

ТЕРМОДИНАМІКО-КІНЕТИЧНИЙ ОПИС РАДІАЦІЙНОЇ АМОРФІЗАЦІЇ НАНОКРИСТАЛІЧНОГО SiC З УРАХУВАННЯМ ЕВОЛЮЦІЇ ДЕФЕКТІВ ТА НУКЛЕАЦІЇ

Ю.С. Білогородський, А.С. Шірінян, В.Ю. Сторіжко, О.М. Кріт

Інститут прикладної фізики НАН України, Київ, Україна

Карбід кремнію (SiC) є важливим матеріалом сучасних технологій завдяки високій теплопровідності, твердості, хімічній інертності та термічній стабільності. Його широка електронна заборонена зона і здатність працювати в екстремальних умовах роблять його перспективним для електроніки та ядерних і аерокосмічних застосувань. Водночас опромінення спричиняє утворення точкових дефектів, що змінюють властивості матеріалу й можуть викликати аморфізацію, зумовлюючи потребу в розумінні механізмів деградації SiC.

Метою нашого дослідження є теоретичний опис пояснення схильності до аморфізації опроміненого нанокристалічного SiC. Зокрема, ми досліджуємо, як накопичення радіаційно-індукованих точкових дефектів впливає на вільну енергію Гіббса нанозерен 3C-SiC та їхню стійкість до кристалічно-аморфного перетворення під дією опромінення [1].

Методологія. У рамках теорії хімічної кінетики розглядаються нестационарні диференціальні рівняння, що описують утворення і дифузію радіаційно-індукованих дефектів, рекомбінацію всередині та анігіляцію дефектів на зовнішніх межах зерен [2]. Використовуючи термодинамічне наближення Гіббса в поєднанні з теорією хімічної кінетики, ми моделюємо радіаційну аморфізацію опроміненого нанокристалічного SiC. Ми визначаємо і будуємо профілі концентрації дефектів, що залежать від розміру зерна, та показуємо, що аморфізація матеріалу — це фазовий перехід першого роду, який має враховувати стадію зародкоутворення нової фази.

Ми розглядаємо два підходи: (1) без урахування нуклеації, де ми порівнюємо початкові та кінцеві значення енергії системи; (2) з урахуванням нуклеації, де енергія системи визначається як для початкового стану, так і для проміжних двофазних станів. Параметри розрахунків в рівняннях були визначені для випадку опромінення іонами Si^+ з енергіями 10-50keV і швидкістю генерації дефектів $K_V=2 \cdot 10^{-3}$ зна/с [1].

Результати. У рамках дослідження ми показуємо, що: 1) відносні концентрації радіаційних вакансій у нанорозмірних зернах SiC вищі, ніж у масивному матеріалі SiC; 2) відхилення концентрацій вакансій та міжвузлів від концентрацій в опроміненому масивному матеріалі становить порядку 5–10 % для зерен розміром $d=2$ нм; 3) концентрація вакансій збільшується зі зменшенням розміру зерна.

Врахування нуклеації суттєво змінює опис, роблячи його ключовим фактором у розумінні поведінки аморфізації нанозерен SiC, а порівняння з експериментальними даними показують кращу узгодженість: збільшується необхідна доза опромінення для аморфізації (DTA) нанозерен порівняно з підходом без урахування нуклеації, проте не призводить до вищих значень DTA порівняно з об'ємними зразками. Запропонована модель передбачає зменшення дози для аморфізації зі зменшенням розміру зерна, а також показує, що сам по собі поверхневий стік (анігіляція) радіаційно-індукованих точкових дефектів не забезпечує підвищення радіаційної стійкості нанокристалічного SiC без урахування інших механізмів, зокрема нуклеаційних ефектів.

Дослідження проводяться у рамках НДР Лабораторії композиційних матеріалів атомно-водневої енергетики Інституту прикладної фізики НАН України (РК 0125U000276) під керівництвом д.ф.-м.н. Арама Шіріняна.

1. Yu. Bilogorodskyy, A. Shirinyan, V. Storizhko «Radiation-induced crystalline-to-amorphous transition in SiC nanocrystals: Role of nucleation barriers» Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 573, p. 165998, 2026.
2. A.S. Shirinyan, Yu.S. Bilogorodskyy. «Effect of radiation-induced vacancy saturation on the first-order phase transformation in nanoparticles: insights from a model» Beilstein Journal of Nanotechnology, 15, p. 1453–1472, 2024.