

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ТИТАНЕ, ОБЛУЧЕННЫХ ЛЕГКИМИ ИОНАМИ

А.К. Тогамбаева, Ф.Ф. Комаров, А.И. Купчишин, Т.А. Шмыгалева
НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы

Работа посвящена моделированию на ЭВМ процессов радиационного дефектообразования в титане, облученном легкими ионами, в рамках каскадно-вероятностного метода.

Разработаны алгоритмы и комплекс программ для расчета спектров первично-выбитых атомов и концентрации радиационных дефектов в твердых телах, облученных ионами, в среде C++Builder. Произведены расчеты для различных налетающих частиц, мишенью является титан. Получены закономерности области нахождения результата КВФ и концентрации радиационных дефектов при ионном облучении для различных налетающих частиц.

Современное развитие науки и техники требует создания принципиально новых материалов, удовлетворяющих требованиям различных областей энергетики, науки и техники. Эти материалы должны обладать высокими качественно новыми физико – химическими свойствами, что предполагает детальное изучение структуры материалов под действием ионизирующего излучения и получение информации о дефектах в структуре материалов. Следствием, действия ионизирующего излучения, является резкое изменение их свойств. Прогнозирование поведения материалов в жестких условиях работы требует создания количественных моделей, объясняющих радиационное дефектообразование. При этом нужно учитывать различные факторы: типы налетающих частиц (заряженные и незаряженные, легкие и тяжелые), обязательно нужно учитывать реальную "физическую" картину; т.е. процессы, происходящие при взаимодействии частиц с веществом.

Ионы основную часть своей энергии тратят на ионизацию и возбуждение атомов среды (до 99%) и только 1% идет на образование дефектов атомной структуры. При взаимодействии заряженных частиц с материалом могут образовываться точечные дефекты, пары Френкеля, большие скопления вакансионных и междоузельных атомов.

Расчет концентрации радиационных дефектов при ионном облучении выполняется по формуле [1]:

$$C_k(E_0, h) = \int_{E_c}^{E_{2\max}} W(E_0, E_2, h) dE_2, \quad (1)$$
$$E_{2\max} = \frac{4m_1c^2 m_2c^2}{(m_1c^2 + m_2c^2)^2} E_1;$$

m_1c^2 - энергия покоя иона. $C_k(E_0, h)$ определяется с учетом того, что энергия частицы на глубине h есть $E_1(h)$. Так как $E_1(h) = E_0 - \Delta E(h)$, то задавая потери энергии на ионизацию и возбуждение ΔE , получаем соответствующие глубины наблюдений h из формулы Бете-Блоха. Спектр первично-выбитых атомов определяется следующим соотношением:

$$W(E_0, E_2, h) = \sum_{n=n_0}^{n_1} \int_{h-k\lambda_2}^h \psi_n(h') \exp\left(-\frac{h-h'}{\lambda_2}\right) \frac{w(E_1, E_2, h') dh'}{\lambda_1(h')\lambda_2}, \quad (2)$$

где n_0, n_1 - начальное и конечное значение числа взаимодействий из области определения каскадно-вероятностной функции. Каскадно-вероятностная функция $\psi_n(h')$, входящая в выражение (2), имеет вид:

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

$$\lambda_1(h') = \frac{1}{\sigma_0 n_0 \left(\frac{1}{a(E_0 - kh')} - 1 \right)} * 10^{24} \text{ (см)}, \quad \lambda_2 = \frac{1}{\sigma_2 n_0} * 10^{24} \text{ (см)}.$$

Сечение σ_2 рассчитывается по формуле Резерфорда, z_1 - атомный номер налетающей частицы, z_2 - атомный номер мишени. Спектр ПВА в элементарном акте рассчитывается по формуле:

$$\omega(E_1, E_2) = \frac{d\sigma(E_1, E_2) / dE_2}{\sigma(E_1)}. \quad (4)$$

Подставляя выражение (4) в формулы (1), (2) получаем:

$$C_k(E_0, h) = \frac{E_d E_{2\max}}{E_{2\max} - E_d} \int_{E_c}^{E_{2\max}} \frac{dE_2}{E_2^2} \sum_{n=n_0}^{n_1} \int_{h-k\lambda_2}^h \psi_n(h') \exp \left(-\frac{h-h'}{\lambda_2} \right) \frac{dh'}{\lambda_1(h') \lambda_2}.$$

Выполняя преобразования, приходим к следующему выражению:

$$C_k(E_0, h) = \frac{E_d}{E_c} \frac{E_{2\max} - E_c}{E_{2\max} - E_d} \sum_{n=n_0}^{n_1} \int_{h-k\lambda_2}^h \psi_n(h') \exp \left(-\frac{h-h'}{\lambda_2} \right) \frac{dh'}{\lambda_1(h') \lambda_2}, \quad (5)$$

где E_d - средняя энергия смещения, E_0 - первоначальная энергия частицы, E_c - пороговая энергия, $E_{2\max}$ - максимальная энергия, передаваемая атому и соответствующая лобовому столкновению, $\psi_n(h')$ - каскадно - вероятностная функция.

Вычислить концентрацию радиационных дефектов по формуле (1), если поставить вместо $\psi_n(h')$ ее выражение в виде (3) нельзя, так как в каждом члене КВФ возникает переполнение. Выражение для $\psi_n(h')$ используют в виде:

$$\Psi_n(h', h, E_0) = \exp \left(-\ln n! - n \ln \lambda_0 - \frac{1}{\lambda_0 ak} \ln \left(\frac{E_0}{E_0 - kh'} \right) + \frac{h'}{\lambda_0} + n \ln \left(\frac{\ln \left(\frac{E_0}{E_0 - kh'} \right)}{ak} - h' \right) \right). \quad (6)$$

Значения концентрации, рассчитанные по формуле (6) имеют следующее поведение. Для легких налетающих частиц кривые возрастают, достигая максимума, затем убывают до нуля. С увеличением первоначальной энергии частицы кривые смещаются вправо. С увеличением пороговой энергии E_c значения концентрации уменьшаются, и кривые проходят значительно ниже, переход через максимум осуществляется плавней. При энергиях $E_0 = 100$ кэВ кривая убывает. С увеличением атомного веса налетающей частицы значение функции в точке максимума увеличивается и, следовательно, кривые проходят выше, в то время как значения глубин уменьшаются. Результаты расчетов приведены на рисунках 1,2 и в таблице 1.

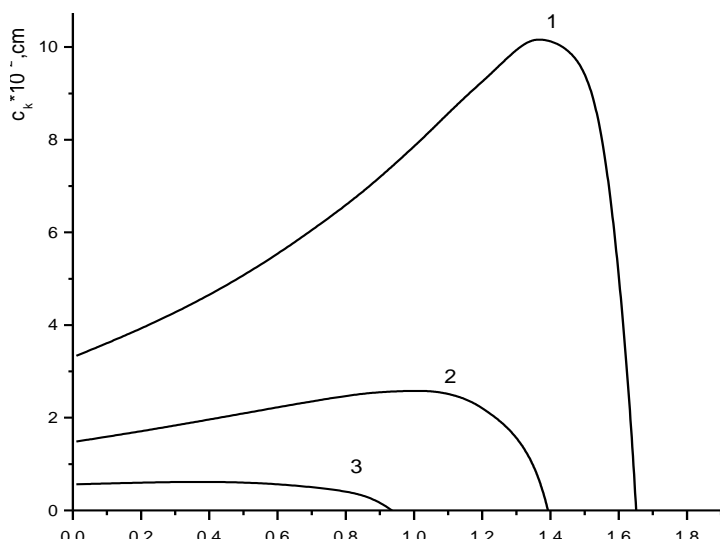


Рис. 1. Зависимость концентрации радиационных дефектов от глубины при облучении титана ионами углерода при $E_0=800$ кэВ, $E_c=50$ кэВ (1), 100 кэВ (2), 200кэВ (3)

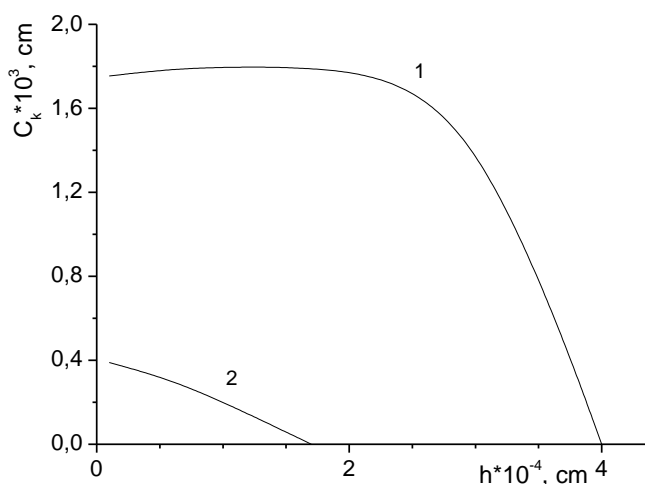


Рис 2. Зависимость концентрации радиационных дефектов от глубины при облучении титана ионами азота при $E_0=200$ кэВ, $E_c=50$ кэВ (1), 100 кэВ (2)

Нахождение области результата концентрации радиационных дефектов при ионном облучении позволило найти закономерности поведения этой области. Отметим некоторые из них.

1. С увеличением пороговой энергии при одной и той же глубине проникновения значения концентрации радиационных дефектов значительно уменьшаются, границы области результата не меняются.

2. В зависимости от глубины проникновения значения концентрации радиационных дефектов возрастают.

3. С увеличением первоначальной энергии первичной частицы при одном и том же значении поровой энергии и глубины проникновения значения концентрации радиационных дефектов уменьшаются.

4. Границы области результата концентрации радиационных дефектов в зависимости от глубины проникновения увеличиваются, диапазон изменения границ колеблется от 0 до 5000.

5. В зависимости от пороговой энергии при одной и той же энергии и одной и той же глубине проникновения границы не меняются.

Таблица 1. Границы области определения концентрации радиационных дефектов для азота в титане при $E_c=50$ кэВ, $E_0=1000$ кэВ

$h \cdot 10^4$, см	C_k , см	E_0 , кэВ	n_0	n_1	τ
0,1	453,93	1000	0	27	1"
1,7	504,21	900	61	224	3"
3,5	569,57	800	196	439	4"60
5,4	650,76	700	376	681	6"
7,3	747,10	600	596	970	7"90
9,4	878,12	500	894	1341	9"
11,6	1050,64	400	1286	1840	13"
12,8	1165,35	350	1545	2142	14"
14	1294,26	300	1846	2474	15"70
14,5	1352,72	280	1987	2648	17"
15	1412,73	260	2138	2820	18"
15,5	1473,16	240	2301	2995	19"
16,1	1556,9	220	2514	3247	21"
16,6	1612,65	200	2709	3461	22"
17,2	1688,03	180	2967	3795	24"50
17,8	1746,76	160	3258	4105	26"
18,4	1765,86	140	3588	4455	29"
19	1695,9	120	3971	4885	31"45
19,6	1422,67	100	4422	5397	35"
20,3	677,95	80	5071	6110	41"
20,6	0	70	5406	6452	42"

Литература

1. А.А. Купчишин, А.И. Купчишин, Т.А. Шмыгалева. Компьютерное моделирование радиационно-физических задач. Монография. Алматы. Изд-во «Қазақ университеті». 2007 г. 432 с.

ЖЕҢІЛ ИОНДАРМЕН СӘУЛЕЛЕНГЕН ТИТАНДАҒЫ РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАРДЫ ЭЕМ-МЕН МОДЕЛЬДЕУ

А.К. Тоғамбаева, Ф.Ф. Комаров, А.И. Купчишин, Т.А. Шмыгалева

Жұмыс каскадты-ықтималдық әдіс шеңберінде жеңіл иондармен сәулеленген титандағы радиациялық ақаулардың пайда болу үрдісін ЭЕМ-мен модельдеуге арналған.

C++Builder ортасында иондармен сәулеленген алғаш соғылған атомдардың спектрлері мен қатты денелердегі радиациялық дефектілердің шоғырлануын есептеу үшін алгоритмдер және программа жиынтықтары жасалды. Нысана титан болып табылатын жағдайдағы әр түрлі ұшып келген бөлшектер үшін есептеулер жүргізілді. Әр түрлі ұшып келген бөлшектер үшін иондық сәулелену кезіндегі радиациялық дефектілер концентрациясы және ҚЫФ нәтижелерін табу аймақтарындағы зандылықтар алынды.

MODELING ON THE COMPUTER OF RADIATION DEFECTS IN THE TITAN, IRRADIATED BY LIGHT IONS

A.K. Togambayeva, F.F. Komarov, A.I. Kupchishin, T.A. Shmygaleva

The work is devoted to modeling on the computer of radiation defects generation processes in the titan irradiated by light ions, within the limits of an in cascade-probabilistic method.

Algorithms and complex of programs for calculation of spectra of the primarily-knocked out atoms and concentration of radiation defects in the solid irradiated by ions, in the environment C++ Builder are developed. Calculations are made for various flying particles and titan target. Regularities of the area of result CPF and concentration of radiation defects are received at an ion irradiation for various flying particles.