

УДК 5353.05

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ДЕФЕКТОВ В МАТЕРИАЛАХ

^{1,2)} Купчишин А.И., ¹⁾ Ниязов М.Н., ¹⁾ Абдухаирова А.Т., ¹⁾ Тронин Б.А.

¹⁾ *Казахский национальный педагогический университет им. Абая, Алматы, Казахстан*

²⁾ *Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан*

Произведено моделирование на ЭВМ распределений по глубине имплантированных ионов титана и азота с энергиями $E = 70, 150, 250, 550, 700$ и 1000 эВ, потерь энергии в титане. Получено, что эти кривые (для различных энергий), как для титана, так и для азота имеют четко выраженные максимумы, а их концентрации неравномерно распределены по глубине. Как показывают расчеты распределение потерь энергии на ионизацию и возбуждение по глубине материала титана и азота в титане – это резко убывающие функции для всех рассчитанных энергий. С увеличением энергии величина максимума в распределении имплантированных ионов уменьшается, а потеря энергии – возрастает.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, высокоэнергетические частицы производят в твердых телах, в том числе и в металлических материалах, ряд последовательных взаимодействий с электронами и атомами конденсированного вещества. В результате этого происходит передача энергии этому веществу, которая вызывает радиационно-химические превращения в материале путем ионизации и возбуждения атомов и молекул. Кроме этого, идет каскад вторичных частиц (первично-выбитых атомов), обладающих достаточно высокой кинетической энергией. Следует заметить, что заряженные частицы (электроны, ионы и т.п.) производят в конденсированных средах непосредственную ионизацию атомов и молекул, а фотонные излучения – косвенную, за счет образования вторичных электронов. Далее, электроны и атомы вещества, поглощая энергию первичных взаимодействий, становятся родоначальниками большого числа дальнейших последовательных взаимосвязанных между собой событий на атомно-молекулярном уровне, что приводит в конечном итоге к изменению структуры и различных свойств облучаемого материала. В результате после облучения, в основном, происходят необратимые изменения структуры и свойств материалов, сопровождающиеся совокупностью эффектов, которые характеризуются дозовыми или интегральными эффектами, поскольку степень их проявления зависит, прежде всего, от энергии, интенсивности излучения и поглощенной дозы. Как правило, дозовые эффекты проявляются на атомном и молекулярном уровне в виде различных радиационных дефектов. При этом наиболее типичным видом радиационных дефектов в структуре твердого тела являются пары Френкеля в виде междоузельных атомов и вакансий в кристаллической решетке [1–4].

При упругом взаимодействии суммарная кинетическая энергия смещенного атома и первичной частицы остается неизменной. Первично-выбитый атом, имея кинетическую энергию, достаточную для последующих взаимодействий с атомами кристалличес-

кой решетки, может вызывать дальнейшие смещения. В различных моделях и теориях каскадов рассматриваются закономерности образования вторичных атомов. Причем при этом различные виды ионизирующих излучений имеют различную способность образования вторичных и т.д. смещений [5–7]. Несмотря на большое количество работ в этом направлении, расчетов для конкретных экспериментов и анализу характеристик числа взаимодействий и глубин наблюдения выполнено крайне мало.

В данной работе произведены расчеты пространственных распределений дефектов, потерь энергии, концентрации выбитых атомов в титане, облученном ионами азота и титана.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Моделирование на ЭВМ пространственных распределений имплантированных ионов производилось по стандартной программе *SRIM*. Пакет программ *TRIM (SRIM)* предназначен для моделирования физических процессов возникновения каскадов радиационных дефектов при облучении слоистых твердотельных композиций быстрыми протонами, альфа-частицами и ионами с большей массой.

Пакет программ (ПП) доступен в двух версиях: *TRIM* для операционной системы *DOS* (также может работать под *Windows* в режиме эмуляции *DOS*) и *SRIM for Windows*. *TRIM (SRIM)* использует графический пользовательский многооконный интерфейс.

Состав ПП *TRIM (SRIM)*:

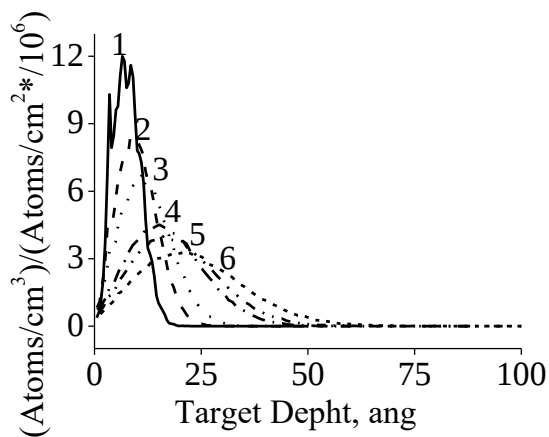
- а) блок ввода исходных данных;
- б) блок моделирования;
- в) блок стат. анализа результатов расчета;
- г) блок вывода результатов расчета.

Основой интерфейса является стандартное окно с набором кнопок для ввода исходных данных и кнопок, предназначенных для запуска команд, а также стандартные типы изображений, играющие роль управляющих элементов. Следует отметить, что указанная программа может быть запущена на компьютере в виде нескольких копий с разными исходными данными.

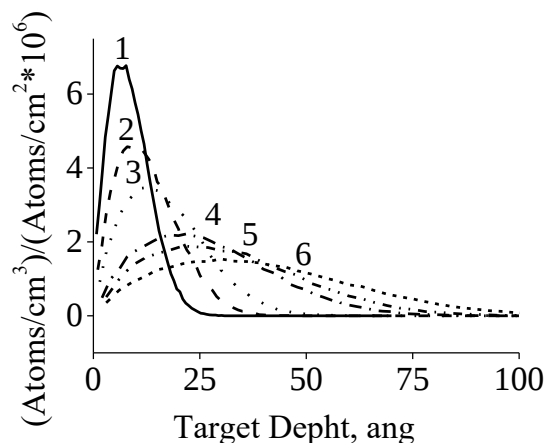
В качестве мишени был выбран титан, а налетающими частицами являлись ионы титана и азота.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунках 1–3 представлены распределения имплантированных ионов титана и азота, потерь энергии и концентрация выбитых атомов в облученном титане в зависимости от глубины проникновения для различных энергий налетающих ионов. Кривые распределения, как имплантированных ионов, так и потерь энергии для титана и азота имеют четко выраженные максимумы, а их концентрация неравномерно распределена по глубине материала. Для титана в титане величина максимума распределения имплантированных ионов в 2 раза больше, чем ионов азота в том же материале (рисунок 1). Причем глубина проникновения ионов для обоих случаев имеет сильное различие (для ионов титана ~ 60, а для ионов азота ~ 100 Å).



а)



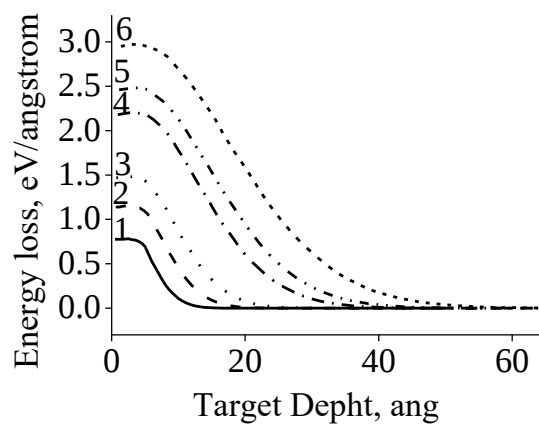
б)

1 – 70; 2 – 150; 3 – 250; 4 – 550; 5 – 700; 6 – 1000 эВ

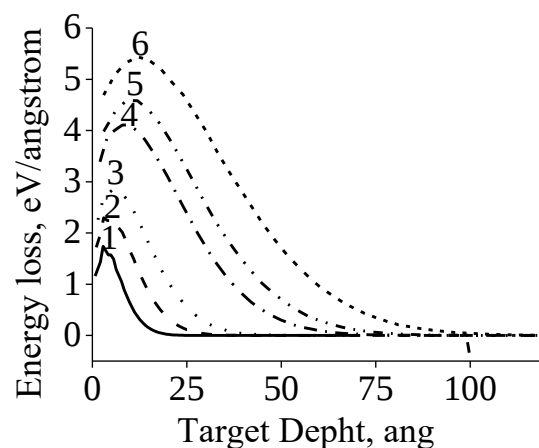
Рисунок 1. Распределение имплантированных ионов Ti (а) и N (б) различных энергий в Ti

Как показывают расчеты, распределение потерь энергии на ионизацию и возбуждение по глубине материала – это довольно резко убывающие

функции. Распределения выбитых атомов по глубине в определенной мере повторяют распределения имплантированной примеси (рисунок 3).



а)

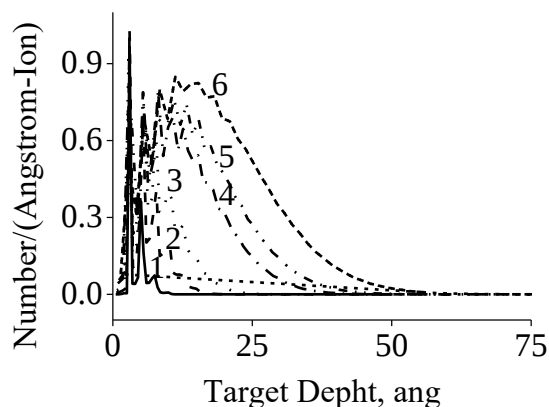


б)

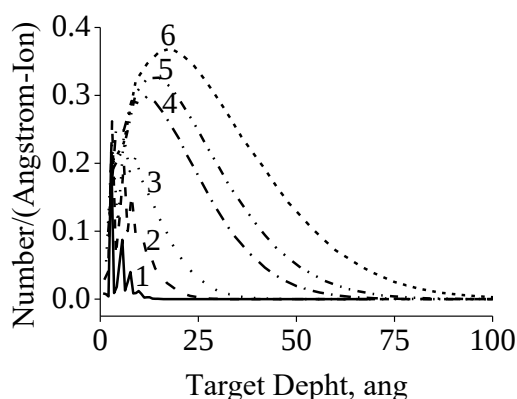
1 – 70; 2 – 150; 3 – 250; 4 – 550; 5 – 700; 6 – 1000 эВ

Рисунок 2 – Распределение потерь энергии на ионизацию при облучении Ti ионами Ti (а) и N (б)

Концентрация имплантированных ионов с ростом энергии (на единицу длины пути) уменьшается, а потери энергии – растут, что связано с пробегом взаимодействия первичных частиц. На рисунке 4 показаны зависимости концентрации имплантированной примеси в титане в максимуме и потерь энергии на ионизацию от энергии первичной частицы. Потери энергии на ионизацию увеличиваются, а концентрация имплантированных ионов с увеличением энергии уменьшается по экспоненциальному закону. Потери энергии при облучении ионами азота практически в два раза больше, чем при облучении ионами титана. А распределение имплантированных ионов при этом при облучении титана ионами того же элемента больше, чем при облучении его азотом. Наблюдается закономерность изменения потерь энергии и распределения имплантированных ионов, как для ионов титана, так и для ионов азота.



а)



б)

1 – 70; 2 – 150; 3 – 250; 4 – 550; 5 – 700; 6 – 1000 эВ

Рисунок 3. Распределение выбитых атомов Ti при облучении ионами Ti (а) и N (б) различных энергий

Использование полученных результатов может существенно углубить понимание радиационных процессов в материалах и упростить расчеты других параметров и характеристик частиц и дефектов

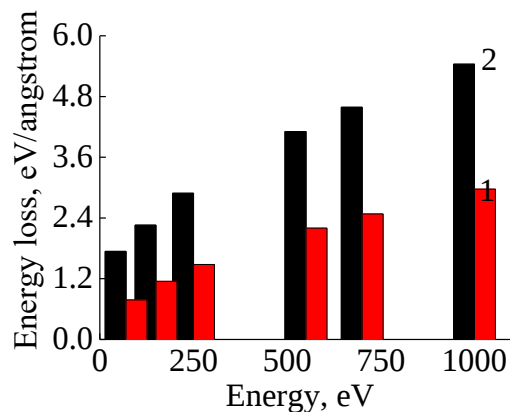
Выводы

1. Произведено моделирование на ЭВМ распределений по глубине имплантированных ионов титана и азота с энергиями $E = 70, 150, 250, 550, 700$ и 1000 эВ, потеря энергии в титане. Получено, что эти кривые (для различных энергий), как для титана, так и для азота имеют четко выраженные максимумы, а их концентрации неравномерно распределены по глубине.

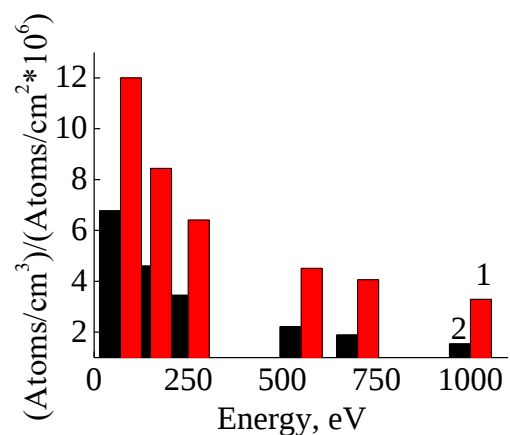
2. Потери энергии на ионизацию увеличиваются с ростом энергии налетающих частиц, а максимум в распределении имплантированных ионов уменьшается.

3. Как показывают расчеты распределение потерь энергии на ионизацию и возбуждение по глубине материала титана и азота в титане – это резко убывающие функции для всех рассчитанных энергий.

4. С увеличением энергии величина максимума в распределении имплантированных ионов уменьшается, а потеря энергии – возрастает.



а)



б)

1 – Ti; 2 – N

Рисунок 4. Сравнение зависимостей потерь энергии (а) и концентрации (б) имплантированной примеси в максимуме кривых от энергии частиц при облучении Ti ионами Ti и N

ЛИТЕРАТУРА

1. Динс Дж., Винийард Дж. Радиационные эффекты в твердых телах. – М.: ИЛ, 1960. – 243 с.
2. Купчишин А.А., Купчишин А.И., Шмыгалева Т.А. Компьютерное моделирование радиационно-физ. задач. – Алматы: «Казак университети», 2007. – 432 с.
3. Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Темкин М.М. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей. – Минск: Изд. БГУ им. Ленина, 1980. – 352 с.
4. Jorabayev A.B., Kupchishin A.A., Kupchishin A.I., Smygalev E.V., Shmygaleva T.A. Finding the domain of cascaded-probabilistic functions for Light particles// KazNU. Bulletin. Chemistry series. – Almaty. – 2013. – №3 (71). – С. 112–117.
5. T.A. Belykh, A.L. Gorodishchensky, L.A. Kazak, A.R. Urmanov. Nucl. Instr. Meth. B51, 242 (1990).
6. I.V. Antonova, A.V. Dvurechenskii, A.A. Karanovich, A.V. Rybin, S.S. Shaimeev, H. Klose. Phys. Stat. Sol. (a) 147,K1 (1995).
7. Гусева М.И., Иванов С.М., Мансурова А.Н., Мартыненко Ю.В. –Физика плазмы, 1986, т. 4, с. 97.

**МАТЕРИАЛДАРДАҒЫ АҚАУЛАРДЫҢ КЕҢІСТІКТІК ҰСТАНУЫНЫҢ
КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛІН ЖАСАУ**

^{1,2)} А.И. Купчишин, ¹⁾ М.Н. Ниязов, ¹⁾ А.Т. Абдухαιрова, ¹⁾ Б.А. Тронин

¹⁾ *Абай атындағы Қазақ Ұлттық Педагогикалық Университеті, Алматы, Қазақстан*

²⁾ *Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, Алматы, Қазақстан*

$E = 70, 150, 250, 550, 700$ және 1000 эВ энергиясымен имплантацияланған титан және азот иондарының тереңдікті таратылуын және иондардың энергия шығының компьютерлік моделдеужасалған. Титан және азот үшін бұл қисықтардың (эртүрлі энергия үшін) максимумы анық көрсетілген және олардың концентрациясы тереңдікте біркелкі таралмайды. Есептеулер көрсеткендей иондану процсінде энергия шығының таралуы және титан мен азоттыңазған иондардыңтитанға өтуі – бұл барлық есептелген энергиялар үшін күрт төмендейтін функциялар. Энергияның өсуі кезінде имплантацияланған иондардың таралуының максималды мәні төмендейді, ал энергия шығыны артады.

MODELLING ON COMPUTER OF SPATIAL DISTRIBUTIONS OF DEFECTS IN MATERIALS

^{1,2)} A.I. Kupchishin, ¹⁾ M.N. Niyazov, ¹⁾ A.T. Abdukhαιrova, ¹⁾ B.A. Tronin

¹⁾ *Kazakh National Pedagogical University by Abay, Almaty, Kazakhstan*

²⁾ *Kazakh National University by al-Farabi, Almaty, Kazakhstan*

The computer simulation of the depth distributions of implanted titanium and nitrogen ions with e energies was performed= $70, 150, 250, 550, 700$ and 1000 eV, energy loss in titanium. It is found that these curves (for different energies), both for titanium and nitrogen, have distinct maxima, and their concentrations are unevenly distributed in depth. As shown by the calculations, the distribution of energy losses for ionization and excitation by the depth of titanium and nitrogen material in titanium are sharply decreasing functions for all calculated energies. With increasing energy, the maximum value in the distribution of implanted ions decreases, and energy losses – increases.