

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ  
ОБЛУЧЕНИИ ИОНАМИ УГЛЕРОДА**

Прима А.И., Р.В. Зырянова, Ф.Т. Бакиев

Научный руководитель: Профессор, д.ф.-м.н. А.И. Пушкарёв,

Старший преподаватель, к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [artyom.prima@yandex.ru](mailto:artyom.prima@yandex.ru)

**SIMULATION OF RADIATION DEFECTS FORMATION IN METAL BY CARBON IONS  
IRRADIATION**

Prima A.I., R.V. Zyryanova, F.T. Bakiev.

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.I. Pushkaryov

Senior Lecturer, Ph.D. N.V. Chistyakova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Lenin str., 30, 634050

E-mail: [artyom.prima@yandex.ru](mailto:artyom.prima@yandex.ru)

***Abstract.** In the purpose study, we performed a result of simulation of radiation defects formation in metal by carbon ion irradiation. For simulation SRIM, software based on Monte-Carlo, were used. Data about the formation of radiation defects per ion in various structural metals, the trajectory and depth of the ion in the sample and the distribution of energy losses are presented.*

**Введение.** Для развития космической и атомной промышленности необходимы конструкционные материалы, способные в течении долгого времени сохранять свои характеристики в условиях высокоэнергетических воздействий. Процесс повреждения кристаллической структуры конструкционного материала начинается с повреждения кристаллической решетки бомбардируемой заряженной частицей с дальнейшим образованием радиационных дефектов (РД): межузельного атома и вакансии (пара Френкеля). Дальнейшая диффузия, миграция и отжиг радиационных дефектов влияет на устойчивость конструкционного материала к высокоэнергетическим воздействиям. Экспериментальные исследования РД сложны из-за малого пространственного и временного масштаба. Поэтому для изучения РД на атомном уровне подходит компьютерное моделирование. Целью данной работы является исследование процесса формирования РД в конструкционных материалах при облучении ионами углерода различной энергии и анализ количества радиационных дефектов, образованных на один налетающий ион.

**Экспериментальная часть.** Эволюция развития РД имеет три основных этапа: Динамический (баллистический) – этап, за период которого увеличивается зона повреждения, пока энергия атома, внедренного в кристаллическую решетку, не распределится среди атомов кристаллической решетки (ниже пороговой энергии смещения). Рекомбинационный (кинетический) – этап, во время которого происходит рекомбинация до тех пор, пока не будет достигнуто относительно стабильное количество РД. Диффузионный – этап, на котором начинается диффузионное (термодинамическое) развитие

радиационно-поврежденной области [1]. В данной работе был смоделирован первый (баллистический) этап, траектория иона и количество РД, образованных на один ион.

Для моделирования использовалась среда *SRIM* (The Stopping and Range of Ions in Matter) – пакет программ, предназначенный для моделирования физических процессов возникновения каскадов радиационных дефектов при облучении слоистых твердотельных композиций заряженными частицами [2]. В основе программы лежит метод Монте-Карло, использующий генерирование случайных чисел, необходимых для расчёта процессов. В качестве образцов были выбраны конструкционные материалы: медь, железо, титан, цирконий. В *SRIM* для расчета взаимодействия между частицами используется Формула Бете — Блоха, более подробная информация имеется в [3,4].

**Результаты.** С помощью программы *SRT* (Stopping/Range tables) была рассчитана глубина внедрения иона в зависимости от энергии иона. Данные представлены в таблице 1.

Таблица 1

Глубина пробега иона

Материал	Глубина пробега, Å						
	10 кэВ	50 кэВ	100 кэВ	150 кэВ	200 кэВ	250 кэВ	300 кэВ
медь	128	727	1332	1901	2484	2863	3391
железо	170	752	1385	1798	2318	2757	3378
титан	245	1069	1823	2690	3412	3949	4629
цирконий	244	1114	1760	2557	3185	3656	4551

В программе *SRIM*, для расчёта образования РД, был задан режим, дополнительно отслеживающий каждый отдельный атом отдачи до тех пор, пока его энергия не станет меньше энергии смещения того или иного атома мишени из равновесного состояния. Это позволило рассчитать количество РД, образовавшихся на 1 атом. Были получены зависимости количества вакансий на один налетающий ион (Рис. 1.а) и изменения потерь энергии на нагрев, вибрацию и образование вакансий (Таблица 2) для меди (Рис 1.б).

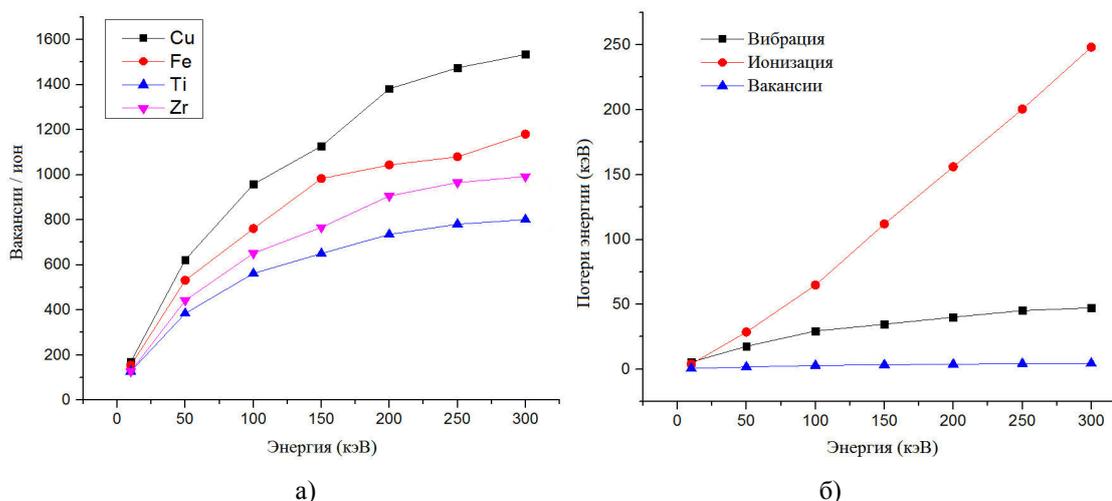


Рис. 1. Зависимости изменения количества вакансий на один налетающий ион (а) и изменение потерь энергии для меди (б)

Количество радиационных дефектов рассчитывали по следующему алгоритму:

$$РД = \text{Вакансии} + \text{Замещенные атомы} + \text{Межузельные атомы}$$

$$\text{Межузельные атомы} = \text{Вакансии} + \text{Замещенные атомы}$$

Таблица 2

Распределение потерь энергии в металлах при энергии иона 300 кэВ

Материал	Энергия, кэВ		
	Потери на ионизацию	Потери на вибрацию	Потери на образование вакансий
медь	248,16 (82,72%)	47,28 (15,76%)	4,56 (1,52%)
железо	258,99 (86,33%)	37,5 (13,7%)	3,51 (1,17%)
титан	267,72 (89,24%)	29,88 (9,96%)	2,4 (0,8%)
цирконий	261,93 (87,31%)	35,13 (11,71%)	2,94 (0,98%)

Таблица 3

Образование РД при энергии иона 300 кэВ

Материал	Вакансии	Замененный атом	Межузельный атом	РД
медь	1534	89	1623	3246
железо	1180	96	1275	2550
титан	801	56	857	1714
цирконий	992	70	1061	2123

**Заключение.** В ходе моделирования были получены данные по количеству радиационных дефектов, которые образуются на один налетающий ион в меди, железе, титане и цирконии, распределение потерь энергии иона в образце. При энергии иона 300 кэВ количество РД на один ион в меди составило 1714 шт, в железе 2550 шт, в цирконии 2123 шт и в титане 1714 шт. Наибольший пробег иона при энергии 300 кэВ в цирконии, он равен  $7000 \text{ \AA}$ , а наименьший в железе до  $4900 \text{ \AA}$ . Так же следует заметить, что энергия иона расходуется не только на ионизацию и образование вакансий в мишени. При низких энергиях иона ее большая часть тратится на вибрацию кристаллической решетки и может составлять более 50% от общей энергии. потери на ионизацию увеличиваются пропорционально увеличению энергии иона.

Исследования были выполнены при поддержке гранта РФФИ № 17-08-00067.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Корчуганов А. В., Чернов В. М., Зольников К. П., Крыжевич Д. С., Псахье С. Г. Молекулярно-динамическое моделирование радиационной повреждаемости металлов с внутренней структурой // Перспективные материалы. – 2016. – №. 3. – С. 5.
2. James Ziegler - SRIM & TRIM. URL: <http://www.srim.org/>
3. F. Ziegler, “Handbook of Stopping Cross-Sections for Energetic Ions in All Elements”, Pergamon Press (1980).
4. ICRU-49, H. O. Wyckoff (ICRU Scientific Counsellor), “Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles”, Intl. Comm. on Rad. Units, Bethesda, MD (1993).