

## МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ПО ГЛУБИНЕ НАНОКЛАСТЕРОВ ВАКАНСИОННОГО ТИПА В МАТЕРИАЛАХ, ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ

А.И. Купчишин<sup>1,2</sup>, А.А. Купчишин<sup>1</sup>, Т.А. Шмыгалева<sup>2</sup>, С.М. Есхожаева

<sup>1</sup>Казахский национальный университет им. Абая, Алматы, Казахстан

<sup>2</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

Создание новых материалов с уникальными свойствами является одной из приоритетных областей исследований, как в физике, так и в технике. Изучение свойств малых металлических частиц из сотен и тысяч атомов представляет большой интерес благодаря их возможному использованию в качестве материалов или поверхностных наноструктур. Несомненным является тот факт, что свойства наноматериалов в значительной мере зависят от свойств составляющих их частиц. Исследование внутреннего строения свободных кластеров может играть ключевую роль в объяснении их физических или химических особенностей. Металлы и сплавы по-прежнему остаются основой конструкционных, инструментальных и других материалов. Важным фактором в формировании их свойств являются нанодфекты кристаллической решётки, возникающие, в частности, при облучении [1].

### Методика расчета

Для вычисления распределений по глубине нанокластеров в материалах, облученных ионами, рассчитывались 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.

Глубины наблюдений находились по таблицам параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей [2]. Далее производился расчет аппроксимированных сечений взаимодействия.

### Результаты и их обсуждение

Анализ расчетов показывает, что аппроксимационные кривые модифицированных сечений взаимодействия хорошо описываются аналитической формулой, 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.

Концентрация нанокластеров вакансионного типа в кремнии и железе при облучении ионами рассчитывалась по формуле:

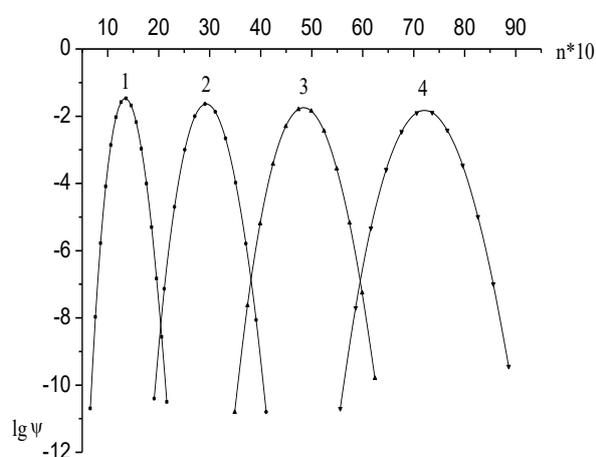
$$c_k(E_0, h) = \frac{E_d}{E_c} \frac{(E_{2\max} - E_c)}{(E_{2\max} - E_d)} \sum_{n=n_0}^{n_1} \int_{h-k\lambda_2}^h \psi_n(h', E_0) \exp\left(-\frac{h-h'}{\lambda_2}\right) \frac{dh'}{\lambda_1(h')\lambda_2}, \quad (1)$$

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,  $\psi_n(h', E_0)$  – каскадно-вероятностная функция в модифицированном виде,  $\lambda_1(h')$  и  $\lambda_2$  – пробеги смещения ион- и атом-атомных смещений,  $n_0$ ,  $n_1$  – начальное и конечное значения области результата,  $k$  – целое число, большее 1.

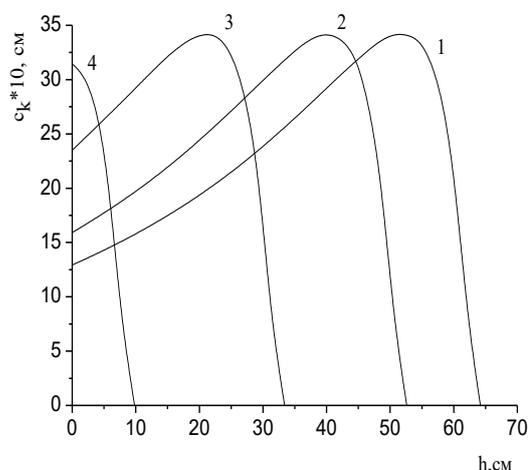
На рисунке 1 представлены зависимости КВФ для углерода в железе от числа взаимодействий. Результаты расчетов показывают, что КВФ в зависимости от  $n$  и от  $h$  возрастают, достигая максимума, затем убывают. Результаты расчетов профилей распределения по глубине нанокластеров вакансионного типа (размерами 1 – 10 нм) представлены на рисунке 1.

Анализ полученных результатов говорит о том, что с уменьшением первоначальной энергии первичной частицы интервал области результата смещается вправо, значения концентрации радиационных дефектов возрастают. В зависимости от глубины проникновения начальное и конечное значения числа взаимодействий увеличиваются, интервал области результата ( $n_0$   $n_1$ ) также увеличивается и смещается вправо. С увеличением пороговой энергии при одной и той же глубине

проникновения значения концентрации радиационных дефектов значительно уменьшаются, границы области результата не меняются.



$E_0 = 900$  кэВ (1–4);  $h = 1,0 \times 10^{-4}$ ;  $2,0 \times 10^{-4}$ ;  $3,0 \times 10^{-4}$ ;  $4,0 \times 10^{-4}$  (см.)  
Рис. 1 – Зависимость КВФ от числа взаимодействий для углерода в железе



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

## Заключение

В работе разработаны алгоритмы расчета каскадно-вероятностных функций и концентрации нанокластеров вакансионного типа и проведены их вычисления для различных налетающих частиц в кремнии и железе. Проведены расчеты КВФ для налетающих ионов углерода в зависимости от числа взаимодействий в железе. С ростом числа взаимодействий КВФ резко возрастает, достигает максимума и далее быстро убывает. С увеличением энергии ионов кривые КВФ смещаются вправо. Установлены особенности поведения концентрации нанокластеров вакансионного типа в зависимости от первоначальной энергии первичной частицы, глубины проникновения, пороговой энергии. При этом концентрация дефектов сначала медленно возрастает, затем достигает максимума и резко падает на конце пробега иона.

## Литература

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 г. – 388 с.
2. 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.