

Моделирование ионного воздействия на металлические системы

Созонова Наталья Михайловна

Дроздов Александр Юрьевич

Физико-технический институт Уральского отделения РАН

Баянкин Владимир Яковлевич, д.т.н.

Kingdom88@mail.ru

Ионная имплантация широко применяется в различных областях науки как метод модифицирования механических свойств поверхностного слоя твердого тела, но некоторые вопросы до сих пор остаются малоизученными. Актуальными остаются исследования образования и накопления радиационных дефектов, поведения внедренных атомов, эффекта поверхностной сегрегации и влияние короткоживущих некогерентных источников упругих волн. Их изучение является трудной задачей, поскольку при комнатной температуре часть радиационных дефектов отжигается и физическое состояние материала во время и после облучения отличаются. Поэтому наибольший интерес представляют результаты, полученные непосредственно во время ионной имплантации и сразу после ее окончания. Это возможно с помощью компьютерного моделирования ионной имплантации.

Моделирование выполняется с использованием программного пакета LAMMPS [1] и потенциалов погруженного атома (embedded atom method potential) [2, 3] для систем на основе железа. Данное семейство потенциалов позволяет в рамках классической МД точнее описывать характер взаимодействия, свойства и структуру металлов и сплавов по сравнению с парными межатомными потенциалами. При этом обеспечивается хорошее количественное согласие с широким набором экспериментальных данных и первопринципных расчетов, включая постоянную решетки для различных температур, модули упругости, энергии точечных дефектов, температуру плавления, энергию ОЦК-ГЦК перехода, плотность и структурный фактор жидкой фазы. Шаг по времени подбирался для различных энергий ионной имплантации и составлял 10-18 с.

В данной работе с помощью программного пакета LAMMPS создавалась система Fe+Ni, содержащая не более 50000 атомов. Облучение проводилось ионом Ag с энергиями облучения 10-30 кэВ. Далее проводилась стабилизация системы путем релаксации при комнатной температуре. Для анализа исследуемой структуры были построены функции радиального распределения в разные моменты времени. При изучении которых выявлено, что структура решетки изменяется. В результате моделирования было обнаружено, что происходит образование дефектов в структуре моделируемого образца. На границе раздела решетки Ni и решетки Fe происходит образование пор при облучении ионом Ag с энергией 10кэВ, чего не наблюдается при облучении ионом Ag с энергиями 20 кэВ и 30кэВ. Выявлено, что на границе двух металлов формируется переходный слой. Предложенная компьютерная модель является тестовой системой для исследования основных закономерностей формирования структурных неоднородностей в биметаллических образцах.

Список публикаций:

[1] URL: LAMMPS WWW Site: <http://lammps.sandia.gov/>

[2] Daw M. S., Baskes M. I. // *Phys. Rev. B*. 1984. V. 29. № 12. P. 6443-6453.

[3] Daw M. S., Baskes M. I. // *Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 50. P. 1285.

Оптические и магнитооптические спектры и электронная структура монокристалла

ErAl₃(BO₃)₄

Соколов Валерий Владимирович

Малаховский Александр Валентинович, Гудим Ирина Анатольевна

Институт физики имени Л.В. Киренского КНЦ СО РАН

Малаховский Александр Валентинович, д.ф.-м.н.

valer963@iph.krasn.ru

Er³⁺ - это широко распространенный активный ион используемый в твердотельных лазерах. В частности, генерация лазера была получена в кристалле YAl₃(BO₃)₄ с примесью Er. Аллюбораты RAl₃(BO₃)₄ (R - Y или редкоземельный (РЗ) металл) имеют структуру хантита с тригональной пространственной группой R32 (*D*₃²) в высокотемпературной фазе. Среда с высокой концентрацией активных ионов редкоземельных элементов необходима для миниатюрных твердотельных лазеров. Редкоземельные аллюбораты со структурой хантита являются идеальным материалом для этих целей, так как эта структура позволяет вводить РЗ ионы с высокой концентрацией вплоть до стехиометрического состава.

Линейно поляризованные (π и σ) спектры поглощения и магнитного кругового дихроизма (МКД) кристалла ErAl₃(BO₃)₄ были измерены при $T = 90$ К для 11 полос поглощения: ⁴I_{15/2} → ⁴I_{11/2}, ⁴I_{9/2}, ⁴F_{9/2}, ⁴S_{3/2}, ²H_{11/2},