансная ядерная реакция $^{13}\text{C}(p, \gamma)^{14}\text{N}$ применялись для определения местоположения атомов углерода в растворе Ni – 0,18 ат.%C. Экспериментально определена зависимость выхода рассеянных протонов и γ -квантов из реакции при каналировании протонов вблизи плотно упакованных атомами никеля осевых и плоскостных кристаллографических направлений. Результаты настоящих измерений – необходимые исходные данные для идентификации и изучения свойств простейших дефектов, которые образуют смещенные из узлов атомы матрицы, примесные атомы и вакансии при облучении таких растворов нейтронами и/или заряженными частицами.

Впервые экспериментально, прямым методом показано, что атомы углерода при концентрации 0,18 ат.% С и комнатной температуре в монокристаллическом никеле занимают октаэдрические междоузлия.

Результаты настоящей работы использовались для изучения особенностей каналирования протонов в приповерхностной зоне кристалла. Смотри статью “Компьютерное моделирование каналирования протонов в кристаллах” в этом номере журнала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Dygo, P.J.M. Smulders and D.O. Boerma. Simulation analysis of ion channeling spectra: thermal vibrational amplitude in Si. //Nucl. Instr. and Meth. B64. -1992. -P.701-705.
2. M.L. Swenson. The study of lattice defects by channeling. //Rep. Prog. Phys. -1982. -V.45. -P.47-83.
3. Н.А. Скакун, В.М. Шершнев. Применение методов ядерной физики и ускорителей ННЦ ХФТИ для изучения состава, структуры и свойств твердых тел. //ВАНТ. Серия: физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. -2003. -Вып.№6(84) -С.3-15.
4. Е. Фромм, Е. Гебхард. Газы и углерод в металлах 1980, М.: Металлургия. -С.593.
5. A.Anttila, M.Bister, A.Fontell, K.B.Winterbon Ranges of some light ions measured by (p, γ) resonance broadening. //Rad. Eff. -1977. -V.33. -P.13-19.
6. L.C.Feldman, J.W.Mayer, S.T.Picraux. Materials Analysis by Ion Channeling 1982, Academic, New York. -P.61.
7. John H. Barrett. Potential and stopping-power information from planar - channeling oscillations. //Phys.Rev.-1979. -V.20. -№9. -P.3535-3542.

LOCALIZATION OF CARBON ATOMS IN A CRYSTAL LATTICE OF NICKEL

V.M. Shershnev, N.A. Skakun, P.A. Svetashov

National Science Center “Kharkov Institute of Physics and Technology”,

1 Akademicheskaya St., Kharkov 61108, Ukraine

e-mail: skakun@kipt.kharkov.ua

The carbon location in the monocrystal solution Ni – 0,18 at.%C enriched with the ^{13}C isotope has been determined by the resonant nuclear reaction $^{13}\text{C}(p,\gamma)^{14}\text{N}$ ($E_{\text{res}} = 1,7476$ MeV, $\Gamma_{\gamma} = 70$ eV), excited with protons channeling along axes $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ close-packed by the nickel atoms and along the plane (100). Strong changing in the γ -yield from the reaction has been observed in the narrow interval of angles ($\pm 0,4^\circ$) between the proton beam direction and the crystallographic one. It has been shown that the carbon atoms occupy the octahedral voids in the nickel at concentration 0.18 at. % and at room temperature.

KEY WORDS: channeling, nuclear reaction, nuclear resonance, location of impurity.