

Научная статья  
УДК 539.231: 004.942  
DOI 10.18101/2306-2363-2024-2-8-12

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ ПО ФИЗИКЕ

© **Халтанов Василий Эдуардович**

студент,

Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова

Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

gangsterman318@gmail.com

**Аннотация.** В статье рассмотрено использование информационных технологий на примере программного комплекса COMSOL Multiphysics, а также математической программы MathCad для построения моделей физических процессов и разработки математических моделей теплового воздействия ионных и электронных пучков на обрабатываемые поверхности. Численные расчеты показали, что параметры эксперимента, такие как температура и время нагрева (охлаждения), влияют на структурные превращения в образцах при электронно-лучевой обработке поверхности. Моделирование в методе распыления ионными пучками позволило вычислить теоретические коэффициенты распыления мишеней согласно теории Зигмунда. Расчеты позволили рекомендовать оптимальные параметры ростовых процессов.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, тонкие пленки, рост, ионные пучки, электронные пучки.

### Для цитирования

*Халтанов В. Э.* Использование информационных технологий в научных исследованиях по физике // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2024. Вып. 2. С. 8–12.

### Введение

Программный комплекс COMSOL Multiphysics является перспективным программным обеспечением для моделирования разнообразных физических процессов. Оно позволяет моделировать реальные процессы с помощью численных методов, в частности в области теплопередачи энергии при обработке поверхности высококонцентрированными потоками энергии. При построении геометрической модели, имитирующей реальный эксперимент, возможна оптимизация характеристик процессов. Постановка задачи включает выбор управляющих уравнений с последующей обработкой полученных результатов. В работе было осуществлено моделирование тепловых процессов при электронно-лучевой обработке поверхности образца [1].

С помощью математической программы MathCad, являющейся системой автоматизированного проектирования, возможно проведение расчетов, адаптированных к эксперименту, а также визуальное сопровождение. В данной работе были проведены расчеты по выращиванию тонких пленок оксида цинка распылением ионным пучком [2] с введением формул и данных из теории Зигмунда [3]. Тонкие пленки оксида цинка ZnO являются чувствительными сенсорными элементами для микросенсорики, обладают уникальными оптическими и элект-

трическими свойствами: прозрачностью в области видимого диапазона шкалы электромагнитных волн, малым электрическим сопротивлением, большой шириной запрещенной зоны, малой работой выхода электронов, стойкостью к истиранию.

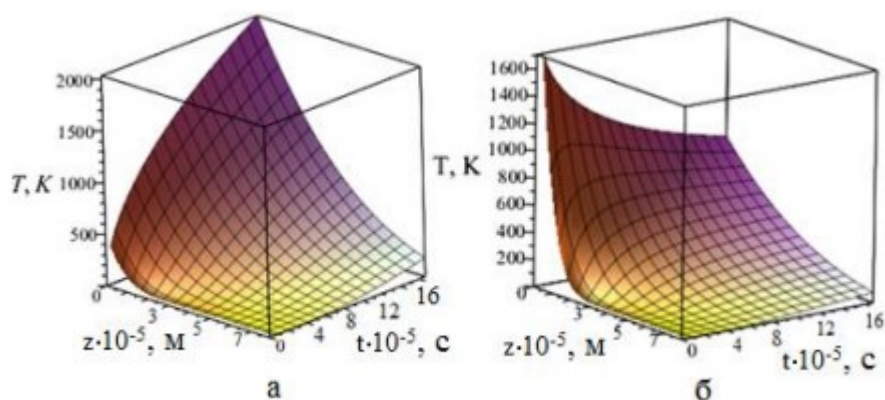
В работе проведено выращивание тонких пленок оксида цинка распылением ионным пучком, а также расчет коэффициентов распыления, что позволило предложить некоторые оптимальные параметры ростовых процессов.

#### Постановка задачи

Математическое моделирование было применено для определения тепловых полей при электронно-лучевой обработке поверхности образца, поскольку данный метод является весьма эффективным для улучшения качественных характеристик поверхностных слоев материалов, среди которых износостойкость, коррозионная стойкость, прочность. В частности, борирование поверхности образца значительно улучшает физико-химические свойства вещества.

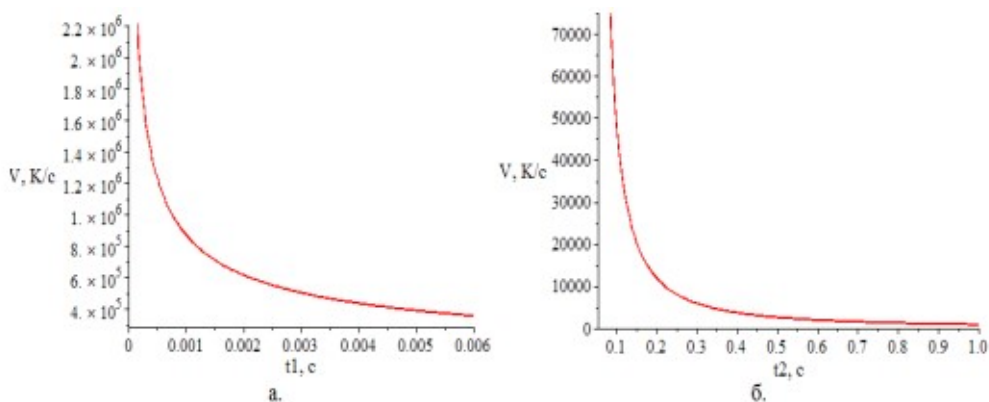
Построение математической модели включает, во-первых, определение граничных условий теплового процесса. Учитывались энергия электронного пучка, плотность потока, толщина обрабатываемого слоя, теплоотвод от поверхности. Во-вторых, были использованы уравнения теплопроводности и законы сохранения энергии.

Программный комплекс COMSOL Multiphysics был адаптирован к теории Н. Н. Рыкалина [3]. Расчеты были проведены для 1000 точек. Модель была максимально приближена к реальному эксперименту: к скорости перемещения электронного луча, к траектории движения луча по поверхности образца. На рисунке 1 показана зависимость температуры в области теплового воздействия электронного пучка по глубине образца (а), а также в зависимости от времени воздействия (б).



**Рис. 1.** Зависимость температуры от глубины и в перпендикулярном направлении движения электронного пучка: а — по фронту; б — в зависимости от времени

На рисунке 2 представлены скорости нагрева и охлаждения в области пятна на поверхности образца. Пятно образуется под воздействием электронного пучка.



**Рис. 2.** Зависимость скорости нагрева (а) и охлаждения (б) в области пятна на поверхности образца

### Результаты и обсуждение

Результаты моделирования тепловых полей при электронно-лучевой обработке поверхности образца показали, что самые высокие температуры наблюдались на поверхности в центральной области образца, что коррелирует с траекторией движения электронного пучка.

Были рассчитаны скорости нагрева и охлаждения в области воздействия электронного пучка. Они достигали величин  $10^6 - 10^5$  К/с, что говорит о высокоскоростных процессах обработки поверхности образца. Такие высокоскоростные процессы приводят к изменению свойств материала. Следовательно, метод электронно-лучевой обработки с использованием математического моделирования тепловых полей может стать весьма эффективным методом для получения материалов с заранее заданными необходимыми свойствами.

В работе проведено моделирование процесса выращивания тонких пленок оксида цинка распылением ионным пучком с помощью математической программы MathCad, а именно был осуществлен расчет коэффициентов распыления мишени из ZnO пучком ионов аргона  $Ar^+$  [2]. Интенсивность распыления мишени ионным пучком определяется коэффициентом распыления  $S$ , который характеризует число выбитых из мишени атомов одним падающим ионом.

Коэффициенты распыления оксида цинка рассчитывали по теории Зигмунда [3]. Результаты проведенных расчетов показали, что коэффициенты распыления кислорода ( $\sim 3,5$  атом/ион) примерно в два раза превышали коэффициенты распыления цинка ( $\sim 1,7$  атом/ион). Причем максимум (выход на «плато») достигается при энергиях падающих ионов порядка  $\sim 4$  кэВ. Дальнейшее увеличение энергии падающих ионов не приводит к значительному увеличению коэффициентов распыления. Поэтому можно рекомендовать для конкретно данного эксперимента энергии в этом диапазоне.

Полный теоретический коэффициент распыления оксида цинка суммировался из парциальных коэффициентов распыления цинка и кислорода, максимальные значения составляли порядка  $\sim 5,2$  атом/ион. В расчетах учитывались атомные массы распыляемого образца и падающих ионов, энергии упругого торможения ионов, энергии поверхностной связи, углы падения ионов.

Сравнительный анализ экспериментальных и теоретических данных показывает, что различие между теоретическими и экспериментальными результатами обусловлено, возможно, изменением рельефа поверхности мишени под действием ионного пучка. Образование кратеров травления приводит к изменению угла облучения поверхности мишени падающими ионами, значительная доля ионного тока поступает на склоны кратера под измененными углами. Распыленные частицы внутри кратера могут захватываться склонами, а затем вновь перераспыляться.

### **Заключение**

Проведенные в работе исследования по моделированию процессов обработки поверхности электронно-лучевыми и ионно-лучевыми методами с использованием программного комплекса COMSOL Multiphysics и математической программы MathCad позволили провести расчет тепловых процессов при воздействии электронных пучков на поверхность образца, что является весьма перспективным для получения материалов с заранее заданными свойствами; расчет процессов распыления мишеней ионными пучками по определению диапазона энергий распыляющих ионов с максимальными значениями коэффициентов распыления, может существенным образом сократить число экспериментов с учетом оптимальных параметров ростовых процессов.

### **Литература**

1. Лапина А. Е., Халтанов В. Э. Выбор оптимальной модели процесса электронно-лучевой обработки с использованием программного пакета Maple и программного комплекса Comsol Multiphysics // Информационные системы и технологии в образовании, науке и бизнесе: материалы всероссийской научно-практической конференции. Улан-Удэ, 2023. С. 135–139. Текст: непосредственный.
2. Халтанов В. Э. Рост тонких пленок оксида цинка распылением ионным пучком // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2024. Вып. 1. С. 14–18. Текст: непосредственный.
3. Sigmund P. Theory of sputtering. *Phys. Rev.* 1969; 184, 2: 383–416.
4. Рыкалин Н. Н., Углов А. А., Зуев И. В. Основы электронно-лучевой обработки материалов. Москва: Машиностроение, 1978. 240 с. Текст: непосредственный.

Статья поступила в редакцию 16.03.2024; одобрена после рецензирования 23.05.2024; принята к публикации 03.06.2024.

## USE OF INFORMATION TECHNOLOGY IN PHYSICAL SCIENCES RESEARCH

*Vasily E. Khaltanov*

Student,

Dorzhi Banzarov Buryat State University  
24a Smolina St., Ulan-Ude 670000, Russia  
gangsterman318@gmail.com

*Abstract.* The article discusses the use of information technology through the example of COMSOL Multiphysics software package and MathCad mathematical program for constructing models of physical processes and developing mathematical models of ion and electron beams' heat exposure on processing surfaces. Numerical calculations have shown

that experimental parameters, such as temperature and heating (cooling) time, cause structural transformations in samples during electron-beam surface processing. Modeling using the ion beam sputtering method made it possible to calculate theoretical target sputtering yield according to the Sigmund theory. Calculations made it possible to recommend optimal parameters for growth processes.

*Keywords:* mathematical modeling, thin films, growth, ion beams, electron beams.

*For citation*

Khaltanov V. E. Use of Information Technology in Physical Sciences Research. *Bulletin of Buryat State University. Chemistry. Physics.* 2024; 2: 8–12 (In Russ.).

*The article was submitted 16.03.2024; approved after reviewing 23.05.2024; accepted for publication 03.06.2024.*