

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ПЕРСПЕКТИВНЫХ
МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ»

ТРУДЫ

XXV МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«РАДИАЦИОННАЯ ФИЗИКА ТВЁРДОГО ТЕЛА»

(Севастополь, 6-11 июля 2015 г.)

под редакцией заслуженного деятеля науки РФ,
д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г.

Москва – 2015

УДК 669.
ББК 22.38
P15
ISBN 978-5-89671-020-2

Труды XXV Международной конференции «Радиационная физика твёрдого тела» (Севастополь, 6 – 11 июля 2015 г.), под редакцией заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г., М.: ФГБНУ «НИИ ПМТ», 2015 г., 644с.

В рамках конференции проводилась XIX Международная школа молодых учёных «Радиационная физика твёрдого тела».

Редакционная коллегия:

д.ф.-м.н. Бондаренко Г.Г. (ответственный редактор),
д.ф.-м.н. Кристя В.И.,
д.т.н. Прасицкий В.В.,
Горелова Е.Г.
Мелкумян А.Б.
Митрофанова Т.Е.

УДК 669.
ББК 22.38

© Издательство ФГБНУ «НИИ ПМТ», 2015

ISBN 978-5-89671-020-2

© Труды XXV Международной
конференции «Радиационная физика
твёрдого тела»

ПРОГРАММА-СОДЕРЖАНИЕ

Понедельник, 6 июля**10.00-13.00****Открытие конференции - Бондаренко Г.Г.**

1. Овчинников В.В. «О радиационно-динамическом воздействии ионизирующих излучений на конденсированные среды»	11
2. Дидык А.Ю., Вишневский Р., Вилчиньска-Китовска Т., Исхакова Л.Д. «Синтез микрочастиц в водороде при давлении 3,5 кбар с оловянным стержнем под действием тормозных γ -квантов с пороговой энергией 10 МэВ»	21
3. Андриевский Р.А. «Поверхности раздела в наноматериалах как эффективные стоки для радиационных дефектов»	38
4. Ивченко В.А. «Атомное строение каскадов атомных смещений в металлических материалах после радиационных воздействий»	40
5. Якушин В.Л., Джумаев П.С., Емельянова О.В., Калинин Б.А., Польский В.И. «Модифицирование микроструктуры и поверхностное упрочнение 12 %-ных хромистых сталей при обработке потоками импульсной газовой плазмы»	49
6. Андреев Д.В., Бондаренко Г.Г., Дубинина М.И., Крестя В.И., Фишер М.Р. «Моделирование ионизации рабочего газа в слаботочном газовом разряде в смеси аргон-ртуть»	60

13.00-14.00 Перерыв.**14.00-17.00 Секция “Радиационная физика металлов” (заседание школы молодых ученых)**

1. Богачев И.А., Калинин Б.А., Лебедева Л.Ю., Олевский Е.А., Стальцов М.С., Чернов И.И. «Свойства реакторной ферритно-мартенситной стали, полученной при оптимизированных режимах спарк-плазменного спекания»	65
2. Печенкин К. В., Ганченкова М. Г. «О растворимости водорода в никеле: расчет из первых принципов»	74

3. Якушин В.Л., Джумаев П.С., Малиева Е.М. «Влияние импульсной плазменной обработки на трибологические характеристики 12%-ных хромистых сталей ЭП823 и ЭК181»	80
4. Дидык А.Ю., Ерискин А.А., Бондаренко Г.Г., Кобзев А.П., Никулин В.Я., Силин П.В., Белоус В., Васяк Я., Хаевска Е. «Распределение дейтерия и водорода в Zr, Ni и Ti сборках фольг при воздействии импульсной дейтериевой высокотемпературной плазмы»	90
5. Боровицкая И.В., Люблинский И.Е., Бондаренко Г.Г., Парамонова В.В., Коршунов С.Н., Мансурова А.Н., Ляховицкий М.М., Жарков М.Ю. «Особенности коррозионной стойкости ванадиевых сплавов в жидком литии высокой чистоты»	105
6. Ризаханов Р.Н., Бармин А.А., Иванов А.В., Ивлиева В.В., Рудштейн Р.И. «Слоистый композиционный материал на основе оксида алюминия и хрома для применения в термонапряженных узлах ракетно-космической техники»	115
7. Морозов Е.В., Масляев С.А., Демин А.С., Ромахин П.А., Пименов В.Н., Грибков В.А. «Осаждение металлов и повреждаемость вольфрамовой мишени потоками ионов и плазмы в установках «Плазменный фокус»	126

Вторник, 7 июля**9.00-13.00 Секция “Радиационная физика неметаллических материалов”**

1. Хасаншин Р.Х., Новиков Л.С., Косогоров А.В. «Структурные изменения поверхности стекла при электронном облучении»	137
2. Попов В.П., Гутаковский А.К., Сафронов Л.Н., Антонов В.А., Подлесный С.Н., Куприянов И.Н., Пальянов Ю.Н., Калинин А.А., Рубанов С. «Формирование NV-центров и наноструктур в облученном ионами алмазе»	147
3. Тыщенко И.Е., Попов В.П. «Радиационно-стойкие структуры кремний-на-изоляторе с ионно-модифицированным встроенным диэлектриком»	160
4. Сергеев А.П., Сергеев П.Б. «Кинетика и механизмы наработки дефектов в чистых кварцевых стеклах при электронном облучении»	171
5. Загорский Д.Л., Фролов К.В., Коротков В.В., Бедин С.А.,	182

Кругликов С.С., Перунов И.В. «Исследование многокомпонентных металлических нанопроволок, полученных методом матричного синтеза на основе трековых мембран»	
6. Пискарев М.С., Гильман А.Б., Ионов А.М., Кечекьян А.С., Кузнецов А.А. «Влияние модифицирования в разряде постоянного тока на адгезионные свойства и структуру поверхности пленок полиэфирсульфона»	189
7. Урбанович А.И., Жвавый С.П. «Моделирование фазовых переходов, инициируемых в CdTe импульсным излучением лазера»	197
8. Корнеев А.В., Ревазов В.О., Селезнев В.П. «Исследование оптических свойств лейкосапфира при воздействии ионизирующих излучений»	206
9. Крючков С.В., Кухарь Е.И. «Абсолютная отрицательная проводимость сверхрешетки в поле электромагнитного излучения»	213
10. Королев А.А., Иванов А.В., Козлов С.А., Штумпф С.А. «Влияние плазмы на генерацию кратных гармоник при взаимодействии нескольких интенсивных предельно коротких световых импульсов в прозрачной диэлектрической среде»	219

13.00-14.00 Перерыв.**14.00-17.00 Секция “Радиационная физика неметаллических материалов” (заседание школы молодых ученых)**

1. Ластовский С.Б., Маркевич В.П., Коршунов Ф.П., Якушевич А.С., Мурин Л.И., Макаренко Л.Ф. «Радиационно-индуцированные бистабильные центры с глубокими уровнями в кремнии <i>p</i> -типа»	226
2. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Christen J., Степович М.А., Туртин Д.В. «Оценка электрофизических параметров полупроводников по результатам измерений катодолюминесценции экситонов»	235
3. Андреев Д.В., Бондаренко Г.Г., Столяров А.А. «Модификация МДП-структур сильнополевой инжекцией электронов и электронным облучением»	242
4. Матюхин П.В., Бондаренко Г.Г., Павленко В.И., Черкашина Н.И. «Взаимодействие высокоэнергетических полей гамма-излучения с металлокомпозиционным материалом на	253

основе алюмосодержащей матрицы»	
5. Новоселова Е.Г., Смирнов И.С., Терентьев А.В., Шупегин М.Л. «Влияние условий формирования на кластерную структуру нанокompозитных пленок на основе ПФМС»	258
6. Yusupov Lochin. «Growth of TiO ₂ nanorods on transparent substrates for solar energy harvesting devices»	264

Среда, 8 июля**9.00-13.00 Секция «Радиационная физика металлов»**

1. Дрожжина М.В., Калинин Б.А., Николаева И.Д., Стальцов М.С., Чернов И.И., Бажал С.В., Глотов А.И., Романов В.А., Лагов П.Б. «Использование ускорителя ЭПП-15 для имитационных исследований радиационной повреждаемости реакторных материалов»	269
2. Рогожкин С.В., Корчуганова О.А., Алеев А.А. «Кинетика распада твердого раствора сплава Fe-22%Cr при термическом старении»	276
3. Портных И.А., Панченко В.Л. «Микроструктура стали ЭК-164 после нейтронного облучения при температурах от 440 до 600°C до повреждающих доз 36...94 сна»	285
4. Панченко В.Л., Пастухов В.И. «Аномальное локальное порообразование, наблюдаемое в 12% хромистых сталях после нейтронного облучения при температуре 1200...1300°C»	299
5. Ельникова Л.В., Фунтиков Ю.В. «Анализ дефектной структуры галфенолов методом позитронной аннигиляционной спектроскопии»	305
6. Валько Н.Г. «Влияние режимов электролиза и облучения на элементный состав и морфологию поверхности покрытий Co-Ni-Fe»	314
7. Черенда Н.Н., Ласковнев А.П., Басалай А.В., Шиманский В.И., Углов В.В., Асташинский В.М., Кузьмицкий А.М. «Формирование биосовместимых поверхностных слоев в сплаве Ti-6Al-4V с помощью компрессионных плазменных потоков»	318
8. Голубев О.Л., Блащенко Н.М. «Изменения изотопного состава ионного тока полевого испарения вольфрама при высоких температурах эмиттера»	327
9. Молодцов В. Л., Печенкин В. А., Аверин Л. В. «Метод расчета характеристик повреждающей дозы в металлах при	332

ускорительном облучении»	
--------------------------	--

13.00-14.00 Перерыв.**14.00-17.00 Секция «Физические основы радиационной технологии» (заседание школы молодых учёных)**

1. Жарков М.Ю., Люблинский И.Е., Вертков А.В. «Реализация концепции замкнутой циркуляции лития внутрикамерными элементами токамака Т-11М на основе литиевых капиллярно-пористых систем»	338
2. Ризаханов Р.Н., Бармин А.А., Иванов А.В., Ивлиева В.В., Лаптев И.Н., Рудштейн Р.И. «Получение и испытание керамического композита на основе нитрида бора с повышенной стойкостью к ионной бомбардировке для применения в составе холловского двигателя»	345
3. Колодяжный А.Ю., Шешин Е.П. «Катодоллюминесцентный источник света на основе катодно-модуляторного узла с отклоняющими электродами»	358
4. Павленко В.И., Бондаренко Г.Г., Черкашина Н.И. «Исследование изменения структуры полимерных композитов после воздействия вакуумного ультрафиолета методом ИК-спектроскопии»	367
5. Романов А.В., Степович М.А. «Модели спектров вторичной флуоресценции конденсированного вещества в спектрометрах с дисперсией по длинам волн»	371
6. Бондаренко Г.Г., Ли И.П., Гайдар А.И., Леденцова Н.Е. «Исследование изменения структурных характеристик конгломератов порошков карбонильного Ni при различных режимах их термообработки»	379

Четверг, 9 июля**9.00-13.00 Секция «Физические основы радиационной технологии»**

1. Суржиков А.П., Власов В.А., Лысенко Е.Н., Малышев А.В., Николаев Е.В. «Твердофазное образование литий-титановых ферритов в условиях нагрева электронными пучками импульсного и непрерывного действия»	387
2. Павлов Ю.С., Лагов П.Б. «Физико-технические основы и примеры применения радиационных методов обработки твердотельных электронных приборов»	398

3. Ревина А.А., Павлов Ю.С. «Роль радиационной химии в современной нанотехнологии»	406
4. Петросянц К.О., Кожухов М.В. «Приборно-технологическое моделирование характеристик SiGe ГБТ при воздействии протонов»	415
5. Петросянц К.О., Попов Д.А. «Приборно-технологическое моделирование 45nm high-k МОПТ с учетом воздействия гамма-излучения»	424
6. Ивашутенко А.С., Франгульян Т.С., Гынгазов С.А. «Спекание циркониевой керамики с использованием микроволнового и искрового методов нагревов»	432
7. Валько Н.Г., Война В.В., Лукашик О.А., Петрученя Е. Ю. «Электролитическое осаждение Zn-Co покрытий в поле рентгеновского излучения»	438
8. Кузнецов П.М., Федоров В.А. «Анализ колебаний эрозионного факела, возникающего в результате лазерного воздействия на металлическую поверхность»	442

13.00-14.00 Перерыв.**14.00-17.00 Секция «Радиационная физика неметаллических материалов»**

1. Загорский Д.Л., Коротков В.В., Бедин С.А., Парфёнов Д.А., Артёмов В.В. «Стабильность нанопроволок, синтезированных на основе трековых мембран»	446
2. Курбанов А.М., Нуритдинов И. «Автолокализация электронных возбуждений и образование центров окраски в кристаллах $Gd_3Sc_2Al_3O_{12}$ »	454
3. Охрименко О.Б. «Особенности атермического взаимодействия СВЧ излучения со структурами оксид/полупроводник»	462
4. Yavidov B.Ya. «Polaronic system with disordered density-displacement type electron-phonon interaction»	470
5. Федоров И.А., Лобанов С.В., Шешин Е.П. «Исследование термо- и автоэмиссионных свойств наноструктурированного материала на основе интеркалированного пирографита»	478
6. Буртелов В.А., Шешин Е.П. «Формирование эмиссионных центров на поверхности ТРГ фольги искровым разрядом через диэлектрическую маску»	487

Пятница, 10 июля

9.00-13.00 Секция «Физические основы радиационной технологии»

1. Дидык А.Ю., Боровицкая И.В., Куликаускас В.С., Бондаренко Г.Г., Ерискин А.А., Никулин В.Я., Силин П.В., Белоус В., Васяк Я., Хаевска Е. «Исследование распределения дейтерия и водорода в сборках Ta CD ₂ Ta, Ta Ta CD ₂ Ta Ta и Nb CD ₂ Nb, после воздействия высокотемпературной плазмы аргона на установке ПФ-4»	497
2. Онанко А.П., Онанко Ю.А. «Влияние изменения дефектной наноструктуры на указательную поверхность упругих свойств и автоматизированная система визуализации анизотропии после облучения»	509
3. Кабышев А.В., Конусов Ф.В. «Ионно-термическая модификация оксида алюминия»	520
4. Бондаренко Г.Г., Кристя В.И., Савичкин Д.О. «Расчет коэффициента распыления катода в слаботочном газовом разряде в смеси «аргон-ртуть»	531
5. Тимошенко С.П., Графутин В.И., Евстафьев С.С., Прокопьев Е.П., Бритков О.М., Хмелевский Р.О. «Аннигиляционный контроль производства и качества материалов на основе металлов и кремния методами ДУАЛ (DWAL), ВРАФ (TDAP) и УРАФ (ADAP)»	536
6. Дьячкова И.Г., Новоселова Е.Г., Смирнов И.С. «Влияние температуры на формирование нарушенных слоев в кремнии при протонном облучении»	539
7. Галанина Л.И., Новиков Л.С. «Оценка вероятности одиночных радиационных сбоев в результате ядерного взаимодействия первичных частиц с материалами микросхем»	550
8. Амрастанов А.Н., Степович М.А., Гинзгеймер С.А. «Оценка теплового воздействия электронного пучка на однородный полупроводниковый материал. Результаты математического моделирования»	557

13.00-14.00 Перерыв.**14.00-17.00 Секция «Радиационная физика металлов»**

1. Чернова А. Д., Печенкин В. А., Конобеев Ю. В. «Расчет температур и напряжений в образце при облучении в ВЭМ»	564
2. Демина Е.В, Воронин А.В., Гусев В.К., Новохацкий А.Н.,	569

Прусакова М.Д., Морозов Е.В., Бер Б.Я., Борматов А.А., Сотников Г.Ю. «Структурные изменения в поверхностном слое вольфрама, подвергнутого воздействию большого числа импульсов гелиевой плазмы»	
3. Камышанченко Н.В., Никулин И.С., Никуличева Т.Б., Мишунин М.В. «Структура зоны аккомодации механического двойника в технически чистом титане»	576
4. Selyshchev P. A., Akintunde S. O. « Influence of irradiation on formation of compound layer as result of chemical reaction and diffusion»	579
5. Чирская Н.П., Воронина Е.Н., Новиков Л.С. «Математическое моделирование взаимодействия ионизирующего излучения с микроструктурами космических аппаратов»	590
6. Аленина М.В., Колотов В.П. «Активационные свойства рекомендуемых материалов для защитного блока бланкета строящегося термоядерного реактора и их соответствие критериям малоактивируемых конструкционных материалов»	600

Суббота, 11 июля**9.00**

1. Куленников Э.Л., Красильников В.В. «О перспективе создания центра ядерной медицины»	605
2. Оксенгендлер Б.Л., Ашуров Х.Б., Максимов С.Е., Тураев Н.Ю. «Фрактальная концепция в радиационной физике твёрдого тела»	617
3. Ястребинский Р.Н., Бондаренко Г.Г., Павленко В.И., Ястребинская А.В. «Моделирование процессов взаимодействия высокоэнергетических излучений с радиационно-защитными композиционными материалами»	627
4. Андреев В.В., Бондаренко Г.Г., Масловский В.М., Столяров А.А., Тихонов А.Н., Ахмелкин Д.М. «Сильнополевая и плазменная модификация структур метал-диэлектрик-полупроводник»	632
Обсуждение докладов	
Общая дискуссия	
Закрытие конференции	

INFLUENCE OF IRRADIATION ON FORMATION OF COMPOUND LAYER AS RESULT OF CHEMICAL REACTION AND DIFFUSION

Selyshchev P. A.¹, Akintunde S. O.²

¹ Department of Physics University of Pretoria (Private bag X20 Hatfield 0028 South Africa, selyshchev@gmail.com)

² Department of Physics, University of Pretoria (Private bag X20 Hatfield 0028 South Africa, samuel.akintunde@up.ac.za)

A model is developed that describes the formation of AB-compound layer at the interfaces between A- and B-layers under irradiation. The AB-layer grows owing to chemical reaction on interfaces which is provided by diffusion of A- and B-atoms through AB layer. It is shown that the growth of AB-layer can occur in two stages: the first stage is controlled by interfacial reaction (linear growth) and the second stage by diffusion (parabolic growth). Time, when the first stage is changed to the second (critical time), and corresponding critical thickness of AB compound are estimated.

Рассмотрен рост АВ соединения, которое образуется между слоями А и В веществ под облучением. Слой растет в результате химической реакции, которая обеспечивается диффузией А и В атомов к соответственно В и А слоям через АВ слой. Показано что рост АВ слоя может иметь две стадии: первая контролируется химической реакцией (линейный рост), вторая – диффузией (параболический рост). Оценено время, когда первую фазу меняет вторая, и соответствующая толщина АВ слоя.

Introduction

It is known that irradiation significantly changes the properties of multi-component systems [1].

First of all, radiation affects the kinetic processes. This is manifested in increasing of diffusion, in changing of the phase diagram and passing of chemical reactions.

In this paper, following [2] we consider the effect of irradiation on the growth of a solid AB compound. The AB layer comes into being and grows between layers of A and B substances as a result of a chemical reaction and diffusion. At least one of the layers (A or B) is solid (metal).

These phenomena are experimentally observed for different substances both without irradiation [2-10] and under irradiation [11-18]. It is shown that the formation of the first AB compound phase can be best explained by linear-parabolic growth law. As a rule parabolic law describes diffusion con-

trolled growth, linear stage is connected with reaction controlled growth especially at the beginning of the process. Usually failure to take into account the chemical reaction results in loss of linear stage [7]. Unfortunately, most of the experimental works provide only information on diffusion controlled growth. Influence of irradiation the most authors connect with radiation-enhanced diffusion and process of ion mixing (particularly at low temperatures and for thin film). In this article we do not consider influence of ion mixing and deal basically with radiation-enhanced diffusion.

Let chemical reaction, which takes place between A and B substances, be described by the equation



As usual, we assume that the reaction occurs at the interface of A and B substances. As a matter of fact reaction occurs in vicinity of interface. The thickness of reaction zone is not more than several interatomic distances. It is here all mechanisms of irradiation influence proceed.

After AB-layer has been formed, the reaction occurs between A and AB-layers and between B and AB-layers. Since the product compound separates the reactant spatially, the reaction can only continue if either A, B, or both A and B atoms are able to diffuse across the reaction layer and form additional AB compounds at the respective interfaces. The reaction at A and AB interface is provided by diffusive transport of B atoms from B-layer through AB-layer to A-layer. The reaction at B and AB interface is provided by the diffusive transport of A-atoms from A-layer through AB-layer to the B-layer. Thus for steady case the growth in layer thickness, Δh , is given as

$$\Delta h = V_{ab} (|J_a| + |J_b|) \quad (2)$$

where V_{ab} is molar volume. But diffusive fluxes J_a and J_b are determined by boundary conditions and therefore by chemical reaction rate which depends on concentrations at interface (in reaction zone).

The rate of a chemical reaction is one of the most important factors, which determines the growth of AB-layer. The rate also depends on the external conditions, such as temperature. Owing to irradiation, the atoms of components can be in different states, and have various configurations. For example, A-atom can occupy the site of AB-lattice or interstitial site. This also affects the reaction rate.

The concentration dependence of the chemical reaction rate is complex. The explicit dependence and its theoretical justification are established only for the simplest systems. For instance, the reaction rate for a mixture of ideal gases can be described as the product of their concentrations because the rate is proportional to probability for collide of A and B atoms. If one of the

reactants is taken in such large excess that its concentration remains practically constant during the reaction, the reaction rate must be independent on the concentration of this reactant [19].

Such behaviour is especially typical for the solid-state reactions where the number of possible neighbouring sites for each atom is strictly limited and the reaction occurs only between the nearest neighbours. If all possible sites around B-atom are occupied by A-atoms, further increasing of concentration of A-atoms has no effect on reaction rate. Thus, the reaction rate must be very sensitive to the deviation from stoichiometry, and the reaction rate remains constant when the concentration changes within a wide range. However, such behaviour makes it possible to build a simple approximation of the reaction rate as a function of concentrations.

Ways of irradiation influence

Influence of irradiation on microscopic processes in solid is very diverse. The most important radiation-induced mechanisms, which influence on diffusion and chemical reactions, are heating and formation of mobile point defects (interstitial atoms, vacancies, etc.).

The heating is connected with relaxation of different radiation-induced excitations. To a first approximation the radiation heating is equivalent to increasing of temperature of the irradiated sample. Diffusion and rate of chemical reaction strongly (exponentially) depend on temperature. Thus microscopic kinetics varies and this leads to changes of growth of AB-layer. The foregoing result is remarkable. If energies other than thermal energies are pumped into a system on an atomic scale, its kinetic coefficients behave “as if” the system had been heated to a higher temperature $T^{irr} = T + \Delta T^{irr}$.

$$T^{irr} = T_e + Q^{irr} / h \quad (3)$$

Where the rate of irradiation heating is $Q^{irr} = \xi \Theta K$. K is defect production rate, Θ is energy which releases under annealing of one defects. It is approximately equal to the energy of the defect formation. Parameter ξ is ratio of energy of irradiation which transforms into heating and energy of irradiation which transforms into defect generation. Environment temperature is kept constant and equal to T_e . h is the heat exchange coefficient between the irradiated sample and the environment.

Second approximation gives link between annealing of defects and defect concentration. For appropriate conditions this link can be the reason for self-oscillation of temperature and defect concentration [20]. The radiation heat-

ing is proportional to the irradiation flux density and thus proportional to defect formation rate.

There are several reasons for the increase in diffusion or enhancement of atom mobility in a metal under irradiation. First, diffusion grows due to radiation heating. Secondly, it grows by opening new channels via defect species which are usually not present in significant concentration at thermal equilibrium, some connecting with the presence of new defect species, others not.

Vacancy-type diffusion increases by virtue of radiation-induced formation of additional vacancies. The diffusion coefficient for vacancy diffusion is connected with that for atom diffusion in the following way

$$D_a^v = n_v D_v \quad (4)$$

Using (1), we obtain the diffusion coefficient for atom diffusing through vacancy mechanism under irradiation, $D_a^{v,irr}$,

$$D_a^{v,irr} = D_a^{v,th} \left(1 + \frac{n_v - n_v^{th}}{n_v^{th}} \right) \quad (5)$$

where $D_a^{v,th}$ is the diffusion coefficient for atom diffusion through vacancy mechanism without irradiation, n_v^{th} is thermal vacancy concentration, n_v is vacancy concentration under irradiation. Neglecting recombination the vacancy concentration can be obtained from

$$K - \frac{n_v - n_v^{th}}{\tau_v} + D_v \Delta n_v = 0 \quad (6)$$

Owing to diffusion occurs by the jump of an atom from its lattice site to a vacant site, the fluxes of vacancies and atoms, J_v and J_a^v satisfy next equations

$$J_a^v = -J_v \quad (7)$$

Thus to solve problem of growth of *AB*-layer, one needs to find and use atom or vacancy fluxes.

Interstitial mechanism involves the movement of an interstitial atom from one interstitial position to another. It takes place only under irradiation because without irradiation, concentration of interstitial atoms is practically equal to zero. Rates of formation of interstitial atoms and vacancies are ap-

proximately the same. Thus their average fluxes to sinks (dislocations, interfaces, etc.) are also the same and the contributions of interstitial and vacancy mechanisms to growth of AB layer are comparable. Interstitial atoms are very mobile. Migration energy of interstitial atoms is about 0.1 – 0.3 eV. Migration energy of vacancies is about 0.5 - 1 eV. They diffuse slower than interstitial atoms. Stationary distribution for interstitial atoms, for example of sort A, inside AB layer is described by equation

$$K - \frac{n_i^a}{\tau_i^a} + D_a^i \Delta n_i^a = 0 \quad (8)$$

where n_i^a is concentration of interstitials, K is defect production rate, D_a^i is the diffusion coefficient, τ_i^a is life-time of interstitials.

Model and basic equations

Suppose the AB layer comes into being and grows between the planar layers. Let the axis X be perpendicular to the layers. At the initial time, when AB layer is absent, zero point lays at interface of A- and B-layers. It further lays inside AB layer which occupies space from $x=-h_a$ till $x=h_b$. Here $h_a(t)$ is the thickness of compound layer which grows as a result of chemical reaction on surface of A-layer. $h_b(t)$ is the thickness of compound layer which grows as a result of chemical reaction on surface of B-layer. The thickness of AB compound layer is $h(t)=h_a(t) + h_b(t)$, h_a , h_b , and h are functions of time, t . At the initial time ($t = 0$) the thickness $h(t)$ of AB compound layer is equal to zero.

By the previous statement, we simulate rate of chemical reaction in the following way. The rate, which describes chemical reaction between A atoms in interstitial position and B atoms of B layer, is

$$\phi_{ib} = \begin{cases} \gamma_b^0 n_b^0 = const & n_i^a(x = h_b) \geq n_b^0 \\ \gamma_b^0 n_i^a(x = h_b) & n_i^a(x = h_b) \leq n_b^0 \end{cases} \quad (9)$$

where n_a^0 and n_b^0 are densities of A- and B- atoms at A- and B-layers respectively. $n_i^a(x = h_b)$ is interstitial density in reaction zone at $x=h_b$. Note that in fact the rate is function of only interstitial density because density of B-atoms at B-layer is constant. Deviation from stoichiometry is possible only through change of density of A-interstitials.

In the same way we simulate rate of chemical reaction between B-atoms and A-atoms, which come to B-layer through vacancy diffusion mechanism;

and between A -atoms of A -layer and B -atoms, which come to A -layer through vacancy and interstitial diffusion mechanisms.

$$\begin{aligned}\phi_{vb} &= \begin{cases} \gamma_b^0 n_b^0 = const & n_a^v(x=h_b) \geq n_b^0 \\ \gamma_b^0 n_a^v(x=h_b) & n_a^v(x=h_b) \leq n_b^0 \end{cases} \\ \phi_{ia} &= \begin{cases} \gamma_a^0 n_a^0 = const & n_i^b(x=-h_a) \geq n_a^0 \\ \gamma_a^0 n_i^b(x=-h_a) & n_i^b(x=-h_a) \leq n_a^0 \end{cases} \\ \phi_{va} &= \begin{cases} \gamma_a^0 n_a^0 = const & n_b^v(x=-h_a) \geq n_a^0 \\ \gamma_a^0 n_b^v(x=-h_a) & n_b^v(x=-h_a) \leq n_a^0 \end{cases}\end{aligned}\quad (10)$$

where $n_a^v(x=h_b)$ is density of A -atoms, which come to B -layer (in reaction zone at $x=h_b$) through vacancy diffusion mechanism. $n_b^v(x=-h_a)$ and $n_i^b(x=-h_a)$ are density of B -atoms which come to A layer (in reaction zone at $x=-h_a$) through vacancy- and interstitial-type diffusion.

The growth of thickness of AB -layer is determined by diffusion of A - and B -atoms inside AB -layer and rate of reaction on its boundaries.

$$\frac{dh}{dt} = \frac{dh_a}{dt} + \frac{dh_b}{dt} = V_{ab}(\phi_{va} + \phi_{ia} + \phi_{vb} + \phi_{ib}) \quad (11)$$

For stationary diffusion, neglecting production and annealing of defects we obtain equations for densities of diffusing atoms

$$D_a^i \frac{\partial^2 n_i^a}{\partial x^2} = 0 \quad D_a^{v,irr} \frac{\partial^2 n_a^v}{\partial x^2} = 0 \quad D_b^i \frac{\partial^2 n_i^b}{\partial x^2} = 0 \quad D_b^{v,irr} \frac{\partial^2 n_b^v}{\partial x^2} = 0 \quad (12)$$

with corresponding boundary conditions

$$\begin{aligned}n_i^a(x=-h_a) &= n_{i0}^a & n_a^v(x=-h_a) &= n_a^0 & n_i^b(x=h_b) &= n_{i0}^b & n_b^v(x=h_b) &= n_b^0 \\ J_a^i(x=h_b) &= \phi_{ia} & J_a^v(x=h_b) &= \phi_{va} & J_b^i(x=-h_a) &= \phi_{ib} & J_b^v(x=-h_a) &= \phi_{vb}\end{aligned}$$

where $n_{i0}^a = n_{i0}^a(K, T)$ and $n_{i0}^b = n_{i0}^b(K, T)$ are densities of interstitials inside A - and B -layers respectively. $J_a = J_a^i + J_a^v$ and $J_b = J_b^i + J_b^v$.

Thus to obtain equation for the thickness of AB layer as function of time, we should to solve equation (10), found corresponding fluxes or rates of reactions and substitute them in (9). Recall that we must use $T^{irr}(K)$ for all parameters which are function of temperature. Now all of them become also functions of defect production rate.

Results and discussion

It is obvious that breaking of stoichiometry as result of excess of diffusing atoms near corresponding interface is possible either at one interface only or not possible at all. The density of A-atoms near surface of B – layer (and B-atoms near A-layer) decreases while AB-layer grows. So, if at initial state ($t=0$, $h=0$ and $n_a^0 > n_b^0$) there is excess, for example, A-atoms, thus there is critical time, t_c , at which stoichiometry is recovered ($t=t_c$ and $n_i^a(x=h_b) + n_i^b(x=h_b) = n_a = n_b^0$) and dependence of chemical reaction rate on concentration changes. To show explicit consequences of this, let consider diffusion with diffusion coefficient D_a of A kind of atoms which are in excess.

The critical time and corresponding thickness of AB-layer are

$$t_c = \frac{D_a(n_a^0 - n_b^0)}{\gamma^2 V_{ab} (n_b^0)^4} \quad \text{and} \quad h_c = h(t_c) = \gamma(n_b^0)^2 V_{ab} t_c = \frac{D_a(n_a^0 - n_b^0)}{\gamma(n_b^0)^2} \quad (13)$$

When $t \leq t_c$, density of A atoms inside the AB-layer and AB-layer thickness from initial state till t_c are

$$n_a(x) = -\frac{\gamma(n_b^0)^2}{D_a} x + n_a^0 \quad (14)$$

$$h(t) = \gamma(n_b^0)^2 V_{ab} t \quad (15)$$

When $t \geq t_c$, we obtain

$$n_a(x, t) = -\frac{\gamma_a^0 n_b^0}{D_a + \gamma_b^0 h(t)} x + n_a^0$$

$$h(t) = \frac{D_a}{\gamma_b^0} \left(-1 + \sqrt{\left(1 + \frac{\gamma_b^0 h_c}{D_a}\right)^2 + \frac{2\gamma^2 V_{ab} (n_b^0)^2 n_a^0}{D_a} (t - t_c)} \right) \quad (16)$$

Thus linear growth of AB-layer is changed by parabolic at t_c . If there are two contributions to growth of AB-layer through diffusion mechanisms or kinds of diffusing atoms, for example A (in excess) and B, we obtain the following.

When $t \leq t_c$, densities of A and B atoms inside the AB-layer are

$$n_a(x) = -\frac{\gamma_b^0}{D_a} (x + h_a) + n_a^0 \quad (17)$$

$$n_b(x, t) = \frac{\mathcal{M}_a^0 n_b^0}{D_b + \mathcal{M}_a^0 h(t)} (x - h_b) + n_b^0 \quad (18)$$

The thickness of AB-layer and time are linked by

$$t = \frac{h}{\mathcal{W}_{ab} n_b^0} \left[1 - \frac{D_a}{\mathcal{M}} \ln \left(1 + \frac{\mathcal{M}_a^0 h}{D_a (n_a^0 + n_b^0)} \right) \right] \quad (19)$$

Critical thickness obtained from $n_a(h_b(t_c)) = n_b^0$ is

$$h_c = h_a(t_c) + h_b(t_c) = \frac{D_a (n_a^0 - n_b^0)}{\mathcal{M}_b^0} \quad (20)$$

Substituting (13) in (12) we obtain critical time

$$t_c = \frac{h_c}{\mathcal{W}_{ab} n_b^0} \left[1 - \frac{D_a}{\mathcal{M}_c} \ln \left(\frac{\mathcal{M}_a^0 h_c}{D_a (n_a^0 + n_b^0)} + 1 \right) \right] \quad (21)$$

When $t \geq t_c$, we get

$$n_a(x, t) = - \frac{\mathcal{M}_a^0 n_b^0}{D_a + \mathcal{M}_b^0 h(t)} (x - h_a) + n_a^0 \quad (22)$$

$$n_b(x, t) = - \frac{\mathcal{M}_a^0 n_b^0}{D_b + \mathcal{M}_a^0 h(t)} (x - h_b) + n_b^0 \quad (23)$$

Hence, rate of compound growth at $t > t_c$, is

$$\frac{dh(t)}{dt} = \mathcal{W}_{ab} (n_a^0 n_b (-h_a(t)) + n_b^0 n_a (h_b(t))) \quad (24)$$

and link between time and thickness of compound layer is

$$t = t_c + \alpha (h^2(t) - h_c^2) + \lambda (h(t) - h_c) - \sigma \ln \left[\frac{\phi h(t) + \psi}{\phi h_c + \psi} \right] \quad (25)$$

Where

$$\alpha = \frac{1}{2V_{ab} [D_b n_b^0 + D_a n_a^0]}, \quad \lambda = \frac{[(D_a n_a^0)^2 + (D_b n_b^0)^2]}{\beta V_{ab} n_a^0 n_b^0 [D_b n_b^0 + D_a n_a^0]^2},$$

$$\sigma = \frac{D_a D_b [D_a n_a^0 - D_b n_b^0]^2}{\beta^2 V_{ab} n_a^0 n_b^0 [D_b n_b^0 + D_a n_a^0]^3}, \quad \psi = D_a D_b,$$

and $\phi = \beta [D_b n_b^0 + D_a n_a^0]$.

Thus in spite of that critical thickness is kept the same, both linear and parabolic growth of compound ceases to be the same. This is result of inter-connection A and B diffusive fluxes through displacement of boundaries of

AB layer. Joint consideration both vacancy and interstitial mechanisms gives the same result.

Deviation from the linear or parabolic dependence indicates the presence of two or more diffusion mechanisms that accounted for growth of AB layer.

Numerical calculations of growth of Ni_2Si layer between nickel (Ni) and silicon (Si) layers without irradiation give the critical thickness of Ni_2Si layer to be about 1.16nm which is close to experimental one (3.3nm) reported in [3]. Numerical calculations and comparing theoretical and experimental results for growth of Pd_2Si layer make us to conclude that the dominant diffusing specie during the growth of Pd_2Si is silicon which is in accord with experimental report in [4-5].

The results of numerical estimation shows that the higher the defect generation rate and irradiation temperature, the more the diffusion coefficient of the dominant atomic specie(s) in the growing silicide and the thicker the critical thickness become. However, the critical time of the growing silicide remain practically the same.

Figures 1 and 2 depict the effect of vacancy generation and radiation heating on the growing silicide over a period of 20 seconds. The influence of radiation heating on the growing compound is practically the same as that of vacancy generation. Thus influence of diffusion dominate one of chemical reaction rate.

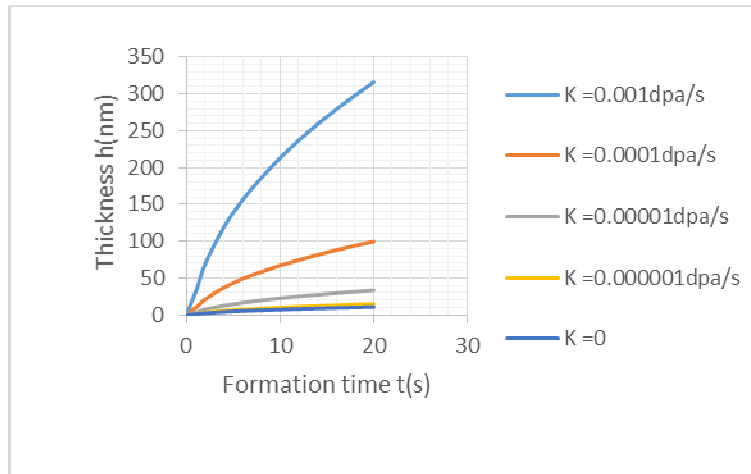


Figure 1. The nickel silicide growth due to vacancy mechanism

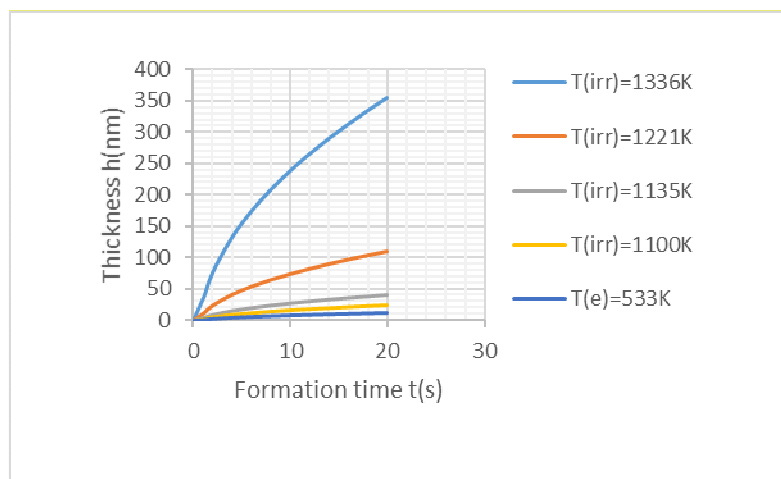


Figure2. Radiation heating influence on nickel silicide growth

References

1. G. S. Was Fundamentals of Radiation Materials Science. Springer Berlin Heidelberg New York 2010, 827 p.
2. V.I. Dybkov, Phase Formation and Diffusion in Binary System: Real Facts and Misleading views
3. F. Nemouchi, D. Mangelinck, C. Bergman, and P. Gas, Appl. Phys. Lett. 86 041903 (2005) 1-3.
4. K.T. Ho, C.D. Lien, V. Shreter, and M.A. Nicolet, J.Appl. Phys. 57, (1985) 227.
5. C.M. Comrie, J.M. Egan, J. Appl. Phys. 64, (1988) 1173.
6. U. Gosele, and K.N. Tu, J. Appl. Phys. 53 (4) (1982) 3252
7. G.W. Rubloff and P.S. Ho, Thin Solid Films, 93 (1982) 21-40
8. I.K. Robinson, P.J. Eng, Appl. Surf. Sci. 60/61 (1992) 498-504
9. E. Mirowski and S.R. Leone, J. Crys. Growth 219 (2000) 368-378
10. R.M. Tromp, E.J. Van Leone, R.G. Smeenk, F.W. Saris, Thin Solid Films 93 (1982) 151
11. B.Y. Tsaur, S.S. Lau, and J.W. Mayer, Thin Solid Films, 63, (1979) 31-36.
12. B.Y. Tsaur, S.S. Lau, and J.W. Mayer, Appl. Phys. Lett., 34(2), (1979)168-170.
13. G.E. Chapman, S.S. Lau, S. Matteson, and J.W.Mayer, J. Appl. Phys., 50 (10), (1979)6321-6327
14. B.Y. Tsaur, S.S. Lau, and J.W. Mayer, Appl. Phys.Lett., 35(2), (1979)225-227.

15. C.N. Whang, H.K. Kim, R.Y. Lee, R.J. Smith, *J.Mate. Sci.*, 24 (1989) 270
16. Tamulevicius S., Pranevicius L., Budinavicius J., *Appl. Surf. Sci.*, 53 (1991) 159.
17. N. Boussaa, A. Guittoum, S. Tobbeche, *Vac.* 77 (2005) 125
18. G. Valyi, H. Ryssel, O. Ganschow, R. Jede, *Appl.Surf. Sci.* 38 (1989) 235.
19. R. Schmid V. N.Sapunov *Non-formal kineticks*. Verlag Chemie GmbH, 1982 264p
20. Selyshchev P.A. *Self-organization phenomena in nuclear materials*, Moscow, NITs “Regular and chaotic dynamics” 2008, 208 p.

**Труды XXV Международной конференции
«Радиационная физика твёрдого тела»
(Севастополь, 6 – 11 июля 2015 г.)**

Научный редактор:
д.ф.-м.н. Бондаренко Геннадий Германович

Подписано в печать 29. 05. 2015г.
Бумага типографская. Печать - ризография.
Формат 70х108/16.
Тираж 100 экз. Заказ 385.

Издательство ФГБНУ «НИИ ПМТ»
115054, Москва, ул. М.Пионерская, д. 12
Тел/факс (499) 959-37-03, 959-37-05 e-mail:
info@niipmt.ru

Отпечатано в ООО «Телер»
125130, Москва, ул. Клары Цеткин, д. 28
Тел/факс (495) 937-86-64, e-mail: piskarev@teler.ru

