

PMT3540 - Aula 3 - A cascata de dano

Cláudio Geraldo Schön

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

29 de agosto de 2018

Colisão primária

Primeiro evento de colisão de uma partícula e um átomo em repouso no material (em ordem cronológica):

- Interação da partícula incidente com o átomo-alvo
- Transferência de energia cinética para o átomo, gerando o primeiro átomo deslocado (PKA, *primary knock-on atom*)
- Deslocamento do PKA no reticulado
- Trajeto do PKA no reticulado, gerando átomos adicionais deslocados
- Criação da cascata de dano (coleção de defeitos puntiformes criados pelo PKA)
- Repouso do PKA criando um auto-intersticial (SIA, *self-interstitial atom*)

Caminho livre médio de deslocamento

Por definição:

$$\lambda_D = \frac{1}{N\bar{\sigma}}$$

com

$$\bar{\sigma}_D(E) = \int_{E_D}^E \sigma(E, T) dT$$

Para o modelo de esferas rígidas:

$$\sigma(E, T) = \frac{\bar{\sigma}(E)}{\gamma E}$$

como $\gamma = 1$, temos, integrando:

$$\bar{\sigma}_D(E) = \bar{\sigma}(E) \left(1 - \frac{E_D}{E} \right)$$

Caminho livre médio de deslocamento

Por definição:

$$\lambda_D = \frac{1}{N\bar{\sigma}}$$

com

$$\bar{\sigma}_D(E) = \int_{E_D}^E \sigma(E, T) dT$$

Para o modelo de esferas rígidas:

$$\sigma(E, T) = \frac{\bar{\sigma}(E)}{\gamma E}$$

Usando o modelo de esferas rígidas, em que $\bar{\sigma} = 4\pi r^2$:

$$\bar{\sigma}_D(E) = 4\pi r^2(E) \left(1 - \frac{E_D}{E}\right)$$

Caminho livre médio de deslocamento

Por definição:

$$\lambda_D = \frac{1}{N\bar{\sigma}}$$

com

$$\bar{\sigma}_D(E) = \int_{E_D}^E \sigma(E, T) dT$$

Para o modelo de esferas rígidas:

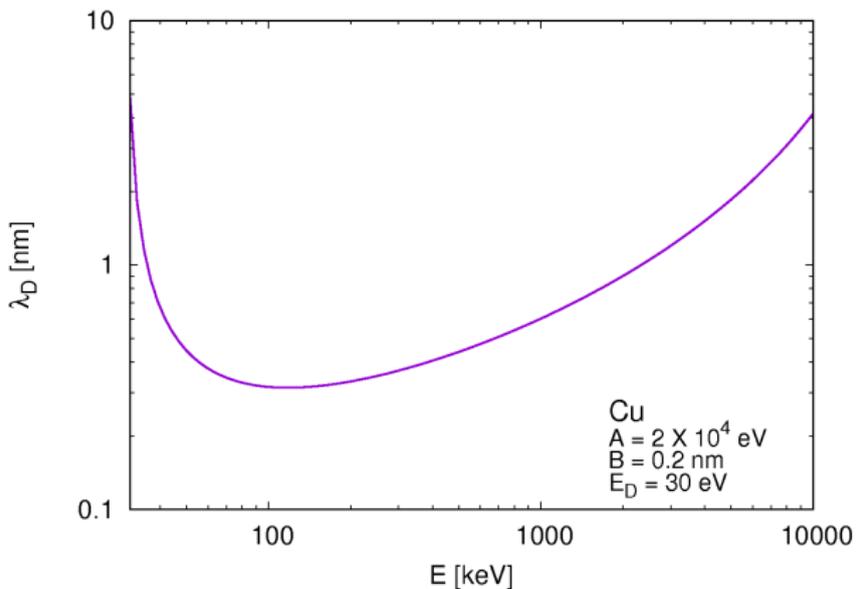
$$\sigma(E, T) = \frac{\bar{\sigma}(E)}{\gamma E}$$

com r (Born - Meyer):

$$\bar{\sigma}_D(E) = 4\pi B^2 \left[\ln \left(\frac{2A}{E} \right) \right]^2 \left(1 - \frac{E_D}{E} \right)$$

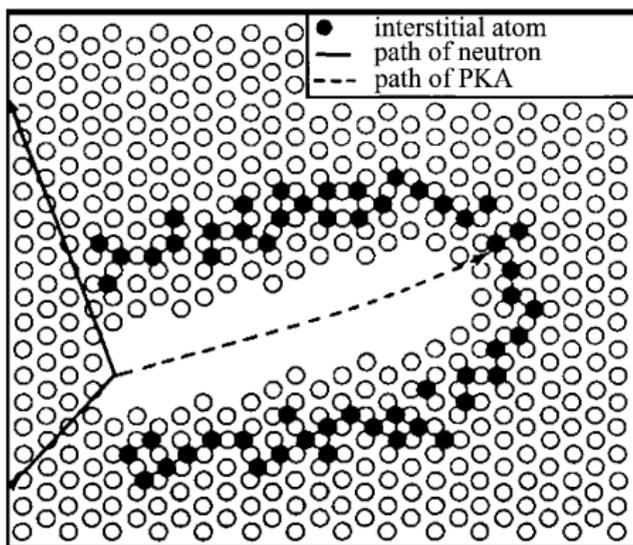
Caminho livre médio

Exemplo: Cobre em Cobre



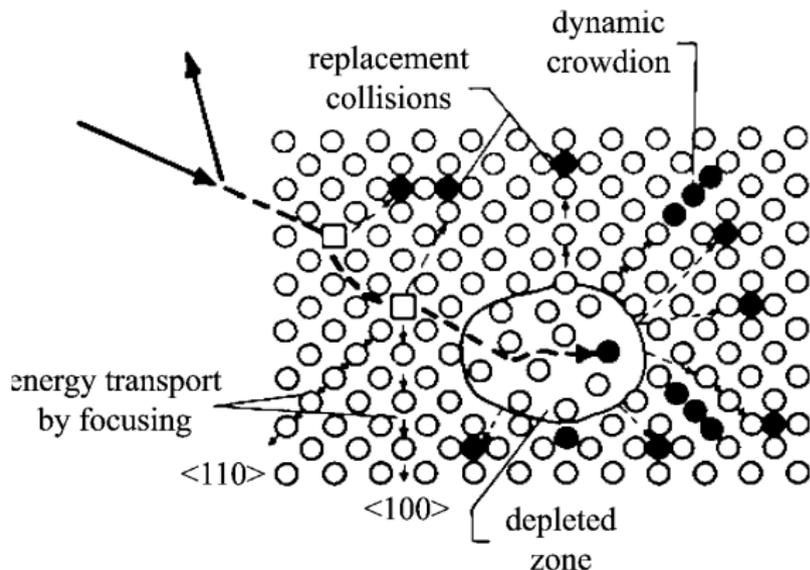
Aglomerado de deslocamentos (*displacement spike*)

Modelo de Brinkman (1956)



Aglomerado de deslocamentos (*displacement spike*)

Modelo de Seeger (1958)



Distribuição de energia na profundidade

$$F_D(x) dx = dE = NS_n E(x) dx$$

Onde S_n é o poder de frenagem nuclear. Usando o potencial de lei de potência ($V = r^{-s}$):

$$F_D(x) = \frac{T}{2mR} \left(1 - \frac{x}{R}\right)^{\left(\frac{1}{2m}-1\right)}$$

Onde T é a energia do PKA, $m = s^{-1}$ e R é o alcance do PKA, que corresponde à distância média percorrida pelo PKA antes de repousar no sólido.

Energia de dano

Modelo de Norgett, Robinson, Torrens (1975)

Número de deslocamentos:

$$N_d = \frac{\kappa E_T}{2E_d} = \frac{\kappa (T - \eta)}{2E_d}$$

onde E_T é a energia total disponível para gerar deslocamentos na cascata, também conhecida como **energia de dano**, η é a fração de energia dissipada com a colisão do PKA com elétrons e $\kappa = 0,8$ é a eficiência de deslocamento.

Energia de dano

Modelo de Norgett, Robinson, Torrens (1975)

$$E_T = \frac{T}{[1 + k_N g(\varepsilon_N)]}$$

onde

$$g(\varepsilon_N) = 3.4008\varepsilon_N^6 + 0.40224\varepsilon_N^{\frac{3}{4}} + \varepsilon_N$$

com

$$k_N = 0.1337 Z_1^{\frac{1}{6}} \sqrt{\frac{Z_1}{A_1}}$$

Z_1, A_1 = número atômico do PKA e massa atômica do PKA.

Energia de dano

Modelo de Norgett, Robinson, Torrens (1975)

$$E_T = \frac{T}{[1 + k_N g(\varepsilon_N)]}$$

onde

$$g(\varepsilon_N) = 3.4008\varepsilon_N^6 + 0.40224\varepsilon_N^{\frac{3}{4}} + \varepsilon_N$$

com

$$k_N = 0.1337 Z_1^{\frac{1}{6}} \sqrt{\frac{Z_1}{A_1}}$$

$$\varepsilon_N = \left[\frac{A_2 T}{(A_1 + A_2)} \right] \left(\frac{a}{Z_1 Z_2 q_e^2} \right)$$

Z_1, A_1 = número atômico do PKA e massa atômica do PKA.

Z_2, A_2 = número atômico e massa atômica do átomo espalhado, q_e é a carga elementar do elétron.

Energia de dano

Modelo de Norgett, Robinson, Torrens (1975)

$$E_T = \frac{T}{[1 + k_{NG}(\varepsilon_N)]}$$

onde

$$g(\varepsilon_N) = 3.4008\varepsilon_N^6 + 0.40224\varepsilon_N^{\frac{3}{4}} + \varepsilon_N$$

com

$$k_N = 0.1337Z_1^{\frac{1}{6}} \sqrt{\frac{Z_1}{A_1}}$$

$$\varepsilon_N = \left[\frac{A_2 T}{(A_1 + A_2)} \right] \left(\frac{a}{Z_1 Z_2 q_e^2} \right)$$

e

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{\frac{1}{3}} a_0 \left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Z_1, A_1 = número atômico do PKA e massa atômica do PKA.

Z_2, A_2 = número atômico e massa atômica do átomo espalhado, q_e é a carga elementar do elétron.

$a_0 = 5.29177 \times 10^{-11}$ m = raio de Bohr

Distribuição de dano

Usando o modelo de Kinchin - Pease modificado, ou o NRT (onde a eficiência de deslocamento, $\kappa = 0.8$) temos:

$$\frac{N_d}{\phi} = \frac{0.8F_D(x)}{2E_D}$$

ou

$$dpa(x) = \frac{N_d}{N} = \frac{0.4F_D(x)}{NE_D}\phi$$

O dano total é:

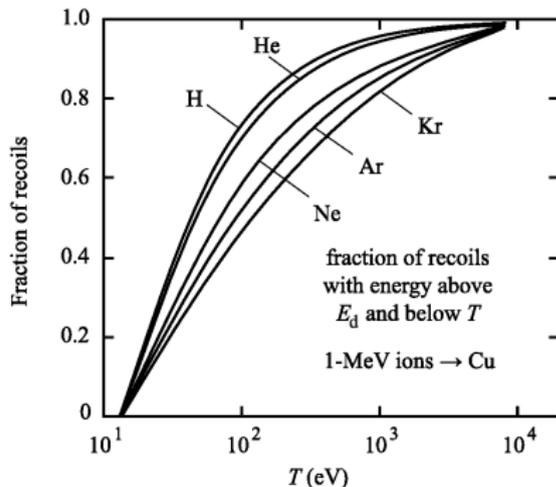
$$dpa \approx \frac{0.4\phi E_T}{NRE_D}$$

Densidade de ricochete (*recoil*)

A probabilidade de ricochete é dada por:

$$P_r(E_i, T) = \frac{1}{N} \int_{E_D}^T \bar{\sigma}_r(E_i, T') dT'$$

$\bar{\sigma}_r$ é a seção de choque de uma partícula incidente com energia E_i , produzindo um ricochete com energia T , e N é o número total de ricochetes.



Fração de energia no ricochete

Podemos também calcular a fração de dano produzida no ricochete por meio de uma média ponderada:

$$W(E_i, T) = \frac{1}{E_T(E_i)} \int_{E_D}^T \bar{\sigma}(E_i, T') E_T(T') dT'$$

com

$$E_T(E_i) = \int_{E_D}^{\gamma E_i} \bar{\sigma}(E_i, T') E_T(T') dT'$$

Casos limites

Sem perda por excitação eletrônica

Prótons (interação coulombiana):

$$\bar{\sigma}_C(E_i, T) = \frac{\pi M_1 (Z_1 Z_2 q_e^2)^2}{E_i T^2}$$

Nêutrons (esferas rígidas):

$$\bar{\sigma}_{ER}(E_i, T) = \frac{A}{E_i}$$

Casos limites

Sem perda por excitação eletrônica

Assumindo que $E_T(T) = T$

Prótons (interação coulombiana):

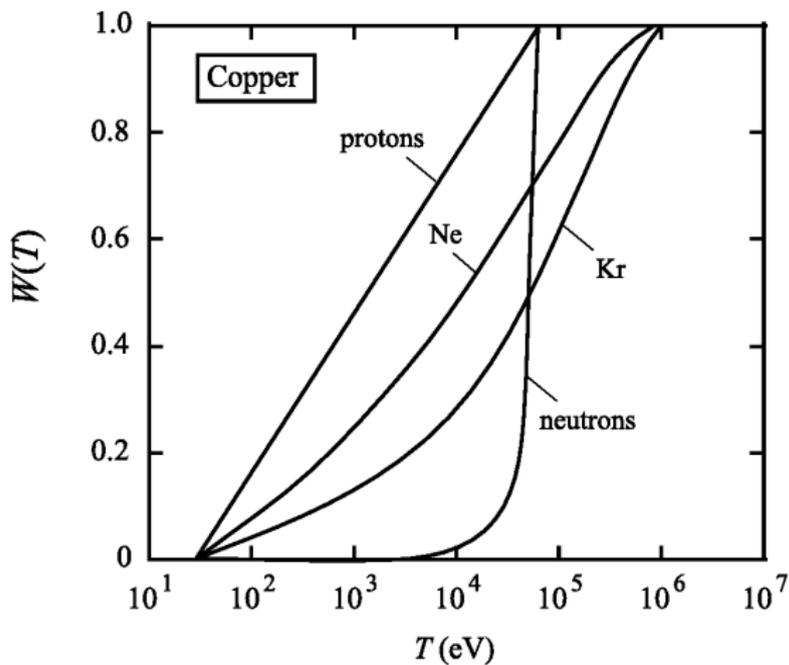
$$\frac{\ln T - \ln E_D}{\ln \gamma E_i - \ln E_D}$$

Nêutrons (esferas rígidas):

$$\frac{T^2 - E_D^2}{(\gamma E_i)^2}$$

Fração de energia no ricochete

Exemplo: cobre



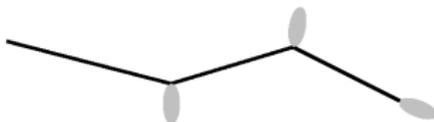
Typical damage

1 MeV particles in Ni

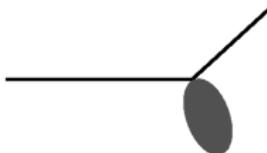
1 MeV electrons
 $\bar{T} = 60 \text{ eV}$
 $\epsilon = 50\text{--}100\%$



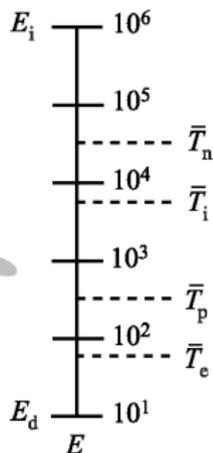
1 MeV protons
 $\bar{T} = 200 \text{ eV}$
 $\epsilon = 25\%$



1 MeV heavy ions
 $\bar{T} = 5 \text{ keV}$
 $\epsilon = 4\%$



1 MeV neutrons
 $\bar{T} = 35 \text{ keV}$
 $\epsilon = 2\%$



Densidade de energia na cascata

$$\rho_{E_T} \approx \frac{E_T}{NV_{cas}}$$

V_{cas} é o volume da cascata e N é a densidade atômica do alvo.

$$V_{cas} = \frac{4\pi}{3} \left[(\delta\Delta X)^2 + (\delta Y)^2 \right]^{\frac{3}{2}}$$

onde ΔX e Y são as extensões médias da cascata na direção longitudinal e transversal, respectivamente, e δ é um redutor que corrige a estimativa de ΔX e Y usando a teoria simples de transporte.

Propriedades da cascata

Temperatura média:

$$TK = \frac{\rho E_T}{3k_B}$$

onde $k_B = 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ é a constante de Boltzmann.

Variância do perfil de temperatura:

$$R_{TK} = 2\sqrt{D\tau}$$

Onde $D \approx 10^{12} \text{ nm}^2 \text{ s}^{-1}$ é a difusividade térmica e τ é a meia-vida da cascata.

$$D = \frac{\kappa_T}{C_P}$$

onde κ_T é a condutividade térmica e C_P a capacidade térmica, ambos do alvo.

Propriedades da cascata

Escrevendo:

$$E_T = \frac{4\pi}{3} (R_{TK})^3 U_a N$$

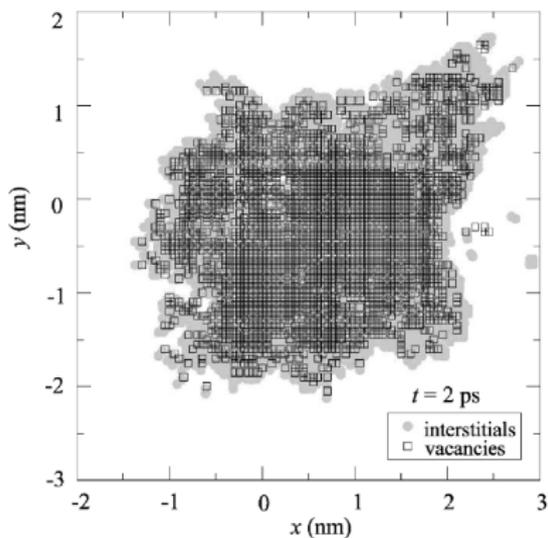
onde $U_a \approx 0.3$ eV é a energia por átomo.

Resolvendo para τ :

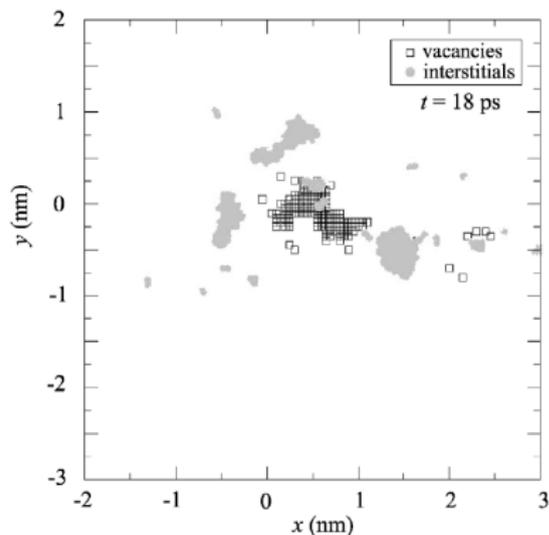
$$\tau = \frac{1}{4D} \left(\frac{3E_T}{4\pi N U_a} \right) \approx 10^{-12} \text{s}$$

Configurações após incidência do PKA

Simulação por Dinâmica Molecular

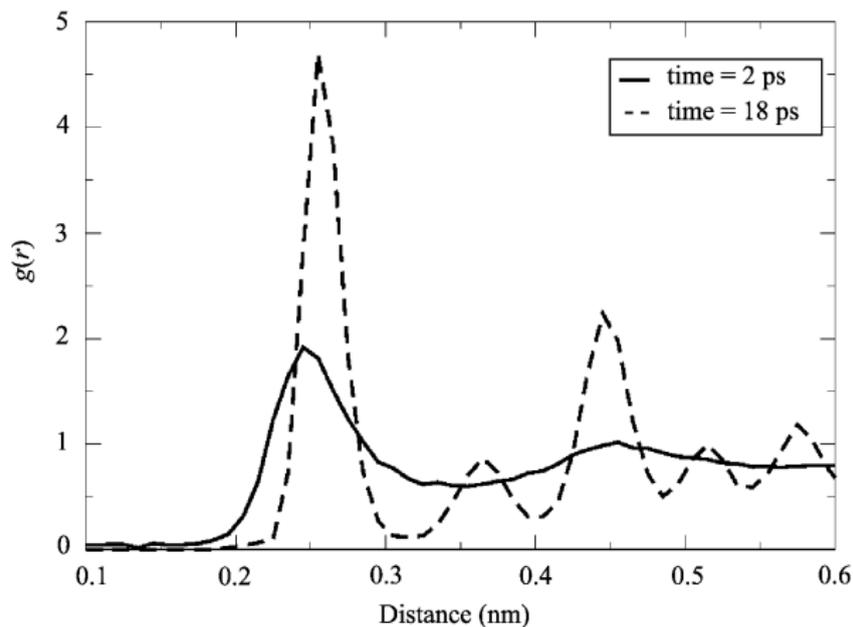


2ps após a colisão.



18ps após a colisão.

Função de correlação de pares



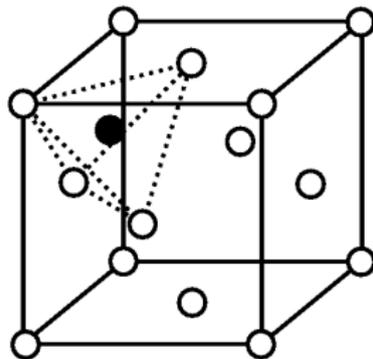
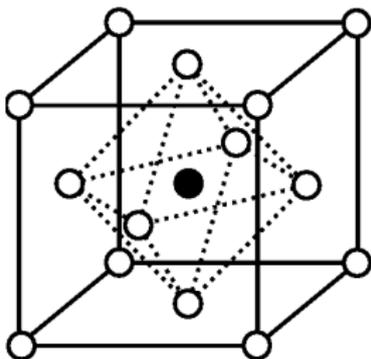
Etapas do desenvolvimento da cascata

- Colisão** - Fase que se segue à incidência do PKA e continua até que nenhum outro átomo tenha energia para sofrer deslocamento (tipicamente < 1 ps).
- Superaquecimento** - Nessa fase a energia introduzida pelo PKA e pelos átomos de ricochete é compartilhada na forma de calor, a temperatura aumenta consideravelmente e o material se assemelha a um estado fundido (cerca de 0,1 ps).
- Têmpera** - O restante do material, muito mais maciço, rapidamente restabelece o equilíbrio térmico, o material da região da cascata retorna ao estado condensado e a maioria dos defeitos produzidos é aniquilada (≈ 10 ps).
- Recozimento** - Os defeitos produzidos ou formam configurações estáveis, ou migram para fora da região da cascata, essa fase pode durar indefinidamente ou ser interrompida caso outra cascata seja produzida na mesma região.

Intersticiais

Interstícios

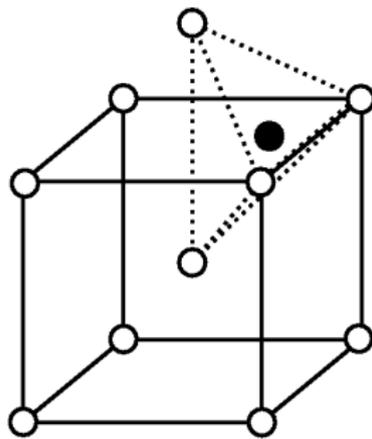
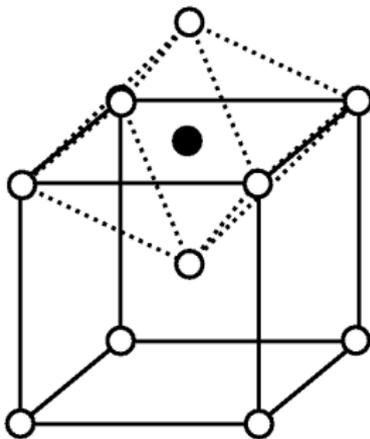
FCC



Intersticiais

Interstícios

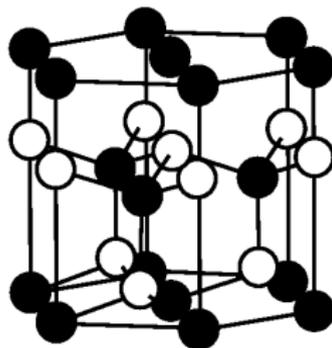
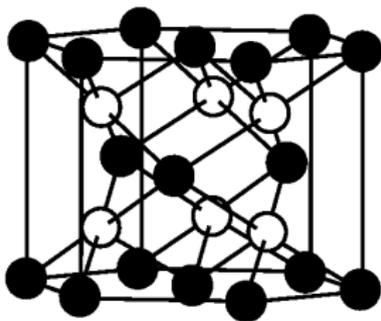
BCC



Intersticiais

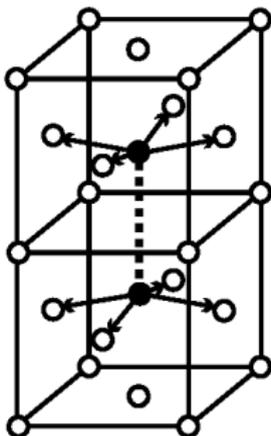
Interstícios

HCP

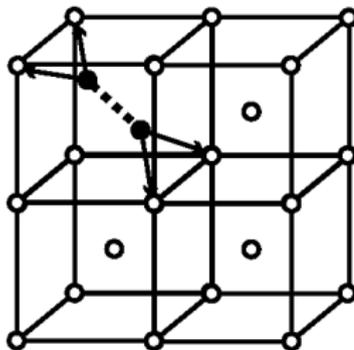


Autointersticiais

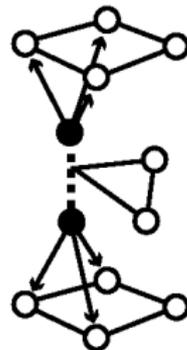
fcc



bcc



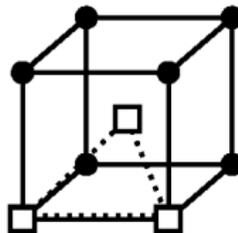
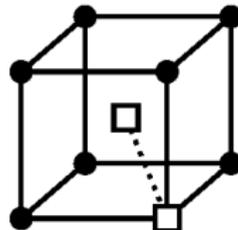
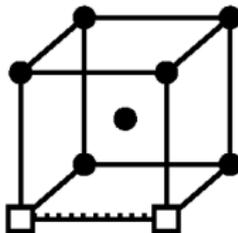
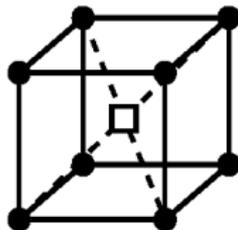
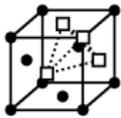
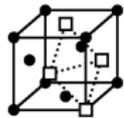
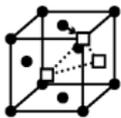
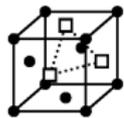
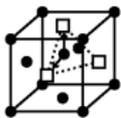
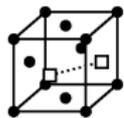
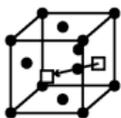
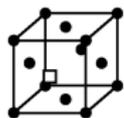
hcp



Autointersticiais são móveis tendem a se combinar em defeitos múltiplos, formando clusters de defeitos altamente estáveis.

Lacunas

Complexos de lacunas



FCC

BCC

Lacunas e autointersticiais

Propriedade	Autointersticial		Lacuna	
Energia de formação	alta	$> 2 \text{ eV}$	baixa	$< 2 \text{ eV}$
Volume de relaxação	alto	$\approx 2\Omega$	baixo	$0,1 \text{ a } 0,5 \Omega$
Entalpia de migração	baixa	$\approx 0.15 \text{ eV}$	alta	$> 0,5 \text{ eV}$

Ω : volume atômico.