



UZ9700744

## ВЛИЯНИЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ НА РАДИАЦИОННОЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ

Ш.А.Вахидов, И.Нуритдинов, Ж.Д.Ибрагимов  
ИЯФ АН РУз, 702132, Ташкент, п.Улутбек

Известно [1], что для обсуждения радиационного дефектообразования в неупорядоченных твердых телах наиболее удобным является классификация, разделяющая всевозможные разновидности неупорядоченностей на позиционную, композиционную и топологическую. В настоящей работе приводится обзор результатов систематических исследований влияния таких типов неупорядоченностей на радиационное дефектообразование в широкощелевых твердых телах на примере оксидных и фторидных материалов.

1. ПОЗИЦИОННАЯ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТЬ (ПН) характеризуется сохранением координационного числа  $K$  на первой координационной сфере для всех атомов топологической сетки, при этом неупорядоченность возникает из-за постоянного нарушения дальнего порядка при случайных отклонениях угла связи и межатомных расстояний координационных партнеров. Поэтому спектр энергии связи атомов  $I(U)$  существенно расширяется по сравнению с идеальным кристаллом, где спектр характеризуется дельта функцией  $I(U) = \delta(U - U_0)$ . Функция при ПН имеет квазинепрерывный несимметричный вид с максимумом, а максимум функции смещается в сторону меньших энергий по сравнению с  $U_0$  идеального кристалла данного химического состава. Это приводит к уменьшению энергии дефектообразования (в том числе радиационного) в неупорядоченной среде. Более существенные изменения при ПН происходит для энергии миграции  $Q_m$  междоузельного атома. В силу отличия размеров междоузлия и геометрии атомов, составляющих междоузельных положений, спектр  $I(Q_m)$  сильно уширяется по сравнению с

кристаллом  $\delta(Q_m - Q_{m_0})$ . Экспериментальные результаты для ПН обсуждаются на примере кристаллического и стеклообразного кварца.

2. КОМПОЗИЦИОННАЯ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТЬ (КН) возникает в многокомпонентных соединениях из-за случайных распределений отдельных компонентов по связям с сохранением топологической сетки. В данном случае из-за ограниченного числа комбинаций с возможными ближайшими соседями атомов данного компонента, как для  $U_0$ , так и для  $Q_0$ , имеется дискретный спектр:  $U_0 = \{U_i\}$ ,  $Q_0 = \{Q_j\}$ . Эксперименты для данного типа неупорядоченности обсуждаются на примере кристаллов кварца и фторидов щелочноземельных элементов.

3. ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТЬ (ТН) обусловлено разрывом топологической сетки и может иметь место в сильнодефектных кристаллах и реальных стеклообразных соединениях. В целом позиции атомов в топологической сетке являются случайными,  $f(U_0) \neq \delta(U - U_0)$  и  $f(Q_m) \neq \delta(Q_m - Q_{m_0})$ . В случае сильнодефектного кристалла для  $U_0$  и  $Q_m$  наряду со спектром типа  $\delta$  функциями, обусловленной регулярной частью кристалла, имеется дискретный спектр  $\{U_i\}$ , связанной с имеющимися дефектами в матрице. Значение  $U_0$  и  $Q_m$  в стеклообразном веществе с ТН из-за отсутствия трансляционной симметрии и в областях "регулярной" сетки и в разрывных областях сетки имеют непрерывный спектр. Поэтому  $f(U_0)$  и  $f(Q_m)$  имеют квази непрерывный вид. Экспериментальные результаты для ТН обсуждаются на примере  $SiO_2$ , оксидорто- и пирофосфатов иттрия.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. П.К.Хабибуллаев, Б.Аскароев, А.Г.Будревич и др. Теоретические аспекты радиационной физики неупорядоченных сред. // В кн: Радиационные эффекты в многофазных гетерогенных диэлектриках. Ташкент, "Фан", 1988, С. 3-48.