УДК 538.971:539.12.04

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ SRIM/TRIM ИОННО-ЛУЧЕВОЙ МОДИФИКАЦИИ КЕРАМИЧЕСКИХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ZrO_2 ИОНАМИ Ag И Au

Ассистент Каршинского государственного технического университета Асророва Чарос Бахтиёр кизи.

asrorovacharos10@gmail.com +998914504883

Керамические мембраны на основе ZrO_2 служат основой твердооксидных электролитов, нанофильтрационных мембран и термобарьерных покрытий. Введение Ag и Au в приповерхностный слой придаёт мембране каталитическую, плазмонную или антибактериальную функциональность, однако пропиточные и золь-гель методы дают слабо контролируемое распределение металла по глубине и блокируют поровое пространство. При ионной имплантации глубина залегания металла задаётся энергией пучка, а доза — флюенсом; ключевая задача — согласовать пробег ионов с толщиной селективного слоя при допустимом радиационном повреждении. Настоящая работа решает эту задачу расчётно.

Методика. Транспорт ионов Ag и Au в ZrO_2 рассчитан методом Монте-Карло в приближении парных столкновений — на той же физической основе, что реализована в SRIM/TRIM: универсальный экранированный потенциал Циглера—Бирсака—Литтмарка с точным численным интегралом рассеяния, электронное торможение по Линдхарду—Шарфу, аддитивность по правилу Брэгга, модифицированная модель Кинчина—Пиза с разделением энергии по Норгетту—Робинсону—Торренсу. Масштабирующий множитель электронного торможения $\xi = 2{,}2$ калиброван по опубликованным данным SRIM/TRIM для шести опорных систем (среднее отклонение пробегов 7,7 %). Приняты $\rho = 6{,}05$

г/см^3, атомная плотность 8,87·10^{22} см$^{-3}$, E_d = 57 (Zr) / 27 (O) эВ; статистика — до 6000 траекторий на режим.

Таблица 1. Расчётные характеристики имплантации в ZrO_2 (флюенс 1·10^{16} ион/см^2).

Ион	**E, кэВ**	**R_p, нм**	**ΔR_p, нм**	**N_v, 1/ион**	**C_{max}, ат.%**	**D_{max}, сна**
Ag	100	30,7	9,2	572	5,00	25
Ag	500	107,8	28,9	2028	1,76	23
Ag	1000	190,6	43,8	3226	1,32	21
Au	100	24,3	6,7	615	6,74	39
Au	500	73,8	19,3	2447	2,58	44
Au	1000	129,4	32,0	4178	1,76	41

Результаты. Проективный пробег растёт от 19,1 нм (Ag, 50 кэВ) до 338 нм (Ag, 2 МэВ) и от 16,2 до 231 нм для золота; во всём интервале R_p(Au) меньше R_p(Ag) в 1,2—1,5 раза. Это задаёт выбор режима: слой 50—100 нм отвечает энергиям 200—500 кэВ, слой 200—300 нм — 1—2 МэВ. Ядерное торможение преобладает над электронным до 565 кэВ (Ag) и 1921 кэВ (Au), поэтому дефектообразование определяется каскадами смещений. Число вакансий на ион достигает 4178 (Au, 1 МэВ), что при 1·10^{16} ион/см^2 даёт 41 сна в максимуме. Коэффициент распыления по формуле Зигмунда составляет 2,1—5,8 ат./ион.

Установлено, что при фиксированном флюенсе пиковые концентрация металла и повреждение не зависят от пористости P, а профили лишь растягиваются по глубине как 1/(1−P): при P = 35 % пробеги возрастают в 1,54 раза. Порог зарождения наночастиц (5—12 ат.%) достигается при флюенсах (3—5)·10^{16} ион/см^2: для Au с энергией 500 кэВ уровень 8 ат.% отвечает 3,1·10^{16} ион/см^2 и повреждению ≈136 сна, что приемлемо для ZrO_2 с учётом её устойчивости к аморфизации. Пробеги в CeO_2 на 5—10 % больше, а пиковое повреждение на

5—21 % выше, чем в ZrO_2. Расчётные профили планируется верифицировать методами РОР, ВИМС, рентгеновской дифракции в скользящей геометрии и ПЭМ поперечных срезов с контролем газопроницаемости мембран.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ziegler J. F., Ziegler M. D., Biersack J. P. SRIM — The Stopping and Range of Ions in Matter (2010) // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2010. Vol. 268. P. 1818—1823.

2. Stoller R. E. et al. On the use of SRIM for computing radiation damage exposure // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2013. Vol. 310. P. 75—80.