

## Раздел первый

# ФИЗИКА РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ И ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

УДК 539.534.9:523.23

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОФИЛЕЙ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОБЛУЧЕНИИ НАНОСТРУКТУРНОЙ ПЛЕНКИ Nb ИОНАМИ Ti<sup>+</sup>

*В.И. Павленко, И.Г. Марченко*

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,  
Харьков, Украина*

*E-mail: pavlenko@kipt.kharkov.ua, march@kipt.kharkov.ua*

Методами компьютерного моделирования исследованы профили образования точечных дефектов в зависимости от угла падения ионов при облучении поверхности ниобиевой наноструктурной пленки ионами Ti<sup>+</sup>. Энергия падающих ионов  $E$  изменялась в интервале 0,5...2,0 кэВ, угол падения  $\alpha$  варьировался от 0 до 80°. Получены угловые зависимости профилей распределения вакансий и межузельных атомов. Показано, что существует интервал углов падающих ионов, при котором наблюдаются максимальные значения концентраций вакансий и межузельных атомов.

### ВВЕДЕНИЕ

Для обеспечения растущих запросов автомобилестроения, машиностроения, энергетики, авиа- и ракетостроения в последние десятилетия стали разрабатываться композиционные материалы нового класса, обладающие свойствами, обусловленными переходом к наноразмерной дисперсности композитов [1–3].

В таких наноструктурных материалах проявляются значительные отличия практически всех физических свойств по сравнению с традиционными композитами [4–8].

Давно и успешно применяемые традиционные технологии осаждения тонких пленок, однослойных и многослойных покрытий тесно связаны с нанотехнологиями. Регулируя, например, параметры осаждения, можно получать наноструктурные пленки [9–11].

В частности, активно применяется ионно-плазменная обработка поверхностных слоев жаропрочных композиционных материалов на основе ниобиевых изделий для получения поверхностных слоев материалов с требуемыми свойствами [3, 12]. Кроме того, ионно-лучевая обработка, ионная имплантация, ионное перемешивание и модифицирование поверхностных слоев с помощью ионных пучков позволяют изменить коэффициент трения, увеличить коррозионную стойкость и износостойкость жаропрочных композиционных материалов на ниобиевой основе [13].

Также известно, что осаждаемые вакуумные покрытия обладают высокой пористостью [14]. Это связано с тем, что при термическом осаждении возникает и развивается система вакансионных пор [15]. Вместе с тем присутствие ионной компоненты в осаждаемых потоках приводит к повышению плотности пленок [16].

Ранее было показано, что для формирования структуры пленки под воздействием низкоэнергетических ионов важным являются зависимости профилей залегания точечных дефектов от энергии ионов. В работах [17–21] было исследовано изменение профилей при нормальном падении ионов. В то же время угловые зависимости профилей дефектообразования вакансий и межузельных атомов не изучались.

Целью данной работы являлось изучение изменения профилей залегания вакансий и межузельных атомов пленки Nb, облучаемой ионами Ti<sup>+</sup>, в зависимости от угла падения ионов на пленку.

### МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Все расчеты были выполнены с помощью программного комплекса SPURT.CRIS [22, 23], созданного для моделирования процессов первичного дефектообразования в сложных неравновесных системах в процессе облучения наноструктурной пленки низкоэнергетичными ( $E \leq 2...3$  кэВ) потоками ионов в широком интервале углов облучения ( $\alpha = 0...80^\circ$ ).

Компьютерный комплекс SPURT.CRIS (базовая версия которого – программа SPURT.MP [24]) основан на приближении метода парных столкновений (МПС) или так называемого метода Монте-Карло, становление которого положила работа Билера [25]. В методе Монте-Карло взаимодействие движущейся частицы с атомами материала пленки представляет как последовательность парных столкновений. Причем в программе SPURT.CRIS разработаны и реализованы алгоритмы поиска атома-мишени по столкновению и самого акта столкновения, применимые к модели твердого тела как со стохастическим расположением атомов, так и к модели твердого тела с упорядоченной решеткой. В

программном комплексе SPURT.CRIS (в отличие от программы SPURT.MP) объединены алгоритмы аморфности, слоистости и поликристалличности мишени, т. е. модельная наноструктурная пленка представляет собой нанокристаллиты, произвольно ориентированные друг по отношению к другу и расположенные в аморфной матрице [22, 23].

Общая теория моделирования физических процессов в наноструктурной пленке по программе SPURT.CRIS детально описана в работе [22]. Здесь лишь отметим, что алгоритм моделирования первичных профилей залегания междузельных атомов Nb и вакансий, образованных в процессе облучения пленки Nb ионами  $Ti^+$ , состоит из двух этапов. На первом этапе с помощью собственно самой программы SPURT.CRIS моделируются координаты  $(x, y, z)$  точечных дефектов

(межузельных атомов пленки и вакансий), расплывенных и отраженных ионов для пары  $Ti^+ \rightarrow Nb$ . Второй этап заключается в том, что полученные массивы данных частиц поступают в программу CALCMULT [22], которая обрабатывает координаты точечных дефектов генерируемой программой SPURT.CRIS и формирует соответствующие профили дефектов.

## РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЯ

Профили залегания вакансий и междузельных атомов ниобия при облучении наноструктурной пленки Nb ионами  $Ti^+$  с энергией  $E = 1$  кэВ для различных углов  $\alpha$  приведены на рис. 1, 2.

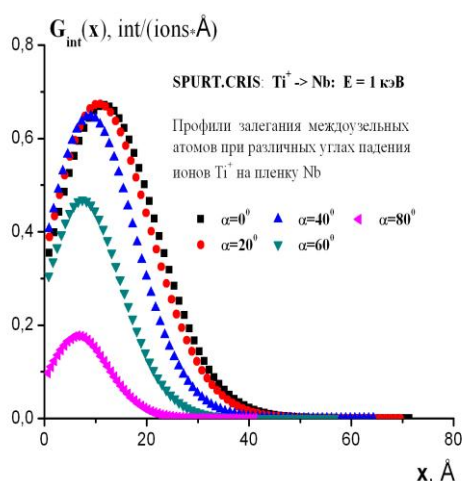


Рис. 1. Профили залегания междузельных атомов Nb при различных углах падения ионов  $Ti^+$  на пленку Nb. Энергия ионов  $E = 1$  кэВ

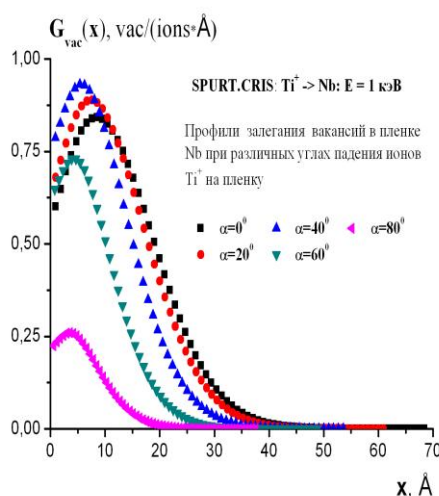


Рис. 2. Профили залегания вакансий при различных углах падения ионов  $Ti^+$  на пленку Nb. Энергия ионов  $E = 1$  кэВ

Анализ графиков наглядно демонстрирует влияние угла падения  $\alpha$  ионов на поведение профилей залегания точечных дефектов. Наблюдается следующая тенденция: с ростом угла  $\alpha$  происходит уменьшение значений профилей залегания дефектов  $G_{int}(x)$  и  $G_{vac}(x)$  как по концентрации дефектов на заданной глубине, так и по глубине проникновения дефектов в объем пленки. Количественные параметры, характеристики и тенденции этого процесса, полученные компьютерным моделированием, при различных энергиях  $E_i$  ( $E_1 = 0,5$  кэВ,  $E_2 = 1$  кэВ,  $E_3 = 1,5$  кэВ,  $E_4 = 2$  кэВ) иллюстрируются на рис. 3–6.

Видно, что для пары  $Ti^+ \rightarrow Nb$  при энергии облучения, например,  $E_4 = 2$  кэВ (см. рис. 3) максимальное значение  $G_{int}^{max}(x) = 0,96$  отн. ед. профиля залегания междузельных атомов Nb в исследованном угловом диапазоне ( $\alpha = 0 \dots 80^\circ$ ) достигается при  $\alpha \sim 30^\circ$ . В то же время (см при той же энергии рис. 4), максимальное значение  $G_{vac}^{max}(x) = 1$ , профиля залегания вакансий достигается в области  $\alpha \sim 45^\circ$ .

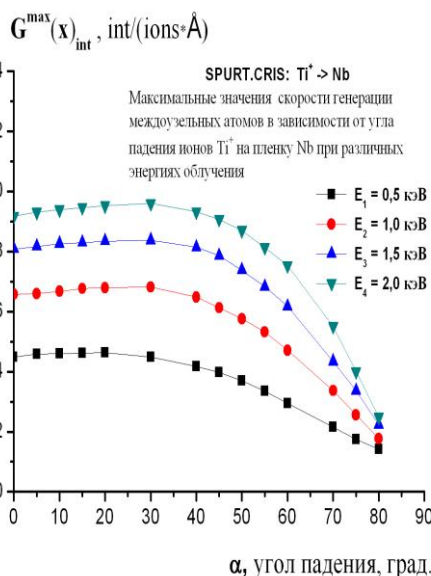


Рис. 3. Максимальные значения скорости генерации междузельных атомов Nb в зависимости от угла падения ионов  $Ti^+$  на пленку Nb при различных энергиях облучения

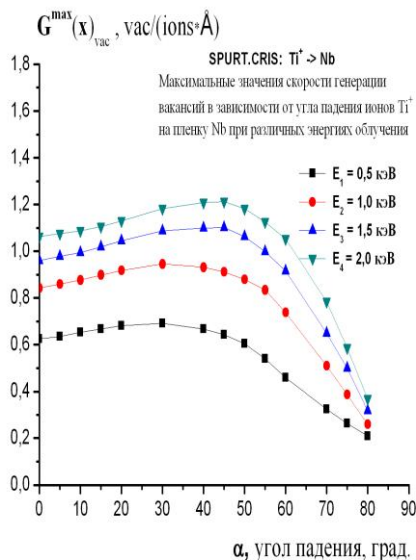


Рис. 4. Максимальные значения скорости генерации вакансий в Nb в зависимости от угла падения ионов  $Ti^+$  на пленку Nb при различных энергиях облучения

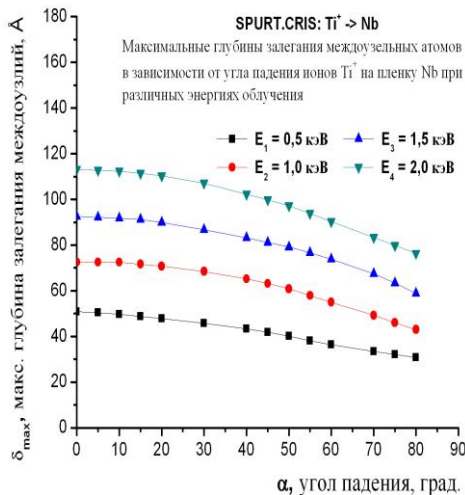


Рис. 5. Максимальные глубины залегания межузельных атомов Nb в зависимости от угла падения ионов  $Ti^+$  на пленку Nb при различных энергиях облучения

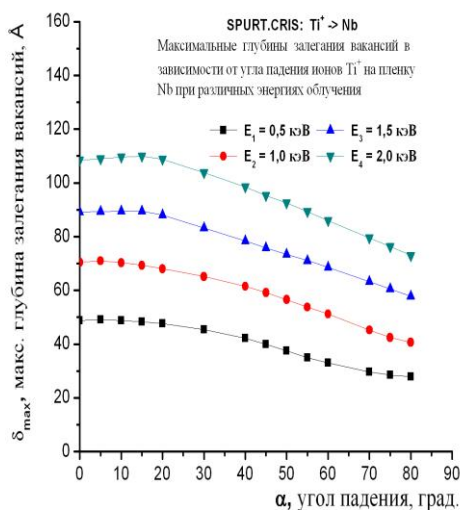


Рис. 6. Максимальные глубины залегания вакансий в Nb в зависимости от угла падения ионов  $Ti^+$  на пленку Nb при различных энергиях облучения

Во всем спектре исследованных энергий максимальные глубины залегания межузельных атомов  $\delta_{\max}$  (см. рис. 5) наблюдаются при углах падения ионов, лежащих в интервале  $\alpha = 0 \dots 20^\circ$ . Так, при нормальном падении ионов на пленку максимальная глубина модифицированного слоя изменяется от  $\delta_{\max}^{\text{int}} = 51 \text{ \AA}$  (при  $E_1 = 0,5 \text{ кэВ}$ ) до  $\delta_{\max}^{\text{int}} = 113 \text{ \AA}$  (при  $E_4 = 2,0 \text{ кэВ}$ ).

Максимальные глубины генерации вакансий лежат в интервале углов  $\alpha = 0 \dots 20^\circ$ . В рамках данных исследований в случае  $\alpha = 0^\circ$  величина  $\delta_{\max}^{\text{vac}}$  составляет  $\sim 49 \text{ \AA}$  (при  $E_1 = 0,5 \text{ кэВ}$ ) и  $\delta_{\max}^{\text{vac}} \sim 109 \text{ \AA}$  (при  $E_4 = 2,0 \text{ кэВ}$ ) (см. рис. 6).

На рис. 7, 8 приведены графики профилей функции  $G_{vi}(x) = G_{\text{vac}}(x) - G_{\text{int}}(x)$ . Изучены поведения профилей при следующих углах падения ( $\alpha$ ) потока ионов на пленку:  $0, 20, 40, 60, 80^\circ$ . Исследование профилей приводит к следующему выводу: профили залегания точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) по глубине пленки обладают двумя различными областями повреждения. Непосредственно вблизи поверхности мишени  $G_{vi}(x) < 0$ . В этой области (приблизительно до  $18 \text{ \AA}$  для  $\alpha = 0^\circ$  и примерно до  $9 \text{ \AA}$  для  $\alpha = 80^\circ$ ) идет процесс обогащения поверхностных слоев пленки Nb вакансиями вследствие активно идущих процессов распыления и прямого выбивания атомов в более глубокие слои пленки. С продвижением в глубь объема пленки функция  $G_{vi}(x) > 0$  (начиная с  $x \sim 19 \dots 20 \text{ \AA}$  для  $\alpha = 0^\circ$  и с  $x \sim 10 \text{ \AA}$  для  $\alpha = 80^\circ$ ). В этой области доминируют процессы, связанные с преимущественным залеганием межузельных атомов Nb.

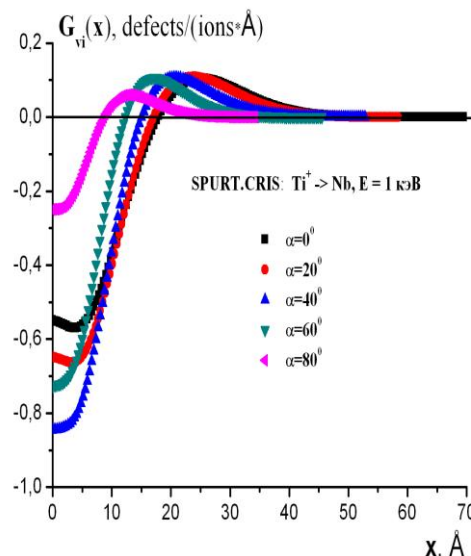


Рис. 7. Профили функции  $G_{vi}(x)$  при различных углах падения ионов  $Ti^+$  на Nb. Энергия ионов  $E = 1 \text{ кэВ}$

Более детальное выявление и описание тонкостей и закономерностей всех эффектов, связанных с эволюцией профилей залегания вакансий и межузельных атомов (с учетом варьирования различных параметров наноструктурной пленки), требуют дополнительных компьютерных исследований.

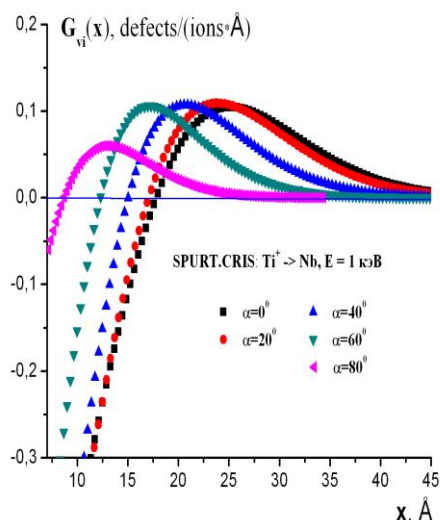


Рис. 8. Фрагменты профилей функции  $G_{vi}(x)$  при различных углах падения ионов  $Ti^+$  на Nb. Энергия ионов  $E=1$  кэВ

### ВЫВОДЫ

С использованием компьютерной программы SPURT.CRIS, реализующей облучение наноструктурной пленки ионами, проведены компьютерные расчеты и получены профили первичного дефектообразования вакансий и межузельных атомов, создаваемых в модельной наноструктурной пленке Nb, облученной ионами  $Ti^+$  в широком интервале углов падения ионов на пленку при различных энергиях падающих ионов ( $0,5 \leq E \leq 2$  кэВ).

Компьютерное моделирование показало существование интервала углов падающих ионов, облучающих ниобиевую пленку, при которых наблюдаются максимальные значения концентраций вакансий и межузельных атомов по глубине пленки. Даны количественные оценки этих эффектов.

Исследовано поведение профилей функции  $G_{vi}(x) = G_{vac}(x) - G_{int}(x)$ . Показано, что функция  $G_{vi}(x)$  изменяет свой знак в глубине пленки. Вблизи поверхности мишени  $G_{vi}(x) < 0$ . Это связано с обогащением поверхностных слоев вакансиями в результате активно идущих процессов распыления, а также прямого выбивания атомов в более глубокие слои мишени. В глубине пленки  $G_{vi}(x) > 0$ , что указывает на преимущественное залегание в этой области межузельных атомов Nb.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Д.Н. Коротаев. *Технологические возможности формирования износостойких наноструктур электроискровым легированием*. Омск: «СибАДИ», 2009, 255 с.
2. С.А. Мубояджян, С.А. Будиновский. Ионно-плазменная технология: перспективные процессы, покрытия, оборудование // *Авиационные материалы и технологии*. 2017, №5, с. 39-54.
3. О.С. Оспенникова. Стратегия развития жаропрочных сплавов и сталей специального назначения, защитных и теплозащитных покрытий //

*Авиационные материалы и технологии*. 2012, №5, с. 19-36.

4. И.П. Суздаев. *Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов*. М.: «КомКнига», 2006, 592 с.

5. Р.А. Андриевский, А.В. Рагуля. *Наноструктурные материалы*. Киев: «Академия», 2005, 185 с.

6. Н.А. Азаренков, В.М. Береснев, А.Д. Погребняк и др. *Наноматериалы, нанопокрyтия, нанотехнологии*. Харьков: ХНУ им. В.Н. Каразина, 2009, 209 с.

7. А.Д. Погребняк, А.П. Шпак, Н.А. Азаренков, В.М. Береснев. Структура и свойства твердых и сверхтвердых нанокomпозитных покрытий // *Успехи физических наук*. 2009, т. 179, №1, с. 1-29.

8. Н.А. Азаренков, В.Н. Воеводин, В.Г. Кириченко, Г.П. Ковтун. Наноструктурные материалы в ядерной энергетике // *Вісник Харківського університету. Серія «Ядра, частинки, поля»*. 2010, №887, в. 1(45), с. 4-24.

9. А.А. Андреев, Л.П. Саблев, С.Н. Григорьев. *Вакуумно-дуговые покрытия*. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2010, 317 с.

10. А.В. Рагуля, В.В. Скороход. Наноструктурная керамика и нанокomпозиты: достижения и перспективы // *Прогресивні матеріали і технології*. Київ, 2003, т. 2, с. 7-34.

11. Е. Шейман. Сверхтвердые покрытия из нанокomпозитов. Обзор зарубежной литературы // *Материаловедение и термическая обработка металлов*. 2008, №12(642), с. 41-47.

12. Д.В. Прохоров. *Структура и механические свойства жаропрочных композиционных материалов на основе Nb-Al*: Дис. ... канд. техн. н. Черниголова, 2016, 190 с.

13. В.П. Сергеев. *Ионно-плазменное наноструктурирование поверхностных слоев высокопрочных материалов и сплавов и нанесение наноструктурных покрытий*: Дис. ... докт. техн. н. Томск, 2011, 539 с.

14. A. Guglya, I. Marchenko. Ion beam-assisted deposition // *Comprehensive guide for nanocoatings technology*. New York, Nova Science Publishers, 2015, v. 1, p. 45-69.

15. I. Marchenko. Computer simulation of the formation of niobium film nanostructure by low-temperature deposition // *Vacuum*. 2007, v. 81, p. 700-707.

16. I. Marchenko, I. Neklyudov. Film nanostructure formation during low-temperature PVD deposition using partially ionized atomic fluxes // *Journal of Physics: Conference series*. 2008, v. 113, p. 2-8.

17. С.Н. Слепцов, Л.В. Булатова, И.Г. Марченко, А.Н. Слепцов, Ю.И. Поляков. Структурное состояние толстых конденсатов ниобия, осажденных из собственных атомно-ионных потоков // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 1993, в. 1(60), с. 62-69.

18. С.Н. Слепцов, И.Г. Марченко, А.Н. Слепцов. Тонкая структура конденсатов ниобия,

сформированных из ионно-атомных потоков в атмосфере гелия // *Физика и химия обработки материалов*. 1994, №4-5, с. 94-100.

19. А.С. Бакай, С.Н. Слепцов, А.И. Жуков, И.Г. Марченко, А.Н. Слепцов, А.Э. Резниченко. Низкотемпературное уплотнение пленок хрома, индуцированное бомбардировкой потоками аргона и хрома // *Металлофизика и новейшие технологии*. 1996, т. 18, с. 62-69.

20. A.S. Bakai, S.N. Sleptsov, A.I. Zhukov, I.G. Marchenko, A.N. Sleptsov. Mathematical modeling of the densification of niobium film deposited from self-ion-atomic fluxes // *Met. Phys. Adv. Tech.* 1996, v. 15, p. 1329-1342.

21. A.S. Bakai, A.I. Zhukov, S.N. Sleptsov, I.G. Marchenko, A.N. Sleptsov, A.E. Reznichenko. Low-temperature densification of chromium films induced by bombardment with argon and chromium ions // *Met. Phys. Adv. Tech.* 1996, v. 16, p. 99-109.

22. В.И. Павленко, С.Н. Слепцов, Л.А. Ферлий. *Программа SPURT.CRIS: Модель наноструктурной пленки. Математическое моделирование*: Препринт ХФТИ 2013-3. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2013, 39 с.

23. В.И. Павленко, И.Г. Марченко. Компьютерное моделирование профилей имплантированных ионов  $Al^{+}$  в наноструктурную пленку Cu // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2017, №4(110), с. 32-38.

24. И.Г. Марченко, В.И. Павленко. *Программа SPURT.MP: моделирование процессов взаимодействия ионов с многокомпонентной мишенью*: Препринт ХФТИ 2006-3. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2006, 36 с.

25. I. Beeler, M. Beeler. *Computer experiment studies on mechanisms for irradiation induced defect production and annealing processes*. North Carolina State University. Raleigh (USA), ORO-3912-101-112, 1979, p. 588.

*Статья поступила в редакцию 21.03.2018 г.*

## **КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОФІЛІВ ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМУ ОПРОМІНЕННІ НАНОСТРУКТУРНОЇ ПЛІВКИ Nb ІОНАМИ $Ti^{+}$**

*V.I. Pavlenko, I.G. Marchenko*

Методами комп'ютерного моделювання досліджені профілі утворення точкових дефектів залежно від кута падіння іонів при опроміненні поверхні ніобієвої наноструктурної плівки іонами  $Ti^{+}$ . Енергія  $E$  іонів, що падають, змінювалася в інтервалі 0,5...2,0 кэВ, кут падіння  $\alpha$  варіювався від 0 до 80°. Отримані кутові залежності профілів розподілу вакансій і міжвузольних атомів. Показано, що існує інтервал кутів іонів, що падають, в якому спостерігаються максимальні значення концентрацій вакансій і міжвузольних атомів.

## **COMPUTER SIMULATION OF THE PROFILES OF DEFECTION FOR LOW-TEMPERATURE IRRADIATION OF NANOSTRUCTURAL FILM Nb by $Ti^{+}$**

*V.I. Pavlenko, I.G. Marchenko*

In the work of computer modeling methods, the profiles of the formation of point defects are studied as a function of the angle of incidence of ions upon irradiation of the surface of a niobium nanostructured film with  $Ti^{+}$  ions. The energy  $E$  of the incident ions varied in the energy range from 0.5 to 2.0 keV, the angle of incidence  $\alpha$  varied from 0 to 80°. Angular dependences of the profiles of the distribution of vacancies and interstitial atoms were obtained. It is shown that there exists an interval of angles of incident ions at which the maximum values of vacancy concentrations and interstitial atoms are observed.