

діелектричному стрижні з $\varepsilon \approx 1$ для зменшення його впливу на характеристики феритового резонатора. На рисунку 3 показані графіки залежностей теоретичного (пунктир) та вимірюючого (суцільна з точками) коефіцієнтів передачі, хід яких повторює експоненціальний закон розподілу магнітного поля за віссю x смужкової лінії, як було припущено вище.

Висновки

Феритовий елемент, внесений в лінію передачі, може бути представлений феритовим резонатором, що дає змогу застосовувати при розрахунку описаний теоретичний підхід.

При розрахунку коефіцієнтів збудження складні власні поля можуть бути описані за допомогою простих наближених формул, зберігаючи високу точність кінцевих результатів у найбільш важливих точках, наприклад, при феромагнітному резонансі.

Відмінність наближеного та реального розподілу магнітного поля зумовлюється наявністю в останньому вищих типів хвиль.

1. *Вунтесмері Вол. С., Стоколос М.О.* Широкопasmові невзаємні пасивні пристрої діапазону дуже високих частот // Вісник НТУУ «КПІ». Радіотехніка. Радіоапаратобудування. – 2008. – Вип. 37. – С. 65-70.
2. *Баскаков С.И.* Сборник задач по курсу «Электродинамика и распространение радиоволн». – М.: Высш. школа, 1981. – 208 с.
3. *Бокринська О.Я., Вунтесмері В.С., Кисляковський А.В.* Феромагнітний резонанс у техніці сантиметрових хвиль. – Київ: Техніка, 1966. – 106 с.

Поступила 21.03.2011р.

УДК 543.51:549.282

П.И.Диденко, канд. физ.-мат. наук, Институт геохимии окружающей среды НАН Украины, Киев

РОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ В ТОКСИЧНОСТИ КВАРЦЕВЫХ АЭРОЗОЛЕЙ

The presence of surface layer in the varieties of quartz was discovered. The surface plays an important role in quartz toxicity. Presence of the surface layer or its absence on quartz enables to forecast the properties of quartz aerosols. A computer model is proposed to explain of quartz surface.

Введение. Исследование кварца приобретает актуальность в связи с тем, что кварцевые аэрозоли очень опасны [1]. До сих пор дискутируется не только механизм образования свободных радикалов этих аэрозолей, но даже сам тип этих радикалов остаётся не до конца установлен [2]. Воздействие

кварцевых аэрозолей легких человека приводит к тяжелому заболеванию (силикоз).

Результаты. Кинетика выхода вторичных ионов показывает существование поверхностного слоя разной степени дефектности кварца. Особенности этого слоя представлены в таблице 1.

Таблица 1.

Отношение выходов вторичных ионов I_S^+ / I_B^+ для образцов кварца, где I_S^+ – значение выхода вторичных ионов на начальной стадии (поверхностный слой), нормированный на выход вторичных ионов Si^+ ; I_B^+ – установившееся (объемное) значение выхода вторичных ионов, нормированное на выход вторичных ионов Si^+ .

I_S^+ / I_B^+	№1	№2	№3	№4	№5	№6	№7	№8
Si^+	1	30,06	7,02	16,02	203,64	53,94	1,73	1,6
O^+	1	8,49	2,68	11,85	56,24	3,94	1,17	1,186
H^+	1	9,4	6,85	5,64	23,34	117,17	2,2	1
OH^+	1	12,25	4,16	16,6	60,5	7,76	1,385	1,28
SiH^+	1	65,76	9,07	100,84	278,2	11,34	1,39	1,08
$SiOH^+$	1	37,8	4,03	151,26	97,58	113,46	2,27	1
SiO^+	1	20,7	4,6	23,7	35,17	51,27	1,6	1,66
SiO_2^+	1	16,8	4,58	268,4	50,4	68,1	1,01	1
Si_2^+	1	21,98	7,6	29,7	1575,6	168,07	1	1,05
Si_3^+	1	75,6	18,9	50,4	1361,4	7,564	1,26	1

Выход вторичных ионов кварца нормирован на выход вторичных ионов Si^+ , что позволяет избегать ошибок, связанных со случайными вариациями условий эксперимента [4, 5].

Особенности объема кварца, установленные при его распылении, представлены в таблице 2.

Основные особенности вторичных ионов разновидностей кварцев:

1. Поверхностный слой мелкозернистых кварцев характеризуется избытком водорода и гидроксидов в $\equiv SiH-$ и $\equiv SiOH-$ группах и невысоким перепадом выхода протонов. Это свидетельствует о сдвиге динамического равновесия в ионно-перемешанном слое в сторону захвата одновалентных радикалов на болтающиеся связи.

2. Высокий перепад выхода вторичных ионов SiO_2^+ коррелирует с низким перепадом вторичных ионов O^+ , что указывает на их участие в одной квазихимической реакции в качестве исходного и конечного продуктов.

3. Для мелкозернистых характерен аномально высокий перепад выходов вторичных ионов Si^+ , O^+ , SiO^+ , Si_2^+ и Si_3^+ . Высокий выход этих вторичных ионов характерен для кварца с избытком болтающихся связей и ультрамалых кремниевых включений. Концентрация этих структурных элементов максимальна вблизи поверхности дефектного слоя.

Таблица 2.

Отношение выходов вторичных ионов I_S^+ / I_B^+ для образцов кварца, где I_S^+ – значение выхода вторичных ионов на начальной стадии (объем), нормированный на выход вторичных ионов Si^+ ; I_B^+ – установившееся (объемное) значение выхода вторичных ионов, нормированное на объемный выход вторичных ионов Si^+ .

I_B^+ / I_{Si}^+	№1	№2	№3	№4	№5	№6	№7	№8
Si^+	$7,7 \cdot 10^5$	$(4 \div 1) 10^6$	$8,5 10^5$	$6,2 10^5$	$8,8 10^4$	$4,6 10^3$	$5,2 10^2$	$4,0 10^4$
H^+	$1,8 \cdot 10^{-1}$	$(2,4-9,5) 10^{-2}$	$1,0 10^{-1}$	$8,5 10^{-2}$	$1,9 10^{-1}$	$9,8 10^{-2}$	$4,0 10^2$	$5,0 10^{-2}$
OH^+	$9,0 \cdot 10^{-3}$	$(2,1-8,2) 10^{-3}$	$7,1 10^{-3}$	$7,7 10^{-3}$	$1,1 10^{-2}$	$5,7 10^{-2}$	$8,3 10^0$	$6,0 10^{-2}$
SiH^+	$7,7 \cdot 10^{-4}$	$(0,8-3,1) 10^{-4}$	$2,0 10^{-4}$	$1,6 10^{-4}$	$2,8 10^{-3}$	$1,2 10^{-2}$	$8,5 10^{-1}$	$6,5 10^{-3}$
$SiOH^+$	$6,0 \cdot 10^{-5}$	$(0,7-2,6) 10^{-5}$	$2,4 10^{-5}$	$1,1 10^{-5}$	$4,7 10^{-3}$	$5,7 10^{-3}$	$2,5 10^{-2}$	$7,0 10^{-3}$
O^+	$1,0 \cdot 10^{-2}$	$(0,3-1,2) 10^{-2}$	$1,3 10^{-2}$	$1,4 10^{-2}$	$2,0 10^{-2}$	$1,4 10^{-1}$	$6,0 10^0$	$1,5 10^{-1}$
SiO^+	$7,3 \cdot 10^{-2}$	$(1,2-4,8) 10^{-2}$	$5,1 10^{-2}$	$4,0 10^{-2}$	$5,8 10^{-2}$	$8,5 10^{-2}$	$3,3 10^{-1}$	$3,0 10^{-2}$
SiO_2^+	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$(0,8-3,0) 10^{-4}$	$2,6 10^{-4}$	$3,4 10^{-4}$	$4,5 10^{-3}$	$1,4 10^{-3}$	$8,6 10^0$	$3,0 10^{-2}$
Si_2^+	$3,2 \cdot 10^{-2}$	$(0,6-2,3) 10^{-3}$	$3,1 10^{-3}$	$3,1 10^{-3}$	$7,2 10^{-2}$	$1,3 10^{-2}$	$1,8 10^1$	$6,0 10^{-2}$
Si_3^+	$1,6 \cdot 10^{-4}$	$(0,3-1,3) 10^{-5}$	$1,5 10^{-5}$	$3,2 10^{-5}$	$7,5 10^{-5}$	$4,3 10^{-5}$	$1,5 10^{-1}$	$1,0 10^{-3}$

Разновидности кварцев: № 1 – сливной серый кварц; № 2 – сливной белый кварц; № 3 – сливной белый, полупрозрачный кварц; № 4 – сливной дымчатый кварц; № 5 – кварц мелкозернистый, сахаровидный (~200 мкм); № 6 – кварц мелкозернистый, прозрачный (~200 мкм); № 7 – сливной прозрачный кварц; № 8 – сливной молочно-белый кварц. Размер зерен сливного кварца ~1–2 мм.

Компьютерное моделирование и обсуждение результатов [3].

Компьютерное моделирование распыления кварца проведено с целью отождествления свойств кварца и кварцевых аэрозолей.

При динамическом послойном анализе однородной матрицы масс-спектр вторичных ионов отражает стационарное состояние поверхностного слоя распыляемой матрицы, модифицированного ионным пучком. Для модифицированной поверхности SiO_2 важной характеристикой является статистика ближнего порядка (доля каждого типа тетраэдров $Si-Si_{4-p}O_p$, $p = 0, \dots, 4$) [5]. Каждый из таких фрагментов может служить предшественником (*precursor*) для одного или нескольких типов вторичных ионов. В свою очередь, некоторые типы вторичных ионов (например, SiO^+) обнаруживают чувствительность к наличию в исходной матрице так называемых

болтающихся связей $\equiv\text{Si}-\text{O}$. Нановключения кремния в SiO_x активно проявляют себя в эмиссии вторичных ионов Si_n^+ ($n = 2, 3, \dots$). Таким образом, ионный пучок оказался тем инструментом, который переводит в принципе одинаковые исходные матрицы в разные конечные состояния, выявляя скрытые структурные различия в них. Однако, ситуация осложняется неоднородностью исходной матрицы в пределах поверхностного слоя и недостижимостью здесь истинно-стационарного состояния по радиационным дефектам, составу и статистике ближнего порядка.

Для выявления природы матричных эффектов для рассматриваемой пары ион-мишень предпринято компьютерное моделирование эволюции статистики ближнего порядка в поверхностной области матрицы SiO_2 при ионном распылении. Элементарные квазихимические реакции с участием кремний-кислородных тетраэдров, имплантируемого и выбитого из узлов подрешетки SiO_2 атомарного кислорода, точечных дефектов и атомных столкновений, генерирующий тот или иной тип дефекта, представлены в таблице 3.

Следует особо отметить, что в процессах дефектообразования необходимо различать так называемые далекие и близкие столкновения. В далёких столкновениях энергия, передаваемая мостиковому атому кислорода ($\sim 5-8$ эВ), достаточна только для создания локализованной пары ($\equiv\text{Si}-\text{O}\dots-\text{Si}\equiv$) болтающихся связей. Такие дефекты, обладающие свойствами свободных радикалов, интенсивно образуются в кварце при облучении его легкими частицами [6]. В их образовании участвуют не только ядерные, но и электронные потери энергии первичного иона, доминирующие на начальном участке его траектории. В случае же близких столкновений передаваемая энергия достаточна для образования кислородной вакансии $\equiv\text{Si}\dots-\text{Si}\equiv$ и быстрого атома отдачи (recoil atom) кислорода. Данный атом способен в дальнейшем мигрировать по междоузельному или эстафетному механизму и вступать в реакции не только вдали от места своего зарождения, но и за пределами слоя, возмущенного ионной бомбардировкой. В частности, как показали опыты с мечеными атомами кислорода [7], возможна эффузия матричного кислорода в вакуум вплоть до его полного замещения в узлах каркаса кислородом первичного пучка. Однако в модели пренебрегается диффузией собственно атомарного кислорода на том основании, что в области матрицы SiO_2 , насыщенной болтающимися связями и другими радиационными дефектами, более или менее свободная миграция кислорода возможна только после его объединения в молекулу.

Роль механически индуцированных дефектов, а также разного рода трещин, границ зерен и других протяженных дефектов, поверхность которых содержит ненасыщенные болтающиеся связи типа $\equiv\text{Si}-$, $=\text{Si}<$, учитывается путем замены сосредоточенных стоков эквивалентным по мощности распределенным стоком для молекулярного кислорода. Концентрация центров захвата N_{ED} принимается равной суммарному количеству

поверхностных болтающихся связей в единице объема, а эффективность захвата рассчитывается с учетом времени диффузионной доставки к поверхности зерна [8] в зависимости от геометрии и квадрата линейного размера последнего. В результате такого захвата образуются дефекты $\equiv Si-O$
 $\equiv Si-O$ или $= Si < O$; их концентрация обозначена через N_{ED} . Обозначим соответственно через C_p , N_O , N_{O_2} , N_{per} и N_D концентрации тетраэдров $Si-Si_4$, pO_p , атомарного и молекулярного кислорода, перекисных комплексов и болтающихся связей в SiO_2 -фазе.

Таблица 3

Элементарные процессы в каскаде столкновений, инициированном ионом кислорода в кварце.

	Исходный Фрагмент	Процесс	Конечный фрагмент
Эволюция статистики ближнего порядка			
1	$\equiv Si-Si \equiv + O$ $Si-Si_{4-k}O_k + O$	Встраивание кислорода в тетраэдр (доокисление субокисной фазы)	$\equiv Si-O-Si \equiv$ $Si-Si_{4-k-1}O_{k+1}$
2	$\equiv Si-O-Si \equiv$ $Si-Si_{4-k}O_k$	Выбивание кислорода из тетраэдра (рекойл - восстановление)	$\equiv Si-Si \equiv + O$ $Si-Si_{4-k+1}O_{k-1} + O$
Процессы, стимулированные столкновениями в каскаде			
3	$\equiv Si-O-Si \equiv$	Столкновения $O \rightarrow Si$ Далекие столкновения	$\equiv Si \dots O-Si \equiv$
4	$\equiv Si-O-Si \equiv$	$O \rightarrow O$ Ближние столкновения	$\equiv Si \dots -Si \equiv + O$
5	$\equiv Si-Si \equiv$	$O \rightarrow O$ $O \rightarrow Si, Si \rightarrow Si$	$\equiv Si \dots -Si \equiv$
6	$\equiv Si-O \dots -Si \equiv$	$O \rightarrow O$	$\equiv Si \dots -Si \equiv + O$
Вторичные квазихимические реакции с участием точечных дефектов			
7	$\equiv Si \dots -Si \equiv$	Замыкание связей	$\equiv Si-Si \equiv$
8	$\equiv Si-O \dots -Si \equiv$	Замыкание связей (самоотжиг)	$\equiv Si-O-Si \equiv$
9	$\equiv Si-O \dots -Si \equiv + O$	Образование перекисного комплекса	$\equiv Si-O-O-Si \equiv$
10	$\equiv Si \dots -Si \equiv + O$	Захват кислорода вакансией	$\equiv Si-O-Si \equiv$
11	$O + O$	Ассоциация атомарного кислорода	Подвижный $O_2 \uparrow$
12	$O_2 \uparrow +$ протяженный дефект	Захват на протяженные дефекты	$= Si < O$ $-Si-O$ $-Si-O$

Кроме того, необходимо предположить, что коэффициенты скорости выбивания мостикового кислорода в междоузельное положение β (или в состояние болтающейся связи γ) пропорциональны соответствующей плотности энергии, теряемой первичным ионом в близких и далеких столкновениях соответственно:

$$\beta(z) = \beta_0(J_0/\lambda_n) f(z) \quad (1)$$

$$\gamma(z) = \gamma_0(J_0/\lambda_f) F(z), \quad (2)$$

где $f(z)$ и $F(z)$ – плотности потерь энергии первичного иона в направлении, перпендикулярном поверхности в близких и далеких столкновениях; β_0 и γ_0 – число смещений или дефектов на один первичный ион, λ_n и λ_f – характерные расстояния каждого из распределений (порядка длины проективного пробега атома кислорода после распада молекулы O_2), а J_0 – удвоенная плотность первичного молекулярного ионного пучка. Аналогично интенсивность поступления в матрицу атомарного кислорода из первичного пучка на глубину z имеет вид:

$$G(z) = (J_0/\lambda_o) g(z) \quad (3)$$

где $g(z)$ – распределение пробегов, $\lambda_o = (2\pi)^{1/2}\sigma$, где σ – дисперсия распределения. Все параметры, касающиеся торможения первичного иона, могут быть взяты из расчета по программе TRIM или из таблиц.

Система дифференциальных уравнений, описывающая временную кинетику пространственного распределения структурных единиц ближнего порядка и точечных дефектов в твердом теле, в подвижной системе координат, связанной с распыляемой поверхностью (скорость распыления v_s) в соответствии с реакциями таблицы 3, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_D}{\partial t} &= \gamma(z)C_4 + v_s \frac{\partial N_D}{\partial z} - N_D/\tau_D + \beta(z) N_{per} - k_{ox}N_O N_D \\ \frac{\partial N_O}{\partial t} &= G(z) - 2k_A(N_O - N_{eq})^2 + v_s \frac{\partial N_O}{\partial z} - k_{ox}N_O \sum (4-p)C_p - \beta(z) \sum pC_p \\ &\quad - k_{ox}N_O N_D + \beta(z)N_{per} \\ \frac{\partial C_p}{\partial t} &= v_s(t) \frac{\partial C_p}{\partial z} + k_{ox}N_O (4-p+1)C_{p-1} - k_{ox}N_O (4-p)C_p + \\ &\quad + \beta(z) (p+1)C_{p+1} - \beta(z) pC_p, \quad p=1,2,3 \quad (4) \\ \frac{\partial C_0}{\partial t} &= v_s(t) \frac{\partial C_0}{\partial z} - 4k_{ox}N_O C_0 + \beta(z) C_1 \\ \frac{\partial C_4}{\partial t} &= v_s \frac{\partial C_4}{\partial z} + k_{ox}N_O C_3 - 4\beta(z) C_4 - \gamma(z)C_4 + N_D/\tau_D, \\ \frac{\partial N_{per}}{\partial t} &= v_s(t) \frac{\partial N_{per}}{\partial z} + k_{ox}N_O N_D - \beta(z) N_{per} \\ \frac{\partial N_{O_2}}{\partial t} &= v_s(t) \frac{\partial N_{O_2}}{\partial z} + k_A(N_O - N_{eq})^2 - k_{eff} N_{O_2} N_{ED} + D \frac{\partial^2 N_{O_2}}{\partial z^2} \\ \frac{\partial N_{DD}}{\partial t} &= v_s(t) \frac{\partial N_{DD}}{\partial z} + k_{eff} N_{O_2} N_{ED} \\ \frac{\partial N_{ED}}{\partial t} &= v_s(t) \frac{\partial N_{ED}}{\partial z} - k_{eff} N_{O_2} N_{ED} \end{aligned}$$

Здесь k_A – коэффициент скорости объединения атомарного кислорода в молекулярный, когда концентрация N_O превышает предельную

растворимость N_{eq} , k_{eff} – эффективный коэффициент захвата молекул O_2 на протяженные дефекты, D – коэффициент диффузии O_2 в SiO_2 . Коэффициент k_{ox} характеризует окисление субоксидной фазы атомарным кислородом, а также формирование перекисных комплексов из кислородных мостиков в SiO_2 -фазе. Характерное время τ_D описывает самоотжиг болтающихся связей.

В качестве начальных условий принято равенство всех концентраций нулю за исключением величины C_4 ($Si-O_4$ -тетраэдр), которая задана равной концентрации кремния в чистом SiO_2 . Концентрация N_{ED} , постоянная в пределах возмущенного слоя, играет роль параметра. В качестве граничных условий принято: а) равенство всех концентраций своим начальным значениям на бесконечности; б) отсутствие накопления, сегрегации или отравления на распыляемой поверхности для всех компонентов кроме молекулярного кислорода. Для последнего принят бесконечный сток при диффузии в вакуум.

Для численного решения системы (4) использовался программный код на языке C/C++, основанный на неявных конечно-разностных схемах. В качестве компилятора использовался Microsoft Visual C/C++ 5.0. Результаты расчётов представлены на рис. 1–3.

Расчёты показали, что в стационарном состоянии модифицированный ионной бомбардировкой слой имеет вложенную слоистую структуру. У самой поверхности в той или иной пропорции присутствуют все локальные атомные конфигурации $Si-Si_{4-p}O_p$. Кластеры чистого кремния $Si-Si_4$ все локализованы в области под поверхностью толщиной около 10 нм. Тетраэдры $Si-Si_3O_1$ занимают слой толщиной 15 нм. Именно поэтому в масс-спектрах кварца присутствуют вторичные ионы Si_2^+ и Si_3^+ . Далее с шагом примерно в 5 нм вглубь возрастает толщина областей, насыщенная кластерами $Si-Si_2O_2$ и $Si-Si_1O_3$ соответственно. На большей глубине восстанавливается исходный ближний порядок, представленный тетраэдрами $Si-O_4$. Вместе с тем, статистика ближнего порядка в поверхностном слое SiO_2 в условиях распыления кислородом опосредованно наследует исходную структуру матрицы. Основными параметрами являются: 1) макро-дефектность; 2) предельно достижимая концентрация атомарного кислорода в матрице в условиях её распыления – N_{eq} . При низкой исходной концентрации локализованных на макро-дефектах кремниевых болтающихся связей ($\equiv Si-$, $=Si<$) все они трансформируются в связи $\equiv Si-O$ или $= Si < O$ (рис. 2).

При этом выход вторичных ионов, чувствительных к данному фрагменту матрицы (SiO^+ , SiO_2^+), возрастает пропорционально исходной дефектности. Если же подвижного атомарного кислорода для реакции декорирования поверхности макро-дефекта не достаточно, то исходную дефектность будут пропорционально отслеживать вторичные ионы, чувствительные к кремниевым фрагментам (Si_2^+ , Si_3^+), а выход вторичных ионов $Si_nO_m^+$ ($m>n$) выходит на насыщение.

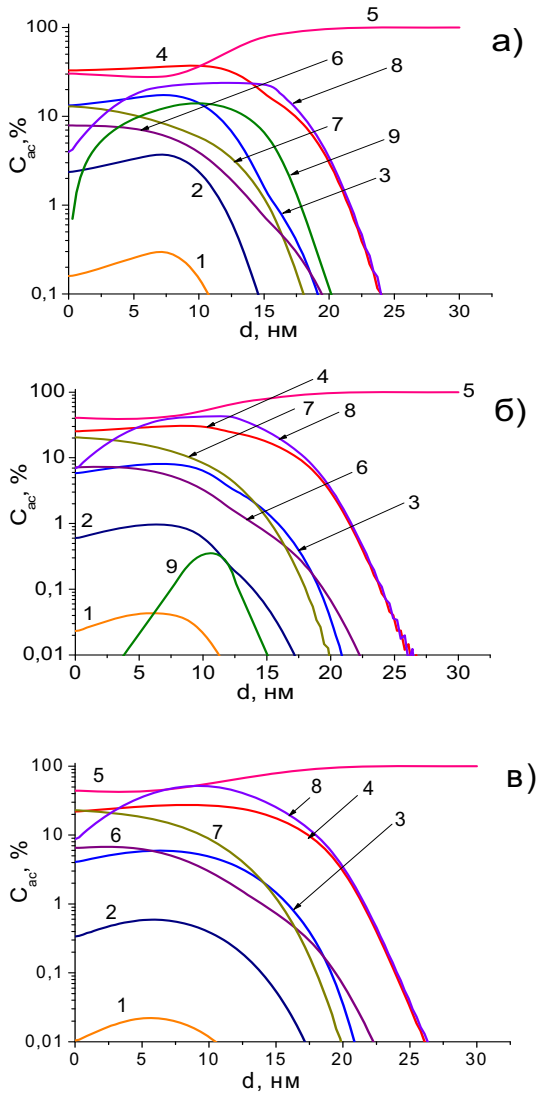


Рис. 1. Стационарное распределение фрагментов ближнего порядка $\text{Si-Si}_{4-p}\text{O}_p$ и точечных структурных дефектов в поверхностной области кварца, распыляемого кислородом при послойном анализе: (1) Si-Si_4 , (2) $\text{Si-Si}_3\text{O}_1$, (3) $\text{Si-Si}_2\text{O}_2$, (4) $\text{Si-Si}_1\text{O}_3$, (5) Si-O_4 , (6) Si-...O-Si , (7) Si-O-O-Si , (8) атомарный кислород O_a , (9) O_2 .

Случай (а) малой, (б) средней и (в) высокой растворимости атомарного кислорода ($N_{\text{eq}} = 10, 20$ и 30 ат.% соответственно) в модифицированном слое.

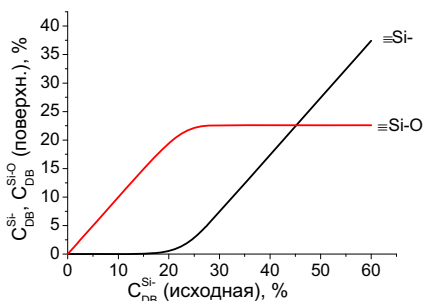


Рис. 2. Эффективная объемная концентрация болтающихся связей, локализованных на внутренних поверхностях протяженных структурных дефектов, установившаяся в поверхностном слое кварца, распыляемого кислородом, в зависимости от исходной макро-дефектности матрицы

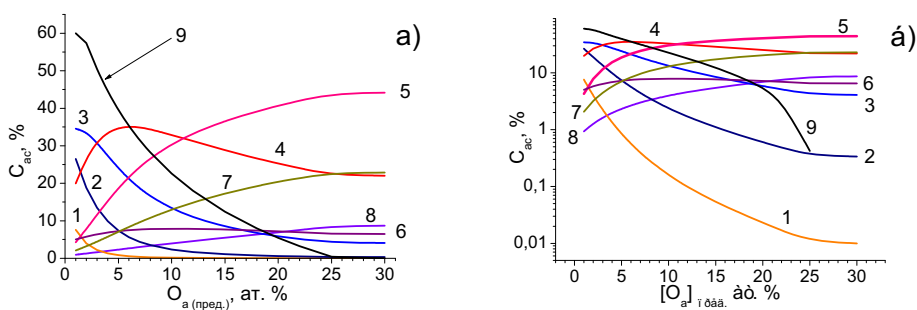


Рис. 3. Фазовый состав распыляемой поверхности в зависимости от растворимости атомарного кислорода: (1) Si-Si₄, (2) Si-Si₃O₁, (3) Si-Si₂O₂, (4) Si-SiO₃, (5) Si-O₄, (6) Si-...O-Si, (7) Si-O-O-Si, (8) атомарный кислород O_a, (9) декорированные дефекты. (а) и (б) – линейный и логарифмический масштабы соответственно.

Следует отметить, что аналогичную роль декораторов болтающихся связей (табл. 4) играют гидроксилы и водород, поскольку выход вторичных ионов SiH⁺ и SiOH⁺ также коррелирует с исходной дефектностью, а соответствующие болтающиеся связи активно обсуждаются в связи с токсичностью кварцевых аэрозолей [9].

Если вторичные ионы Si⁺ и O⁻ образуются при разрыве Si-O связи, то вторичные ионы O⁺ имеют, вероятно, своим предшественником соответствующий подвижный атомарный кислород, попадающий в матрицу с первичным пучком и/или выбитый из узла в междоузлие в ходе каскада столкновений [10]. Согласно моделированию содержание в поверхностном слое такого атомарного кислорода весьма чувствительно как к структуре модифицированного слоя (через коэффициент захвата на вакансии), так и к структуре нижележащего слоя (через коэффициент диффузии ассоциированной молекулы O₂), а также к плотности упаковки структуры

SiO₂-каркаса. Для стеклообразных матриц SiO₂ характерно наличие больших по размеру нерегулярных междоузлий вплоть до образования наноразмерных полостей. При распылении это позволяет удерживать в растворенном состоянии больше атомарного кислорода, чем в случае кристаллических матриц. Поэтому выход ионов O⁺ может испытывать значительные вариации, что и наблюдается экспериментально. В частности, значительный перепад во вторичных ионах O⁺ наблюдается при распылении микрокристаллических матриц. Однако, более важную роль количество подвижного атомарного кислорода играет в формировании общей картины статистики ближнего порядка на распыляемой поверхности. На рис. 3 видно, что фрагменты ближнего порядка на распыляемой поверхности кварца можно разбить на три группы:

- 1) малочувствительные структурные элементы (Si...O-Si), доля которых слабо меняется в широком диапазоне изменений данного параметра;
- 2) фрагменты, активируемые высокой концентрацией O_a (Si-O₄, Si-O-O-Si);
- 3) структурные элементы, исчезающие с поверхности при высокой растворимости кислорода в матрице. Прежде всего, это субокисные тетраэдры (Si-Si_{4-p}O_p, при p≤2), а также декорированные кислородом дефекты. Такое поведение декорированных дефектов обусловлено тем, что на протяженных дефектах оседает только избыточный, по отношению к предельной растворимости, кислород (объединяющийся в молекулы), количество которого с ростом растворимости убывает.

Исходя из этих результатов, необходимо сравнить результаты по объемному выходу для образцов кварца № 1 и 5. В первом случае нарушенного слоя вообще не наблюдается, а во втором случае он наиболее ярко выражен. Для ненарушенной области мелкозернистого кварца № 5 имеет место заметно более высокий выход вторичных ионов SiH⁺ и SiOH⁺, что является индикатором большего количества насыщенных водородом болтающихся связей. При этом самих гидроксидов и водорода (вторичные ионы H⁺ и OH⁺) оказывается почти поровну. Выход вторичных ионов Si₂⁺ больше для мелкозернистого кварца (дефекты с дефицитом кислорода =Si< на поверхности зерен и кислородные вакансии ≡Si-Si≡). Аналогично выход вторичных ионов SiO₂⁺ (поверхностный фрагмент = Si < O) также больше для образцов кварца № 5. Вместе с тем выход вторичных ионов Si₃⁺ больше для образцов сливного кварца. Это отражает наличие ультрамалых включений кремния, появившихся из-за дефицита атомарного кислорода в возмущенном ионной бомбардировкой слое. Последнее обстоятельство, в свою очередь, подтверждается более низким выходом вторичных ионов O⁺. При сопоставлении перепада выходов вторичных ионов каждого из образцов видно, что, в общем случае, образцы групп сливного кварца (№ 1–3, 7, 8) демонстрируют большую устойчивость к модификации свойств поверхности дроблением, чем образцы кварца № 5 и 6. Однако, образцы кварца № 4

(сливной дымчатый), будучи с точки зрения объемных значений выходов вторичных ионов практически идентичными другим образцам групп сливного кварца (1–3), обладает сильно разупорядоченной поверхностной областью. Вероятно, дефекты, ответственные за дымчатую окраску (субмикротрещины и другие концентраторы напряжений), придают им дополнительную хрупкость, в результате чего поверхностная область оказывается насыщенной мелкодисперсным кремнезёмом. Эта особенность отчётливо проявляется при сопоставлении нормированных выходов ионов ($Y^+ = I^+/Si^+$) на поверхности (Y_S^+) и в объеме (Y_B^+) образца. Для всех образцов отношение (Y_S^+/Y_B^+) меняется в пределах нескольких единиц, тогда как для образцов четвертой группы оно может достигать нескольких десятков, особенно в случае вторичных ионов SiO_2^+ . Особняком среди групп образцов стоят образцы кварца № 7 и 8. В отличие от родственных им образцов кварца № 1–4, они имеют слабовыраженный нарушенный слой ($I_S^+/I_B^+ \sim 1\div 2$) в сочетании с высоким содержанием водорода и гидроксиллов (вторичные ионы H^+ , $\equiv Si-H^+$, OH^+ и $\equiv Si-OH^+$). По-видимому, наличие большого количества водородосодержащих комплексов оказывает стеклообразующий эффект на структуру поликристаллического кварца, что придаёт ей достаточную гибкость и способность к релаксации напряжений при внешних механических воздействиях.

Обнаружена корреляция между свойствами кварца (структура и/или состав) и выходом вторичных ионов. Кластеры с преобладанием кремния ($Si_nO_m^+$, $n>m$) проявляют себя чувствительными к начальной фрагментации матрицы. Несмотря на бомбардировку ионами кислорода, вторичные ионы с преобладанием кислорода ($m>n$) оказываются чувствительными к: а) исходному содержанию кислорода в ряду $Si \rightarrow SiO_x \rightarrow SiO_2$ и б) структурному несовершенству в ряду стехиометрических матриц (сливные кварцы \rightarrow пленки $SiO_2 \rightarrow$ гранулированный кварц). В подгруппе кремниевых кварцев отношение Si_2^+/Si^+ максимально для монокристаллического кремния, что свидетельствует о неполном *in situ* окислении такой матрицы под ионным пучком. Отношение Si_3^+/Si^+ максимально для исходно фрагментированного нанопористого кремния, однако оно имеет заметную величину при распылении стехиометрических аморфных SiO_2 пленок. Отношение SiO^+/Si^+ чувствительно к наличию дефектов типа «болтающихся связей» $\equiv Si-O\dots-Si \equiv$, которые в условиях бомбардировки кислородом частично трансформируются в перекисные комплексы $\equiv Si-O\dots O-Si \equiv$, дающие вклад в образование SiO_2^+ . Отношение SiO_2^+/Si^+ максимально для гранулированного кварца.

Выводы.

1. Обнаружено существование поверхностного слоя кварца. Проведено компьютерное моделирование поверхности кварца.
2. Наличие поверхностного слоя кварца позволяет прогнозировать свойства кварцевых аэрозолей.

1. ICRP Memorandum. The evolution of the system of radiological protection the justification for new ICRP recommendations. // J. Radiol. Prot. - 23. - 2003. - P. 129-142.
2. Richards R. // Mineralogical Magazine. - 67. - 2003. - P. 129-139.
3. Диденко П.И., Ефремов А.А. // Поверхность. - 2007. - № 3. - С. 90-97.
4. Диденко П.И., Ефремов А.А. // Поверхность. - 2011. - № 3. - С. 1-6.
5. Romanova G.Ph., Efremov A.A., Didenko P.I. // Proc. VI Int. Conf. (SIMS). Chichester: Willey, 1988. P. 335-338.
6. Любов Б.Я. Диффузионные процессы в неоднородных твердых средах. - М.: Наука, 1981. - 296 с.
7. Силинь А.Р., Трухин А.Н. Точечные дефекты и электронные возбуждения в кристаллическом и стеклообразном SiO₂. – Рига: - изд-во «Зинатне», 1985. - 244 с.
8. Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. - Минск: изд-во БГУ, 1979. - 320-377.
9. Stratta P., Canavese C., Messuerotti A. et al. // Journal of Nephrology. - 14. - 2001. - P. 228-240.
10. Wittmaak K. // Proc. XII Int. Conf. (SIMS). Amsterdam: Elsevier, 2000. P. 569-578.

Поступила 3.03.2011г.

УДК 004.89:004.93

Л.И. Тимченко¹, Ю.Ф.Кутаев², Н.С. Петровский¹, Н.И. Кокряцкая¹
Государственный экономико-технологический университет транспорта,
г. Киев, Украина¹
“ГУП НПО Астрофизика”, г. Москва, Россия²

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ИЗМЕРЕНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КООРДИНАТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЦЕНТРОВ ИЗОБРАЖЕНИЙ ПЯТЕН ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ

The purpose of given article is the decision of an actual scientific and technical problem – working out of a high-precision method for calculation of coordinates of the power centers of images of stains of laser bunches with a margin error no more than 1,5 pixels for real time (5 ms).

Keywords: lasers, location, power centers of laser spots, laser routes, filtration of images

Вступление

В наше время все большее преимущество отдается лазерным локаторам. Эти системы позволяют измерять с большой точностью координаты и скорость объекта, получать исчерпывающую информацию о его форме, определять характеристики его поверхности. Вместе с тем лазерные локаторы могут иметь сравнительно небольшие габаритные размеры, и энергетически выгодны. Последнее в большинстве обуславливается тем, что их зондирующий сигнал