

01;05;11

## **О возможности формирования солитонообразных импульсов при ионной имплантации**

© С.Г. Псахье, К.П. Зольников, Р.И. Кадыров,  
Г.Е. Руденский, Ю.П. Шаркеев, В.М. Кузнецов

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 14 октября 1998 г.

Изучены особенности нелинейного отклика материала при высокоэнергетическом воздействии на группы или отдельно взятые атомы свободной поверхности. Проведено исследование характера диссипации энергии, переносимой солитонообразными импульсами, на таких дефектах структуры, как области с высокой концентрацией вакансий, границы зерен, свободная поверхность. Предложен один из способов описания "эффекта дальнего действия", имеющего место при ионной имплантации металлических материалов.

Для понимания физической природы процессов, происходящих в материалах при высокоэнергетических воздействиях, необходимо детальное изучение особенностей их нелинейного отклика. Данная проблема представляет значительный интерес как в научном, так и в прикладном плане. Это связано с разработкой новых материалов, успешно работающих в экстремальных условиях (высокие давления и температуры, ударные нагрузки, радиационное облучение и т.д.).

Одним из методов, который достаточно давно и успешно используется для изучения нелинейного отклика материалов на микроуровне, является метод молекулярной динамики. В более ранних работах, основанных на этом подходе, было показано, что внешнее высокоэнергетическое воздействие на материал может вызвать генерацию в нем солитонообразных импульсов [1–4]. Данные возбуждения могут распространяться в бездефектном материале на значительные расстояния, практически не изменяя своей формы и амплитуды [5–8].

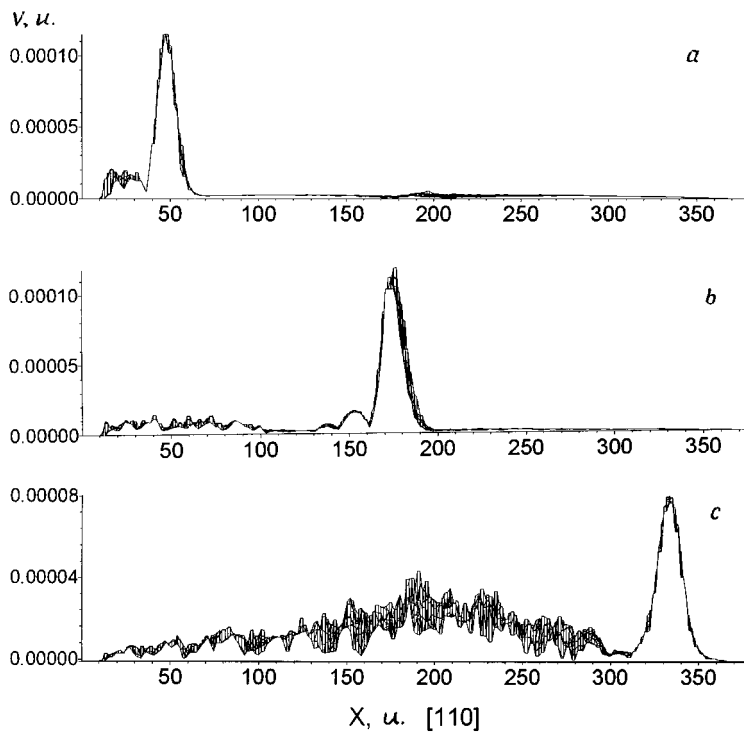
Настоящая работа посвящена молекулярно-динамическому исследованию особенностей диссипации энергии, переносимой уединенными импульсами, на таких дефектах структуры, как свободная поверхность,

границы зерен и области с высокой концентрацией вакансий. Изучена также возможность генерации уединенных импульсов при облучении свободной поверхности высокоэнергетическими частицами или пучками.

В качестве исследуемых объектов были выбраны трехмерные кристаллиты Ni и Al, содержание около 10 тысяч атомов. Особенности прохождения уединенных импульсов через области с пониженной атомной плотностью и границы зерен исследовались на основе парного межатомного взаимодействия в работах. Взаимодействие солитонообразного импульса со свободной поверхностью изучалось с использованием многочастичного потенциала, разработанного в рамках модельного функционала электронной плотности [9,10].

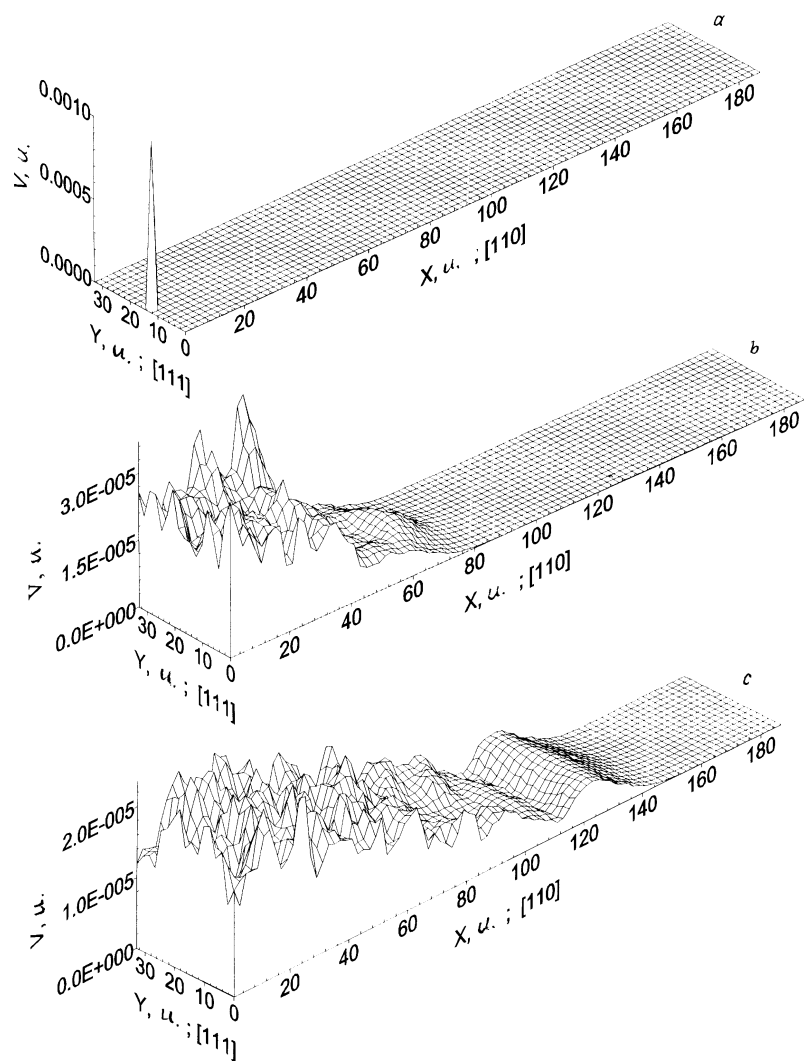
Проведенный анализ прохождения уединенных волн через области с пониженной атомной плотностью в Al показал, что чем больше отклоняется атомная плотность дефектной области от равновесного значения, тем большая часть энергии импульса диссипируется в этой области. Так, при прохождении солитонообразного импульса через локальные области материала, содержащие 25 и 50 вакансий, его амплитуда понизилась на 10 и 20% соответственно. Похожая картина наблюдалась и при прохождении импульса через границы зерен специального типа (например, границу типа  $\Sigma 7$ ). На рис. 1 приведен солитонообразный импульс, инициированный сжатием в образце Al, в различные моменты времени. При этом граница зерна располагалась посередине изучаемого образца перпендикулярно направлению распространения импульса. Из рис. 1 видно, что значительная часть его энергии (приблизительно 20%) рассеивается в зернограничной области. Исследования взаимодействия уединенного импульса со свободной поверхностью показали, что при этом происходит закачка энергии в приповерхностные слои материала. Согласно результатам расчетов, амплитуда импульса при взаимодействии со свободной поверхностью Ni может увеличиться в 1.5–2 раза в зависимости от ориентации свободной поверхности. Этот эффект сопровождается некоторым поджатием атомных слоев. После отражения от свободной поверхности амплитуда импульса понижается и происходит закачка энергии в область материала, лежащую вблизи поверхности.

Результаты моделирования показали возможность генерации солитонообразных импульсов при высокоэнергетическом воздействии на группу и на отдельный атом свободной поверхности. Такого рода воздействия могут иметь место при облучении материала мощными



**Рис. 1.** Положение солитообразного импульса: *a* — в начале образца, *b* — в области границы зерна, *c* — после прохождения границы зерна.

электронными пучками, радиационной или ионной бомбардировке. На рис. 2 показаны характерные этапы формирования солитообразного импульса в результате передачи энергии одному из атомов свободной поверхности. В частности, данному атому присваивалась скорость около 2000 м/с, направленная в глубь материала. Отметим, что при ионной имплантации атомам облучаемой поверхности могут передаваться даже значительно более высокие скорости, превосходящее данное значение на один два порядка. На первом этапе (рис. 2, *a*) отображен момент передачи импульса атому поверхности, на втором происходит передача энергии ближайшим соседям и формируется импульс с полусферическим фрон-



**Рис. 2.** Стадии формирования солитонобразного импульса.

том (рис. 2, *b*). При этом в центральной части фронта атомы имеют большие скорости, т. е. образуется некоторое начальное возвышение. По мере распространения импульса в материале его фронт превращается из полусферического в плоский и гребень фронта выравнивается (рис. 2, *c*). Аналогичная картина наблюдается и при воздействии на группу из нескольких соседних атомов свободной поверхности.

Данные результаты представляют определенный интерес для понимания процессов, происходящих при ионной имплантации металлических материалов. Структурные перестройки в приповерхностных слоях ионно-имплантированных металлов достаточно хорошо согласуются с имеющимися теоретическими расчетами взаимодействия ионов с материалом. В то же время такое важное явление как "эффект дальнего действия" (формирование дефектной структуры в материале на расстояниях, существенно превышающих толщину поверхностного легируемого при ионной имплантации слоя [11–13] еще недостаточно изучен в теоретическом плане. Сложности экспериментального изучения этой проблемы связаны как с короткими временами изучаемых процессов, высокими энергиями ионных потоков, так и с существенно нелинейными процессами, происходящими при столкновении ионных пучков с поверхностными слоями материала [14].

Отметим, что до настоящего времени рассматривалось взаимодействие одного импульса с дефектами структуры, тогда как при ионной имплантации металлургическими дозами ( $10^{15} - 10^{17}$  ион/см<sup>2</sup>) генерируется огромное число импульсов. Это должно приводить к закачке энергии как в поверхностную ионно-легируемую область, так и в дефектные области (границы зерен, области с повышенной концентрацией вакансий и т. д.), расположенные в глубине материала. Отметим, что даже в хорошо отожженном металлическом кристалле плотность дислокаций может составлять  $10^7$  см<sup>-2</sup> и выше. Ввиду того, что скорость распространения импульсов в материале очень высока (близка к скорости звука), перенос энергии и ее перераспределение в объеме материала могут реализоваться достаточно быстро. Помимо этого они могут способствовать также и перемещению уже имеющихся дислокаций от поверхности в глубь материала. Заканчиваемая при ионной имплантации солитонообразными импульсами энергия в приповерхностные слои материала будет трансформироваться в энергию дефектной системы кристалла, включая дислокационную структуру. При этом будет иметь место и повышение плотности дислокаций в приповерхностных слоях облучаемого материала.

По-видимому, данный механизм изменения дефектной подсистемы кристалла лучше наблюдать в монокристаллических и крупнозернистых материалах, так как в этом случае импульсы распространяются со значительно меньшими потерями энергии, проходя значительные расстояния. Тем самым и эффекты дальнего действия будут проявляться в приповерхностных слоях, толщина которых на порядок и более превышает толщину поверхностного легируемого слоя [11,12,15].

## Список литературы

- [1] *Тода М.* Теория нелинейных решеток. М.: Мир, 1984. 256 с.
- [2] *Солитоны* / Под ред. Буллафа Р., Кодри Ф. М.: Мир, 1983. 408 с.
- [3] *Wadati M.* // J. Phys. Soc. Jap. 1975. V. 38. N 3. P. 673–680.
- [4] *Сабиров Р.Х.* // ФТТ. 1990. Т 32. N 7. С. 1992–1998.
- [5] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1–5.
- [6] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю.* // ФГВ. 1997. Т. 33. N 2. С. 43–46.
- [7] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 3. С. 42–46.
- [8] *Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Saraev D.Ju.* // J. Mater. Sci. Technol. 1998. V. 14. P. 1–4.
- [9] *Кузнецов В.М., Каминский П.П., Перевалова В.Ф.* // ФММ. 1987. Т. 63. В. 2. С. 213–218.
- [10] *Kuznetsov V.M., Rudenskii G.E., Kadyrov R.I., Kaminskii P.P.* // Shock Induced Chemical prossing: Proceeding of the USA–Russian Workshop. St. Petersburg, 1996, P. 97–106.
- [11] *Sood D.K., Dearnaley G.* // J. Vac. Sci Technol. 1975. V. 12. N 10. P. 463–467.
- [12] *Sharkeev Yu.P., Didenko A.N., Kozlov E.V.* // Surface and Coatings Tecnology. 1994. V. 65. P. 112–130.
- [13] *Sharkeev Yu.P., Kozlov E.V., Didenko A.N.* // Surface and Coatings Technology. 1997. V. 96/1. P. 103–109.
- [14] *Комаров Ф.Ф.* Ионная имплантация в металлы. М.: Металлургия, 1990. 216 с.
- [15] *Zhukov V.P., Boldin A.A.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1991. V. 166. P. 339–346.