



Ордена Ленина и ордена Октябрьской революции

Институт атомной энергии

им. И. В. Курчатова

В.А. Николаенко, П.А. Платонов

ИАЭ-4240/11

ИАЭ -- 4240/11

**ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ПАРАМЕТРЫ  
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ГРАФИТА**

Москва 1986

**Ордена Ленина и ордена Октябрьской Революции  
Институт атомной энергии им. И.В. Курчатова**

**В.А. Николаенко,  
П.А. Платонов**

**ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ПАРАМЕТРЫ  
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ГРАФИТА**

**Москва  
1986**

**Ключевые слова:** модель порядка связи, графит, облучение, межузельный атом, вакансия, комплекс, концентрация дефектов, расширение графита по оси  $c$ , сжатие графита по оси  $a$ .

В работе на основе модели порядка связи (использована зависимость расстояния между атомами углерода от порядка связи) рассчитаны вклады межузельных атомов и вакансий в изменение параметров кристаллической решетки графита по осям  $c$  и  $a$ . На основе этой же модели определен вклад в изменение параметров решетки графита от скоплений межузельных атомов: двойных, тройных и более крупных, вплоть до экстраплоскостей. Проанализировано отношение  $\Delta c/c: \Delta a/a$  для облученного графита в зависимости от температуры облучения или отжига. Качественно расчетные значения этого отношения для дефектов определенного типа согласуются с экспериментом.

В работах [1, 2] для оценки концентрации точечных дефектов в облученном нейтронами алмазе была использована модель порядка связи, основанная на зависимости расстояния между атомами углерода  $r$  от порядка связи  $n$ . Зависимость  $r = f(n)$  для углерода уже приводилась во многих работах и использовалась для нахождения различных характеристик углеродных материалов. Эта зависимость обоснована и для порядков связи, меньших единиц.

В данной работе использована зависимость  $r = f(n)$ , построенная на основе следующих соображений. Если связь между атомами отсутствует, т.е. порядок связи стремится к нулю, то расстояние между атомами углерода должно быть бесконечно большим. При увеличении порядка связи это расстояние уменьшается, но не может стать меньше некоторого минимального, соответствующего наибольшему числу электронов, осуществляющих ковалентную связь. Поэтому эмпирическое выражение для зависимости  $r = f(n)$  было выбрано в виде гиперболы. Постоянные коэффициенты уравнения определялись методом наименьших квадратов с использованием значений  $r$  и  $n$  тех углеродных соединений, для которых эти величины установлены с большой степенью достоверности. Выражение имеет вид

$$r = 1,09 + 0,45 : n. \quad (1)$$

Эта зависимость может быть использована и для графита, являющегося иной, чем алмаз, аллотропической модификацией углерода. Изменение параметров кристаллической решетки графита вызывается, как и у алмаза, точечными дефектами. Эти дефекты — вакансии и межузельные атомы, а также небольшие скопления межузельных атомов, локализуясь в определенных положениях в решетке, искажают ее. Искажения, заключающиеся в смещении атомов около дефектов, приводят к изменению параметров решетки и всего объема материала.

Для оценки величины новых связей (порядков связи), возникающих около точечного дефекта, используем допущения:

- 1) межузельный атом и вакансия электрически нейтральны;
- 2) электроны межузельного атома и электроны, освободившиеся у атомов, соседних с вакансией, затрачиваются на установление новых связей, причем в пределах первой координационной сферы.

Данные по расширению решетки графита, облученного в разных условиях, а также графита, отожденного после облучения, имеются во многих работах. Однако вклад дефектов различного типа в расширение решетки окончательно не установлен. Считается, что в графите, облученном при температуре выше  $300^{\circ}\text{C}$ , сохраняются лишь вакансии, изолированные же межузельные атомы и небольшие комплексы из них за счет их большей подвижности исчезают, трансформируясь в более крупные образования (экстраплоскости).

Для графита порядок связи в плоскости базиса, где расстояние между атомами углерода  $r = 1,42\text{ \AA}$ , согласно выражению (1) составляет  $n = 1,36$ , а между атомами в соседних плоскостях  $n = 0,20$  (здесь  $r = 3,35\text{ \AA}$ ).

В решетке графита атомы кристаллохимически неэквивалентны, имеются атомы с координацией (3,2), а также с координацией (3) или (3,12). Поэтому при образовании межузлий высвобождается  $1,36 \times 3 + 0,20 \times 2 = 4,48$  или  $1,36 \times 3 = 4,08$  электрона. Для расчета влияния межузельных атомов используем среднюю величину 4,28 электрона, так как из обоих типов атомов решетки межузельные атомы образуются практически в равных количествах. Эти 4,28 электрона затрачиваются на связи межузельного атома с соседями (столько же электронов, освобожденных около вакансий, будет распределено между ближайшими к ней соседними атомами).

Попытаемся, исходя из модели порядка связи, определить вклад в деформацию решетки графита по оси  $c$  от изолированных межузельных атомов и их сегрегаций типа  $C_2$ ,  $C_3$  и вообще  $C_m$ . Значения вклада межузельного атома в расширение графита по оси  $c$ , приводимые в работах [3 — 5], составляют 5,3; 4 и 3 соответственно. Однако межузельные атомы в изолированном состоянии могут присутствовать в графите лишь при очень низких температурах, так как энергия активации их миграции, как следует из работ [6 — 8], составляет сотые доли электронвольта: 0,02 — 0,07 эВ. Поэтому изолированные межузельные атомы при температуре выше азотной практически отсутствуют.

Обсудим с точки зрения модели порядка связи отжиг межузельных атомов путем их объединения в псевдомолекулы — сначала  $C_2$ , а затем  $C_m$  и далее в экстраплоскости (отжиг путем аннигиляции межузельных атомов и вакансий, который всегда ведет к восстановлению решетки, здесь не рассматривается). При объединении межузельных атомов часть их электронов должна быть затрачена на связи между атомами в "молекуле", следовательно, число электронов и порядок связи в направлении

$c$  уменьшаются, а это ведет к увеличению расстояния между атомами. Объединение "молекул" в экстраллоскости ведет уже к уменьшению параметра  $c$ , так как теперь вклад в расширение дают лишь пограничные атомы экстраллоскости. Таким образом, из модели порядка связи качественно следует, что при данной концентрации межузельных атомов по мере увеличения температуры должно наблюдаться сначала увеличение, а затем уменьшение параметра  $c$  [9]. Количественные расчеты можно провести, вводя некоторые допущения.

1. Межузельные атомы, изолированные и входящие в состав различных образований, располагаются между базисными плоскостями, т.е. их координата по оси  $c$  в ячейке графита равна  $1/4$ .

2. Межузельные атомы, образующие плоские "молекулы", комплексы и т.п., стремятся в конечном итоге образовать экстраллоскости, геометрия расположения атомов в которых такая же, как и в любой базисной плоскости графита. Поэтому за элемент построения любого объединения принимается двойка атомов углерода, отстоящих друг от друга на расстоянии  $1,42\text{\AA}$ .

3. Образующиеся экстраллоскости располагаются между плоскостями графита в положении  $C$ , создавая чередование слоев не  $ABAB\dots$ , как в идеальном графите, а, например,  $ABCABACB\dots$ . Благодаря этому в графите между слоями, в том числе и состоящими из дефектных атомов, сохраняются обычные связи. При этом координатами межузельных атомов, изолированных и входящих в состав комплексов, являются  $[2/3 + m, 1/3 + n, 1/4]$  или  $[1/3 + m', 2/3 + n', 1/4]$ , где  $m, n, m'$  и  $n'$  — целые числа.

Эти же положения, как наиболее устойчивые, были приняты в расчетах по расширению графита от межузельных атомов в работе [10]. Следует отметить, что в другой работе допускалось иное положение межузельного атома [11]. Здесь он размещался над или под регулярным атомом с координатой (3). Довод в пользу такого положения состоял в организации в этом случае свойственной углероду тетраэдрической конфигурации. Это положение, однако, как следует из работы [1], не приводит к расширению графита и здесь не рассматривается.

На рис. 1 приведена проекция атомов графита на плоскость базиса, связи в слоях  $A$  и  $B$  помечены сплошными и штриховыми линиями соответственно. На этом же рисунке приведено несколько типов комплексов, спроектированных на плоскость базиса. Все эти комплексы располагаются в слоях типа  $C$ , а связи между атомами в комплексе показаны пунктиром.

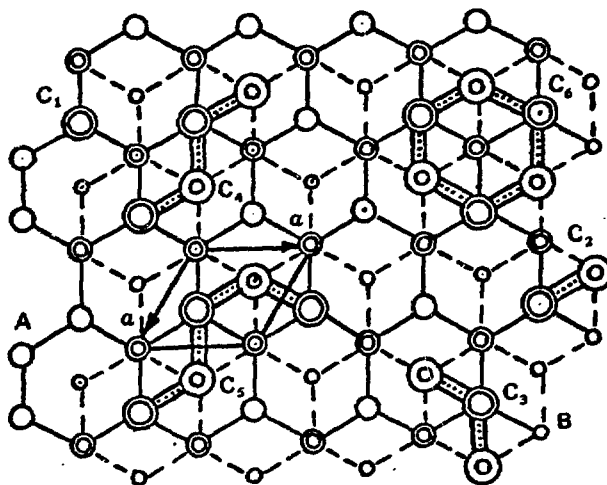


Рис. 1. Проекция атомов углерода на плоскость базиса. Помечены плоскости типа А и В, стрелками выделена элементарная ячейка, показаны несколько типов комплексов из межузельных атомов

Вычислим вклад в расширение решетки графита по оси  $c$  от межузельных атомов, входящих в комплексы, приведенные на рис. 1.

1. Изолированный межузельный атом. Размещаем его в соответствии с принятыми допущениями в положении  $[2/3, 1/3, 1/4]$ . Координация этого атома равна 7 (один атом в слое А и шесть атомов в слое В). При этом межузельный атом организует с соседними семью атомами порядок связи  $n = 0,31$ , в результате расстояние между атомами  $r = 2,56\text{Å}$ , что дает  $\alpha_{ic} = 0,4$ .

2. "Молекула"  $C_2$ . В соответствии с допущениями имеем расстояние между атомами в "молекуле"  $r = 1,42\text{Å}$  и порядок связи между атомами в молекуле  $n = 1,36$ . Поэтому на связи с атомами соседних базисных плоскостей у каждого атома комплекса  $C_2$  останется по 2,92 электрона. Координация опять равна 7, это дает  $n = 0,21$ ,  $r = 3,24\text{Å}$  и  $\alpha_{ic} = 0,84$ .

3. "Молекула"  $C_3$ . Здесь два крайних атома имеют, как и для образования  $C_2$ ,  $\alpha_{ic} = 0,84$ . Средний же атом молекулы  $C_3$  при  $Z = 7$  с атомами соседних базисных плоскостей устанавливает порядок связи  $n = 0,11$ , так как у него на эти связи остается всего 1,56 электрона. Соответственно этому расстояние от дефектного атома до соседних регулярных равно  $r = 5,14\text{Å}$  и  $\alpha_{ic} = 2,01$ . Тогда среднее по всем атомам этого комплекса значение  $\alpha_{ic} = 1,26$ .

4. Аналогичные рассуждения дают для  $C_4$   $\alpha_{ic} = 1,42$ .

5. "Молекула"  $C_5$  имеет  $\alpha_{ic} = 1,54$ .

6. Для "молекулы" гексагональной конфигурации получаем  $\alpha_{ic} = 2,01$ .

Имеется возможность рассчитать также влияние межузельных атомов на расширение решетки по оси  $c$ , когда они входят в состав более сложных образований. В этих случаях форма комплекса влияет на величину  $\alpha_{ic}$ , однако для больших образований отклонения незначительны. Для комплексов с числом атомов 24, 66, 96,  $10^3$  и  $10^4$  значения  $\alpha_{ic}$  равны 1,00; 0,61; 0,50; 0,13 и 0,06 соответственно. Все полученные значения  $\alpha_{ic}$  нанесены на рис. 2, где фактически воспроизведена функция, дающая значение вклада межузельного атома в расширение решетки графита по оси  $c$  в зависимости от размера комплекса [9].

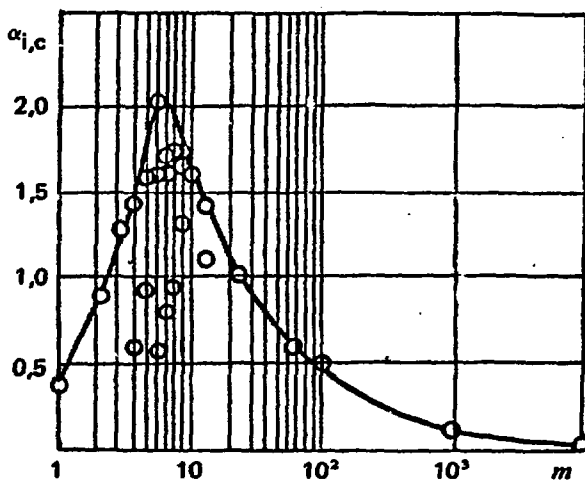


Рис. 2. Зависимость вклада межузельных атомов в расширение решетки графита по оси  $c$  от числа атомов в комплексе

Таким образом, из модели порядка связи следует, что расширение решетки графита по оси  $c$  при постоянной концентрации межузлий увеличивается за счет числа атомов, входящих в комплекс от одного до 6 – 10. Дальнейшее увеличение числа атомов в комплексе приводит уже к не столь значительному росту параметра  $c$ .

До сих пор мы учитывали только изменение параметра  $c$ , однако можно определить влияние межузельных атомов и на параметра решетки графита. Схема расчета приведена на рис. 3. Из рисунка видно, что благодаря симметрии межузельный атом смещает атом  $M$  вертикально вверх, однако смещение атома  $N$  определяется сопротивлением, оказываемым ему силами, действующими по осям  $c$  и  $a$ . Условия равновесия атома  $N$  в новом положении  $N'$  после смещения записываются как



$$F_1 = F \cos \alpha \text{ и } F_2 = F \sin \alpha, \quad (2)$$

откуда имеем

$$\frac{F_1}{F_2} = \operatorname{ctg} \alpha = \frac{4a}{\sqrt{3}c}, \quad (3)$$

где

$$F_1 = k\epsilon_1 E_1 = k \frac{\Delta a}{a} E a, \quad (4)$$

$$F_2 = k\epsilon_2 E_2 = k \frac{\Delta c}{c} E c. \quad (5)$$

Здесь  $E_1 = E_a = 116 \cdot 10^{10}$  Па и  $E_2 = E_c = 4.7 \cdot 10^{10}$  Па [12].

Подставляя значения  $F_1$  и  $F_2$  в выражение (3), получаем

$$\Delta a/a = 0,04 \Delta c/c, \quad (6)$$

где  $\Delta c/c$  — изменение параметра  $c$  графита из-за межузельных атомов, изолированных или входящих в состав комплексов.

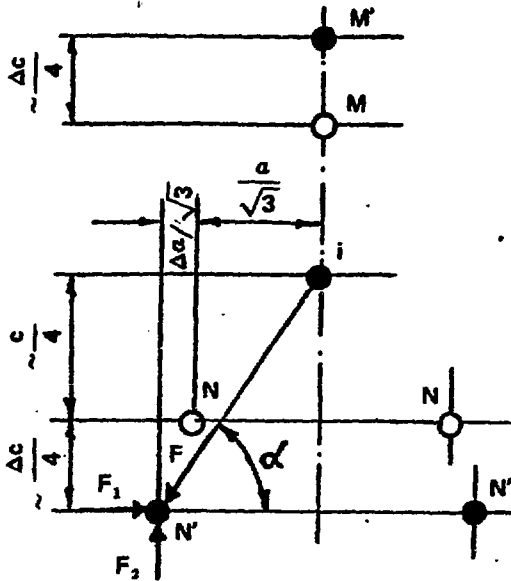


Рис. 3. Схема для расчета смещения атомов в решетке графита под действием межузельного атома ( $i$ );  $M, N$  ( $\circ$ ) — атомы в исходных положениях;  $M', N'$  ( $\bullet$ ) — в смещенных положениях

Из выражения (6) видно, что межузельные атомы несколько увеличивают и параметр  $a$  графита. Это незначительное увеличение в сочетании с уменьшением  $a$  из-за вакансий, как будет показано ниже, имеет большое

значение для объяснения поведения зависимости  $\Delta c/c : \Delta a/a$  от температуры облучения.

Таким образом, в зависимости от концентрации межузельных атомов и сложности комплекса\* для изменения параметра  $c$  можно записать

$$\Delta c/c = 0,4 C_{i,1}; \quad (7)$$

$$\Delta c/c = 0,84 C_{i,2}; \quad (8)$$

$$\Delta c/c = 2,01 C_{i,6}. \quad (9)$$

Используя эти выражения, а также (6), получаем относительное изменение параметра  $a$  графита, связанное с влиянием межузлий:

$$\Delta a/a = 0,04 \cdot 0,4 C_{i,1} = 0,016 C_{i,1}; \quad (10)$$

$$\Delta a/a = 0,034 C_{i,2}; \quad (11)$$

$$\Delta a/a = 0,08 C_{i,6}. \quad (12)$$

Теперь, также исходя из модели порядка связи, рассмотрим влияние вакансий на оба параметра решетки графита. При образовании вакансии, как уже отмечалось, у ближайших соседних атомов высвобождаются электроны, которые распределяются на связи с соседями. В плоскости базиса около вакансии располагаются три атома, каждый из них теперь в этой плоскости связан только с двумя соседями. Получаем шесть пар атомов с порядком связи  $n = 1,36 + 4,28 : (6 \times 2) = 1,72$ . Кроме того, в этой же базисной плоскости появятся избыточные электроны за счет вакансий, создающихся в соседних базисных плоскостях на местах атомов с координатой (3,2). Это также изменит порядок связи, теперь от  $n = 1,36$  до  $n = 1,36 + 0,20 : (3 \times 2) = 1,39$ . Тогда средний по кристаллу порядок связи в плоскости базиса в зависимости от концентрации вакансий составит

$$n = 1,36(1 - 6C_v - 6C_v) + 6 \cdot 1,72 C_v + 6 \cdot 1,39 C_v = 1,36 + 2,36 C_v. \quad (13)$$

Вакансия в решетке графита приводит к сжатию базисной плоскости по двум причинам: из-за упругой релаксации соседних атомов в вакансию и благодаря изменению расстояний между атомами из-за перераспределения связывающих электронов. Первый эффект предполагается малым, так как связи очень жесткие, второй же эффект является определяющим

\* Индексы при концентрации межузельных атомов  $C_{i,x}$  обозначают сложность комплекса: 1—изолированный межузельный атом, 2—молекулы  $C_2$ , 6— комплексы из шести атомов, имеющие гексагональную конфигурацию.

(эти же доводы использовал Келли [3]). Теперь, комбинируя выражения (13) и (1), получаем

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{\Delta r}{r} = \frac{-0,4 C_v}{1 + 1,74 C_v} \approx -0,4 C_v. \quad (14)$$

Можно определить новый порядок связи и по оси  $c$  графита из-за вакансий. В этом направлении связи, наоборот, очень слабые. Оценим новый порядок просто из условия равенства нулю порядка связи над вакансиями (это аналогично нулевому порядку связи над атомами с координацией 3), имеем тогда

$$n = 0,2(1 - C_v). \quad (15)$$

Из (15) и (1) получаем

$$\frac{\Delta c}{c} = \frac{\Delta r}{r} = \frac{0,67 C_v}{1 - C_v} \approx 0,67 C_v. \quad (16)$$

Таким образом, оцененные по модели порядка связи значения вклада вакансий в изменение параметров  $a$  и  $c$  кристаллической решетки графита составляют  $\alpha_{v,a} = -0,4$  и  $\alpha_{v,c} = 0,67$ . Эти коэффициенты позволяют по экспериментальным значениям  $\Delta c/c$  и  $\Delta a/a$  рассчитать концентрации вакансий для температур облучения более  $300^\circ \text{C}$ , когда роль межузельных атомов, точнее комплексов из них, практически не проявляется. Результаты таких расчетов, проведенных по соотношениям Келли, Хэнсона и Грея [3 – 5], а также по нашей модели, приведены в таблице. Для расчетов были использованы значения  $\Delta a/a$  и  $\Delta c/c$  из работы [13].

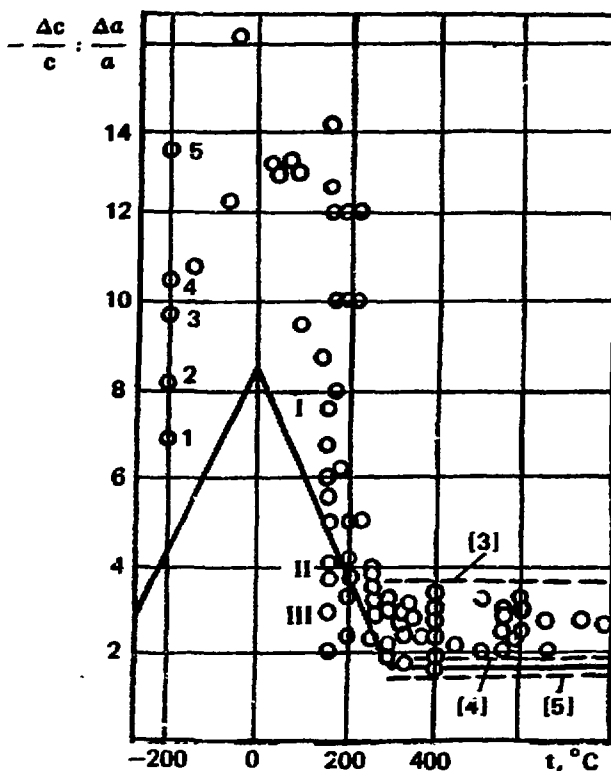
#### Концентрация вакансий в облученном графите\*

Флюенс, $\times 10^{20}$ нейтр./см <sup>2</sup> , $E > 0,18$ МэВ	Температура, °C	$\Delta c/c$ , %	$\Delta a/a$ , %	Расчетные значения			
				Келли [3]	Хэнсона [4]	Грея [5]	данной работы
3,1	300	0,99	0,44	1,9	5,0	5,0	1,47
				3,1	4,0	3,1	1,10
13	400	0,78	0,41	1,5	3,9	3,9	1,16
				2,9	3,7	2,9	1,00
50	650	0,31	0,11	0,6	1,6	1,6	0,46
				0,8	1,0	0,8	0,27
35	900	0,13	0,045	0,25	0,65	0,65	0,19
				0,32	0,41	0,32	0,11

\* В числителе даны концентрации вакансий, определенные по  $\Delta c/c$ , в знаменателе — по  $\Delta a/a$ .

Во многих работах имеются экспериментальные данные по отношению  $\Delta c/c : \Delta a/a$  для различных условий облучения, а также для отожженного облученного графита. Такие данные, взятые из работ [3 – 5, 13 – 20], представлены на рис. 4. Видно, что это соотношение, в зависимости от температуры облучения или отжига, по абсолютной величине сначала увеличивается, а затем уменьшается. При температуре более  $300^\circ\text{C}$  величина  $\Delta c/c : \Delta a/a$  остается примерно постоянной.

Рис. 4. Отношения  $\Delta c/c : \Delta a/a$  для графита в зависимости от температуры облучения или отжига ( $c$ ); ——— результаты расчетов, основанных на модели порядка связи; ---- расчеты по другим моделям; цифрами 1 – 5, а также I – III обозначены результаты для последовательно возрастающих доз облучения при низкой [15] и повышенной [17] температурах соответственно



Попытаемся описать эту функцию с помощью полученных из модели порядка связи соотношений. Значения  $\Delta c/c : \Delta a/a$  в зависимости от концентрации вакансий и межузельных атомов, входящих в различные комплексы, известны для трех характерных случаев:

- 1) изолированные межузельные атомы (они существуют при минимальных температурах облучения, для них  $\alpha_{i1} = 0,40$ ) и вакансии;
- 2) комплексы  $C_6$  гексагональной конфигурации, температура, по-видимому, порядка  $(-100 \div +100)^\circ\text{C}$ ,  $\alpha_{i6} = 2,01$  и вакансии;
- 3) экстралоскости с числом атомов более  $10^4$  (температура более  $300^\circ\text{C}$ ),  $\alpha_i \approx 0$  и вакансии.

Для этих трех случаев получаем соответственно

$$\Delta c/c = 0,67 C_v + 0,4 C_{i,1} = 1,07 C; \quad (17)$$

$$\Delta c/c = 0,67 C_v + 2,01 C_{i,6} = 2,68 C; \quad (18)$$

$$\Delta c/c = 0,67 C_v = 0,67 C. \quad (19)$$

Здесь  $C$  — концентрация точечных дефектов, вакансий или межузельных атомов, для последних независимо от того, в какие комплексы они входят.

Значения  $\Delta a/a$  для этих же трех случаев равны:

$$\Delta a/a = -0,4 C_v + 0,016 C_{i,1} = -0,38 C \quad (20)$$

$$\Delta a/a = -0,4 C_v + 0,08 C_{i,6} = -0,32 C. \quad (21)$$

$$\Delta a/a = -0,4 C_v = -0,4 C. \quad (22)$$

Комбинируя полученные в выражениях (20) — (22) значения  $\Delta a/a$  с величинами  $\Delta c/c$  из (17) — (19), получаем расчетную величину отношения  $\Delta c/c : \Delta a/a$  для этих трех предельных случаев:  $-2,8$ ;  $-8,4$  и  $-1,7$  соответственно. Полученные значения приведены на рис. 4 и соединены сплошными линиями.

Интересно проанализировать экспериментальные данные по отношению  $\Delta c/c : \Delta a/a$ , полученные при одной температуре, но при разных флюенсах нейтронов. По мере роста температуры сложность комплексов увеличивается, должна она увеличиваться также и при увеличении флюенса нейтронов, т.е. концентрации дефектов, так как при этом просто растет вероятность встречи дефектов, а следовательно, и образования более сложных комплексов. Таким образом, данные по величине  $\Delta c/c : \Delta a/a$  при постоянной температуре должны характеризовать динамику комплексообразования в зависимости от концентрации дефектов. Из модели порядка связи следует, что при низких температурах рост концентрации дефектов должен вести к увеличению отношения  $|\Delta c/c : \Delta a/a|$ , а при повышенных температурах — к его уменьшению.

В работе [17] приведены данные по облучению графита при  $150^\circ\text{C}$ . Они свидетельствуют об уменьшении отношения  $\Delta c/c : \Delta a/a$  по мере увеличения дозы облучения. На рис. 4 эти данные помечены цифрами I — III, относительные дозы нарушающих нейтронов для этих точек составляют 1; 2,2 и 4,0 соответственно.

Для низких температур эксперимент также подтверждает ожидаемый из модели порядка связи результат. Это иллюстрируется рис. 4, где данные

по облучению графита при азотной температуре флюенсами 0,8; 3,0; 4,2; 6,0 и 8,3 на  $10^{18}$  нейтр./см<sup>2</sup> ( $E > 1$  МэВ) помечены цифрами 1 – 5 соответственно. Видно, что соотношение  $\Delta c/c : \Delta a/a$  растет по абсолютной величине с увеличением флюенса нейтронов [15].

Молекулы  $C_m$  с  $m > 3$  могут иметь разные конфигурации, приводящие к разным значениям  $\alpha_{ic}$ . Например, для разомкнутой молекулы  $C_6$   $\alpha_{ic} = 1,62$ , можно представить и такую ее геометрию, при которой  $\alpha_{ic} = 0,56$ . Приведем и некоторые другие значения  $\alpha_{ic}$  для комплексов с разной геометрией расположения атомов:  $\alpha_{i_4} = 0,63$ ;  $\alpha_{i_5} = 0,91$ ;  $\alpha_{i_7} = 0,77$ ; 1,56; 1,68;  $\alpha_{i_8} = 0,92$ ; 1,61; 1,72;  $\alpha_{i_9} = 1,3$ ; 1,66; 1,75;  $\alpha_{i_{10}} = 1,61$ ;  $\alpha_{i_{12}} = 1,12$ ; 1,41 и т.д. Все эти значения приведены на рис. 2.

Образование тех или иных конфигураций комплексов, а также их перестройка, изменение и укрупнение определяются факторами, действующими при облучении. Большое влияние могут оказать условия приготовления образца, например температура обработки перед облучением [21]. Поэтому всегда можно ожидать различий в экспериментальных результатах. Например, в работе [22] исследовались параметр  $c$  решетки и электросопротивление пирографита после облучения и отжига. Флюенс нейтронов составил  $1,4 \cdot 10^{18}$  нейтр./см<sup>2</sup> ( $E > 1,0$  МэВ), температура облучения  $-195^\circ \text{C}$ . При этом расширение по оси  $c$  после облучения составило 0,6%. Было показано, что параметр решетки и электросопротивление при отжиге сначала возрастали, а затем, при температуре примерно  $-50^\circ \text{C}$ , плавно уменьшались. Подобное явление отмечено и в работе [23]. В работе [24] также исследован характер отжига облученного при низкой температуре пирографита. Облучение в этом случае проведено при температуре 5 К, флюенс составил  $3 \cdot 10^{17}$  нейтр./см<sup>2</sup> ( $E > 0,1$  МэВ) и  $\Delta c/c$  после облучения 0,1%. Никакого увеличения параметра кристаллической решетки при отжиге не было обнаружено.

Таким образом, результаты этих экспериментов кажутся противоречивыми. Однако существенно, что условия облучения (флюенс и спектр нейтронов, а также температура облучения и, вероятно, структура исходных образцов) значительно отличались. Все это должно было отразиться на форме и размерах комплексов. В конечном итоге это сопровождалось в одном случае ростом параметра  $c$  при отжиге, а в другом – его непрерывным уменьшением.

В заключение отметим, что расчетные значения отношения  $\Delta c/c : \Delta a/a$ , полученные для случаев изолированных межузельных атомов, гексагональных комплексов из межузлий, а также экстраплоскостей с числом

атомов более  $10^4$ , могут быть дополнены данными для комплексов других типов. Полученная в этом случае зависимость  $\Delta c/c : \Delta a/a$  от числа атомов в комплексе качественно повторяет экспериментальные данные по этому же соотношению от температуры облучения или отжига графита, облученного малыми флюенсами нейтронов.

Расчетная кривая  $\Delta c/c : \Delta a/a$  является единственной, так как построена вне зависимости от концентрации дефектов, экспериментальные же точки имеют разброс, так как получены для разных флюенсов нейтронов и, следовательно, для различных концентраций дефектов. Расчетная кривая построена в функции числа атомов в комплексе, а экспериментальные данные связаны с температурой облучения и отжига. В связи с этим появляется возможность связать размер комплекса с характерной для его образования температурой.

#### Список литературы

1. Николаенко В.А., Алексеев С.И., Платонов П.А. Концентрация точечных дефектов в углеродных материалах: Препринт ИАЗ-2124. — М., 1971.
2. Николаенко В.А. Расширение и сжатие алмаза при облучении. — В кн.: Тр. междунар. конф. "Радиационная физика полупроводников и родственных материалов" (Тбилиси, 13 — 19 сентября 1979 г.). — Изд-во Тбилисск. ун-та, 1980, с. 429 — 433.
3. Kelly B.T. Dimensional Changes and Lattice Parameter Changes in Graphite Crystals due to interstitial Atoms and Vacancies. — In: Papers read at the Second Conf. on Industrial Carbon and Graphite (London, 7 — 9 April, 1965). — London, 1966, p. 483 — 492.
4. Henson B.W., Reynolds W.N. Lattice Parameter Changes in Irradiated Graphite. — Carbon, 1965, vol. 3, p. 277 — 287.
5. Gray B.S., Brocklehurst J.E., Kelly B.T. et al. Radiation Annealing in Graphite. — In: Rad. Damage in Reactor Materials, vol. 11. — Vienna: IAEA, 1969, p. 523 — 542.
6. Iwata T., Fuyita F.E., Susuki H. On the Energy of the Interstitial Atom in Graphite. — J. Phys. Soc. Japan, 1961, vol. 16, N 2, p. 197 — 205.
7. Schweitzer D.G. Activation Energy for Annealing Single Interstitial in Neutron-Irradiated Graphite and the Absolute Rate of Formation of Displaced Atoms. — Phys. Rev., 1962, vol. 128, N 2, p. 556 — 559.
8. Thrower P.A., Mayer R.M. Point Defects and Self-Diffusion in Graphite. — Phys. Stat. Sol. (A), 1978, vol. 47, p. 11 — 37.

9. Nikolaenko V.A., Platonov P.A. Radiation Damage in Graphite. — *Rad. Eff.*, 1980, vol. 45, N 3 — 4, p. 185 — 189.
10. Agronovich V.M., Semonov L.P. On the Theory of the Effect of Irradiation on Some Properties of Graphite. — In: Proc. Intern. Conf. held at Berkeley Castle (Gloucestershire, England, 30 May — 2 June 1961), N 44, p. 251 — 258.
11. Wallace P.R. Configuration of Interstitial Atoms in Irradiated Graphite. — *Solid Stat. Comm.*, 1966, vol. 4, N 10, p. 521 — 524.
12. Шулепов С.В. Физика углеграфитовых материалов. — М.: Metallurgy, 1972, с. 254.
13. Гэнчаров В.В., Бурдаков Н.С., Виргильев Ю.С. и др. Действие облучения на графит ядерных реакторов. — М.: Атомиздат, 1978, с. 272.
14. Шуршакова Т.Н., Виргильев Ю.С., Калягина И.П. Радиационные дефекты в графите. — *Атомная энергия*, 1976, т. 40, вып. 5, с. 339 — 408.
15. Pluchery M. Mesures de Paramètres de Graphite Industrial irradié Dans L'Azote Liquide. — In: *Rad. Damage in Reactor Materials*. — Vienna: IAEA, 1963, p. 523 — 529.
16. Simmons J.H.W. Radiation Damage in Graphite. — *Intern. Series of Monographs in Nuclear Energy*, v. 102. — Printed in Great Britain: Pergamon Press, 1965, p. 241.
17. Reynolds W.M., Thrower P.A. The Nucleation of Radiation Damage in Graphite. — *Phil. Mag.*, 1965, vol. 12, N 117, p. 573 — 593.
18. Gain R. Comparison of Irradiation Damage in Artificial and Natural Graphite at different Irradiation Temperatures. — In: *Rad. Damage in Reactor Materials*. — Vienna: IAEA, 1963, p. 651 — 662.
19. Платонов П.А., Чугунов О.К., Алексеев С.И. и др. Исследование радиационных дефектов в облученном пирографите: Препринт ИАЭ-2266. — М., 1973.
20. Platonov P.A., Trofimchuk E.I., Chugunov O.K. et al. Annealing of Radiation Damage in Graphite. — *Rad. Eff.*, 1975, vol. 25, p. 105 — 110.
21. Платонов П.А., Чугунов О.К., Алексеев С.И. и др. Структурные характеристики пирографита с различной термомеханической обработкой и их изменение под действием облучения в реакторе: Препринт ИАЭ-2247. — М., 1972.
22. Chinaglia B., Domenici M., Pieragostini F., Walther H. Studies on the Structure, Radiation Damage, Annealing and fission Product Diffusion in Pyrolytic Carbon. — In: *Proc. of the Third Intern. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy* (Geneva, 31 Aug. — 9 Sept. 1964), vol. 9. — Vienna: IAEA, P/573, p. 399 — 407.



23. Simmons J.H.W. Recent Progress in the Study of Radiation Damage in Graphite. — In: Rad. Damage in Reactor Materials. — Vienna: IAEA, 1963, p. 475 — 491.
24. Maeta H., Iwata T., Okuda S. C-Axis Spacing in Pyrolytic Graphite after Neutron Irradiation at 5K. — J. Phys. Soc. Japan, 1975, vol. 39, N 6, p. 1558 — 1565.

Редактор С.А. Руцкая  
Технический редактор С.Д. Павлова  
Корректоры В.П. Горячева, М.С. Курзова

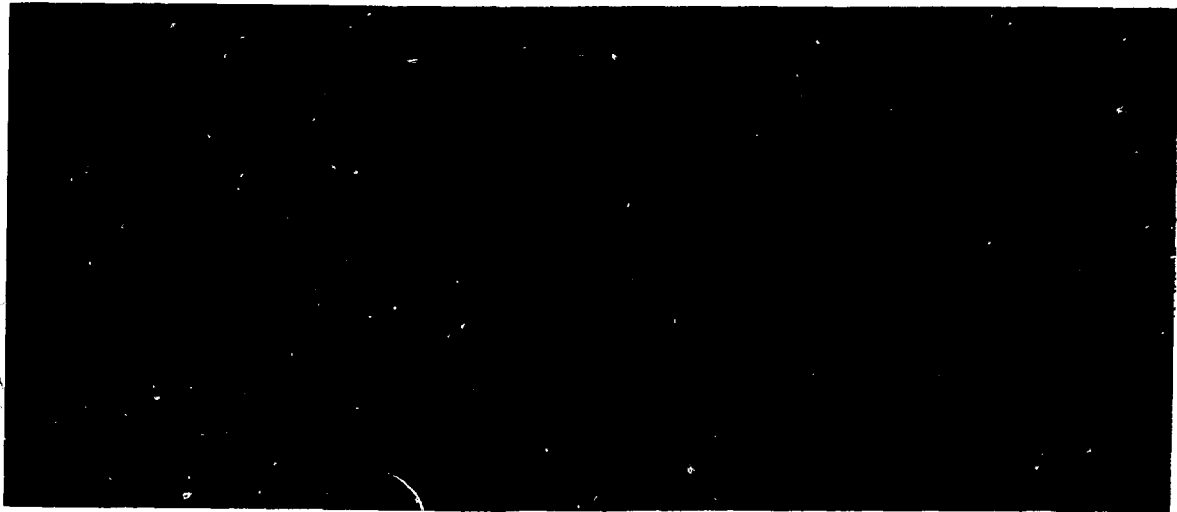
T-21672. 9.12.85. Формат 60x90/16. Уч.-изд. л. 1.0  
Тираж 145. Индекс 3624. Заказ 109

Отпечатано в ИАЭ

## РУБРИКАТОР ПРЕПРИНТОВ ИАЗ

1. Общая, теоретическая и математическая физика
2. Ядерная физика
  
3. Общие проблемы ядерной энергетики
4. Физика и техника ядерных реакторов
5. Методы и программы расчета ядерных реакторов
  
6. Теоретическая физика плазмы
7. Экспериментальная физика плазмы и управляемый термоядерный синтез
8. Проблемы термоядерного реактора
  
9. Физика конденсированного состояния вещества
10. Физика низких температур и техническая сверхпроводимость
11. Радиационная физика твердого тела и радиационное материаловедение
  
12. Атомная и молекулярная физика
13. Химия и химическая технология
  
14. Приборы и техника эксперимента
15. Автоматизация и методы обработки экспериментальных данных
16. Вычислительная математика и техника

Индекс рубрики дается через дробь после основного номера ИАЗ.



Препринт ИАЭ-4240/11. М., 1986