

ISSN 1561-2430 (Print)
ISSN 2524-2415 (Online)

ФИЗИКА
PHYSICS

УДК 669.018.6
<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2018-54-4-480-487>

Поступила в редакцию 20.10.2017
Received 20.10.2017

В. В. Углов

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

**УПРУГИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ
И ИХ РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ**

Аннотация. Проведены расчеты модуля Юнга наноструктурированного материала в зависимости от размеров и объемной доли нанокристаллов на примере объемного nc-TiN/a-Si₃N₄ нанокомпозита. Показано, что определяющую роль здесь играют модули упругости a-Si₃N₄ матрицы и самих nc-TiN нановключений и их соотношения. Исследована кинетика дефектной подсистемы с учетом рекомбинационных процессов и действия стоков, которыми являются нанокристаллы, при радиационном воздействии на нанокомпозит.

Ключевые слова: наноструктурированные материалы, упругие модули, радиационное воздействие, напряжения, радиационные дефекты.

Для цитирования. Углов, В. В. Упругие свойства наноструктурированных материалов и их радиационная стойкость / В. В. Углов // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2018. – Т. 54, № 4. – С. 480–487. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2018-54-4-480-487>

V. V. Uglov

Belarusian State University, Minsk, Belarus

**ELASTIC PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED MATERIALS
AND THEIR RADIATION RESISTANCE**

Abstract. Young's modulus of the nc-TiN/a-Si₃N₄ nanocomposite has been calculated depending on a size and a volume fraction of the nanocrystalline phase. The elastic moduli of a-Si₃N₄ matrix and nc-TiN nanocrystals as well as their relation show that they play an important role in the total elastic modulus of the nanocomposite. The kinetics of the defect structure during nanocomposite irradiation was investigated taking into account the recombination processes and sinks on the nanocrystals.

Keywords: nanostructured materials, elastic moduli, irradiation, stress, radiation defects

For citation. Uglov V. V. Elastic properties of nanostructured materials and their radiation resistance. *Vestsi Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, vol. 54, no. 4, pp. 480–487 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2018-54-4-480-487>

Введение. Одним из путей повышения прочностных свойств, температурной и радиационной стойкости материалов является синтез нанокомпозитных систем, представляющих собой в простейшем случае структурированную наноразмерными частицами матрицу [1–5]. Физические свойства матрицы, отдельных наночастиц, их размеры и концентрация в совокупности определяют характеристики полученного таким образом материала. При этом следует учитывать, что между макроскопическим и наноразмерным состояниями должна существовать определенная переходная зона (размерная «граница» R_0), обусловленная изменением физических свойств материала при соответствующем изменении его размера. Изменение физико-механиче-

ских, магнитных, теплофизических и других свойств наночастиц может быть связано с деформацией материала, обусловленной поверхностным натяжением, уменьшением координационного числа в приповерхностном слое, изменением его группы симметрии, перестройкой архитектуры электронных оболочек, изменением энергии связи. Существенное влияние на физические свойства нанообъектов могут оказывать также различные дефекты структуры.

Результаты и их обсуждение. На примере объемного nc-TiN/a-Si₃N₄ нанокompозита, состоящего из аморфной a-Si₃N₄ матрицы и nc-TiN нанокристаллических включений, рассмотрим механизм формирования его упругих свойств и радиационной стойкости.

Поверхностное натяжение, характеризуемое коэффициентом $\sigma_{\text{нат}}$, приводит к деформации решетки $\epsilon(r)$, значение которой в рамках теории упругости имеет следующий вид [6]:

$$\epsilon(r) = -\frac{2\sigma_{\text{нат}} \langle R \rangle^2}{3K(\langle R \rangle^3 - r_0^3)} \left(1 - \frac{r_0^3}{r^3} \right), \tag{1}$$

где K – модуль всестороннего сжатия объемного TiN; $r_0 \sim a_0$; a_0 – постоянная решетки TiN в равновесном состоянии, $a_0 = 4,24 \text{ \AA}$; r – расстояние от поверхности нанокристалла до рассматриваемого слоя; $\langle R \rangle$ – средний радиус полиэдрического nc-TiN нанокристалла.

Зависимость модуля Юнга нанокристалла от деформации в слое r можно определить следующей формулой [7]:

$$E(r) = B_0 [1 - 3\gamma\epsilon(r)] U_b(r), \tag{2}$$

где γ – постоянная Грюнаизена; $U_b(r)$ – энергия связи; n – концентрация атомов решетки; $B_0 = 36n^{2/3} / (a_0 \langle Z(R) \rangle)$; $\langle Z(R) \rangle$ – среднее значение координационного числа в нанокристалле.

Аппроксимация полученных в ряде компьютерных экспериментов зависимостей $\langle Z(R) \rangle$ может быть выражена следующей формулой [6]:

$$\langle Z(R) \rangle = Z(1 - k_1 e^{-k_2 \langle R \rangle}), \tag{3}$$

где Z – координационное число объемного TiN; k_1 и k_2 – коэффициенты, которые определяются отдельно для каждого конкретного вещества.

С уменьшением размера nc-TiN нанокристалла наблюдается уменьшение значения энергии связи U_b [8]. Данная зависимость показана на рис. 1.

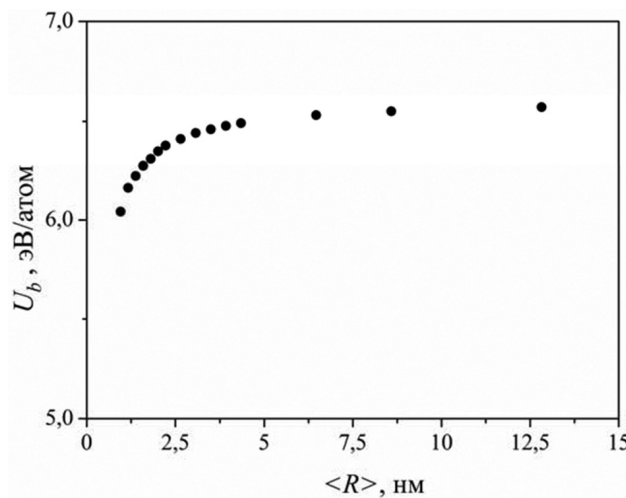


Рис. 1. Зависимость энергии связи свободных nc-TiN нанокристаллов от размера
 Fig. 1. Dependence of binding energy on the size of free nc-TiN nanocrystals

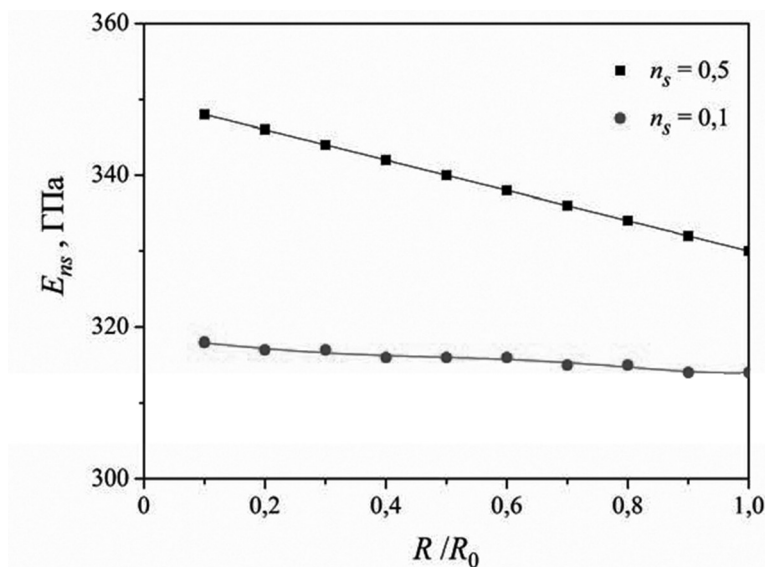


Рис. 2. Зависимость модуля Юнга nc-TiN/a-Si₃N₄ нанокompозита от размера nc-TiN нанокристаллов и их объемной доли

Fig. 2. Dependence of Young's modulus of nc-TiN/a-Si₃N₄ nanocomposite on the nanocrystals size and the volume fraction

Зависимость модуля упругости нанокристалла $E_2(R)$ от его размера R определялась по [6] как

$$E_2(R) = \frac{1}{V_0} \int_V E(r) dV.$$

Тогда, согласно [9], эффективный модуль упругости Юнга наноструктурированного материала для случая малой объемной доли включений запишется как

$$E_{ns} = \frac{E_1(3E_2 + G_1) + (E_2 - E_1)(3E_1 + G_1)}{3E_2 + G_1} n_s, \quad (4)$$

где E_1 – модуль Юнга матрицы [8], $E_2 > E_1$; G_1 – модуль сдвига матрицы [8], $G_2 > G_1$; $E_2 = E_2(R)$; n_s – объемная доля нанокристаллов.

На рис. 2 представлены соответствующие зависимости $E_{ns}(R, n_s)$. Согласно результатам расчетов, при увеличении объемной доли нанокристаллов и уменьшении их размеров наблюдается увеличение эффективного модуля Юнга nc-TiN/a-Si₃N₄ нанокompозита. Следует отметить, что упругие модули nc-TiN нанокристаллов больше, чем у аморфной a-Si₃N₄ матрицы. Поэтому при увеличении их объемной доли они будут оказывать существенное влияние на упругие свойства всего нанокompозита.

В ряде экспериментов показано, что наноструктурированные материалы обладают более высокой радиационной стойкостью [1–3]. Это связывается в первую очередь с геттерирующей способностью наноразмерных включений.

Пусть при облучении рассматриваемого нанокompозита, например нейтронами, скорость генерации радиационных дефектов в единичном объеме в единицу времени равна $g_{\text{ген}}$. Скорость генерации радиационных дефектов оценивалась по формуле $g_{\text{ген}} = K_{\text{см}} \cdot \rho_{\text{яд}}^2$, где $K_{\text{см}}$ – скорость создания смещений (сна/с), сна – смещение на атом, $\rho_{\text{яд}}$ – ядерная плотность ($\sim 10^{29} \text{ м}^{-3}$). В качестве средней скорости набора дозы было взято значение 10^{-10} сна/с. Температура облучения – $T = 800$ °С. Тогда скорость изменения концентрации для дефектов типа j в объеме можно описать следующим уравнением [10]:

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = g_{\text{ген}} + D_j \Delta C_j - \mu_{\text{рек}} C_i C_v - \frac{D_j}{k_B T} \nabla(C_j \mathbf{F}_j), \quad (5)$$

где C_j – концентрация радиационных дефектов типа j (i – междоузельные атомы, v – вакансии); D_j – коэффициент диффузии дефектов типа j ; $\mu_{\text{рек}} = (24\pi^2 \Omega N)^{1/3}$ – коэффициент рекомбинации, Ω – атомный объем, N – число атомов в зоне рекомбинации; $\mathbf{F}_j = \frac{1}{3} \Omega \nabla \sigma$ – силовое поле стока, действующее на дефект типа j ; k_B – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Некогерентную границу между плоскими слоями кристаллической и аморфной фаз можно представить в виде дисклинационно-дислокационного ансамбля [11, 12]. Здесь мы упростим модель [11, 12] границы, представив ее в виде системы дислокаций, и выполним оценку упругих напряжений σ для одной грани нанокристалла:

$$\sigma = \frac{(1 + \nu_2) G_2 b \rho_l}{2\pi(1 - \nu_2)} \ln \left(1 + \frac{L^2}{r^2} \right), \quad (6)$$

где b – модуль вектора Бюргера; ν_2 – коэффициент Пуассона нанокристалла; G_2 – модуль сдвига нанокристалла; ρ_l – линейная плотность дислокаций, L – линейный размер грани.

Кинетику радиационных дефектов рассмотрим в системе координат, связанной с аморфной $a\text{-Si}_3\text{N}_4$ матрицей, т. е. миграцию радиационных дефектов из аморфной фазы на границу раздела. Ограничимся также рассмотрением подсистемы квазивнедренных атомов (qi) в аморфной матрице как радиационных дефектов. Это обусловлено спецификой структурных дефектов, связанных с наличием ближнего порядка, в аморфном веществе. Основными точечными дефектами в аморфном $a\text{-Si}_3\text{N}_4$ являются оборванные связи, неправильные связи (Si-Si и N-N вместо Si-N) и сверхкоординированные атомы [13–15]. При облучении также происходит образование квазивакансий (свободных объемов) и квазивнедренных атомов (оторванных от сетки связей). При взаимодействии между собой вышеперечисленные дефекты могут образовывать сложные дефекты – комплексы. В связи с чем, при полном рассмотрении кинетики процесса с учетом рекомбинации, образования комплексов дефектов и их диссоциации, необходимо знать соответствующие механизмы диффузии и взаимодействия специфических структурных дефектов в аморфном веществе. Из перечисленных каналов реакций при описании кинетики ограничимся рассмотрением действия стока. Тогда уравнение (5) переписывается следующим образом:

$$\frac{\partial C_{qi}}{\partial t} = g_{\text{ген}} + D_{qi} \Delta C_{qi} - \frac{D_{qi}}{k_B T} \nabla(C_{qi} \mathbf{F}_j). \quad (7)$$

В качестве граничных условий для уравнения (7) использовалось краевое условие Робина (3-я краевая задача), соответствующее случаю равновесия диффузионного и дрейфового потоков на границе Γ , для подсистемы квазивнедренных атомов

$$\left(-\nabla C_{qi}(r, t) + \frac{\Omega C_{qi}(r, t)}{3k_B T} \nabla \sigma(r) \right)_{\Gamma} = 0. \quad (8)$$

В качестве начальных условий взята нулевая концентрация рассматриваемых точечных дефектов (9)

$$C_{qi}(r, 0) = 0. \quad (9)$$

Решение системы уравнений (7)–(9) проводится сначала для одной грани нанокристалла, далее результат можно просуммировать по всем граням нанокристалла и обобщить для n_s количества нанокристаллов, находящихся в единичном объеме. Из проведенных расчетов согласно

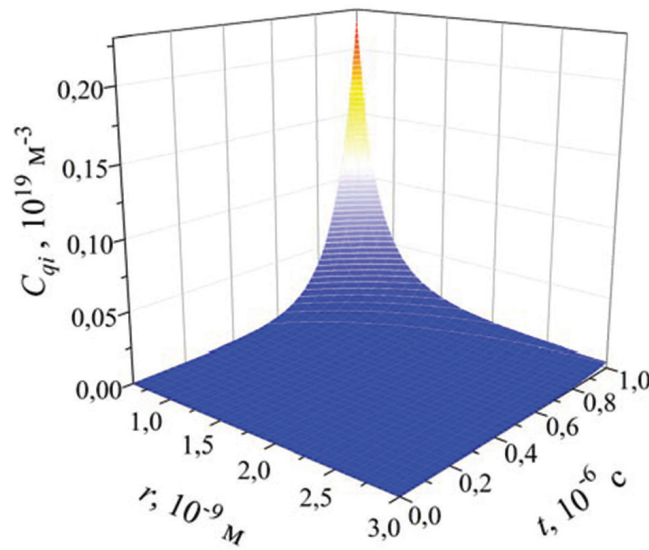


Рис. 3. Зависимость концентрации квазивнедренных атомов при скорости их генерации $10^{19} \text{ м}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ от времени t и расстояния r от границы раздела в аморфной $\text{a-Si}_3\text{N}_4$ фазе

Fig. 3. Dependence of the quasi-interstitials content on the time t and the distance r from the interface in the amorphous matrix $\text{a-Si}_3\text{N}_4$ (quasi-interstitials generation rate $10^{19} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$)

уравнению (7) следует, что количество радиационных дефектов начинает существенно уменьшаться при $n_s \geq (R_d + 2 < R >)^{-3}$. Величина R_d определяется из условия

$$\left| \frac{dU(r)}{dr} \right|_{r=R_d} = 2U_m / a_0,$$

где $U(r) = -\frac{1}{3} \Delta\Omega\sigma$; U_m – энергия миграции дефекта, $\Delta\Omega$ – дилатационный объем дефекта ($\Delta\Omega \sim \Omega$).

На рис. 3 представлена зависимость концентрации квазивнедренных атомов при скорости их генерации $10^{19} \text{ м}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ от времени t и расстояния r от границы раздела в аморфной $\text{a-Si}_3\text{N}_4$ фазе. Из графика данного рисунка следует, что имеет место осаждение радиационных дефектов на границу. Поглощая дефекты, сток, таким образом, уменьшает их концентрацию в объеме фазы. Это, естественно, является положительным результатом наноструктурирования материала.

Однако при температурном разогреве, сопровождающем радиационное воздействие на такие материалы, будет иметь место формирование сложного напряженно-деформированного состояния системы. Термоупругие деформации $\epsilon_r(r)$ в отдельном нанокристалле могут быть получены из следующего уравнения:

$$\frac{3(1-\nu_2)}{(1+\nu_2)} \nabla(\nabla \mathbf{u}) - \frac{3(1-2\nu_2)}{(1+\nu_2)} \nabla \times \nabla \mathbf{u} = \alpha \nabla T(r, t), \tag{10}$$

где \mathbf{u} – вектор смещения (деформации); α – коэффициент линейного температурного расширения; $T(r, t)$ – температура в нанокристалле; $\epsilon_r(r) = du/dr$.

Напряженное состояние материала вследствие разогрева нанокристалла определялось методом Эшелби путем введения соответствующей деформационной матрицы. Возникающее в результате давление $P(r, t)$ в матрице будет иметь следующий вид [16]:

$$P(r, t) = \Phi_1(t)\Phi_2(r, t), \tag{11}$$

где

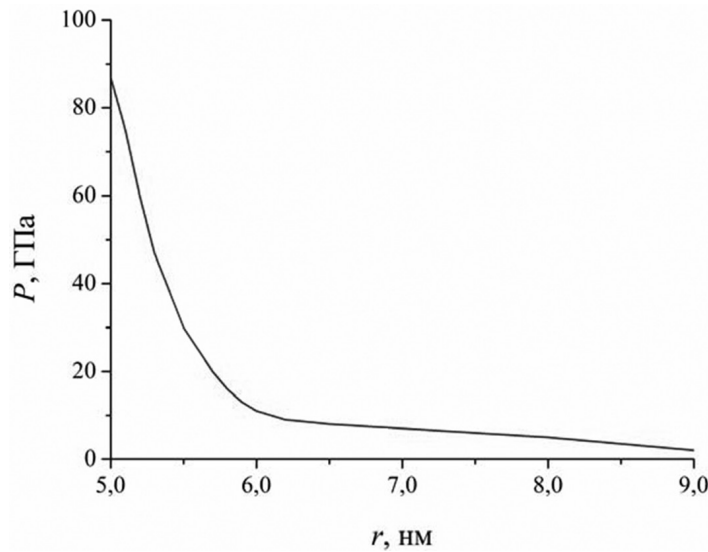


Рис. 4. Пространственный профиль упругих напряжений в окрестности нанокристалла с радиусом 5 нм

Fig. 4. Elastic stress distribution near a nanocrystal with a size of 5 nm

$$\Phi_1(t) = \frac{2}{9} \frac{\alpha E_1 (1 - 2\nu_2) (1 + \nu_2) K_2}{\xi(t) (1 + \nu_2^2) [3(1 - \nu_2) K_1 - (1 + \nu_2) (K_2 - K_1)]},$$

K_2 – модуль сжатия нанокристалла;

$$\Phi_2(r, t) = \frac{2}{r^2} + 2\xi(t)e^{-\xi(t)r^2} - \frac{2}{r^3} \int_0^r e^{-\xi(t)r'^2} dr' + \frac{2(1 - 2\nu_2)}{(1 + \nu_2) \langle R \rangle^3} \int_0^{\langle R \rangle} e^{-\xi(t)r^2} dr - \frac{2(1 - 2\nu_2)}{(1 + \nu_2) \langle R \rangle^2} e^{-\xi(t)r^2},$$

$$\xi(t) = \frac{1}{4Dt}.$$

На рис. 4 показан профиль давления в матрице в результате единичного акта взаимодействия ускоренного иона с материалом. Такой уровень давления очевидно будет приводить к локальному разрушению материала. Здесь возникает также проблема, связанная с размерными эффектами в нанокристаллах. В связи с уменьшением координационного числа и энергии связи при уменьшении размеров нанокристаллов будет также уменьшаться и температура его плавления

$$T_{\text{пл}}(\langle R \rangle) = T_{\text{пл}}^0 (1 - k_3 e^{-k_4 \langle R \rangle}), \tag{12}$$

где $T_{\text{пл}}^0$ – температура плавления объемного TiN; k_3 и k_4 – коэффициенты, которые определяются отдельно для каждого конкретного вещества.

Из вышесказанного следует, что возможно ухудшение жаропрочных свойств наноструктурированных материалов.

Заключение. Наноструктурирование материалов позволяет управлять как их упругими свойствами, так и радиационной стойкостью. Различие упругих характеристик матрицы и нановключений может приводить при радиационном нагреве к разрушению наноструктурированного материала. Избежать негативных явлений, сохранив при этом положительный эффект от наноструктурирования, возможно на пути формирования многослойных систем с наноразмерной толщиной слоев.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Stability of Ti–Zr–N coatings under Xe-ion irradiation / V. V. Uglov [et al.] // *Surf. Coat. Technol.* – 2010. – Vol. 204, № 12/13. – P. 2095–2098. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2009.11.023>
2. Ion-induced phase transformations in nanostructural TiZrAlN films / V. V. Uglov [et al.] // *Surf. Coat. Technol.* – 2014. – Vol. 255. – P. 112–117. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.03.003>
3. Features of microstructure of ZrN, Si₃N₄ and ZrN/SiN_x nanoscale films irradiated by Xe ions / V. V. Uglov [et al.] // *Vacuum*. – 2017. – Vol. 143. – P. 491–494. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2017.03.015>
4. Углов, В. В. Радиационные эффекты в твердых телах / В. В. Углов. – Минск: Белорус. гос. ун-т, 2011. – 207 с.
5. Углов, В. В. Радиационные процессы и явления в твердых телах / В. В. Углов. – Минск: Выш. шк., 2016. – 188 с.
6. On physical properties of nanoparticles: size effect and scale of nanoobjects / V. V. Uglov [et al.] // *Phys. Status Solidi C*. – 2016. – Vol. 13, № 10/12. – P. 903–907. <https://doi.org/10.1002/pssc.201600039>
7. Штремель, М. А. Прочность сплавов. Дефекты решетки / М. А. Штремель. – М.: Metallurgiya, 1982. – 280 с.
8. Modeling of microstructure and elastic properties of nc-TiN/a-Si₃N₄ nanocomposite / I. V. Safronov [et al.] // *Comput. Mater. Sci.* – 2016. – Vol. 123. – P. 256–262. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.06.006>
9. Кристенсен, Р. Введение в механику композитов / Р. Кристенсен. – М.: Мир, 1982. – 334 с.
10. Зеленский, В. Ф. Радиационные дефекты и набухание металлов / В. Ф. Зеленский, И. М. Неклюдов, Т. П. Черняева. – Киев: Наук. думка, 1988. – 236 с.
11. Nanoscale defect structures at crystal–glass interfaces / S. V. Bobylev [et al.] // *J. Phys. Condens. Matter*. – 2005. – Vol. 17, № 4. – P. 619–634. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/4/005>
12. Дефекты и отслаивание аморфных нанопленок от кристаллических подложек / С. В. Бобылев [и др.] // *Физика твердого тела*. – 2006. – Т. 48, № 2. – С. 248–254.
13. Robertson, J. Electronic structure of defects in amorphous silicon nitride/ J. Robertson // *MRS Proceedings*. – 1992. – Vol. 284. – P. 65–76. <https://doi.org/10.1557/proc-284-65>
14. Vedula, R. P. Effect of topological disorder on structural, mechanical, and electronic properties of amorphous silicon nitride: An atomistic study / R. P. Vedula, N. L. Anderson, A. Strachan // *Phys. Rev. B*. – 2012. – Vol. 85, № 20. – P. 205209-11. <https://doi.org/10.1103/physrevb.85.205209>
15. Density functional theory study of the structural and electronic properties of amorphous silicon nitrides: Si₃N_{4-x}:H/L. E. Hintzsche [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2012. – Vol. 86, № 23. – P. 235204-13. <https://doi.org/10.1103/physrevb.86.235204>
16. Радиационно-динамические процессы в наноструктурированных кристаллах при облучении ионами / В. В. Углов [и др.] // *Изв. вузов. Физика*. – 2017. – Т. 60, № 10. – С. 125–130.

References

1. Uglov V. V., Rusalski D. P., Zlotski S. V., Sevriuk A. V., Abadias G., Kislitsin S. B., Kadyrzhanov K. K., Goralchev I. D., Dub S. N. Stability of Ti–Zr–N coatings under Xe-ion irradiation. *Surface and Coatings Technology*, 2010, vol. 204, no. 12–13, pp. 2095–2098. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2009.11.023>
2. Uglov V. V., Zlotski S. V., Saladukhin I. A., Rovbut A. Y., Gaiduk P. I., Abadias G., Tolmachova G. N., Dub S. N. Ion-induced phase transformations in nanostructural TiZrAlN films. *Surface and Coatings Technology*, 2014, vol. 255, pp. 112–117. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.03.003>
3. Uglov V. V., Abadias G., Zlotski S. V., Saladukhin I. A., Safronov I. V., Shymanski V. I., Janse van Vuuren A., O'Connell J., Skuratov V., Neethling J. H. Features of microstructure of ZrN, Si₃N₄ and ZrN/SiN_x nanoscale films irradiated by Xe ions. *Vacuum*, 2017, vol. 143, pp. 491–494. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2017.03.015>
4. Uglov V. V. *Radiation effects in solids*. Minsk, Belarusian State University Publ., 2011. 207 p. (in Russian).
5. Uglov V. V. *Radiation processes and phenomena in solids*. Minsk, Vysheishaya shkola Publ., 2016. 188 p. (in Russian).
6. Uglov V. V., Doroshevich I. L., Kvasov N. T., Remnev G. E., Shymanski V. I. On physical properties of nanoparticles: size effect and scale of nanoobjects. *Physica Status Solidi (c)*, 2016, vol. 13, no. 10–12, pp. 903–907. <https://doi.org/10.1002/pssc.201600039>
7. Shtremel' M. A. *Alloy Strength. Lattice Defects*. Moscow, Metallurgiya Publ., 1982. 280 p. (in Russian).
8. Safronov I. V., Shymanski V. I., Uglov V. V., Kvasov N. T., Dorozhkin N. N. Modeling of microstructure and elastic properties of nc-TiN/a-Si₃N₄ nanocomposite. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 123, pp. 256–262. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.06.006>
9. Christensen R. M. *Mechanics of Composite Materials*. New York, Wiley, 1979. 334 p. <https://doi.org/10.1016/C2013-0-03667-5>
10. Zelenskii V. F., Neklyudov I. M., Chernyaeva T. P. *Radiation Defect and Metals Swelling*. Kiev, Navukova dumka Publ., 1988. 236 p. (in Russian).
11. Bobylev S. V., Ovidko I. A., Romanov A. E., Sheinerman A. G. Nanoscale defect structures at crystal–glass interfaces. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2005, vol. 17, no. 4, pp. 619–634. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/4/005>
12. Bobylev S. V., Ovidko I. A., Romanov A. E., Sheinerman A. G. Defects and separation of amorphous nanofilms from crystalline substrates. *Physics of the Solid State*, 2006, vol. 48, no. 2, pp. 264–271. <https://doi.org/10.1134/s1063783406020120>
13. Robertson J. Electronic structure of defects in amorphous silicon nitride. *MRS Proceedings*, 1992, vol. 284, pp. 65–76. <https://doi.org/10.1557/proc-284-65>

14. Vedula R. P., Anderson N. L., Strachan A. Effect of topological disorder on structural, mechanical, and electronic properties of amorphous silicon nitride: An atomistic study. *Physical Review B*, 2012, vol. 85, no. 20, pp. 205209-11. <https://doi.org/10.1103/physrevb.85.205209>

15. Hintzsche L. E., Fang C. M., Watts T., Marsman M., Jordan G., Lamers M. W. P. E., Weber A. W., Kresse G. Density functional theory study of the structural and electronic properties of amorphous silicon nitrides: $\text{Si}_3\text{N}_{4-x}\text{H}$. *Physical Review B*, 2012, vol. 86, no. 23, pp. 235204-13. <https://doi.org/10.1103/physrevb.86.235204>

16. Uglov V. V., Kvasov N. T., Shimanski V. I., Safronov I. V., Komarov N. D. Dynamic Processes in Nanostructured Crystals Under Ion Irradiation. *Russian Physics Journal*, 2017, vol. 60, no. 10, pp. 1787–1793. <https://doi.org/10.1007/s11182-018-1282-0>

Информация об авторе

Углов Владимир Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики твердого тела физического факультета, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: Uglov@bsu.by

Information about the author

Vladimir V. Uglov – D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Solid State Physics Department of the Physics Faculty, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Uglov@bsu.by