

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра физики твёрдого тела

УДК 669.018.6

ДИПЛОМНАЯ РАБОТА
СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
НАНОЧАСТИЦАХ ЖЕЛЕЗА ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ИОНАМИ КСЕНОНА

студента VI курса
Комарова Николая Дмитриевича

Научный руководитель
заведующий кафедрой физики
твёрдого тела,
профессор, доктор физ.-мат. наук
Углов Владимир Васильевич

Рецензент
профессор кафедры ядерной физики,
доктор физ.-мат. наук
Лобко Александр Сергеевич

«Допустить к защите»

«___» _____ 2019 г.

Заведующий кафедрой физики твёрдого тела,
доктор физико-математических наук, профессор _____ В. В. Углов

Минск, 2019

РЕФЕРАТ

В данной дипломной работе содержится 52 страницы, 28 рисунков, 3 таблицы. При написании работы было использовано 38 литературных источников.

Ключевые слова: ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ, АМОРФИЗАЦИЯ, НАНОЧАСТИЦЫ, РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ, ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ.

Объектом исследования данной работы являются наночастицы железа размерами 2–6 нм. Предмет исследований — дефектообразование, аморфизация, радиационный разогрев, радиационно-индуцированные напряжения, недиффузионные перемещения дефектов. Целью работы является изучение структурно-фазовых изменений, происходящих под облучением в наночастицах железа методами компьютерного моделирования. Используемые методы — молекулярная статика и динамика, численное решение дифференциальных уравнений.

Выявлен рост степени аморфизациинаночастицFe с уменьшением их размера при облучении ионами Хе с одинаковыми энергиями. При разных энергиях ионов установлено, что разупорядочение структуры наночастицFe эффективно протекает в небольшом диапазоне энергий облучения, зависящим от размеров и связанного со значением полного пробега ионов Хев железе. Проанализированы сопутствующие радиационному повреждению процессы, которые влияют на разупорядочение, такие как: тепловой разогрев, индуцированные напряжения и недиффузионное перераспределение точечных дефектов. На примере наночастиц железа, внедренных в Si-матрицу, показаны зависимости термоупругих напряжений и концентрация дислокаций от времени при облучении ионами Хе.

РЭФЕРАТ

В дадзенай дыпломнай працы ўтрымліваецца 52 старонкі, 28 малюнкаў, 3 табліцы. Пры напісанні працы было выкарыстана 38 літаратурных крыніц.

Ключавыя словы: ДЭФЕКТАФАРМІРАВАННЕ, АМАРФІЗАЦЫЯ, НАНАЧАСЦІЦ, РАЗМЕРНЫЯ ЭФЕКТЫ, ЭНЕРГІЯ СУВЯЗІ.

Аб'ектам даследавання дадзенай працы з'яўляюцца наначасціцы жалеза памерамі 2-6 нм, укаранёныя ў Si-матрыцу. Прадмет даследаванняў - дэфектафарміраванне, амарфізацыя, радыяцыйны разагрэў, радыяцыйна-індукаваныя напружання, недыффузіённыя пераразмеркаванне дэфектаў. Мэтай працы з'яўляецца вывучэнне структурна-фазавых змяненняў, якія адбываюцца пад апрамяненнем ў наначасціц жалеза метадамі камп'ютэрнага мадэлявання. Выкарыстоўваюцца метады: малекулярная статыка і дынаміка, колькаснае рашэнне дыферэнцыяльных раўнанняў.

Выяўлены рост ступені амарфізацыі наначасціц Fe з памяншэннем іх памеру пры апрамяненні іёнамі Хе з аднолькавымі энергіямі. Пры розных энергіях іёнаў ўстаноўлена, што разупарадкаванне структуры наначасціц Fe эфектыўна працякае ў невялікім дыяпазоне энергій апраменьвання, якія залежаць ад памераў і звязанага СА значэннем поўнага прабегу іёнаў Хе ў жалезе. Прааналізаваныя спадарожныя радыяцыйнаму пашкоджання працэсы, якія ўплываюць на разупарадкаванне, такія як: цеплавой разагрэў, індукаваныя напружання і недыффузіённыя пераразмеркаванне кропкавых дэфектаў. На прыкладзе наначасціц жалеза, укаранёных у Si-матрыцу, паказаны залежнасці термопружкі хвысілкаў і канцэнтрацыя дыслакацый ад часу пры апрамяненні іёнамі Хе.

THE SUMMARY

This work contains 52 pages, 28 figures, 3 tables. When writing the work was used 38 literary sources.

Key words: DEFORMATION, AMORPHIZATION, NANOPARTICLES, DIMENSIONAL EFFECTS, COMMUNICATION ENERGY.

The object of the study of this work is iron nanoparticles with dimensions of 2–6 nm, embedded in a Si matrix. The subject of research is defect formation, amorphization, radiation heating, radiation induced stresses, non-diffusion displacements of defects. The aim of the work is to study the structural and phase changes that occur under irradiation in iron nanoparticles using computer simulation methods. The methods used are molecular statics and dynamics, numerical solution of differential equations.

An increase in the degree of amorphization of Fe nanoparticles with a decrease in their size during irradiation with Xe ions with the same energies was revealed. At different ion energies, it was found that the disordering of the structure of Fe nanoparticles effectively proceeds in a small range of irradiation energies, depending on the size and associated with the total free path Xe ions in the iron. Radiation damage related processes that affect disordering are analyzed, such as: heat heating, induced stresses and non-diffusion redistribution of point defects. Using the example of iron nanoparticles embedded in a Si matrix, the dependences of thermoelastic stresses and the concentration of dislocations on time upon exposure to Xe ions are shown.