

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ  
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН  
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE REPUBLIC

**«АҚПАРАТТЫҚ ЖӘНЕ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЯЛЫҚ  
ТЕХНОЛОГИЯЛАР: БІЛІМ, ҒЫЛЫМ, ТӘЖІРИБЕ»**  
атты II Халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференциясының  
**ЕҢБЕКТЕРІ**

Алматы, Қазақстан, 3-4 желтоқсан, 2015 жыл

**II том**

**ТРУДЫ**

II Международной научно-практической конференции  
**«ИНФОРМАЦИОННЫЕ И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ  
ТЕХНОЛОГИИ: ОБРАЗОВАНИЕ, НАУКА, ПРАКТИКА»**,

Алматы, Казакстан, 3-4 декабря, 2015 года

**II том**

**THE PROCEEDINGS**

Of the II International scientific - practical conference  
**«INFORMATION AND TELECOMMUNICATION  
TECHNOLOGIES: EDUCATION, SCIENCE AND PRACTICE»**,

Almaty, Kazakhstan, December 3-4, 2015

**II volume**

Алматы 2015

УДК 004(063)  
ББК 32.97  
А37

Редакционная коллегия

Ахметов Б.С. (главный редактор), Калижанова А.У., Козбакова А.Х., Кашаганова Г.Б.,  
Заманова С.К., Абдолдина Ф.Н., Иманбекова Ұ., Мамырова А., Тайсариева Қ.Н., Жұмашева Ж.Т.,  
Юбузова Х.И.

- 37 Ақпараттық және телекоммуникациялық технологиялар: білім, ғылым, тәжірибе:  
Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университетінің II Халықаралық  
ғылыми-тәжірибелік конференция еңбектері. 3-4 желтоқсан, 2015 ж. Алматы, Қазақстан =  
Информационные и телекоммуникационные технологии: образование, наука, практика:  
II Международная научно-практическая конференция, Алматы, Казахстан. 3-4 декабря 2015 г. =  
Information and telecommunication technologies: education, science and practice: II International  
scientific - practical conference, December, 3-4. 2015. Almaty, Kazakhstan. – Алматы: Қ.И.  
Сәтбаев атындағы ҚазҰТЗУ, 2015 – қазақша, орысша, ағылшынша. II-том. -2015. – 615 б.

ISBN 978-601-228-813-1

*II Международная научно-практическая конференция «Информационные и телекоммуникационные технологии: образование, наука, практика» организована с целью анализа современного состояния и перспектив развития информационных и телекоммуникационных технологий, определения путей интеграции образования, науки и инноваций, улучшения качества подготовки IT-специалистов в высших учебных заведениях Республики Казахстан.*

*Данный сборник содержит научные статьи участников конференции. Работы посвящены решению актуальных проблем в областях: информационные и телекоммуникационные технологии в образовании, информационные и телекоммуникационные технологии в науке, информационные и телекоммуникационные технологии: радиоэлектроника, телекоммуникации и управление, перспективы развития информационных и телекоммуникационных технологий, современные проблемы фундаментальной науки (информатика, математика, механика, физика).*

УДК 004(063)  
ББК 32.97

Доклады, включенные в сборник, одобрены и рекомендованы программным и редакционным комитетами конференции, публикуются в авторской редакции.

ISBN 978-601-228-813-1 (2 Т)  
ISBN 978-601-228-811-7 (орт)

© КазНИТУ имени К.И. Сәтпаева, 2015

Т.А. Шмыгалева<sup>1</sup>, А.И. Купчишин<sup>1</sup>, Е. В. Шмыгалев<sup>2</sup>,  
Л.Ш. Черикбаева<sup>1</sup>, Н.Н. Ходарина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

<sup>2</sup>Казахский национальный университет им. Абая, Алматы, Казахстан

[Shmyg1953@mail.ru](mailto:Shmyg1953@mail.ru)

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАДИАЦИОННОГО ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В МАТЕРИАЛАХ, ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ

**Аннотация.** В работе рассматривается процесс взаимодействия ионов с веществом и образования радиационных дефектов. Описан процесс получения каскадно-вероятностных функций (КВФ), используемых далее при расчете спектров первично-выбитых атомов (ПВА) и концентрации радиационных дефектов. Представлен алгоритм расчета КВФ в зависимости от числа взаимодействий и глубины проникновения частиц. Разработаны модели расчета спектров первично-выбитых атомов и концентрации радиационных дефектов в материалах, облученных различными ионами. При этом учитывается атомный вес налетающей частицы и мишени, рассматриваются все варианты: атомный вес налетающей частицы меньше атомного номера мишени, атомный вес налетающей частицы соизмерим с атомным номером мишени, атомный вес налетающей частицы больше атомного номера мишени. Выявлены закономерности поведения концентрации радиационных дефектов.

**Ключевые слова:** Радиационное дефектообразование, каскадно-вероятностная функция, первично-выбитый атом, ион, налетающая частица, мишень.

Процесс взаимодействия ионов с веществом и их прохождение через вещество является сложной задачей как при создании физической, так и математической моделей [1]. Прежде всего, это объясняется катастрофическим увеличением сечения взаимодействия с электронами и атомами среды.

При этом глубина проникновения ионов в материалы с увеличением массы налетающих частиц резко уменьшается. При расчетах каскадно-вероятностных функций в этом случае надо применять специальные методы и приемы. Набор типов налетающих частиц и мишеней представляет собой огромное количество элементов. При этом можно рассматривать различные ситуации, когда массовое число налетающих ионов  $A_1$  меньше массового числа мишени  $A_2$ , т.е.  $A_1 < A_2$ , случай, когда  $A_1$  становится соизмеримым с  $A_2$ , и наконец, совсем уникальные процессы, при  $A_1 > A_2$ . Как показывает предварительный анализ, все эти случаи необходимо учитывать - в каждом из них проявляются свои закономерности.

Кроме этого, с помощью определенного сорта налетающих частиц в конкретном материале можно формировать наперед заданную структуру и химические соединения довольно устойчивые в широком интервале температур. Естественно, что при этом и физико-химические свойства таких веществ будут отличаться от исходных. Работа в этом направлении проводится в рамках каскадно-вероятностного метода.

В работе [1] были получены каскадно-вероятностные функции с учетом потерь энергии для электронов, протонов и  $\alpha$ -частиц, проведен их математический анализ, получены математические модели расчета спектров первично-выбитых атомов (ПВА) и концентрации радиационных дефектов и произведены их расчеты на ПЭВМ. Для ионов математические модели КВФ получить значительно сложнее. Это связано с тем, что сечение взаимодействия, рассчитанное по формуле Резерфорда, велико, колеблется примерно от  $n \cdot 10^7$  до  $n \cdot 10^{12}$  (барн), где  $n$  - целое число, а пробег проникновения очень мал и составляет примерно  $10^{-6} - 10^{-3}$  см. Колебания связаны с тем, что с ростом атомного номера элемента сечение взаимодействия увеличивается, а пробег проникновения уменьшается.

Для ионов в отличие от электронов, протонов и  $\alpha$ -частиц зависимость аппроксимационного коэффициента сечения от энергии представляется в следующем виде [2]:

$$\sigma(h) = \sigma_0 \left( \frac{1}{a(E_0 - kh)} - 1 \right), \quad (1)$$

где  $\sigma_0$ ,  $a$ ,  $E_0$ ,  $k$  - коэффициенты аппроксимации.

Каскадно-вероятностные функции с учетом потерь энергии для ионов можно получить из следующего рекуррентного соотношения [2]:

$$\psi_n(h', h, E_0) = \int_k^h \psi_{n-1}(h', h'', E_0) \psi_0(h'', h, E_0) \frac{1}{\lambda_0} \left( \frac{1}{a(E_0 - kh'')} - 1 \right) dh'' \quad (2)$$

С учетом записанного выше получим математическую модель КВ-функции с учетом потерь энергии для ионов в следующем виде [2]:

$$\begin{aligned} \psi_n(h', h, E_0) &= \frac{1}{\lambda_0^n} \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right)^{-1} \exp\left( \frac{h - h'}{\lambda_0} \right) * \\ &* \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^i \ln^{n-i} \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right) (h - h')^i}{i!(n-i)! a^{n-i} k^{n-i}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Преобразовывая выражение (3), имеем

$$\psi_n(h', h, E_0) = \frac{1}{n! \lambda_0^n} \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right)^{-1} \exp\left( \frac{h - h'}{\lambda_0} \right) * \left[ \frac{\ln \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right)}{ak} - (h - h') \right]^n. \quad (4)$$



Условные вероятности  $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$  являются переходными вероятностями для цепи Маркова. При  $k \rightarrow 0$ , либо  $\alpha \rightarrow \infty$ , КВФ с учетом потерь энергии переходит в простейшую, а следовательно, и в распределение Пуассона.

Расчет каскадно-вероятностной функции с учетом потерь энергии для ионов, представленной выражением (4), особенно затруднителен при больших значениях  $n$  (что мы и имеем на самом деле в большинстве случаев).

Для вычисления КВФ используется следующая удобная для расчета модернизированная формула:

$$\psi_n(h', h, E_0) = \exp \left[ -\ln(n!) - n * \ln(\lambda_0) - \frac{1}{\lambda_0 a k} \ln \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right) + \frac{h - h'}{\lambda_0} + n * \ln \left( \frac{\ln \left( \frac{E_0 - kh'}{E_0 - kh} \right)}{a k} - (h - h') \right) \right], \quad (5)$$

где  $n$  - число взаимодействий,  $h', h$  - глубины генерации и регистрации иона,  $\lambda_0, a, E_0, k$  - параметры аппроксимации.

Расчет концентрации радиационных дефектов при ионном облучении выполняется по формуле [3]:

$$C_k(E_0, h) = \int_{E_c}^{E_{2\max}} W(E_0, E_2, h) dE_2, \quad (6)$$

$$E_{2\max} = \frac{4m_1c^2 m_2c^2}{(m_1c^2 + m_2c^2)^2} E_1, \quad (7)$$

$m_1c^2$  - энергия покоя иона.

Спектр первично-выбитых атомов определяется следующим соотношением [3]:

$$W(E_0, E_2, h) = \sum_{n=n_0}^{n_1} \int_{h-k\lambda_2}^h \psi_n(h') \exp \left( -\frac{h-h'}{\lambda_2} \right) \frac{w(E_1, E_2, h') dh'}{\lambda_1(h') \lambda_2}, \quad (8)$$

где  $n_0, n_1$  - начальное и конечное значение числа взаимодействий из области определения каскадно-вероятностной функции.

Каскадно-вероятностная функция  $\psi_n(h')$ , входящая в выражение (8), имеет следующий вид:

$$\psi_n(h') = \frac{1}{n! \lambda_0^n} \left( \frac{E_0}{E_0 - kh'} \right)^{\frac{1}{\lambda_0 a k}} \exp \left( \frac{h'}{\lambda_0} \left( \frac{\ln \left( \frac{E_0}{E_0 - kh'} \right)}{a k} - h' \right) \right), \quad (9)$$

где  $\lambda_1(h') = \frac{1}{\sigma_0 n_0 \left( \frac{1}{a(E_0 - kh')} - 1 \right)} \approx 10^{24}$  (см),  $\lambda_2 = \frac{1}{\sigma_2 n_0} \approx 10^{24}$  (см). (10)

Сечение  $\sigma_2$  рассчитывается по формуле Резерфорда. Спектр ПВА в элементарном акте рассчитывается по следующей формуле [3]:

$$\varpi(E_1, E_2) = \frac{d\sigma(E_1, E_2)/dE_2}{\sigma(E_1)}, \quad (11)$$

$$\frac{d\sigma(E_1, E_2, h)}{dE_2} = 4\pi a_0^2 E_1^2 z_1^2 z_2^2 \frac{1}{E_1 E_2} 10^{24} \quad (12)$$

Подставляя выражение для  $w(E_1, E_2, h')$  в формулу (6), (8), получаем:

$$C_k(E_0, h) = \frac{E_d E_{2\max}}{E_{2\max} - E_d} \int_{E_c}^{E_{2\max}} \frac{dE_2}{E_2^2} \sum_{n=n_0}^n \int_{h-k\lambda_2}^h \psi_n(h') \exp\left(-\frac{h-h'}{\lambda_2}\right) \frac{dh'}{\lambda_1(h')\lambda_2}. \quad (13)$$

Делая преобразования, приходим к следующему выражению:

$$C_k(E_0, h) = \frac{E_d}{E_c} \frac{E_{2\max} - E_c}{E_{2\max} - E_d} \sum_{n=n_0}^n \int_{h-k\lambda_2}^h \psi_n(h') \exp\left(-\frac{h-h'}{\lambda_2}\right) \frac{dh'}{\lambda_1(h')\lambda_2}. \quad (14)$$

Вычислить концентрацию радиационных дефектов по формуле (14), если подставить вместо  $\psi_n(h')$  ее выражение в виде (9), нельзя, так как в каждом члене КВФ возникает переопределение. Выражение для  $\psi_n(h')$  используют в виде (5).

Для легких налетающих частиц и легких мишеней кривые возрастают, достигая максимума, затем убывают до нуля. С увеличением первоначальной энергии частицы кривые смещаются вправо. С увеличением пороговой энергии  $E_c$  значения концентрации уменьшаются, и кривые проходят значительно ниже, переход через максимум осуществляется плавней. При энергиях  $E_0=100$  кэВ кривая убывает. С увеличением атомного веса налетающей частицы значение функции в точке максимума увеличивается и, следовательно, кривые проходят выше, в то время как значения глубин уменьшаются. С увеличением атомного номера мишени для одной и той же налетающей частицы значение функции в точке максимума незначительно увеличивается, значения глубин уменьшаются.

Результаты расчетов приведены на рисунках 1,2 и в таблице 1.

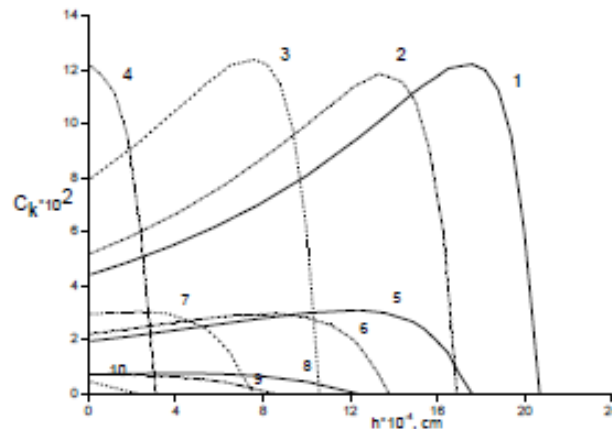


Рис. 1. Зависимость концентрации радиационных дефектов от глубины при ионном облучении для углерода в германии при  $E_c=50$  кэВ;  $E_0=1000, 800, 500, 200$  кэВ (1-4);  $E_c=100$  кэВ при  $E_0=1000, 800, 500$  кэВ (5-7);  $E_c=200$  кэВ при  $E_0=1000, 800, 500$  кэВ (8-10)

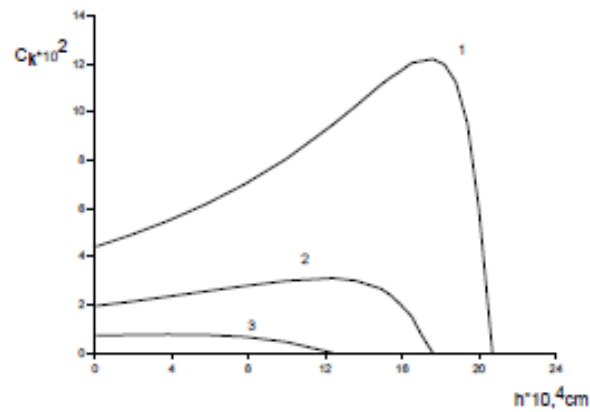


Рис. 2. Зависимость концентрации радиационных дефектов от глубины при ионном облучении для углерода в германии при  $E_0=1000$ ,  $E_0=100$  (2),  $E_0=200$  (3) кэВ

Таблица 1. Границы области определения концентрации радиационных дефектов для азота в золоте при  $E_0=50$  кэВ и  $E_0=500$  кэВ

$h \cdot 10^4$ , см	$C_k$ , см	$E_0$ , кэВ	$n_0$	$n_1$	$\tau$
0,1	1798,3	500	35	32	2"
3,7	1865,6	400	77	307	6"
5,6	1835,1	350	157	450	7"
7,4	1655,4	300	251	601	9"
8,2	1525,6	280	300	675	10"
9	1329,2	260	354	754	10"
9,7	1023,1	240	405	828	12"
10,5	587	220	470	920	13"
11,2	-70,6	200	534	1008	13"

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А.А.Купчишин, А.И.Купчишин, Т.А.Шмыгалева. Компьютерное моделирование радиационно-физических задач. Монография. Алматы: Изд-во «Казак университеті». 2007 г. 432 с.
2. А.А.Купчишин, А.И.Купчишин, Т.А.Шмыгалева и др. Моделирование на ЭВМ и экспериментальные исследования радиационных процессов в железе и твердых сплавах. Монография. Алматы.: КазНПУ им. Абая, ФТЦ, ТОО «КАМА», НИИЭТФ КазНУ им. аль-Фараби. 2010 г. – 263 с.
3. Э.Г. Боос, А.А.Купчишин, А.И.Купчишин, Е.В. Шмыгалева, Т.А.Шмыгалева. Каскадно-вероятностный метод, решение радиационно-физических задач, уравнений Больцмана. Связь с цепями Маркова. Монография. Алматы.: КазНПУ им. Абая, НИИ НХТ и М КазНУ им. аль-Фараби. 2015 г. – 388 с.

СЕНТЕНЬ 5  
SECTION 5

Izraeli gistsyatsionnyy (akspiratsionnyy, matematika, mekhanika, fizika) kuziri kazdagi masalalari **Современные проблемы фундаментальной науки (информатика, математика, механика, физика) Modern problems of fundamental science (computer science, mathematics, mechanics, physics)**

Абдуллаева Ж.С. Из истории математических терминов.....	512
Арыпбаева А.Ж., Шайтбаева А.К. Особенности обучения математическим заданиям студентов технических вузов для подготовки к использованию программы Mathcad.....	516
Ахмед Е.Ж., Байбосилов Ислам Неравенства для прямой теоремы теории приближений по системе типа Хадра.....	519
Ахметов Б.Б., Назиев А.Н., Мамытова Е.А., Серикова Ю.Н., Витчанин С.Е. Определение оптимальной пометки типа степенной свободы на квадрат распределения на малой тестовой выборке.....	523
Вельнов Т.Т., Ахмеджанова А.А.	526

Производственные функции в экономическом анализе и применение тактических и стратегических решений в количественной деятельности информационно-управляющей компании.....	529
Дадиева А.Н., Божанов Е.Т., Ахмеджанова Ш.А., Курмангалы А. Об одной математической модели технологии укладки порошкового материала при выключенной матрице.....	534
Жамойтова Л. Связь между мезомасштабными характеристиками математических моделей.....	537
Жукуташарова Г.Д. Матричные методы математических моделей.....	540
Кобарашев Ж.Е., Адыбаев М.Д. Определение областей второго порядка с монотонной кривой разлома.....	543
Касымов Е.А. О еще одном способе нахождения в квадратурной формуле замкнутого типа.....	547
Костун М.Г., Галляков С.А., Трофименко В.Н. Ускоренное включение $r$ -го корня в двоичном поле.....	552
Кобалдина Ю.О., Оралжанова К.О., Уалиев Ж.Р., Усейбаев Н.Б. Физико-математическая пространственная модель турбулентных систем.....	555
Касымбекова М.Т. Шварцмановские операторы для систем с неустойчивыми блоками и модальными характеристиками.....	560
Лукианова Л.Х. Аппроксимация функции двух переменных с использованием РБФ-сетей.....	563
Мамедбаев Ж.Б. Линейная турбулентность турбулентных систем математической модели.....	568
Мурашова Ж.А. Популяция системных решений нелинейных моделей.....	572
Муромова А.Н. Методические подходы к использованию электронных ресурсов на уроках математики.....	575
Сатыбалдиев О.С., Наурызбекова М.Д. Условия полноты системы нормальных векторов оператора Штурма-Лиувиллевого порядка.....	578
Сатыбалдиев О.С., Талгайбаев А.Ж. Модель как ориентир при мезомасштабном исследовании математических физико-технологических систем.....	581
Садыбаева А.М. Популяция решений логических моделей через систем дифференциальных формул теории.....	586
Серикбаев А.К. Особенности применения ограниченной теории короткого замыкания.....	589
Турусбекова Б.С. Математических моделей для жесткости гидротехнических систем.....	593
Хайруллин Е.М., Ахмеджанова А.А. Двухмерная граничная задача тепло - и массообмена.....	600
Хромович И.В., Ахмеджанова Г.Н., Тусеев Т.Т., Мурашова Ж.А., Ермолаев Ю.В., Ермолаев В.Н., Семенов А.С. Влияние радиации на физико-химические свойства порошковых систем.....	603
Шынгалиева Т.А., Кучишиев А.Н., Шынгалиев Е.В., Чернышова Л.Ш. Особенности выбора параметров аппроксимации при взаимодействии систем с веществом.....	603
Шынгалиева Т.А., Кучишиев А.Н., Шынгалиев Е.В., Чернышова Л.Ш., Ходарова Н.Н. Кинетическое моделирование процессов радиационного дефектообразования в материалах, облучаемых нейтронами.....	603



Компьютерная верстка

*Л.Т. Касжанова*

*Сверстано и отпечатано с авторских оригиналов. Ответственность за научное содержание, стилистические, грамматические и пунктуационные ошибки несут авторы.*

Подписано в печать 2015 г.

Формат 60x84 1/16. Бумага типографская № 1.  
Объем 38.5 уч.-изд. л. Тираж 100 экз. Заказ № .  
Цена договорная

Издание Казахского национального исследовательского технического университета  
имени К.И. Сатпаева  
Учебно-издательский центр  
г. Алматы, ул. Сатпаева, 22