

# МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ПО ГЛУБИНЕ ВАКАНСИОННЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ В КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ, ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ

А.И. Купчишин<sup>1, 2)</sup>, А.А. Купчишин<sup>1)</sup>, Т.А. Шмыгалева<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>Казахский национальный педагогический университет имени Абая,  
Достык 13, Алматы, Казахстан

<sup>2)</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби,  
пр. аль-Фараби 71, Алматы, Казахстан, [ankupchishin@mail.ru](mailto:ankupchishin@mail.ru)

Проведено моделирование на ЭВМ распределений по глубине вакансионных нанокластеров в железе и кремнии, облученных ионами углерода, азота, титана и др. Установлено, что концентрация нанокластеров  $C_k$  медленно возрастает с увеличением глубины материала, достигает максимума и затем резко падает до нуля на конце пробега иона. С ростом энергии налетающей частицы максимум кривой уменьшается и сдвигается вправо по оси глубин.

## Введение

Создание новых материалов с уникальными свойствами является одной из приоритетных областей исследований как в физике, так и в технике. Все это в полной мере можно отнести к сфере производства наноматериалов и совершенствования нанотехнологий. Изучение свойств малых металлических частиц из сотен и тысяч атомов представляет большой интерес благодаря их возможному использованию в качестве конструкционных материалов, катализаторов, поверхностных наноструктур и т.д. Несомненным является тот факт, что свойства наноматериалов в значительной мере зависят от типа и концентрации составляющих их частиц. Исследование внутреннего строения свободных кластеров может играть ключевую роль в объяснении физических или химических особенностей материалов. Металлы и сплавы по-прежнему остаются основой конструкционных, инструментальных и других веществ, и важным фактором в формировании их свойств являются нанодфекты кристаллической решетки, возникающие, в частности, при облучении. В настоящее время весьма актуальны исследования информативны в связи с развитием современной техники легирования поверхностей, например, в целях ее упрочнения, создания полупроводников с определенной структурой и т.п. Кроме этого, путем ионной бомбардировки может быть реализовано получение высококачественных, плотных металлических пленок и покрытий на подложках. Поиск и разработка таких материалов опираются на ясное понимание механизмов создания радиационных нанодфектов. Ранее нами был разработан каскадно-вероятностный метод моделирования процессов прохождения частиц через вещество и радиационных дефектов [1-3].

## Методика расчета

Для вычисления распределений по глубине нанокластеров в материалах, облученных ионами, нужно сначала рассчитать каскадно-вероятностные функции (КВФ). При рассмотрении многоканальных процессов взаимодействия заряженных частиц с твердым телом необходимо учитывать, в частности, полные потери энергии на ионизацию и возбуждение в процессе генерации первично-выбитых атомов.

Для ионов, образующих первично-выбитые атомы, зависимость аппроксимационной функции сечения от энергии, которая в свою очередь, зависит от глубины проникновения, представляется в следующем виде [1]:

$$\sigma(h) = \sigma_0 \left( \frac{1}{a(E_0 - kh)} - 1 \right), \quad (1)$$

где  $\sigma_0$ ,  $a$ ,  $k$  – коэффициенты аппроксимации, связанные с пробегом взаимодействия и коэффициентом удельных потерь энергии,  $E_0$  – энергия первичного иона.

Выражение для КВФ записывается в следующем виде:

$$\psi_n(h', h, E_0) = \frac{1}{n! \lambda_0^n} \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right)^{-1} \exp \left( -\frac{h-h'}{\lambda_0} \right) \left[ \frac{\ln \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right)}{ak} - (h-h') \right]^n \quad (2)$$

Для вычисления каскадно-вероятностной функции используется следующая модифицированная, удобная для расчета формула [1]:

$$\psi_n(h', h, E_0) = \exp \left[ -\ln(n!) - n \times \ln(\lambda_0) - \frac{1}{\lambda_0 ak} \ln \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right) + \frac{h-h'}{\lambda_0} + \right. \\ \left. + n \ln \left( \frac{\ln \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right)}{ak} - (h-h') \right) \right], \quad (3)$$

где  $n$  – число взаимодействий;  $h'$ ,  $h$  – глубины генерации и регистрации иона;  $\lambda_0 = 1/\sigma_0$ ;  $\lambda_0$  и  $\sigma_0$  – пробег и сечение взаимодействия.

Глубины наблюдений находились по таблицам параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей [4]. Далее производился расчет сечений взаимодействия по формуле Резерфорда [1]. Рассчитанные значения сечений аппроксимировались выражением (1). Согласие аппроксимационных и исходных кривых весьма хорошее. При подборе аппроксимационных кривых возникают некоторые особенности и сложности. Необходимо подобрать аналитическое выражение, описывающее рассчитанные сечения взаимодействий, задать начальные данные  $\sigma_0$ ,  $E_0$ ,  $a$ ,  $k$  в аппроксимационной формуле таким образом, чтобы оно наилучшим

образом описывало рассчитанные значения сечений и при этом было бы выше теоретическое корреляционное отношение.

### Результаты и их обсуждение

Аппроксимационные кривые зависимости  $\sigma$  от  $h$  для золота в кремнии приведены на рисунках 1, 2.

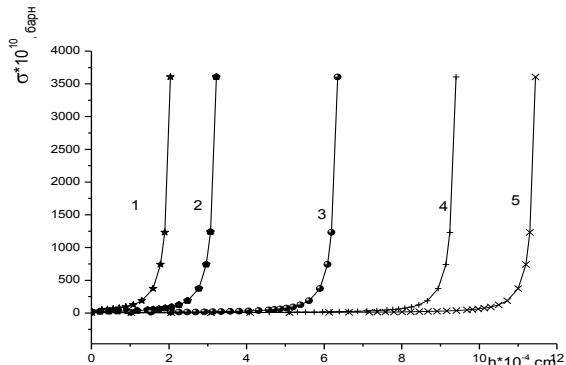


Рис. 1. Аппроксимационные зависимости модифицированного сечения каскадно-вероятностной функции для золота в кремнии:  $E_0 = 100(1), 200(2), 500(3), 800(4), 1000(5)$  кэВ; точки – расчетные данные, сплошные линии – аппроксимации

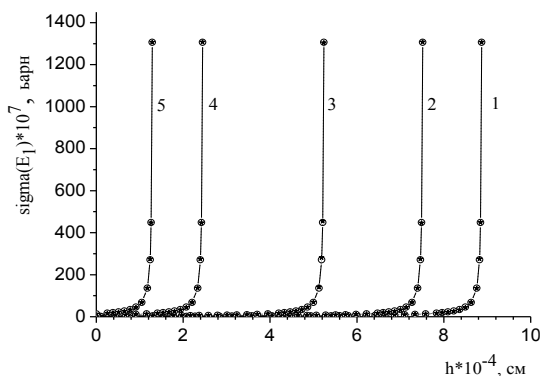


Рис. 2. Аппроксимации модифицированного сечения каскадно-вероятностной функции: для углерода в железе:  $E_0 = 1000(1), 800(2), 500(3), 200(4), 100(5)$  кэВ; точки – расчетные данные, сплошные линии – аппроксимации

Анализ расчетов показывает, что аппроксимационные кривые модифицированных сечений взаимодействия хорошо описываются формулой (1), что позволяет с высокой точностью рассчитывать КВ-функции для кремния и железа. При этом теоретическое корреляционное отношение колеблется в интервале от 0.99 до 0.9999.

Расчеты КВФ производились по формуле (3). Все расчеты производились с двойной точностью по всему интервалу глубин наблюдения. На рисунках 3, 4 представлены зависимости КВФ для титана в железе от числа взаимодействий  $n$  и глубины проникновения  $h$ . Результаты расчетов показывают, что КВФ в зависимости от  $h$  и от  $n$  возрастают, достигая максимума, затем убывают.

Далее необходимо вычислить концентрацию нанокластеров вакансионного типа в железе и кремнии при облучении ионами [5, 6]. Для расчета используется следующая формула:

$$c_k(E_0, h) = \frac{E_d (E_{2\max} - E_c)}{E_c (E_{2\max} - E_d)} \sum_{n=n_0}^{n_1} \int_{h-\lambda_2}^h \psi_n(h') \exp\left(-\frac{h-h'}{\lambda_2}\right) \frac{dh'}{\lambda_1(h')\lambda_2}, \quad (4)$$

где  $E_d$  – пороговая энергия смещения,  $E_c$  – энергия первично-выбитого атома (ПВА), при которой количество смещенных атомов равняется числу атомов  $N_d$ , находящихся в зоне спонтанной рекомбинации,  $E_{2\max}$  – максимально возможная энергия, приобретенная атомом,  $\psi_n(h')$  – каскадно-вероятностная функция в модифицированном виде,  $\lambda_1(h')$  и  $\lambda_2$  – пробеги смещения ион- и атомных смещений.

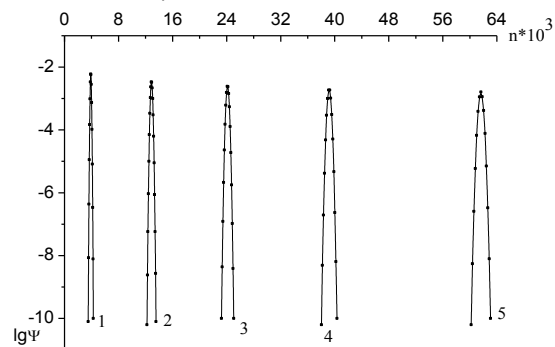


Рис. 3. Зависимость КВФ от числа взаимодействий для титана в железе:  $E_0 = 300$  кэВ (1–5);  $h = 1.0 \cdot 10^{-5}, 3.0 \cdot 10^{-5}, 5.0 \cdot 10^{-5}, 7.0 \cdot 10^{-5}, 9.0 \cdot 10^{-5}$  см

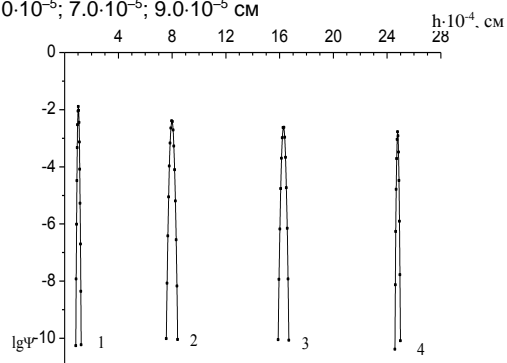


Рис. 4. Зависимость  $\psi_n(h', h, E_0)$  от глубины проникновения для титана в железе:  $E_0 = 700$  кэВ для  $n = 951; 8711; 22777; 54140$  (1-4)

Результаты расчетов представлены на рисунках 5-7.

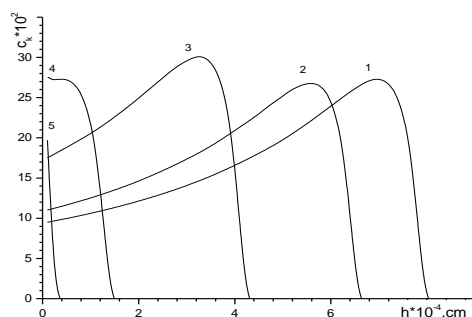


Рис. 5. Профили распределения по глубине нанокластеров вакансионного типа при ионном облучении для азота в железе:  $E_c = 50$  кэВ;  $E_0 = 1000(1), 800(2), 500(3), 200(4), 100(5)$  кэВ

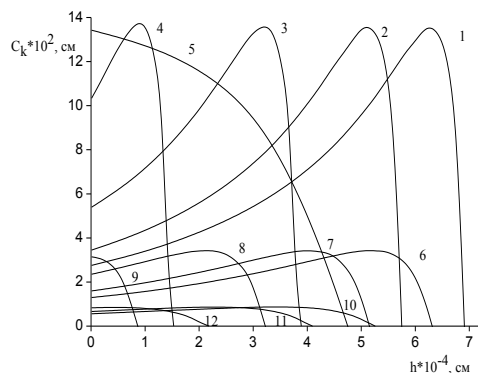


Рис. 6. Профили распределения по глубине нанокластеров вакансионного типа при ионном облучении для азота в кремнии:  $E_c = 50$  кэВ;  $E_0 = 1000, 800, 500, 200, 100$  кэВ (1-5);  $E_c = 100$  кэВ;  $E_0 = 1000, 800, 500, 200$  кэВ (6-9);  $E_c = 200$  кэВ;  $E_0 = 1000, 800, 500$  кэВ (10-12)

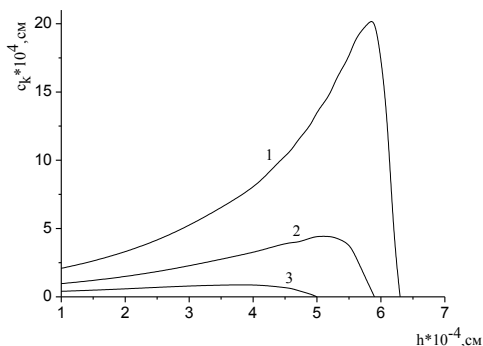


Рис. 7. Зависимость концентрации радиационных дефектов от глубины при ионном облучении для алюминия в железе:  $E_0 = 1000$  кэВ;  $E_c = 50$  (1), 100 (2), 200 (3) кэВ

## Заключение

Таким образом, проведено моделирование распределений по глубине нанокластеров вакансионного типа в железе и кремнии, облученных различными ионами. Предложены формулы для расчета аппроксимационных и каскадно-вероятностной функции и соответствующие алгоритмы, и рассчитаны распределения концентрации нанокластеров по глубине в железе и кремнии. Проведены расчеты КВФ для различных налетающих ионов в зависимости от числа взаимодействий и глубины проникновения частиц. Отмечены особенности подбора аппроксимационных выражений и поведения этих функций.

## Список литературы

1. Боос Э.Г., Купчишин А.А., Купчишин А.И., Шмыгалев Е.В., Шмыгалева Т.А. Каскадно-вероятностный метод, решение радиационно-физических задач, уравнений Больцмана. Связь с цепями Маркова. Монография. Алматы: КазНПУ им. Абая, НИИ НХТ и М КазНУ им. аль-Фараби. 2015. 388 с.
2. Kupchishin A.I., Shmygalev E.V., Shmygaleva T.A., Jorabayev A.B. Relationship between Markov Chains and Radiation Defect Formation Processes by Ion Irradiation// Modern Applied Science. 2015. V. 9. № 3. P. 59–70.
3. Купчишин А.А., Купчишин А.И., Лисицын В.М., Шмыгалев Е.В., Шмыгалева Т.А. Связь процессов радиационного дефектообразования при протонном облучении с цепями Маркова // Известия вузов. Физика. 2016. Т. 59. № 9/2. С. 158–164.
4. Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кулмаханов М.А., Темкин М.М. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей. Минск: БГУ им. В.И. Ленина. 1980. 300 с.
5. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твердые тела. Минск: УП Технопринт. 2001. 392 с.
6. Kupchishin A.I., Kupchishin A.A., Shmygalev E.V., Shmygaleva T.A., Plebaev K.B. Calculation of the spatial distribution of defects and cascade-probability functions in the materials// Journal of Physics: 552. 2014. P. 1–7.

## MODEL OPERATION ON THE COMPUTER OF DISTRIBUTIONS ON DEPTH OF VAKANSIONNY NANOCCLUSERS IN THE CONSTRUCTIONAL MATERIALS IRRADIATED WITH IONS

A.I. Kupchishin<sup>1, 2)</sup>, A.A. Kupchishin<sup>1)</sup>, T.A. Shmygaleva<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>Kazakh national pedagogical university of Abay, 13 Dostyk, Almaty, Kazakhstan

<sup>2)</sup>Al-Farabi Kazakh National University, 71 al-Farabi ave., Almaty, Kazakhstan, ankupchishin@mail.ru

Model operation on the computer of distributions on depth the vakansionnykh of nanoclusters in the iron and silicon irradiated with ions of carbon, nitrogen and titanium, etc. is carried out. It is established that concentration of nanoclusters  $C_k$  sluggishly increases with increase in depth of material, reaches a maximum and then sharply falls down to zero on the end of a run of an ion. With body height of energy of the flying particle the maximum of a curve decreases and moves on an axis of depths to the right.