

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ КОСМИЧЕСКОЙ РАДИАЦИИ НА НАНОСТРУКТУРЫ

Н.П. Чирская¹, Е.Н. Воронина², В.Н. Милеев²,
Л.С. Новиков², В.В. Синолиц²

¹ Физический факультет МГУ, студ. 4 курса

² НИИЯФ МГУ

Abstract

The models of several composite nanostructured materials, such as silicon with carbon rods and spheres introduced in, were made using the GEANT3 program complex. The calculations of sum electric charge distribution, transferring energy distribution, electric field distribution and time dependence of sum electric charge under irradiation of monochromatic electron beams with energy 0.1 MeV were made for structures mentioned above. The possibilities of computer tools Virtual NanoLab and NanoEngineer for construction composite three-dimensional nanostructures and research of their physical and chemical properties are shown.

Введение

Внедрение наноразмерных структур в материалы существенно влияет на физические свойства получаемых композитов. Применение подобных композиционных материалов в космической технике является весьма перспективным. В космической среде существует множество факторов, оказывающих негативное воздействие на космические аппараты. Одним из наиболее важных факторов является космическая радиация. Ее воздействие может приводить к возникновению различных обратимых и необратимых эффектов в материалах и элементах оборудования космического аппарата, а в конечном итоге - к их повреждению. Поэтому важной задачей является моделирование процессов взаимодействия заряженных частиц космической среды с материалами, включая перспективные наноструктурированные материалы.

1. Постановка задачи и основные уравнения

Внутри магнитосферы основным фактором, оказывающим радиационное воздействие на космические аппараты, являются электроны и протоны радиационных поясов Земли, энергии которых лежат в диапазоне $\sim 0,1 - 100$ МэВ [1]. В данной работе рассматривается воздействие на материалы электронов, так как они имеют большую проникающую способность по сравнению с протонами и играют основную роль в процессах радиационной электризации. Моделирование взаимодействия электронов с веществом проводилось с учетом процессов ионизации и возникновения тормозного излучения.

При взаимодействии заряженных частиц с атомами среды может происходить как ионизация, так и возбуждение атомов. В некоторых случаях переданная выбитым электронам энергия может оказаться весьма значительной, вследствие чего образуются δ -электроны, способные вызывать дальнейшую ионизацию.

Тормозное излучение возникает при взаимодействии заряженных частиц с электрическим полем ядра и атомными электронами. Данное явление приводит к рождению фотонов тормозного излучения, которые оказывают существенное влияние на картину взаимодействия. Для фотонов тормозного излучения учтены комптон-эффект, фотоэффект и эффект образования пар.

В расчетах траекторий движения заряженных частиц учитывалось влияние внутреннего электрического поля, кроме того, учитывались эффекты радиационной проводимости диэлектриков при их объемной электризации.

Возникновение радиационной проводимости диэлектриков связано с образованием электронно-дырочных пар в веществе при прохождении первичной частицы. Величина проводимости σ зависит от мощности дозы радиации R_0 и имеет следующий вид:

$$\sigma = \sigma_0 + A_m R_0^\Delta,$$

где σ_0 - собственная темновая проводимость диэлектрика, A_m - радиационная проводимость при единичной мощности дозы, Δ - показатель степени, зависящий от типа диэлектрика. Токи в диэлектрике могут быть вычислены с помощью уравнения непрерывности и закона Ома в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\vec{j}),$$
$$\vec{j} = \vec{j}_i + \sigma \vec{E},$$

где ρ – плотность объемного заряда, \vec{j} - вектор плотности тока, $\sigma \vec{E}$ - плотность тока, определяемая проводимостью диэлектрика в электрическом поле \vec{E} , \vec{j}_i - вектор плотности тока носителей, инжектируемых в образце под действием излучения. Учет радиационной проводимости приводит к увеличению электрических токов в диэлектрике и таким образом влияет на динамику накопления заряда.

Расчеты проводились с помощью комплекса программ GEANT3 [2]. Данная программа позволяет моделировать основные процессы взаимодействия, происходящие в веществе при энергиях частиц от 10 кэВ до 10 ТэВ. Моделирование прохождения частицы через объект заключается в расчете координат, времени и импульсов, которые вычисляются путем интегрирования уравнений движения по шагу траектории. Размер шага определяется параметрами частиц и материала, а также может зависеть от таких процессов, как потери энергии и многократное рассеяние, которые налагают ограничения на интервал интегрирования. Таким образом, GEANT3 не позволяет создавать модели с размерами элементов меньше минимального шага интегрирования. Поэтому структуры используемых моделей имеют микронные масштабы, что, тем не менее, позволяет корректно моделировать влияние структурных особенностей на изучаемые процессы.

Процессы ионизации, тормозного излучения, а также эффекты, связанные с фотонами тормозного излучения, входят в базовый программный комплекс GEANT, поэтому мы не будем останавливаться на них подробно.

3. Геометрические модели нанокремниевых структур

Для расчетов было выбрано несколько характерных геометрий наноструктурированных материалов. Основной объем модели представляет собой тонкий кремниевый цилиндр большого радиуса, что позволяет не учитывать эффекты вылета первичных и вторичных частиц через боковые стенки. Внутри цилиндра размещены углеродные элементы. В одной модели это шарики (рис.1а), в двух других - стержни, ориентированные перпендикулярно (рис.1б) или параллельно поверхности основного материала (рис.1в).

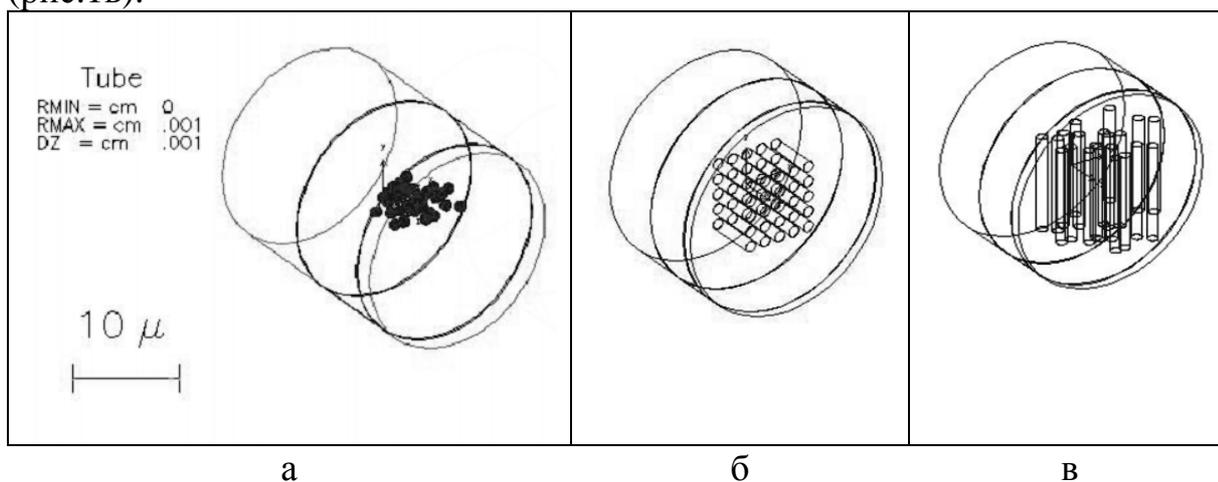
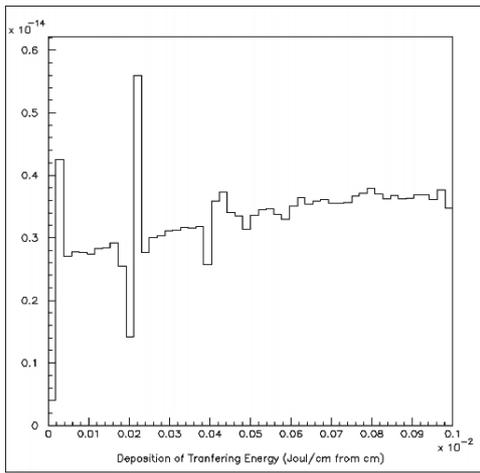


Рис. 1. Модель кремниевого цилиндра: а - с внедренными углеродными шариками; б - с внедренными углеродными стержнями, ориентированными перпендикулярно поверхности кремния; в - внедренными углеродными стержнями, ориентированными параллельно поверхности кремния.

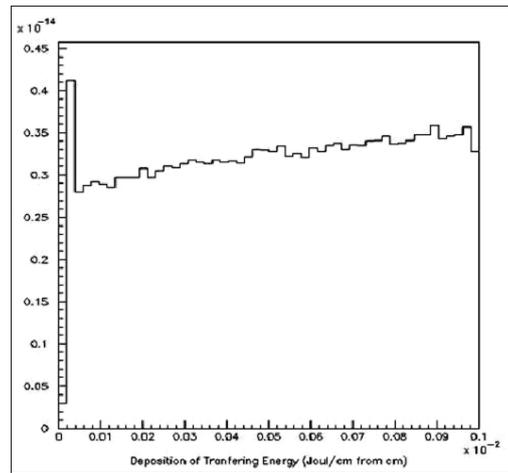
4. Результаты расчетов

Было проведено компьютерное моделирование процессов объемного заряжения образцов наноструктурированных материалов при нормальном падении моноэнергетических пучков электронов с энергией 0,1 МэВ. Толщина кремниевого цилиндра 10 мкм. Диаметр углеродных сфер 1 мкм, диаметр углеродных цилиндров 2 мкм, длина 10 мкм.

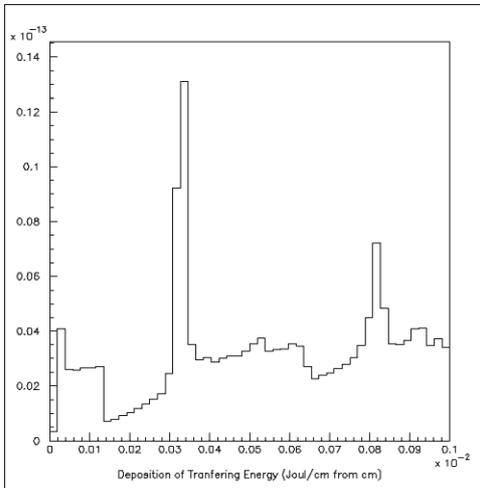
На рис.2 показаны распределения переданной энергии для моделей, изображенных на рис. 1а, рис. 1б, рис. 1в. Как показали расчеты, характер распределения переданной энергии отражает внутреннюю структуру модели. Минимумы значений переданной энергии на распределении рис. 2а соответствуют положению углеродных зерен; на рис.2в – положению углеродных стержней, ориентированных параллельно поверхности кремниевого цилиндра. На рис. 2б дано распределение переданной энергии для модели, изображенной на рис. 1б. В этом случае распределение энергии по глубине практически постоянно, что объясняется малой толщиной модели и однородной по глубине структурой.



а

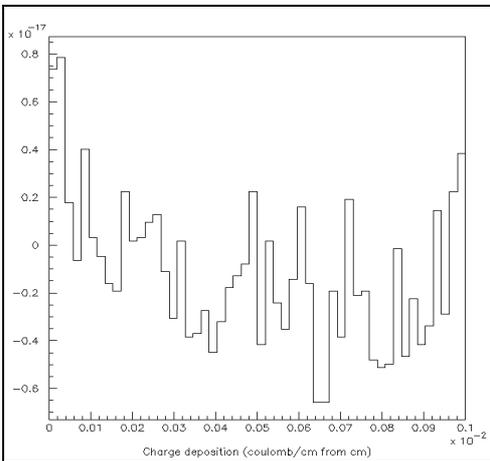


б

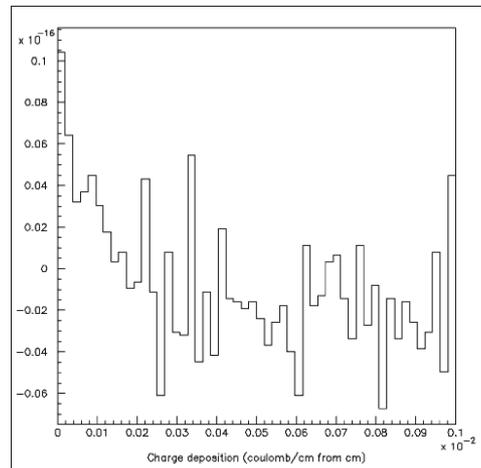


в

Рис. 2. Распределение переданной частицами энергии по глубине образца: а - для модели, изображенной на рис.1а; б - для модели, изображенной на рис.1б; в - для модели, изображенной на рис.1в.



а



б

Рис. 3. Распределение суммарного заряда по глубине образца: а) для модели, изображенной на рис. 1а; б) для модели, изображенной на рис. 1в.

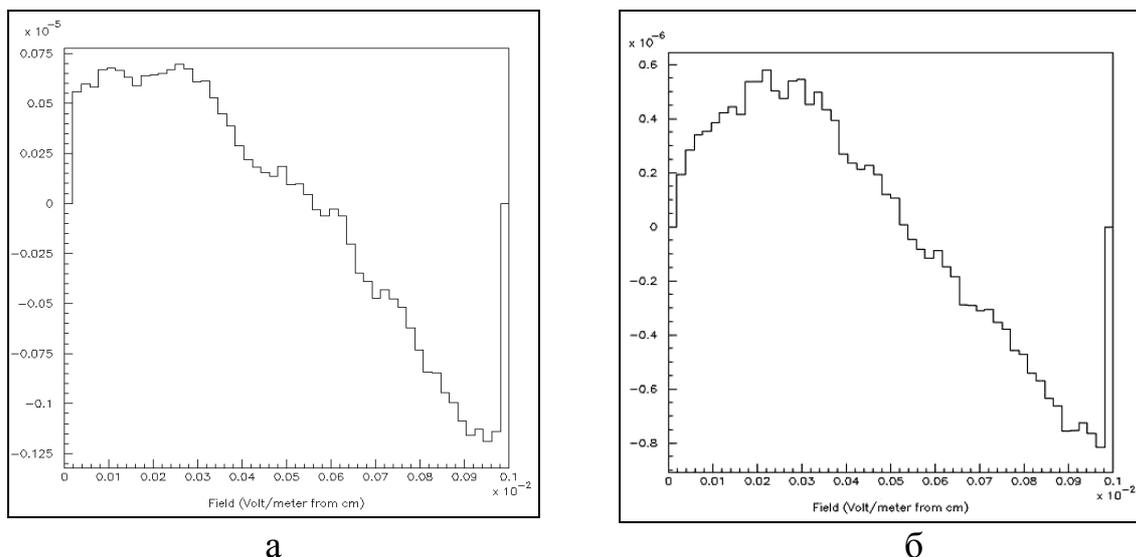


Рис. 4. Распределение напряженности электрического поля по глубине образца: а - для модели, изображенной на рис. 1а; б - для модели, изображенной на рис. 1б.

На рис. 3 представлены распределения суммарного электрического заряда для описанных выше моделей. Плотность распределения электрического заряда испытывает значительные флуктуации, что связано с переносом вторичных частиц между углеродными элементами и кремнием.

На рис. 4 показано распределение напряженности электрического поля по глубине образца. Различия в распределениях, представленных на рис. 4 обусловлено влиянием микроструктуры моделей. Отклонения в распределении напряженности электрического поля (рис. 4а) от аналогичного распределения для однородной по глубине структуры (рис. 4б) соответствуют положениям минимумов в распределениях переданной частицами энергии, т.е. положениям углеродных элементов.

5. Моделирование и исследование наноструктур

При проведении теоретического анализа и компьютерного моделирования радиационных воздействий на наноструктуры в реальном пространственном масштабе необходимо располагать программными средствами, позволяющими строить нужные структуры из отдельных атомов и исследовать некоторые их свойства. Существует ряд пакетов компьютерных программ для этих целей. Так, например, программа Virtual Nanolab [3] предоставляет возможность создавать различные трехмерные структуры из произвольно выбираемых атомов и определять как их фундаментальные свойства (структуру электронных уровней, концентрацию носителей и т.д.), так и важнейшие эксплуатационные свойства (электропроводность, оптические параметры и др.). На рис. 5 приведены примеры построения наноструктур с помощью данной программы.

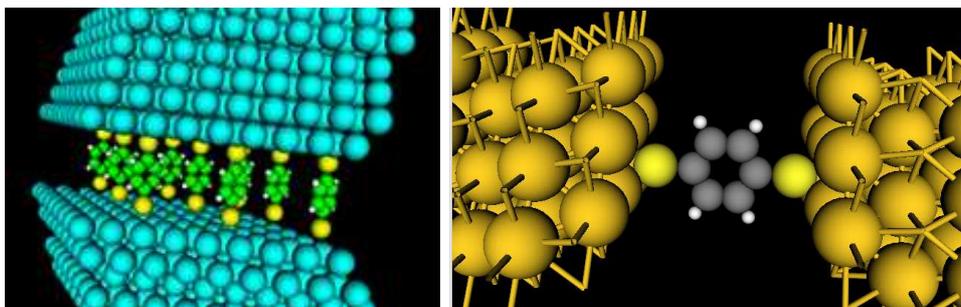


Рис. 5. Наноструктуры, построенные с помощью программы Virtual NanoLab [3]

Изменения макроскопических свойств материалов за счет введения наноэлементов определяются структурными особенностями на атомно–молекулярном уровне, поэтому методы расчетов должны учитывать различные пространственные масштабы. Дополнительные сложности создает тот факт, что зависимость макроскопических свойств от особенностей строения на атомном уровне может оказаться нелинейной или сложно определяемой. Отмеченные особенности необходимо учитывать при создании соответствующих программных комплексов и проведении расчетов.

Еще один широко используемый пакет программ NanoEngineer [4] позволяет производить трехмерное моделирование сложных композитных структур и органических молекул. Примеры построения таких структур показаны на рис. 6.

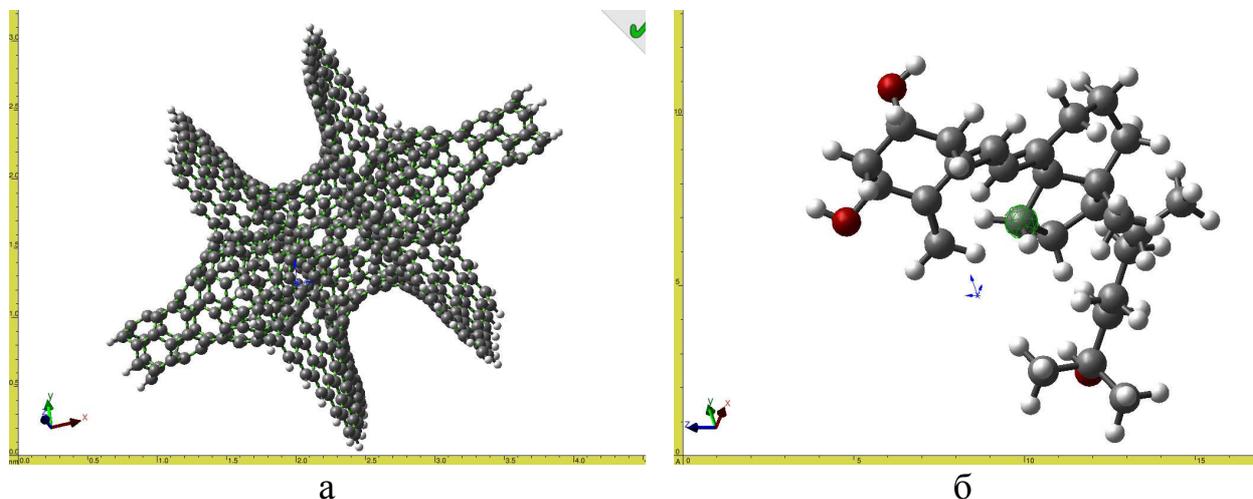


Рис. 6. Построение наноструктур с помощью программы NanoEngineer: а – элемент наномеханизма; б – сложная органическая молекула

С помощью ряда отдельных программ, входящих в комплекс NanoEngineer, можно исследовать механические, химические и электрофизические свойства построенных трехмерных структур. Например, программа MPQS позволяет проводить расчеты проводимости структур и распределения электростатического потенциала.

Программа Nano-Hive используется для изучения динамики процессов на уровне атомов и молекул. Рис. 7 иллюстрирует моделирование процесса взаимодействия сложных молекул в трехмерной области.

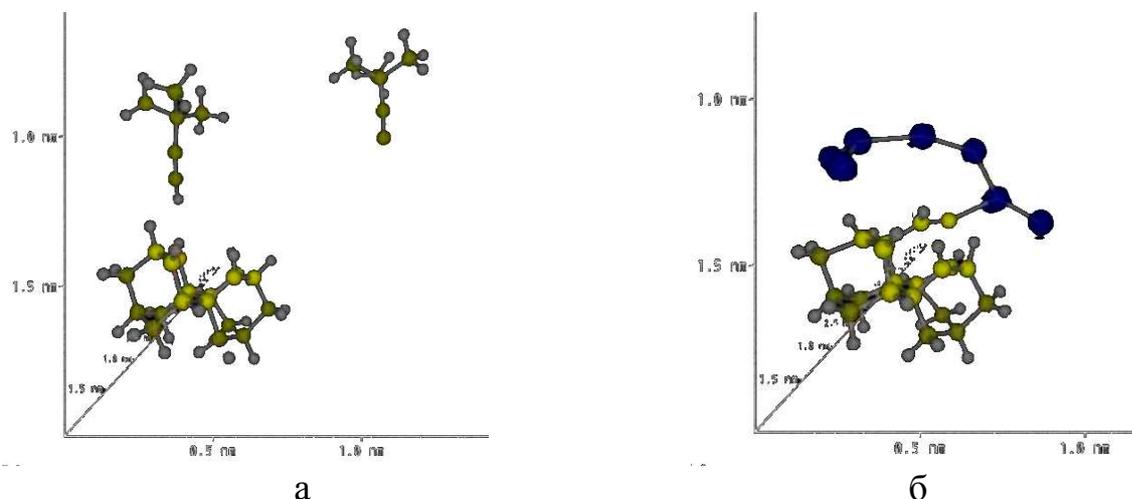


Рис. 7. Иллюстрация процесса взаимодействия молекул:
а – стадия сближения молекул; б – начало объединения молекул

Модульная архитектура пакетов NanoEngineer и Nano-Hive позволяет встраивать их в другие программы или использовать совместно с ними. По-видимому, весьма перспективным может оказаться их использование в сочетании с программами семейства САD, используемыми для автоматизации проектирования.

Заключение

Получены распределения переданной частицами энергии, суммарного заряда и напряженности электрического поля для трех моделей композиционных материалов. Приведенные результаты показывают, что внедрение в однородный материал микроразмерных углеродных элементов влияет на распределения переданной энергии и электрического поля, причем характер распределения отражает микроструктуру модели.

Показаны возможности применения программных комплексов Virtual NanoLab и NanoEngineer для построения сложных трехмерных наноструктур и исследования их физико-химических свойств.

1. Модель космоса, 8-е издание, т.2: Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов. Под ред. Л.С.Новикова, - М.: Изд-во «Книжный дом Университет», 2007, 1144 с.
2. GEANT – Detector Description and Simulation Tool; CERN, Geneva 1993.
3. <http://www.atomistix.com/index.php?id=vnl>
4. <http://www.nanoengineer-1.com>