ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА 2006. Т. 37. ВЫП. 6

УДК 621.315: 536.372: 539.124: 538.971+539.172.17

РАСПЫЛЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ЭЛЕКТРОННОЙ И РЕШЕТОЧНОЙ ПОДСИСТЕМАХ

И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, А. Хофман, И. В. Пузынин, В. К. Семина, З. А. Шарипов Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Ю. Н. Чеблуков Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва

В предлагаемом обзоре представлены результаты измерения коэффициентов распыления чистых металлов, сплавов, аморфных сплавов, полупроводников и высокоориентированного пиролитического графита при их облучении тяжелыми ионами высоких энергий. Проведено обсуждение возможных механизмов сильного распыления материалов с высокой концентрацией дефектов. Введена трехмерная модель тепловой вспышки («горячего трека иона») с температурной зависимостью термодинамических параметров (удельной теплоемкости и теплопроводности) для однослойных моно- и поликристаллов, а также для многослойных структур (материалов). Представлены результаты численного решения введенной системы дифференциальных уравнений в частных производных для температур электронной и решеточной подсистем вокруг и вдоль траектории быстрого тяжелого иона в зависимости от времени t и координат: радиальной r и породольной z, с учетом возможных фазовых переходов, таких как плавление и испарение. Приведено бастуриение то возможных результатов.

The results of sputtering coefficient measurements of pure metals, alloys, amorphous alloys, semiconductors and Highly Oriented Pyrolytic Graphite under swift heavy ion irradiation are presented. The possible mechanisms of strong sputtering of materials with high level of defect concentration are discussed. The three dimensional thermal spike model («hot ion track») with the temperature dependence of thermo-dynamical parameters (specific capacity and thermal conductivity) in the case of one layer mono- and polycrystals and also for multi-layers systems (materials) is formulated. The results of numerical analysis of introduced system of spatial differential equations for the calculation of lattice and electron subsystem temperatures around and along the swift heavy ion trajectory versus the time t and coordinates: radial — r and longitudinal — z with taking into account of possible phase transitions such as melting and evaporation are presented. The discussions of obtained results are made.

введение

Исследование радиационных эффектов в конструкционных материалах тесно связано с созданием экспериментальных и энергетических ядерных реакторов, с решением проблемы снижения вредных факторов, вызванных воздействием ионизирующих частиц (нейтронов спектра деления, осколков деления ядер урана-235 и 238, электронов) и γ -квантов. Электронная промышленность сформулировала свои специфические условия и требования к полупроводниковым монокристаллам, имплантированным электрически активными донорными или акцепторными примесями при высоком уровне их концентраций с тем, чтобы создать в них проводящие или изолирующие слои (а при имплантации примесей типа кислорода — изолирующие слои SiO₂). Имплантация такого рода примесей важна при создании современных электронных устройств, в особенности больших интегральных микросхем с высокой емкостью памяти и ряда других.

Освоение космического пространства посредством космических ракет и искусственных спутников Земли потребовало исследований влияния космических излучений на бортовые электронные устройства (компьютеры и т. д.), на солнечные батареи, окулярные приборы и другое оборудование. В настоящее время обсуждается и даже получил поддержку международный проект по созданию стационарной станции на поверхности Луны, естественного спутника Земли. Ясно, что все проблемы, связанные с воздействием ионизирующих излучений на оборудование таких станций, будут стоять еще более остро изза отсутствия на Луне атмосферы. Идеи и научные исследования основных принципов реализации проектов по созданию термоядерных реакторов типа ТОКОМАК стимулировали изучение взаимодействия легкой бериллиевой и дейтериевой плазмы с первой стенкой реакторов данного типа.

Кроме того, в последние годы интенсивно развиваются современные технологии получения наноструктур на основе различных материалах [1,2]. Создание и исследование таких наноструктур имеют весьма важное значение для современной науки, промышленности и технологии.

Как известно [3], при изучении эмиссии атомов с поверхности некоторых материалов при их облучении осколками деления были получены высокие значения коэффициентов распыления. Это явление было названо неупругим распылением [3]. Развитие ускорительной техники, в том числе и создание накопительных колец тяжелых ионов высоких энергий, стимулирует исследование процессов распыления конструкционных материалов (как правило, это хромоникелевые нержавеющие стали), из которых создаются непосредственно накопительные кольца, в особенности это касается распыления внутренней поверхности колец под действием части накапливаемых ионов, рассеянных на молекулах остаточного газа [4]. Последующие исследования распыления таких сталей под действием облучения быстрыми тяжелыми ионами показали сильную зависимость распыления от уровня неупругих потерь энергии и от исходного состояния материала (размера зерна, концентрации примесей и других причин) [5–12].

Все перечисленные выше области, касающиеся непосредственно радиационной физики твердого тела, смежных областей науки, современных техноло-

аморфных сплавах [28].

гий и промышленности, потребовали детальных исследований радиационных эффектов в различных материалах при их облучении осколками деления радиоактивных химических элементов (как это осуществлялось ранее), ионами низкой энергии с высокими интенсивностями пучков, тяжелыми ионами высоких энергий, быстрыми нейтронами с энергией более 0,1 МэВ, электронами с энергией 1 МэВ и выше и γ -квантов.

Ясно, что развитие и совершенствование имеющихся моделей и создание новых последовательных теорий и феноменологических моделей для описания и предсказания эффектов взаимодействия ионизирующей радиации с материалами имеют первостепенное значение, в особенности это касается более точных и количественных предсказаний возникающих при радиационных воздействиях эффектов. Заметим, что несмотря на довольно длительный период исследований условия образования «треков» тяжелых заряженных частиц высоких энергий — ионов в твердых телах — не ясны в деталях до сих пор [13]. Так, около пятидесяти лет назад были созданы две модели, объясняющие причины возникновения «трека» в диэлектриках применительно к облучению их осколками деления ядер, а именно: модель термического пика [12, 14–16] и механизм кулоновского взрыва [17, 18]. На приведенном рис. 1 показаны стадии развития трека в твердом теле.

Ряд положений, на которых основаны данные модели, не обоснован в достаточной степени. Трехмерная модель термического пика будет обсуждена более детально ниже. Тем не менее данные модели используются в той или иной степени и в настоящее время, в особенности это касается модели термического пика.

Созданные циклические ускорители позволяют получать ионы от легких до самых тяжелых элементов — вплоть до ионов урана [1,2,19] — с высокой энергией $E_{\text{ион}}/M_{\text{ион}} \sim 10 \text{ МэВ/а. е. м., где } E_{\text{ион}}$ и $M_{\text{ион}}$ — полная энергия и масса иона соответственно.

Линейные ускорители тяжелых частиц, таких как тяжелые кластеры металлов Au₂, Au₄ и более легких кластеров (см., например, работы [20–23] и цитируемую там литературу), углеродных комплексов C₅, C₁₀, C₂₀, C₃₀, C₄₀ и фуллеренов C₆₀ [19,24–27], дают возможность получить очень высокий уровень неупругих потерь энергии ($E_z^{\rm inel} = \left(-\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\rm inel} \cong 80-85$ кэВ/нм). Тем самым для объяснения процессов взаимодействия высокоионизирующих частиц с материалами следует использовать некоторую комбинацию моделей термического пика и кулоновского взрыва. Это хорошо видно из приведенного рис. 1. Модель термического пика весьма широко применяется для описания радиационных явлений в диэлектриках и особенно в бесструктурных

В последние два десятилетия были созданы два современных метода исследования структуры поверхности твердых тел: сканирующая туннельная



Рис. 1. Структура трека в твердом теле, описанная в рамках модели термического пика с элементами механизма кулоновского взрыва [30]

(СТМ) и атомно-силовая микроскопии (АСМ) [1,2]. Эти методы эффективны для изучения нанометрических изменений структуры поверхности с высоким пространственным разрешением, вплоть до нескольких нанометров и менее. С помощью этих методов становится возможным исследование характерных особенностей поверхности после ее облучения быстрыми или низкоэнергетическими ионами, в особенности это касается изучения процессов распыления. Увеличение коэффициентов распыления до значения $S_{\rm sput} > 10$ ат./ион свидетельствует об участии в процессе распыления наряду с упругим каскадным распылением и неупругого механизма распыления [3], т.к. каскадная модель упругого распыления предсказывает коэффициенты распыления $S_{\rm sput} \leqslant 1$ ат./ион, при этом характерные свойства распыления существенно зависят от ряда факторов: 1) ориентации пучка бомбардирующих ионов по отношению к поверхности материала, 2) полной энергии ионов, 3) энергии

связи атомов с поверхностью, 4) температуры облучения и некоторых других параметров [29–31]. Процессы распыления вызывают образование различных особенностей на облученных поверхностях: 1) в ряде случаев происходит полировка поверхности образца, 2) создание некоторого неоднородного рельефа, 3) образование выступов, зачастую правильной формы, 4) изменение химического состава вблизи поверхности и ряд других нарушений как с положительными эффектами, так и с отрицательными. Последнее имеет место и в случае бомбардировки ионами низких энергий, и в случае ионов высоких энергий.

Таким образом, исследование особенностей, возникающих на облученных поверхностях, с помощью микроструктурного анализа с высоким разрешением позволяет сделать заключение о механизме взаимодействия между быстрыми тяжелыми частицами и твердыми телами. Измерения коэффициентов распыления на материалах различными методами — очень хороший путь для реализации этой идеи.

Распыление диэлектриков [7, 17–19, 23, 32–37] и поверхностная эрозия аморфных материалов [20, 27, 33, 38, 51] при их облучении быстрыми заряженными тяжелыми частицами, как правило, вызваны испарением атомов с поверхности мишени за счет перегрева поверхностного слоя в месте прохождения высокоионизирующей частицы, испарением кластеров поверхностных атомов или целых небольших зерен, которое иногда происходит. Ясно, что испарение атомов мишени из слоя вблизи поверхности будет наиболее эффективным, если температура в этом слое будет выше температуры сублимациииспарения. В этом слое также будет возникать и высокое давление [37–39], что может усилить процессы распыления. Этот эффект будет обсужден в разд. 2.

Способность современных ускорителей достигать энергий ионов вплоть до $E_{\rm ион}/M_{\rm ион} \ge 10~{\rm M}$ эВ/а.е.м. означает, что можно использовать параллельные пучки ионов высокой интенсивности, которые позволяют достигать предельно высоких плотностей электронных потерь энергии в материалах, при этом линейные электронные потери энергии иона могут достигать $E_z^{\rm inel} \approx 70~{\rm k}$ эВ/нм, как, например, для ионов ²³⁸U с энергией $E_{\rm ион} \approx 10^3~{\rm M}$ эВ в мишени из никеля. Прохождение тяжелого иона через диэлектрические и полупроводниковые материалы в области достаточно высоких неупругих потерь энергии приводит при $E_z^{\rm inel} > E_{\rm shres}^{\rm inel}$ к образованию латентных треков [24,26,32–36,40,41] и к неупругому распылению поверхности с высокими коэффициентами распыления ($S_{\rm sput} > 10~{\rm ar}$./ион). Здесь $E_z^{\rm inel}$ и $E_{\rm shres}^{\rm inel}$ неупругие потери энергии и пороговое значение неупругих потерь для образования трека.

В течение двух-трех десятилетий последовательные научные усилия были направлены на исследование явления неупругого распыления (см. [3, 36] и ссылки в них). Эти исследования были начаты с использования осколков деления для изучения распыления различных материалов. Выполненные работы позволили выявить ряд особенностей поверхностных явлений в металлах, сплавах, диэлектриках, полупроводниках и аморфных материалах. Например, коэффициенты распыления в диэлектриках и мелкодисперсных мишенях были на 2–3 порядка величины больше, чем в крупнозернистых металлических мишенях [3,5].

Создание высокоэнергетических ускорителей тяжелых ионов с высокими интенсивностями ионных пучков (более 10^{12} ион/с) стимулирует расширение области исследований влияния облучения быстрыми тяжелыми ионами на свойства твердых тел [1,2,36,37]. Большая часть таких исследований посвящена изучению основных принципов взаимодействий и наблюдению последствий прохождения через твердые тела тяжелых заряженных частиц, таких как кластеры ионов Au_n, Ar⁺_n, (N₂)⁺_n и др. [11,19–23] и недавно полученные более сложные бомбардирующие кластеры атомов — многоатомные углеродные комплексы [22–27].

Выполненные исследования по распылению материалов позволили сформулировать несколько теоретических феноменологических подходов для описания наблюдаемых явлений: модель термического пика — «горячего трека», модель кулоновского взрыва [3, 36, 42, 43], уже упомянутые выше, модель двойного заряженного поверхностного слоя [3], модель изолированного зерна [3, 5], модель «горячего пятна» [3] и несколько других комбинаций этих подходов. К сожалению, механизмы изменения свойств материалов при их облучении тяжелыми ионами высоких энергий до сих пор не вполне ясны. Кроме того, в этой области исследований необходимо рассматривать, как минимум, два аспекта. Первый касается влияния условий ионного облучения: температуры облучения $T_{\text{обл}}$, набранного флюенса ионов $(F_{\text{ион}}t)$, влияния скорости ионов $V_{\text{ион}} = (2E_{\text{ион}}/M_{\text{ион}})^{1/2}$, уровня неупругих $E_z^{\text{inel}}(z)$ и упругих $E_z^{\rm el}$ потерь энергии иона. Второй касается влияния параметров мишени: энерги́и связи атомов на поверхности $E_{\text{связи}}^{\text{surf}}$ и в объеме мишени $E_{\text{связи}}^{\text{bulk}}$, энергии активации миграции вакансий E_V^m и междоузельных атомов E_I^m , пороговой энергии смещения атомов E_d , концентрации примесей $C_{\text{прим}}(z)$, концентрации дефектов $C_{\text{деф}}(z)$ (имеются в виду точечные дефекты, кластеры дефектов, протяженные дефекты: дислокации, петли междоузельного и вакансионного типов, вакансионные поры, вкрапления других фаз), концентрации свободных электронов n_c^{free} (в проводниках, полупроводниках и диэлектриках), вида кристаллографической симметрии решетки, доменной структуры (монокристаллическая, поликристаллическая или аморфная), размера и формы зерна и их энергии связи с подложкой, а также объемной, поверхностной и фазовой структур.

Применение быстрых тяжелых ионов с высоким уровнем неупругих потерь энергии дало уникальную возможность наблюдать множество особенностей процессов создания дефектов и их влияния на распыление твердых тел, которые нельзя объяснить с точки зрения традиционного подхода с использованием каскадного механизма упругих столкновений [29–31].

Поведение аморфных сплавов при облучении их быстрыми тяжелыми ионами радикально отличается от поведения кристаллических металлических сплавов вследствие отсутствия в них дальнего порядка. Они обладают лишь ближним порядком в расположении атомов, поэтому длина свободного пробега «горячих» электронов относительно небольшая и, как результат, в области вокруг траектории тяжелого иона могут быть достигнуты высокие температуры, т. е. может образовываться «трек» иона в виде деструктированной или рекристаллизованной областей [28,39,44]. Поэтому аморфные сплавы интересный объект для исследования радиационных явлений в твердых телах для проверки теоретических выводов и моделей.

Цель данного обзора — описать новые экспериментальные результаты, полученные при исследовании взаимодействия быстрых тяжелых ионов с поверхностными и объемными структурами различных твердых тел (чистых металлов, металлических и аморфных сплавов, высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ), монокристаллов полупроводников и диэлектриков). Обсудить радиационные эффекты, вызванные быстрыми тяжелыми ионами, такие как распыление и создание первичных радиационных повреждений, последующие процессы эволюции дефектов. Ввести трехмерную модель термического пика для вычисления электронной $T_e(r, z, t)$ и решеточной $T_i(r, z, t)$ температур в объеме с осевой симметрией вокруг траектории тяжелого иона, т.е. в «горячем треке» тяжелого иона. Также будут учитываться возможные фазовые переходы твердая фаза–плавление ($T_i \ge T_{melt}$) и жидкая фаза–испарение ($T_i \ge T_{evap}$).

Обзор состоит из трех разделов: в первом представлены экспериментальные результаты по распылению различных материалов при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий, второй и третий посвящены описанию модели термического пика в трехмерной решетке для вычисления температур электронной и решеточной подсистем с возможными фазовыми переходами (плавление твердого тела и испарение расплава).

1. ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ИХ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

1.1. Исследование изменений свойств поверхности чистых металлов при облучении их тяжелыми ионами с высокими ионизационными потерями энергии. Известно, что коэффициенты распыления материалов при облучении их ионами низких энергий (энергия иона $E_{\text{ион}} \sim 10^2 - 10^3$ кэВ и меньше) на основе механизма каскадного упругого распыления имеют значе-

ния $S_{\rm sput} \sim 1$ ат./ион. В случае облучения твердых тел осколками деления $(E_{\rm ock}/M_{\rm ock} \approx 1 \, {\rm M}$ эВ/а.е.м.) и быстрыми тяжелыми ионами $(E_{\rm ион}/M_{\rm ион} > 1 \, {\rm M}$ эВ/а.е.м.) коэффициенты распыления значительно увеличиваются. Для хорошо отожженных металлов с малой концентрацией дефектов и большими размерами зерен-доменов, как было показано экспериментально [45,46], коэффициенты распыления изменяются в пределах $S_{\rm sput}^{\rm exp} \sim 1-10$ ат./ион, а влияние температуры сказывается незначительно. При наличии в металлах дефектов различной природы влияние неупругих потерь энергии быстрых тяжелых ионов

$$E_z^{\text{inel}}(z) = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\text{inel}}(z)$$

значительно усиливается. Экспериментально показано, что в этом случае коэффициенты распыления $S_{\rm sput}^{\rm exp}$ увеличиваются значительно, в частности, они могут возрастать в один-два порядка величины. Так, даже при распылении крупнозернистых металлов при их облучении быстрыми тяжелыми ионами коэффициент распыления увеличивается в ряде случаев почти на два-три порядка по мере накопления дефектов радиационного происхождения. Это происходит при высоких флюенсах облучения ($F_{\text{нон}}t > (1 \div 2) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$). Экспериментально наблюдаемый высокий коэффициент распыления для никеля при облучении его ионами криптона можно объяснить испарением атомов с поверхности, т.к. температура в треке повышается вплоть до температуры кипения T_{boil}, т.е. модель термического пика можно использовать при высокой концентрации повреждений и/или имевшихся до облучения исходных дефектах. Таким образом, экспериментально доказано, что неупругие потери энергии $E_z^{\text{inel}} = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\text{inel}}$ быстрых тяжелых ионов оказывают большое влияние на распыление металлов с высокой концентрацией дефектов в кристаллической структуре. Представленные результаты объясняются образованием треков и, следовательно, процессом значительного испарения атомов мишени с поверхности, приводящим к высоким коэффициентам распыления в случае использования твердых тел с высокой концентрацией дефектов всех типов (точечных дефектов, кластеров дефектов, протяженных дефектов и особенно границ зерен). Изображения, полученные с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ), для Ni представлены на рис. 2. Эти фотографии показывают поверхность никеля после облучения их ионами $^{86}{\rm Kr}$ до флюенсов $F_{\rm Kr}t=2,0\cdot10^{15}~{\rm cm}^{-2}$ [47–49]. Видно, что поверхность металлического никеля полируется облучением, а имевшиеся неоднородности на исходных образцах претерпевают распыление. Кроме того, на рис. 2, б можно видеть значительное распыление материала вблизи границ зерен. Коэффициент распыления на границе зерна можно оценить как $S_{
m sput}^{
m exp} \approx (2,0 \pm 0,5) \cdot 10^3$ ат./ион.



Рис. 2. Изображение в РЭМ структуры поверхности поликристаллического Ni до (*a*) и после (б) облучения ее ионами ⁸⁶Kr с энергией 305 МэВ до флюенса $Ft = 2 \cdot 10^{15}$ см⁻²

Для поликристаллического Ni было предварительно проведено его облучение ионами ⁸⁶Kr до высокого флюенса методом «ступеньки», чтобы получить более корректную оценку коэффициента распыления, как показано на рис. 3. Для этого образцы никеля вначале облучались ионами ⁸⁶Kr с энергией 305 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 2,0\cdot 10^{15}$ см⁻². Затем половина облученной поверхности образца была закрыта фольгой с толщиной, превышающей длину пробега ионов ⁸⁶Kr, и образец облучали ионами ⁸⁶Kr с энергией 245 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 1,0\cdot 10^{15}$ см⁻². Толщина распыленного слоя Ni была равна разнице толщин однократно и двукратно облученных частей образца, или высоте наблюдаемой «ступеньки» (см. рис. 3). Высота этой ступеньки оказалась равной $H_{\rm step} \approx (0.35 \pm 0.06)$ мкм, что соответствует уровню распыления $S_{\rm sput,Ni}^{\rm exp} \approx (3,0\pm 0.5)\cdot 10^3$ ат./ион.



Рис. 3. Структура поверхности Ni, предварительно облученной ионами ⁸⁶Kr с энергией 305 МэВ до флюенса $Ft = 2 \cdot 10^{15}$ см⁻² (верхняя часть изображения) и затем облученной ионами ⁸⁶Kr с энергией 245 МэВ до общего флюенса $Ft = (2 \cdot 10^{15} + 1 \cdot 10^{15})$ см⁻² (нижняя часть изображения)

Двойное облучение позволило нам, во-первых, создать дефекты с высокой концентрацией; во-вторых, уменьшить, насколько возможно, влияние объемного распухания образца на оценку экспериментального уровня распыления за счет температуры облучения, существенно меньшей, чем $0.3T_{\rm melt}$; в-третьих, достаточно точно определить уровень распыления. Более высокий уровень распыления границы зерна можно объяснить исходной структурой кристалла, т. к. область границы зерна — область с высокой концентрацией исходных дефектов.

Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ) позволила более точно определить коэффициент распыления при облучении высокоэнергетическими ионами. Структуры поверхности образцов Ni в наномасштабе представлены на рис. 4, *a*, *б*. На рис. 4, *a* можно видеть исходную структуру поверхности Ni после электрополировки и структуру после облучения ионами ⁸⁶Kr с энергией 305 МэВ до флюенса $Ft = 2,0 \cdot 10^{15}$ см⁻² (рис. 4, *б*). Изображения были получены методом СТМ, и затем был вычислен средний перепад высот между



Рис. 4. Структура поверхности никеля в исходном состоянии (*a*) (площадь сканирования — 2,6 × 2,6 мкм, высота — 54 нм) и после облучения ионами ⁸⁶Kr с энергией 305 МэВ до флюенса $Ft = 2,0 \cdot 10^{15}$ см⁻² (*б*) (площадь сканирования — 3,15 × 3,15 мкм, высота — ≈ 47 нм). Изображения получены методом СТМ

темными и светлыми частями изображений путем усреднения измеренных значений перепадов высот. Максимальные и минимальные высоты рельефа на выбранных изображениях поверхности необлученных и облученных образцов значительно различались и имели значения $H_{\rm unir}^{\rm max} \approx 54$ нм и $H_{\rm ir}^{\rm min} \approx 12$ нм соответственно. Вычисление средних значений высот неоднородностей выполнялось при обработке, как минимум, десяти СТМ-изображений для необлученного и облученного образцов (для хорошей статистики). Эти средние значения оказались равными $H_{\rm unir}^{\rm mean} = 46,97$ нм и $H_{\rm ir}^{\rm mean} = 21,15$ нм. Приблизительное число атомов $N_{\rm sput,Ni}^{\rm mean}$, испарившихся (распыленных) с поверхности образцов никеля при облучении ионами ⁸⁶Kr, оценивалось с помощью

простого выражения:

$$N_{
m sput,Ni}^{
m mean} pprox \left(H_{
m unir}^{
m mean} - H_{
m ir}^{
m mean}
ight) N_{
m Ni} = 2.4 \cdot 10^{17} \text{ at./cm}^2,$$

где $N_{\rm Ni} = 9,125 \cdot 10^{22}$ ат./см³ — атомная плотность Ni. Таким образом, коэффициент распыления (или, что более вероятно, коэффициент испарения) имеет приближенное значение:

$$S_{
m sput}^{
m exp}\cong N_{
m sput,Ni}^{
m mean}/\left(F_{
m Kr}t
ight)=1,2\cdot10^2$$
ат./ион

Этот большой уровень распыления поверхности двукратно облученного Ni можно объяснить как результат высокой концентрации радиационных дефектов. Температура решетки T_i на оси трека, выраженная в эВ, может быть оценена с помощью формулы [44]:

$$T_{\rm lat} = \sqrt{2\pi \frac{\sqrt{6}}{21} \frac{m_e S^2 \sigma}{1.6 \cdot 10^{-12} a} E_z^{\rm inel}},\tag{1}$$

где m_e — масса электрона (в г); S — скорость звука (в см/с); σ — объемное сечение упругого рассеяния электронов на ионе (в см²); a — минимальное расстояние между атомами в кристалле Ni (в см); $E_{z,\mathrm{Kr}}^{\mathrm{inel}} \approx 2.7 \cdot 10^{11}$ эВ/см — электронная тормозная способность ионов Kr в Ni. Для оценки T_{lat} скорость звука S брали как $S \approx 5 \cdot 10^5$ см/с. В выражении (1) $\sigma \approx \pi (r_d)^2$, где

$$r_d \approx \sqrt{\frac{T_e \cdot 1.6 \cdot 10^{-12}}{4\pi N_{\rm Ni} \overline{z} e^2}}.$$

Здесь r_d — дебаевский радиус; T_e — электронная температура в эВ; $\overline{z}(T)$ — средний заряд ионов Ni в решетке. Так как $\overline{z}(T) \approx \alpha T_e$, где $\alpha \approx 0.05$ эВ⁻¹ [44], значение $r_d \approx 10^{-8}$ см. Для никеля вычисление по формуле (1) дает температуру на оси трека вблизи поверхности $T_i \approx 0.61$ эВ, т. е. 6300 К. Для сравнения температура кипения Ni $T_{\text{boil}} = 3100$ К. Можно сделать вывод, что $T_i(r = 0, z \approx 0) > T_{\text{boil}}$, т. е. могут происходить процессы испарения с облучаемой поверхности Ni.

Для сравнения было выполнено исследование коэффициентов распыления монокристаллического W и нержавеющих сталей X18H10 и X18H10T. Кроме того, был определен химический состав нержавеющей стали после ее облучения [49]. Структуры поверхности вольфрамового монокристалла до (*a*) и после (*б*) облучения ее ионами ⁸⁶Kr с энергией 305 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 2,0 \cdot 10^{15}$ см⁻² представлены на рис. 5. Изображения были получены в растровом электронном микроскопе (метод РЭМ). Видно, что при облучении происходят интенсивные процессы распыления, т. к. все неоднородные поверхностные особенности исчезают (рис. 5, *a*) — распыляются.



Рис. 5. Структуры поверхности монокристалла вольфрама до (*a*) и после (б) облучения ее ионами ⁸⁶Кг с энергией 305 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 2.0 \cdot 10^{15}$ см⁻²

Структуры поверхности хромоникелевой стали (X18H10), не облученной (*a*) и облученной (*б*) ионами ⁸⁶Kr с энергией 245 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 2,0 \cdot 10^{15}$ см⁻², представлены на рис. 6. Видно, что облученная, химически многокомпонентная поверхность обладает интересной структурой,



Рис. 6. Изображения, полученные с помощью РЭМ, поверхности нержавеющей стали в исходном состоянии (*a*) и после облучения ионами ⁸⁶Kr с энергией 245 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 2.0 \cdot 10^{15}$ см⁻² (б)

состоящей из полусферических бугорков. Эти особенности в виде полусферических бугорков-выступов образуются на поверхности облученных нержавеющих сталей Х18Н10 и Х18Н10Т. Вид поверхности нержавеющей стали несколько напоминает особенности на поверхности хромоникелевой стали, возникшие при ее облучении ионами ¹²⁹Хе (124 МэВ) при высоких температурах [9]. Электронно-зондовый анализ образцов, облученных ионами ⁸⁶Кг с энергией 245 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 2,0\cdot 10^{15}$ см⁻², был выполнен с помощью рентгеновской приставки LINK к растровому электронному микроскопу JSM-840. Было обнаружено, что содержание Ni вблизи поверхности после облучения уменьшается вдвое, а химический состав поверхности образца изменяется от Fe_{69,7}Cr_{17,6}Ni_{12,7} (исходный состав) до Fe_{73,7}Cr_{19,7}Ni_{6,6} (облученный образец).

На основе данных, полученных для Ni, W и хромоникелевой стали X18H10, был сделан вывод, что модель термического пика можно использовать для объяснения наблюдаемых высоких значений коэффициентов распыления образцов высокотемпературными эффектами при локальных перегревах, которые достигаются в треке тяжелого иона. Температура при этом может быть выше, чем температура испарения, что и приводит к усилению процессов распыления, в особенности это касается границ зерен.

1.2. Изучение особенностей распыления аморфных сплавов и хромоникелевых сталей. Исследование структурных изменений и других физикохимических свойств аморфных металлических сплавов, облученных тяжелыми ионами, действительно очень важно и информативно по целому ряду причин. Такие аморфные структуры не имеют дальнего порядка в расположении атомов и в них наблюдается только ближний порядок. При этом сечение рассеяния свободных электронов в аморфных сплавах можно выбирать в виде «газового» сечения [44], а именно:

$$\sigma_{\text{amorph}} = \sigma_{\text{scat}} \cong 1,76 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2.$$

Как показано в работе [44], при таком сечении рассеяния температуры в области вокруг траектории тяжелого иона могут значительно превосходить температуры фазовых переходов и фазовые переходы типа твердая фазаплавление ($T_{\rm lat} \ge T_{\rm melt}$) и жидкая фаза-испарение ($T_{\rm targ} \ge T_{\rm evap}$) могут иметь место.

Как известно, в кристаллах со структурами, близкими к идеальным, волновые функции свободных электронов описываются трансляционно-инвариантными функциями Блоха [44]. Такие электроны слабо рассеиваются на атомах среды и «чувствуют» только тепловые колебания атомов решетки, поэтому сечение рассеяние электронов в кристалле следует записать в виде $\sigma_{\rm amorph}$, умноженного на малый параметр $\frac{T_i}{M_{\rm arom}S^2}$, тогда окончательно сечение рассеяния свободного электрона в кристалле будет иметь вид [44]:

$$\sigma_{\rm cryst} = \sigma_{\rm amorph} \frac{T_i}{M_{\rm atom} S^2}$$

Здесь $M_{\text{атом}}$ — масса атома кристалла, а S — скорость звука. При таком сечении рассеяния в «хороших» кристаллах практически невозможно достижение высоких температур в треке тяжелого иона.

Исследования аморфных сплавов при их облучении быстрыми тяжелыми ионами вызывают большой интерес специалистов в радиационной физике конденсированного вещества (см., например, [2,7,8,17,24,28,32,36,44]). В результате таких исследований было обнаружено, что при облучении тяжелыми ионами размеры образцов в направлениях, перпендикулярных ионному пучку, увеличиваются, а вдоль пучка — уменьшаются.

Образцы аморфного сплава Ni₅₈Nb₄₂ были облучены ионами ⁸⁶Kr с энергией 245 МэВ до флюенсов $F_{\rm Kr}t = 1,0 \cdot 10^{14}$ и $F_{\rm Kr}t = 1,0 \cdot 10^{15}$ см⁻² [50] для исследования поверхностных явлений и структурных изменений. Температура образца при облучении не превышала 100 °С. Средняя интенсивность ионного пучка, т. е. поток ионов, составляла $F_{\rm Kr} < 5 \cdot 10^{10}$ см⁻² с⁻¹. Мощность, выделяемая ионами криптона в образцах, была меньше 2 Вт/см².



Рис. 7. Структура поверхности аморфного сплава Ni₅₈Nb₄₂: *a*) необлученная поверхность; *б*) облученная ионами ⁸⁶Kr с энергией 245 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 1,0 \cdot 10^{15}$ см⁻²; *в*) структура образца, частично закрытого фольгой (слева — необлученная область, справа — облученная область)

Исходная поверхность образца $Ni_{58}Nb_{42}$ представлена на рис. 7, *a*. На поверхности видны структурные дефекты — капли замороженного расплава. Структура поверхности облученного аморфного сплава $Ni_{58}Nb_{42}$ представлена на

рис. 7, *б*, *в*. Видно, что поверхность образцов изменилась значительно. В частности, видны сохранившиеся капли замороженного расплава, окруженные относительно гладкими участками поверхности вокруг этих капель, полученных в результате интенсивных процессов распыления, наряду с распуханием.

Эти гладкие участки вокруг капель смещаются вдоль траектории бомбардирующего иона, но в противоположном направлении, так что капли расплава оказываются как бы погруженными в окружающую гладкую поверхность. То есть такого смещения поверхностей капель замороженного расплава, как на участках, их окружающих, не наблюдается. Измеренное значение распухания образцов, облученных ионами ⁸⁶Kr с энергией $E_{\rm нон} = 245$ МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 1,0 \cdot 10^{15}$ см⁻², составило $\frac{\triangle V}{V} \approx 15$ %. Измерения показали, что химический состав вблизи поверхности можно записать в виде химической формулы как Ni_{58-x}Nb_{42+x}, где x = 1,60 при флюенсе ионов $F_{\rm Kr}t = 1,0 \cdot 10^{15}$ см⁻² и x = 1,48 при флюенсе ионов $F_{\rm Kr}t = 1,0 \cdot 10^{14}$ см⁻². Можно сделать вывод, что экспериментально наблюдаемые изменения химического состава при относительно низких флюенсах облучения могут быть вызваны процессами преимущественного испарения атомов Ni, а не Nb, так как Nb — более тугоплавкий металл.



Рис. 8. Структура аморфного сплава Ni₅₈Nb₄₂, облученного ионами ⁸⁶Kr с энергией 245 МэВ до флюенса $F_{\rm Kr}t = 1,0\cdot 10^{15}$ см⁻² ($\delta - 300 \times 300 \times 44,9$ нм) и не облученного ($a - 230 \times 230 \times 34,5$ нм). Структуры получены методом СТМ

На рис. 8, *a*, *б* представлены структуры поверхности сплава Ni₅₈Nb₄₂, полученные с помощью сканирующего туннельного микроскопа. Видно, что увеличение объема может быть связано со ступенчатым объемным ростом, а не с поверхностным ростом. Пробег ионов ⁸⁶Kr в сплаве Ni₅₈Nb₄₂ $R_p = 13,4$ мкм (плотность сплава $\rho = 8,54$ г/см³, пороговая энергия дефектообразования была выбрана равной $E_d \cong 30$ эВ). Неупругие потери энергии $E_{z,\mathrm{Kr}}^{\mathrm{inel}}(z \cong 0) = 24$ кэВ/нм, доза повреждений, возникающих в процессе упругих соударений, $D_{\mathrm{el}} = 0,037$ сна и $D_{\mathrm{el}} = 0,037$ сна соответственно для флюенсов ионов $F_{\mathrm{Kr}}t = 1,0\cdot 10^{15}$ см⁻² и $F_{\mathrm{Kr}}t = 10^{14}$ см⁻²; сечение упругих смещений атомов мишени $\sigma_{\mathrm{el}} = 3,7\cdot 10^{-17}$ сна · см²/ион.

Присутствие радиационных дефектов в металлах существенно увеличивает влияние неупругих потерь энергии быстрых тяжелых ионов на уровень распыления. Следовательно, уровень распыления для металла, имеющего малое число дефектов в кристаллической структуре, может находиться в диапазоне $S_{\text{sput}} < 1 - 10$ ат./ион [3–6]. Эксперименты показали, что уровень распыления для крупнозернистых металлов при их облучении быстрыми тяжелыми ионами при высоких флюенсах облучения ($F_{\rm Kr}t = 2.0 \cdot 10^{15} \, {\rm cm}^{-2}$) увеличивается значительно за счет накопления радиационных дефектов в кристаллической структуре мишени. Экспериментально наблюдаемый высокий уровень распыления для никеля можно объяснить испарением атомов с поверхности образца Ni в области вокруг трека иона, которая нагревается до температур, превышающих температуру плавления (T_{melt}) и, возможно, кипения (T_{boil}) . То есть модель термического пика работает в никеле, облучаемом ионами криптона высокой энергии, за счет существенного накопления концентрации радиационных дефектов, приводящих к уменьшению длины свободного пробега «горячих» электронов и локализации выделенной ионами энергии в малом объеме. Тем самым экспериментально доказано, что неупругие потери энергии $E_{z,\mathrm{Kr}}^{\mathrm{inel}}$ быстрого тяжелого иона имеют существенное влияние на распыление металла с развитой дефектной кристаллической структурой.

1.3. Изучение особенностей влияния облучения тяжелыми ионами с различными ионизационными потерями энергии на изменение структуры поверхности высокоориентированного пиролитического графита как структуры с квазиодномерными свойствами. В качестве модельного кристалла с хорошо известной структурой был взят высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ) [88]. Схематически кристаллическая структура ВОПГ представлена на рис. 9. Экспериментальные результаты были получены на поверхности ВОПГ после его облучения быстрыми тяжелыми ионами ²⁰⁹Ві и ⁸⁶Кг [51, 52]. СТМ-изображения исходной поверхности ВОПГ до (a) и после облучения (б) ионами ⁸⁶Кг до флюенса $F_{\rm Kr}t = 5.0 \cdot 10^{12}$ см⁻² представлены на рис. 10. Часть поверхности образца была закрыта фольгой из Ni с толщиной больше длины пробега иона и, следовательно, не облучалась, в то время как другая подвергалась воздействию ионов. Границы между разориентированными кристаллами исследовали методом СТМ. На необлученной части образца ВОПГ (рис. 10, a) можно наблюдать границу между разориентированными двумя кристаллитами, а на облученной части — сильно распыленную границу (рис. 10, б). Следовательно, распыление границ превышает распыление самого кристаллита. В необлученной части образцов ВОПГ



Рис. 9. Схемы слоевой структуры (квазиодномерной структуры) ВОПГ: *a*) вид сбоку; *б*) вид сверху



Рис. 10. СТМ-изображения исходной (*a*) и облученной ионами ⁸⁶Kr (305 МэВ) до флюенса $F_{\rm Kr}t = 5,0 \cdot 10^{12}$ см⁻² (б) поверхностей ВОПГ. Площади сканирования по поверхности — 128 × 128 нм (*a*) и 167 × 160 нм (б), глубина на границах зерен — 5 (*a*) и 47 Å (б)

можно наблюдать границу между двумя разориентированными кристаллическими зернами, образованную при изготовлении этого кристалла. На облученной части — очень сильно распыленную глубокую границу из таких структур. Глубина границы на рис. 10, *a*, по оценкам, равна 5 Å. На рис. 10, *б* граница состоит из перекрывающихся кратеров, т.е. перевернутых конусов с глубиной $h_{\rm cone} \approx 40$ Å и средним диаметром $D_{\rm cone} \approx 20$ нм. Вблизи границ имеются несколько кратеров, размер которых меньше, чем масштаб сканирования СТМ (в нашем случае характерный масштаб сканирования был 1 нм).

Можно сделать вывод, что и в данном случае наблюдается распыление границы между разориентированными кристаллитами ВОПГ, которое доминирует по сравнению с распылением поверхности самого кристаллита. Следовательно, для границ кристаллитов коэффициент распыления границ также велик. Для оценки коэффициента распыления ВОПГ, облученного ионами ⁸⁶Kr, учитывалось распыление атомов углерода в процессе их распыления (испарения) с поверхности, вызванного высокой температурой в объеме вокруг траектории иона. Коэффициент распыления можно оценить, используя простое допущение. Допустим, что атомы углерода испаряются из конического кратера со средними размерами: с диаметром $D_{\rm cone} = 19$ нм и глубиной $h_{\rm cone} = 47$ Å (см. рис. 10, б). Тогда число атомов углерода, вылетевших из такого конуса, можно оценить с помощью следующего выражения:

$$N_{
m cone} = rac{\pi D_{
m cone} h_{
m cone}}{12} N_{
m BO\Pi\Gamma} pprox 4,5 \cdot 10^4 \, \, {
m ar./ион},$$

где $N_{\text{ВОПГ}} = 1,1384 \cdot 10^{23}$ ат./см³ — атомная плотность ВОПГ.

Термин «конус» означает, что площадь с диаметром $D_{\text{cone}} = 19$ нм может состоять из перекрытых отдельных (смежных) треков. Из рис. 10, *а* можно видеть, что ширина границы практически такая же, как на рис. 10, *б*, но глубина на границе составляет h = 5 Å (рис. 10, *a*), а глубины конусов h = 47 Å (рис. 10, *б*), т. е. они значительно более глубокие. Из этого факта вытекает, что на поверхности границы имеется перекрытие нескольких отдельных треков ионов ⁸⁶Kr. Следовательно, диаметр отдельного трека может быть меньше 19 нм. Коэффициент распыления-испарения в треке для отдельного иона ⁸⁶Kr должен быть меньше, учитывая фактор перекрытия. Отметим, что при флюенсе ионов ⁸⁶Kr, которым были облучены образцы ВОПГ, $F_{\text{Kr}t} = 5,0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ среднее расстояние между треками ионов может быть оценено как $R \approx 1/(5,0 \cdot 10^{12})^{1/2}$ см = 4,5 нм. Таким образом, в этом случае перекрытие треков очень возможно.

СТМ-изображение ВОПГ, облученного ионами ²⁰⁹Ві с энергией 705 МэВ при флюенсе $F_{\rm Bi}t = 1,0 \cdot 10^{12}$ см⁻², представлено на рис. 11. Можно видеть отдельные изолированные кратеры, образующиеся на поверхности кристаллита ВОПГ после его облучения ионами ²⁰⁹Ві. Анализ СТМ-изображений показал, что средняя плотность кратеров на поверхности составляет только 2–3 % от общего флюенса ионов ($F_{\rm Kr}t = 1,0 \cdot 10^{12}$ см⁻²).

Область с цилиндрической симметрией возбужденных электронов будет образовываться вокруг траектории высокоэнергетического иона в твердых мишенях. Радиус этой области можно оценить как $r_0 \sim 1.0$ нм. Средняя энергия возбужденных электронов на атом мишени имеет вид [28]

$$Q_{e0} = \left(-\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\text{inel}} \frac{1}{\pi r_0^2 N_{\text{атом}}} = (1, 5\alpha + \beta)T_{e0}^2,$$

где α и β — параметры; например, для мишени из железа можно принять, что $\alpha = 0.05 \ \Im B^{-1}$, $\beta = 0.1 \ \Im B^{-1}$ [28, 44]. Тогда начальная температура электронного газа в зависимости от уровня ионизационных потерь энергии может быть вычислена на основе выражения

$$T_{e0} = \sqrt{Q_{e0}/(1.5\alpha + \beta)}.$$

Для ионов ²³⁸U с энергией $E_{\text{ион}}^U/M_{\text{ион}}^U = 7$ кэВ/нм в мишени из Fe $T_{e0} \approx 40$ эВ в цилиндре с радиусом $r_0 \approx 1$ нм! Следовательно, в среднем можно написать для высокоионизирующих тяжелых ионов, что $T_{e0} \approx 20-40$ эВ [28,44].



Рис. 11. СТМ-изображение структуры поверхности ВОПГ, облученного ионами ²⁰⁹Ві с энергией 705 МэВ до флюенса $F_{\rm Bi}t = 1,0\cdot 10^{12}$ см⁻². а) Профиль сканирования вдоль линии, показанной на рис. *б*. Площадь сканирования — 127×127 нм

Последующий процесс релаксации энергии возбужденных электронов будет происходить благодаря электрон-электронному рассеянию (релаксация за счет электронной теплопроводности) и взаимодействиям электронов с атомами решетки. Последний процесс и приводит к нагреванию атомов решетки в объеме вокруг траектории иона. Охлаждение области возбужденных электронов в кристалле ВОПГ будет сильно затруднено, т. к. плотность свободных электронов для монокристалла графита на три порядка величины меньше, чем для металлов, и имеет значение $n_e^{\rm free} \approx 5 \cdot 10^{18}$ электрон/см³. В особенности это касается ВОПГ, так как в этом материале теплопроводность и электропроводность по глубине также на три порядка меньше, чем вдоль поверхности.

Ясно, что уровень неупругих потерь энергии ионов ⁸⁶Kr в ВОПГ недостаточен для создания «горячего» трека тяжелого иона и меньше, чем пороговые неупругие потери энергии для образования такого трека, т. е. $E_{z, Kr}^{inel} <$ $E_{\rm thres}^{\rm inel}$ — пороговых неупругих потерь энергии для образования трека иона. Расчеты с использованием компьютерной программы TRIM-98 [61] показывают, что неупругие потери энергии ионов ⁸⁶Kr с энергией 305 МэВ на поверхности кристалла ВОПГ составляют $E_z^{\text{inel}}(z \approx 0) = 12$ кэВ/нм. Этих неупругих потерь энергии недостаточно, чтобы вызвать какие-либо изменения структуры поверхности отдельного кристаллита, но распыление границ между кристаллитами происходит (рис. 10, б) благодаря высокому уровню структурных дефектов в этой области, как и в случае преимущественного распыления границ зерен в металлах. Уровень неупругих потерь энергии ионов ²⁰⁹Ві с энергией 705 МэВ более чем в два раза превышает уровень упругих потерь ионов ⁸⁶Кг, а именно: он составляет $E_{z,{\rm Bi}}^{{\rm inel}} = 27,6$ кэВ/нм и практически достаточен для образования треков (рис. 11), т. е. $E_{z,{
m Bi}}^{
m inel} \approx E_{
m thres}^{
m inel}$. Тем не менее распыление поверхности кристаллита ВОПГ происходит с созданием кратеров и имеет, скорее всего, термофлуктуационный характер, так как плотность кратеров на поверхности намного меньше, чем флюенс ионов.

1.4. Исследование влияния внесенных внешним электронным облучением дефектов на изменения структуры полупроводниковых монокристаллов (Si, InP, Ge и GaAs) при последующем облучении их тяжелыми ионами высоких энергий. Исследование влияния облучения быстрыми тяжелыми ионами на свойства монокристаллов полупроводников, таких как Si, Ge, GaAs, InP, алмаз и некоторые другие, очень важно для электронной промышленности, в том числе для разработки новых подходов в современной нанотехнологии, а также для дальнейшего развития экспериментальной и фундаментальной теоретической радиационной физики конденсированного состояния [22, 26, 32–36, 41–43, 53–55].

Было проведено экспериментальное исследование изменений поверхности монокристаллического Si при его облучении ионами ⁸⁶Kr с энергией 253 МэВ, предварительные результаты которого опубликованы в работе [53]. Флюенсы облучения составили $F_{\rm Kr}t = 1,0\cdot 10^{14}$ см⁻² и $F_{\rm Kr}t = 2,6\cdot 10^{15}$ см⁻². Изменения поверхности монокристаллического кремния, облученного быстрыми ионами ⁸⁶Kr, изучались методом атомно-силовой микроскопии (ACM). На рис. 12, *а* представлено трехмерное изображение исходной поверхности кремния. На рис. 12, *б* помимо двухмерного изображения поверхности исходного образца кремния (верхнее изображение) представлен соответствующий профиль сканирования вдоль линии, отмеченной на верхнем изображении. Видно, что неоднородности исходной поверхности достаточно малы (менее $\pm 0,1$ нм). Это указывает на хорошее качество исходного монокристаллического Si.

Трехмерное изображение облученной поверхности кремния (ионы ⁸⁶Kr с энергией 253 МэВ, при этом флюенс составлял $F_{\rm Kr}t = 2,6 \cdot 10^{15}$ см⁻²) представлено на рис. 13, *а*. Профиль вдоль линии сканирования облученной поверхности Si (вдоль линии на двухмерном изображении на рис. 13, *б*, вверху) представлен на рис. 13, *б* внизу. Перепад высот между светлыми и темными участками на облученной поверхности составляет примерно $\pm 2,0$ нм, т. е. облученная поверхность становится более шероховатой по сравнению с исходной гладкой необлученной поверхностью (см. рис. 12, *б*).



Рис. 12. Трехмерное ACM-изображение необлученной поверхности монокристаллического Si (*a*) и линия сканирования по поверхности (*б*)

Очень интересно сравнить поверхностные особенности, присутствующие на облученной поверхности в наших экспериментах, и результаты, описанные в работе [33], где была исследована ACM-топография распыленных поверхностей монокристалла Si с ориентацией [100] после его облучения ионами



Рис. 13. Трехмерное АСМ-изображение поверхности Si, облученного ионами ⁸⁶Кг с энергией 253 МэВ, флюенс $F_{\rm Kr}t = 2.6 \cdot 10^{15}$ см⁻² (*a*) и профиль сканирования вдоль линии, проведенной на правом верхнем изображении (*б*)

 $^{40}{\rm Ar}$ с энергией 100 эВ до флюенса $F_{\rm Ar}t=5,26\cdot10^{17}~{\rm сm}^{-2}$ (случай А) и с энергией 300 эВ до флюенса $F_{\rm Ar}t=4,8\cdot10^{17}~{\rm сm}^{-2}$ (случай Б).

Среднеквадратичная шероховатость поверхности (rms), измеренная по АСМ-изображениям, оказывается равной ≈ 0.16 нм в случае A и 0.31 нм в случае Б (см. работу [33]). Поперечные размеры созданных облучением структур в случаях A и Б составляют $\approx 35-40$ нм и 90–100 нм соответственно [33]. В наших исследованиях измеренная шероховатость была относительно небольшой, ≈ 0.049 нм для необлученной поверхности (см. рис. 12, а, б) и 0,598 нм для облученной поверхности (см. рис. 13, а, б). Поперечные размеры полусферических выступов, наблюдаемых на облученной поверхности, составляют $\approx 40-60$ нм при высоте в диапазоне значений 1-2 нм. Из данных исследований можно сделать вывод, что изменения поверхности Si после его облучения ионами ⁸⁶Kr с энергией 253 МэВ при флюенсе $F_{\rm Kr}t = 2.6 \cdot 10^{15}$ см⁻² сравнимы с особенностями изменений структуры в случае облучения ионами Ar⁺ [33]. Следовательно, при облучении монокристаллов Si ионами ⁸⁶Kr коэффициент распыления должен быть больше, чем при облучении кремния ионами ⁴⁰Ar разных энергий, результаты которых представлены и описаны в работе [33]. Этот вывод предполагает, что наблюдаемые особенности поверхности возникают благодаря более значительному процессу распыления при облучении быстрыми тяжелыми ионами ⁸⁶Kr, чем в случае облучения кремния ионами аргона малой энергии, но при значительно больших флюенсах облучения.

Коэффициент распыления кремния ионами Ar⁺ с энергией 300 эВ был вычислен на основе модели упругих соударений с помощью программы TRIM-98 [61]. Вычисленное значение оказалось равным $S_{\text{sput,Ar}}^{\text{el}} = 0,226$ ат./ион. Поверхностную энергию связи атомов кремния (энергию сублимации) считали равной $E_{\text{bond}} = 4,7$ эВ. Коэффициент распыления при воздействии ионов ⁸⁶Kr $S_{\text{sput,Kr}}^{\text{inel}}$ был оценен с использованием значения толщины распыленного слоя под действием ионов ⁴⁰Ar с энергией 300 эВ, $\Delta Z_{\text{Ar}} = (F_{\text{Ar}}t)S_{\text{sput,Ar}}^{\text{el}}$ ат./см² (случай Б из работы [33] и рис. 13, *a*, *б* [53]). Тут было принято во внимание, что структуры на облученных поверхностях кремния (случай Б из работы [33] и рис. 13, *a*, *б* [53]) внешне очень похожи и близки по своим характеристикам, таким как поверхностная плотность, средний диаметр и высота полусферического бугорка. Было использовано неравенство

$$S_{
m sput, Kr}^{
m inel} > rac{(F_{
m Ar}t)_{
m Ar} \cdot S_{
m sput, Ar}^{
m el}}{F_{
m Kr}t} \cong 40$$
ат./ион.

Сечения дефектообразования по упругому каналу $\sigma_{\rm Kr/Ar}$ и неупругие по-

тери энергии $E_{z,\mathrm{Kr/Ar}}^{\mathrm{inel}} = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\mathrm{inel/el}}^{\mathrm{Kr/Ar}}(z)$ для ионов ⁸⁶Kr и Ar⁺ вблизи поверхности равны

$$\sigma_{\rm Kr}(z \approx 0) = 2,9 \cdot 10^{-17} \text{ (сна} \cdot \text{см}^2)/ион,$$

 $\sigma_{\rm Ar}(z \approx 0) = 5,4 \cdot 10^{-16} \text{ (сна} \cdot \text{см}^2)/ион,$
 $E_{x,{\rm Kr}}^{\rm inel}(z \approx 0) = 9,39 \text{ кэB/нм},$
 $E_{x,{\rm Ar}}^{\rm inel}(z \approx 0) = 0,07 \text{ кэB/нм}.$

Видно, что сечение упругого повреждения для ионов Kr в ≈ 20 раз меньше, чем для ионов ⁴⁰Ar. Также необходимо заметить, что практически одинаковые изменения поверхностей (одинаковые особенности) образцов Si были получены после их облучения ионами ⁸⁶Kr (энергия 253 МэВ, флюенс $F_{\rm Kr}t = 2,6 \cdot 10^{15}$ см⁻²) и ионами аргона (энергия 300 эВ, флюенс $(F_{\rm Ar}t)_{\rm Ar} = 4,8 \cdot 10^{17}$ см⁻²). При этом флюенс ионов ⁴⁰Ar был в 180 раз больше флюенса ионов ⁸⁶Kr. Следовательно, дозы повреждений от упругих потерь энергии ионов ⁴⁰Ar $(D_{\rm Ar}^{\rm el}(z \approx 0))$ и ионов ⁸⁶Kr $(D_{\rm Kr}^{\rm el}(z \approx 0))$ вблизи поверхности в образцах Si составляют следующие величины:

$$D_{
m Arr}^{
m el}(z pprox 0) = \sigma_{
m Arr}(z pprox 0)(F_{
m Ar}t)_{
m Arr} = 2.6 \cdot 10^2
m cma,$$

 $D_{
m Kr}^{
m el}(z pprox 0) = \sigma_{
m Kr}(z pprox 0)(F_{
m Kr}t) = 7.5 \cdot 10^{-2}
m cma.$

Это означает, что общие упругие потери энергии при облучении ионами 40 Ar в $3,5\cdot 10^3$ раз больше, чем при облучении ионами 86 Kr. Тем не менее

особенности поверхности образцов Si практически одинаковы по внешнему виду, высоте и диаметру полусферических бугорков. Такое большое различие между значениями полных упругих потерь энергии и дозы повреждений для образцов, облученных ионами ⁴⁰ Ar и ⁸⁶Kr, означает, что с помощью упругих потерь энергии невозможно описать и объяснить возникновение одинаковых структур на облученной поверхности Si. Однако неупругие потери энергии в случае облучения ионами Kr были значительно больше, чем при его облучении ионами ⁴⁰Ar, в частности, $E_{z,\mathrm{Kr}}^{\mathrm{inel}}(z \approx 0) / E_{z,\mathrm{Ar}}^{\mathrm{inel}}(z \approx 0) = 130$. Это позволяет сделать вывод, что распыление Si при облучении ионами ⁸⁶Kr должно описываться механизмом неупругого распыления, т.е. в этом случае модель термического пика может быть использована для объяснения наблюдаемых эффектов.

В работах [54, 55] было показано, что в аморфных пленках кремния и германия, приготовленных вакуумным напылением с осаждением из газовой фазы на подложки и затем облученных быстрыми тяжелыми ионами (от ¹⁶О с энергией 100 МэВ до ¹⁹⁷Au с энергией 207 МэВ), наблюдаются треки. Эти треки состоят из маленьких рекристаллизованных частиц вдоль осей треков [54, 55]. Этот эффект проявляется выше некоторого порогового значения $E_{z,\text{thres}}^{\text{inel}}$ (при этом $E_{z,\text{thres}}^{\text{inel}} \cong 5$ кэВ/нм в Ge и $E_{z,\text{thres}}^{\text{inel}} \cong 15$ кэВ/нм в Si [55]). Пороговые энергетические потери, зависящие от материала мишени, были интерпретированы в рамках модели термического пика [28,55-57]. Согласно этой модели образование трека ионов ⁸⁶Kr в кремнии невозможно или маловероятно, т.к. $E_{z,\mathrm{Kr}}^{\mathrm{inel}} < E_{z,\mathrm{thres}}^{\mathrm{inel}}$. Тем не менее при высоких флюенсах облучения монокристаллов Si ионами ⁸⁶Kr имеет место аморфизация от поверхности вдоль проективного пробега ионов. Это связано с тем, что длина свободного пробега «горячих» электронов уменьшается и неупругие потери энергии ионов криптона становятся локализованными в объеме, окружающем траекторию иона. Этот процесс приводит к локальному повышению температуры в области вокруг траектории иона и, следовательно, может привести к большей эффективности распыления.

Создание специфической структуры поверхности в виде полусферических бугорков, покрывающих всю облученную поверхность кремния, можно попытаться объяснить на основе какой-то другой модели. Это явление может быть связано с накоплением молекул имплантированного газа под поверхностью облученного монокристалла Si или со специфическим механизмом распыления-испарения. При этом вначале может происходить выброс испарившихся атомов кремния с распределением $N(\Theta)$ этих атомов в зависимости от угла Θ , отсчитываемого от нормали к поверхности, которое имеет вид [3]:

$$\frac{N(\Theta)}{N(0)} \approx \cos{(\Theta)},$$

где $N(\Theta)$ — число атомов, вылетевших с поверхности под углом Θ , а N(0) — амплитуда их углового распределения. При этом возможно обратное осаждение атомов на поверхность, окружающую перегретую область, — «горячий» трек тяжелого иона с последующим ростом полусферических структур и с конкурирующим процессом испарения-распыления этих структур. Такие процессы происходят и при упругом распылении. При этом также образуются различные структуры.

В последние годы новые технологии на основе наноструктур начали развиваться с высокой эффективностью, со многими приложениями и получили широкое распространение во многих странах. Нанокластеры, нанопроволочки и регулярные нано- и микроструктуры, которые могут модифицировать электронные, магнитные, квантовые и оптические свойства твердых тел, обеспечивают уникальные, недоступные ранее возможности для развития оптоэлектроники, наноэлектроники и других важных отраслей науки, технологии, промышленности, компьютерной техники, биологии и медицины. Один из путей упомянутого выше наноструктурирования твердых тел — их облучение быстрыми тяжелыми ионами. При таком облучении треки могут образоваться в форме нанометрических цилиндров-трубок или в виде цепочек кластеров с модифицированной структурой, внедренных в неповрежденную матрицу исходный материал. Механизмы образования треков при сверхвысоких уровнях возбуждения электронной подсистемы кристалла не выяснены в деталях до сих пор. Модель термического пика наиболее часто используется для объяснения образования треков или их отсутствия в материалах при облучении частицами с высоким уровнем ионизационных потерь энергии [28, 56].

Усовершенствованная модель термического пика будет изложена во втором разделе данного обзора. В этом разделе обсудим модель термического пика в части, касающейся определения того, какая часть потерь энергии иона идет на образование теплового пика — на нагревание цилиндрического объема вокруг траектории иона до температуры выше температур плавления или испарения, т. е. образование трека иона. Этот процесс определяется константой электрон-фононного взаимодействия g, характеризующей эффективность переноса энергии от возбужденных «горячих» электронов к атомам решетки. Образование треков в изоляторах, полупроводниках, аморфных материалах, металлах, металлических сплавах наблюдается, когда электронные потери энергии превышают некоторое пороговое значение $E_{z,thres}^{inel}$, которое определяется типом облученного материала и особенностями его структуры. Для полупроводников значение $E_{z,thres}^{inel}$ существенно превышает соответствующие значения для изоляторов и может быть больше чем 30 кэВ/нм.

Однако было показано, что образование трека в предварительно разупорядоченном монокристалле InP возможно при $E_{x,\text{thres}}^{\text{inel}} \approx 13$ кэB/нм [58, 59]. Очень похоже, что разупорядочение может изменить электронные свойства материала, таким образом изменяя значение константы электрон-фононного взаимодействия g. Изменение электронных свойств кристалла благодаря контролируемому введению дефектов при облучении легкими частицами — один из способов уменьшения $E_{z,\text{thres}}^{\text{inel}}$. Это как бы предварительная обработка с целью повысить чувствительность решетки монокристалла к ионизационным потерям энергии и фактически понизить пороговое энерговыделение для образования трека.

Экспериментальные исследования радиационных эффектов в монокристаллах GaAs и InP с предварительной обработкой представлены в работе [60]. Первая партия образцов монокристаллов GaAs n-типа с ориентацией [100] и InP с площадью 1 × 1 см и толщиной 300 мкм облучалась электронами с энергией $E_{e1} = 4$ МэВ до флюенса $F_e t = 4.0 \cdot 10^{17}$ см⁻². После этого образцы, предварительно облученные электронами, облучали ионами ²⁰⁹Ві с энергией $E_{\rm Bi} = 710$ МэВ до флюенса $F_{\rm Bi}t = 1.0 \cdot 10^{12}$ см⁻². Исследования области вблизи брэгговского пика (область с максимальными упругими потерями энергии вблизи зоны остановки ионов) методом СЭМ показали, что происходит процесс перекрытия отдельных треков. Это хорошо видно при изучении структуры слоя, в котором останавливаются ионы, и брегговского пика. Следовательно, диаметр трека вблизи конца отрезка пробега иона должен удовлетворять неравенству $D_{\rm Bi} = 1/(F_{\rm Bi}t)^{1/2} > 10$ нм. Вторая партия образцов монокристаллов GaAs и InP облучалась электронами с энергией $E_{e2} = 23$ МэВ до флюенса $F_{e2}t = (3,0 \pm 0,5) \cdot 10^{17}$ см⁻². После этого половина поверхности образцов закрывалась никелевой фольгой с толщиной, превышающей длину пробега ионов, и затем эти образцы облучались ионами 86 Кг с энергией $E_{\rm Kr} = 253$ МэВ до флюенса $F_{\rm Kr} t = 1,3 \cdot 10^{14}$ см $^{-2}$. При этом флюенсе, естественно, имеет место перекрытие треков от отдельных ионов. Температура обеих партий образцов не превышала 50 °C во время электронного и ионного облучения. Топографию поверхности образцов исследовали, используя растровый электронный микроскоп S-806 (Hitachi) и атомно-силовой микроскоп «Femtoscan 001».

Распределение повреждений по глубине изучалось с помощью избирательного химического травления сколов кристаллов перпендикулярно облученной поверхности образца (это практически метод поперечного сечения cross-section method). Затем образцы, приготовленные таким образом, исследовали с помощью оптического микроскопа «Leica INM-100».

Параметры, характеризующие радиационное взаимодействие ионов с кристаллами GaAs и InP, были вычислены с помощью программы TRIM-98 [61]. Для вычисления сечения образования повреждений и неупругих потерь энергии электронов в этих полупроводниках была написана специальная компьютерная программа. Основные параметры процесса радиационного воздействия ионов и электронов на монокристаллы GaAs и InP представлены в табл. 1 и 2.

Как показали ACM-исследования, электронное облучение не изменяет топографию поверхности образцов InP и GaAs. Облучение их ионами ⁸⁶Kr

Таблица	1.	Параметры	процесса	взаимодейст	гвия элек	тронов с н	кристаллами	GaAs и
InP								

Кристалл	<i>Е</i> _е , МэВ	$\Phi_e, \ 10^{-17} \mathrm{cm}^{-2}$	$D_e, 10^{-5}$ сна	$E_{e,\max}^{\mathrm{AIII}}$, кэ B	$E_{e,\max}^{ m BV}$, кэ $ m B$	$E_{ m cp}^{ m AIII}$, э ${f B}$	$E^{ m BV}_{ m cp},$ $\mathfrak{2B}$	
GaAs	23	3 ± 1	9,3	16,8	15,7	124	124	
GaAs	4	4	5,8	$0,\!61$	0,57	$59,\!6$	58,5	
InP	23	3 ± 1	9,4	10,2	37,9	127	136	
Примечание. E_e — энергия электронов; Φ_e — флюенс электронов; $D_e = \sigma_e \cdot F_e t$ — доза повреждения от электронного облучения; $E_{e,\max}^{AIII}$ и $E_{e,\max}^{BV}$ — максимальные энергии								
смещенных атомов; E_{cp}^{AIII} и E_{cp}^{BV} — их средние энергии. Символы «III» (In, Ga) и «V» (P,								
As) — обозначения элементов химических групп III и V таблицы элементов Менделеева.								

Таблица 2. Параметры процесса радиационного взаимодействия ионов с кристаллами GaAs и InP

²⁰⁹ Ві ($E_{\rm Bi} = 710~{\rm M}$ эВ, $F_{\rm Bi}t = 1,0\cdot 10^{12}~{\rm cm}^{-2}$)										
Кристалл	<i>R</i> _p , мкм	$R_p, E_z^{\text{inel}}(0),$ км кэВ/нм		$\sigma(z=0),$ (сна · см ⁻²)/ион		$\sigma(zpprox R_p),$ (сна \cdot см $^{-2}$)/ион		D(z=0),	$D(z \approx R_p),$ сна	
GaAs	30,6	35,	2 1	$1,96 \cdot 10^{-16}$		$6,8 \cdot 10^{-15}$		$1,96 \cdot 10^{-4}$	$1,96 \cdot 10^{-4}$ $6,8 \cdot 10^{-4}$	
$^{86}{ m Kr}~(E_{ m Kr}=253~{ m M}$ эВ, $F_{ m Kr}t=1,3\cdot 10^{14}~{ m cm}^{-2})$										
Кристалл	R_p , мкм	$\frac{E_z^{\text{inel}}}{\text{K}\Im B}$	$\sigma(z = \frac{c + a \cdot c}{u + a})$	= 0), см ⁻² н	$\frac{\sigma(z \approx z)}{\frac{c + a \cdot c}{u + o + c}}$	R_p), M^{-2}	D(z=0),сна	$D(z pprox R_p),$ сна	$S_{\mathrm{Kr}}^{\mathrm{AIII}},$ <u>ат.</u> ион	$S_{\mathrm{Kr}}^{\mathrm{BV}},$ ат. ион
GaAs InP	23,3 25,5	$15,8 \\ 12,6$	$6,7 \cdot 1 \\ 5,3 \cdot 1$	0^{-17} 0^{-17}	$3,2 \cdot 10 \\ 2,8 \cdot 10$	-15 - 15	$ 8,7 \cdot 10^{-3} \\ 6,9 \cdot 10^{-3} $	$\begin{array}{c} 4.2 \cdot 10^{-1} \\ 3.6 \cdot 10^{-1} \end{array}$	$0,016 \\ 0,017$	$0,017 \\ 0,03$
Примечание. R_p — пробег ионов; $E_z^{\rm inel} = -(\partial E/\partial z)_{\rm inel}(z)$ — удельные неупругие потери энергии в слое вблизи поверхности; $\sigma(z=0)$ и $\sigma(z\approx R_p)$ — сечения дефектообразования вблизи поверхности и в пике Брэгга; $D(z=0)$ и $D(z\approx R_p)$ — дозы поверждений; $S_{\rm Kr}^{\rm AIII}$ и $S_{\rm Kr}^{\rm BV}$ — коэффициенты распыления [61]. Здесь AIII — химические элементы III группы (Ga и In), BV — элементы V группы (P и As) таблицы Менделеева.										

приводит к небольшому сглаживанию рельефа поверхности и исходных, и облученных электронами кристаллов. В то же время на облученной части поверхности InP появляется так называемая «рябь» (рис. 14). Возможно, это происходит из-за неоднородного распыления в процессе облучения ионами криптона. Толщины распыленных слоев InP и GaAs, облученных ионами ⁸⁶Kr при условиях облучения, представленных выше, были вычислены с использованием модели упругого каскадного распыления [61] и выражения

$$\triangle H_{\mathrm{InP,GaAs}}^{\mathrm{TRIM,Kr}} = [S_{\mathrm{Kr}}^{\mathrm{AIII}} + S_{\mathrm{Kr}}^{\mathrm{BV}}]F_{\mathrm{Kr}}t/N_{\mathrm{atom}}^{\mathrm{InP,GaAs}},$$

где $N_{\rm arom}^{\rm InP,GaAs}$ — атомные плотности монокристаллов InP и GaAs соответственно. Здесь $S_{\rm Kr}^{\rm AIII}$ и $S_{\rm Kr}^{\rm BV}$ — коэффициенты распыления элементов III и V групп. Тогда можно получить толщины распыленных слоев, имеем $\triangle H_{\rm InP}^{\rm TRIM} = 9.8 \cdot 10^{-4}$ нм и $\triangle H_{\rm GaAs}^{\rm TRIM} = 9.6 \cdot 10^{-4}$ нм.



Рис. 14. Структура поверхности монокристаллов InP: а) поверхность кристалла InP, облученная только электронами ($E_e = 23 \text{ МэB}$, $F_e t = 3,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$); б) поверхность кристалла InP, облученная электронами ($E_e = 23 \text{ МэB}$, $F_e t = 3,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$) и ионами ⁸⁶Kr ($E_{\mathrm{Kr}} = 253 \text{ МэB}$, $F_{\mathrm{Kr}} t = 1,3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$). Изображения были получены методом ACM

Эти значения слишком малы, чтобы объяснить наблюдаемые изменения топографии поверхности. Перепады высот рельефов, измеренных на ACM-изображениях, значительно больше, чем предсказывает каскадная модель упругого распыления. Можно сделать вывод, что неупругое распыление [3] имеет место во время облучения ионами криптона с энергией 253 МэВ монокристаллов InP и GaAs, предварительно облученных электронами, из-за высоких неупругих потерь энергии, при этом $E_{z,{\rm Kr}}^{{\rm inel}}(z\approx 0)=12,6$ кэВ/нм для InP и $E_{z,{\rm Kr}}^{{\rm inel}}(z\approx 0)=15,8$ кэВ/нм для GaAs.

При электронном облучении сечения дефектообразования в кристаллах GaAs и InP, вычисленные по специально написанной программе, оказались равными

$$\begin{split} &\sigma^{\rm GaAs}_{e,4\,\rm M_{9B}} = 1,45\cdot10^{-22}~({\rm cha}\cdot{\rm cm}^2)/e^-,\\ &\sigma^{\rm GaAs}_{e,23\,\rm M_{9B}} = 3,1\cdot10^{-22}~({\rm cha}\cdot{\rm cm}^2)/e^-,\\ &\sigma^{\rm InP}_{e,23\,\rm M_{9B}} = 3,1\cdot10^{-22}~({\rm cha}\cdot{\rm cm}^2)/e^-. \end{split}$$

Для кристаллов GaAs, облученных электронами и ионами ²⁰⁹Bi, в экспериментах было зафиксировано начало отшелушивания. Слой достаточно большой ширины ($\Delta H \approx 5 - 6$ мкм) с сильными механическими напряжениями, которые создают поврежденный слой с развитыми микротрещинами, был обнаружен на сколе дважды облученного образца GaAs на глубине, превышающей длину пробега иона (рис. 15).



Рис. 15. Радиационные повреждения, выявленные избирательным химическим травлением образцов GaAs, сколотых перпендикулярно поверхности основного образца: *a*) образец, облученный только ионами ²⁰⁹Bi ($E_{\rm Bi} = 710$ МэВ, $F_{\rm Bi}t = 1,0\cdot10^{12}$ см⁻²); *b*) образец, облученный электронами ($E_e = 4$ МэВ, $F_et = 4,0\cdot10^{17}$ см⁻²) и ионами ²⁰⁹Bi ($E_{\rm Bi} = 710$ МэВ, $F_{\rm Bi}t = 1,0\cdot10^{12}$ см⁻²); *b*) изображение с большим увеличением области микротрещины, указанной стрелкой на рис. 15, *b*. Черные вертикальные отрезки на рис. *a* и *b* показывают длину пробега иона $R_p^{\rm Bi} = (30,6 \pm 1,0)$ мкм

Было установлено также, что двойное облучение монокристаллов InP и GaAs электронами и ионами ⁸⁶Kr приводит к распуханию облученной части кристалла, образованию микротрещин на поверхности, разрывам и сколам в приповерхностных слоях (рис. 16, 17). На рис. 17, *в*, *г* представлена поверхность InP с отдельными кристаллитами, образованными в результате облучения образца быстрыми тяжелыми ионами. Для объяснения создания отдельных кристаллитов на дважды облученной поверхности монокристалла InP можно использовать замечания об образовании полусферических бугорков на облученной поверхности Si, т.е. специфический механизм распыления-испарения: испарение и последующее вакуумное осаждение рассеянных атомов, так как угловое распределение рассеянных атомов описывается законом косинуса, т. е. ($N(\Theta) \sim \cos(\Theta)$).

Распухание ряда кристаллов, таких как ионные кристаллы (LiF и CaF₂) и ковалентные кристаллы (SiO₂, Y₃Fe₅O₁₂ и Gd₃Ga₅O₁₂), наблюдалось в работе [62]. Оно объясняется воздействием, вызванным влиянием высокоэнергетических ионов, когда облученный слой изолятора при флюенсе облучения ионами $Ft \approx 1,0 \cdot 10^{13}$ см⁻² откалывается от нижележащего слоя неповрежденного кристалла. В наших экспериментах было обнаружено, что уровень механических напряжений в полупроводниковых монокристаллах InP и GaAs, облученных ионами ⁸⁶Kr с более высоким флюенсом, $F_{Kr}t = 1,3 \cdot 10^{14}$ см⁻²,



Рис. 16. Микротрещины на поверхности кристалла GaAs, облученного электронами ($E_e = 23 \text{ M}$ эB, $F_e t = 3,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$) и ионами ⁸⁶Kr ($E_{\text{Kr}} = 253 \text{ M}$ эB, $F_{\text{Kr}}t = 1,3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$). Рис. *а* и δ — изображения, полученные с помощью растрового электронного микроскопа с различными увеличениями: ×1000 и ×10000 соответственно

недостаточен для разрушения материала. Однако предварительное разупорядочение кристаллов электронным облучением способствует процессам деструкции во время последующего облучения ионами высоких энергий (быстрыми ионами).

Наблюдаемые эффекты можно объяснить увеличением объема дважды облученных частей из-за процесса аморфизации и возникновением механических напряжений в слое остановки быстрого иона. На часть поверхностей образцов, закрытых металлической фольгой, ионы ⁸⁶Kr не действуют, а в облученных частях кристалла ионы останавливаются на глубине их проективного пробега. Свободное расширение облученного ионами объема ограничено соседней неповрежденной областью, и облученные части распухают в сторону поверхности образца. Возникающие механические напряжения приводят к растрескиванию дважды облученных областей материала. Как видно из табл. 1 и 2, дозы повреждений благодаря электронному облучению кристаллов InP и GaAs значительно меньше, чем дозы повреждений, вызванных ионным облучением. Тем не менее влияние бомбардировки быстрыми ионами кристаллов, предварительно облученных электронами, значительное и несколько необычное. Из табл. 1 и 2 видно, что дозы повреждений после электронного облучения в монокристаллах InP и GaAs (например, в монокристалле InP $D_e^{\rm InP}=9,4\cdot 10^{-5}$ сна) намного меньше повреждений, возникших после облучения ионами $^{86}{\rm Kr}~(D_{\rm Kr}^{\rm InP}(z=0)=6,9\cdot 10^{-3}$ сна и $D_{\rm Kr}^{\rm GaAs}(z=0)=$



Рис. 17. *а*, б) Трещины и разрывы на поверхности InP, облученной электронами ($E_e = 23 \text{ МэB}$, $F_e t = 3,0\cdot10^{17} \text{ см}^{-2}$) и ионами ⁸⁶ Kr ($E_{\text{Kr}} = 253 \text{ МэB}$, $F_{\text{Kr}} t = 1,3\cdot10^{14} \text{ см}^{-2}$). *в*, *г*) Поверхности InP с отдельными кристаллитами, увеличение ×12500 и ×25000 соответственно

 $8,7\cdot 10^{-3}$ сна), даже вблизи поверхности, а в брэгтовском пике (максимуме дефектообразования) доза повреждений в $\approx 7\cdot 10^3$ раз больше, чем доза повреждений после электронного облучения. Доза повреждений после облучения ионами $^{209}{\rm Bi}$ вблизи поверхности монокристалла GaAs практически в 2 раза больше ($D_e^{{\rm GaAs}}(z=0)=9,3\cdot 10^{-5}$ сна и $D_{{\rm Bi}}^{{\rm GaAs}}(z=0)=1,96\cdot 10^{-4}$ сна), а в брэгтовском пике ($D_{{\rm Bi}}^{{\rm GaAs}}(z=R_p)=6,8\cdot 10^{-3}$) — практически на 2 порядка величины больше, чем доза после электронного облучения. Может быть, такая высокая доза повреждений после облучения кристаллов ионами $^{86}{\rm Kr}$ с интенсификацией дефектообразования после предварительного электронного облучения — причина того, что невозможно получить качественный поперечный скол дважды облученных электронами и ионами криптона кристаллов InP и GaAs. Поперечный скол хорошего качества получается в образце GaAs, облученном меньшей дозой $^{209}{\rm Bi}$, и это позволяет наблюдать трещины

только в слое на глубинах, превышающих длину пробега ионов ²⁰⁹Ві (см. рис. 15, δ , δ).

Чтобы объяснить влияние электронного облучения, способствующего механическому разрушению образцов, мы оценили чувствительность материала к электронным потерям энергии. В работе [63] был введен параметр $\eta = Q/ \triangle H_f$. Здесь $\triangle H_f$ — скрытая теплота плавления, $Q = 0.63 rac{E_z^{
m inel}}{\pi \lambda^2}$ средняя плотность энергии, выделенная ионом в цилиндре радиусом λ , равным средней длине свободного пробега электрона. Если параметр удовлетворяет условию $\eta > \eta_{cr1} = 1,3$, решетка рассматривается как чувствительная к неупругим потерям энергии; если $\eta < \eta_{
m cr2} = 0,7,$ то решетка считается нечувствительной к неупругим потерям энергии иона. В диапазоне $\eta_{cr2} \leq \eta \leq \eta_{cr1}$ недостаточное знание используемых параметров не позволяет сделать какого-либо конкретного заключения. Вычисленные средние расстояния между изолированными точечными дефектами, генерированными электронным облучением, были выбраны в качестве длины среднего свободного пробега электрона. Волновые функции свободных электронов в идеальном кристалле представляют трансляционно-инвариантные функции Блоха [28, 56]. Присутствие вакансий нарушает периодичность кристалла, и это допущение кажется разумным.

Средние расстояния между точечными дефектами, возникшими после электронного облучения, для InP и GaAs равны соответственно 12,1 нм и 12,5 нм. Эти значения сравнимы с длинами свободного пробега электронов в металлах [11]. Как показали вычисления, для монокристалла InP параметр $\eta_{\rm Kr} = 0,88$. Для монокристалла GaAs имеем два параметра: $\eta_{\rm Kr} = 0,83$ (облучение ионами криптона), $\eta_{\rm Bi} = 1,34$ (облучение ионами висмута) [64]. Во всех случаях η превышает нижний предел чувствительности кристалла к электронным потерям энергии, $\eta_{\rm cr} = 0,7$.

В обзоре [65] представлены результаты, описывающие влияние изотопического беспорядка на кинетические коэффициенты полупроводников и кристаллов галогенидов щелочных металлов, таких как алмаз (${}^{12}C_{1-x}{}^{13}C_x$), ${}^{70}Ge_x^{nat}Ge_{1-x}$ и Li_{1-x}⁶Li_xF. Представлены также модели для вычисления изменения этих коэффициентов. Отметим, что при увеличении концентрации изотопа ${}^{13}C$ в алмазе от 0,001 до 10% (на четыре порядка величины по концентрации) при комнатной температуре (~ 300 K) теплопроводность уменьшается в 4 раза. Значительные изменения теплопроводности вызваны изменением атомного веса изотопа в решетке (замещением атома решетки ${}^{12}C$ на атомы изотопа ${}^{13}C$, т. е. относительным изменением атомного веса лишь на $\approx 8\%$) и, как следствие, нарушением трансляционной инвариантности в кристалле. В случае электронного облучения при дозе повреждения $D_e \cong 9,3 \cdot 10^{-5}$ сна вакансии, образующиеся в кристаллах InP и GaAs, являются центрами нарушения трансляционной симметрии в кристаллах и «своеобразными центрами» рассеяния возбужденных электронов. Это и приводит к усилению электрон-фононных взаимодействий и более интенсивному нагреванию решетки в области вокруг траектории тяжелого иона. Это может уменьшить электронную и решеточную теплопроводности и, как следствие, привести к увеличению времени существования, или «жизни», перегретой области вокруг траекторий тяжелых ионов. Процессы локального плавления и последующей частичной рекристаллизации этого перегретого объема вызывают образование дополнительных дефектов при неполной рекристаллизации и, возможно, частичную аморфизацию облученного слоя в кристалле.

Влияние предварительного разупорядочения после облучения электронами с энергиями МэВ-диапазона на эффекты взаимодействия быстрых ионов с кристаллами InP и GaAs было исследовано в работах [60, 64]. Было показано, что предварительное облучение электронами приводит к образованию макродефектов в процессе последующего облучения InP и GaAs такими ионами. При малых флюенсах облучения (ионы ²⁰⁹Bi, $E_{\rm Bi} = 710$ МэВ, $F_{\rm Bi}t = 1,0 \cdot 10^{12}$ см⁻²) слой с макродефектами в виде развитой системы трещин с дугообразной структурой образуется за зоной остановки ионов висмута. Наблюдаемый сильный изгиб трещин (рис. 15, *в*) на глубине вблизи конца пробега иона свидетельствует о значительных механических напряжениях в этой области; по-видимому, уровень напряжений выше предела прочности облученных образцов монокристаллов GaAs. С увеличением флюенса облучения (ионы ⁸⁶Kr, $E_{\rm Kr} = 253$ МэВ, $F_{\rm Kr}t = 1,3 \cdot 10^{14}$ см⁻²) макродефекты развиваются, микротрещины и разрывы образуются уже и на поверхности кристаллов InP и GaAs [60,64].

Сформулируем кратко основные результаты первого раздела обзора. Были представлены результаты изучения влияния облучения тяжелыми ионами в области неупругих потерь энергии на структуру ряда чистых металлов, металлических и аморфных сплавов, ВОПГ и полупроводниковых монокристаллов Si, GaAs и InP. Было показано, что коэффициент (уровень) распыления существенно зависит от состояния облученной поверхности и плотности дефектов в кристаллической мишени, от того, были ли дефекты (точечные дефекты, протяженные дефекты и др.) внесены до облучения или являются результатом их накопления непосредственно в процессе облучения. Присутствие этих дефектов существенно усиливает влияние неупругих потерь энергии высокоэнергетических тяжелых ионов и, следовательно, увеличение коэффициентов распыления. Поэтому следует ожидать сильных неоднородностей распыления поверхностей крупнозернистых поликристаллических материалов, в том числе и монокристаллов, высокоэнергетическими тяжелыми ионами при высоких флюенсах облучения, как это было показано на образцах нержавеющей стали и Si, облученных быстрыми тяжелыми ионами.

Распыление на границах зерен намного сильнее, чем распыление поверхности самого зерна. Для монокристаллов со структурой, близкой к идеальной при низкой концентрации дефектов структуры и примесей, коэффициенты распыления близки к предсказываемым каскадной моделью упругого распыления [3,4,10,11,29–31,44].

Важность проблемы распыления в областях ядерной техники, имплантации тяжелых ионов высоких энергий и обработки материалов для создания новых технологий делает необходимым продолжение экспериментальных и теоретических исследований по изменению основных свойств материалов при облучении их быстрыми тяжелыми ионами и другими сопутствующими ядерно-физическими излучениями, чтобы детально установить различные аспекты этих явлений.

Таким образом, были проведены экспериментальные исследования возлействия быстрых тяжелых ионов на поверхности металлов, металлических сплавов, аморфных сплавов и ВОПГ в области неупругих потерь энергии, а также дано объяснение экспериментальных результатов на достигнутом уровне имеющихся подходов и моделей. На основе данных, полученных для Ni, Au и ВОПГ, можно сделать вывод, что образование трека и, следовательно, высокие коэффициенты испарения (распыления) имеют место в случае сильно разупорядоченных систем или в материалах с относительно низкой концентрацией свободных электронов (диэлектриках и некоторых полупроводниках). Было показано, что для проводящих материалов, когда выполняется условие $\tau_L \ll \tau_h$ в низкодефектной зоне, атомы решетки вокруг траектории быстрого тяжелого иона «не нагреваются» (остаются «холодными») и не создают «горячий» трек. Условие $\tau_L \ll \tau_h$ нарушается на границе между зернами, а также в области с высокой концентрацией дефектов, как это можно видеть для Ni, предварительно облученного ионами криптона с высоким флюенсом и затем облученного вторично с использованием так называемого «метода ступеньки» (см. рис. 3), и для предварительно сильно деформированного Аи. В результате, когда быстрый тяжелый ион проходит сквозь такую область, создается «горячий» трек и могут происходить процессы, обусловленные испарением атомов мишени.

Используя наблюдаемые поверхностные эффекты в различных твердых телах при их облучении быстрыми тяжелыми ионами с различными неупругими потерями энергии $E_z^{\rm inel} = -(\partial E/\partial z)_{\rm inel}$ и большинство экспериментальных результатов первого раздела обзора, можно сделать вывод, что практически для всех материалов коэффициенты распыления больше, чем предсказывает модель упругого каскадного распыления [29–31].

Как было показано выше, выражение (1) [44] можно использовать для вычисления температуры решетки в твердых телах с высокой концентрацией дефектов или аморфных твердых телах. Необходимо привлекать и другие модели неупругого распыления [3] с расчетом температурных эффектов на основе модели термического пика [9, 12–16, 28, 31, 36, 39, 42–44, 56, 57] для описания экспериментальных результатов.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ И РЕШЕТОЧНОЙ ТЕМПЕРАТУР

Систему связанных дифференциальных уравнений в частных производных в цилиндрических координатах можно записать как [14–16,42,56,63,67]

$$C_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_e(T_e)\frac{\partial T_e}{\partial z}\right) - g(T_e)(T_e - T_i) + A(r, z, t), \quad (2a)$$

$$C(T_i)\frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda_i^{\parallel}(T_i)\frac{\partial T_i}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_i^{\perp}(T_i)\frac{\partial T_i}{\partial z}\right) + g(T_e)(T_e - T_i).$$
(26)

В этих уравнениях удельные теплоемкости и теплопроводности зависят от температуры. Ось z направлена перпендикулярно плоскости облучаемой мишени, т. е. по движению тяжелого иона. Производные по углу отсутствуют ввиду цилиндрической симметрии удельных ионизирующих потерь энергии тяжелого иона. $T_e(r, z, t)$ и $T_i(r, z, t)$ — температуры электронов и решетки. $C_e(T_e)$, $C_i(T_i)$ и $\lambda_e(T_e)$, $\lambda_i^{||,\perp}(T_i)$ — удельные теплоемкости и удельные теплопроводности электронов и решетки соответственно. Символы «||» и « \perp » означают, что теплопроводность монокристаллов может зависеть от ориентации оси кристалла, они соответствуют направлениям вдоль и перпендикулярно поверхности. Коэффициент $g(T_e)$ характеризует взаимодействие между электронной подсистемой и решеткой и в общем случае зависит от электронной температуры. Функция A(r, z, t) — объемная плотность вносимой ионом мощности. Эту функцию можно записать в виде наиболее часто используемого выражения [17, 39, 56, 66–68]:

$$A(r,z,t) = bS_{\text{inel0}} \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \mu(z).$$
(3)

Здесь функция $\mu(z)$ — профиль ионизационных потерь энергии тяжелого иона $S_{\text{inel}}(z)$, нормированный на значение ионизационных потерь энергии вблизи поверхности мишени S_{inel0} :

$$\mu(z) = \frac{S_{\text{inel}}(z)}{S_{\text{inel}0}}, \quad S_{\text{inel}0} = S_{\text{inel}}(z=0), \quad S_{\text{inel}} = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\text{inel}}.$$
 (4)

Время достижения равновесного распределения электронов, т.е. время свободного пробега δ -электронов со средней энергией ε_e , составляет $t_0 \simeq (1-5) \times 10^{15}$ с. Полуширина распределения по времени принята равной $\sigma_t = t_0$

[67]. Скорость экспоненциального спада [68], или пространственная ширина возбужденной области [69], $r_0 \leqslant 2,5$ нм (согласно результатам [68]) или $r_0 \simeq 1$ нм [28].

Нормировочный множитель b определяется из условия нормировки:

$$\int_{0}^{\infty} dt \int_{0}^{r_m} 2\pi r A(r,z,t) \, dr = S_{\text{inel}} = S_{\text{inel}0} \mu(z). \tag{5}$$

Здесь r_m — максимальный пробег δ -электронов. Этот пробег зависит от максимальной энергии ε_e , передаваемой отдельному электрону [28,69].

Начальные и граничные условия можно записать в следующей форме [39,63,66]:

$$T_{e,i}(r,z,0) = T_0 = 300 \text{ K},\tag{6}$$

$$\frac{\partial T_{e,i}(r,z,t)}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0, \quad \frac{\partial T_{e,i}(r,z,t)}{\partial z}\bigg|_{z=0} = 0, \tag{7}$$

$$T_{e,i}(R_{\max}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{\max}, t) = T_0.$$
(8)

Здесь и далее R_{max} — радиус удаления от траектории иона и Z_{max} — глубина, намного превышающая длину проективного пробега иона. При этих значениях R_{max} и Z_{max} решетку можно считать невозмущенной, а ее температуру при $r > R_{\text{max}}$ и $z > Z_{\text{max}}$ — равной T_0 . Таким образом, начальные и граничные условия означают, что в начальный момент времени электронная и решеточная ионная подсистемы имеют температуру, равную комнатной, а граница z = 0 термически изолирована.

При решении системы уравнений (2а) и (2б) целесообразно ввести безразмерные переменные, т. е. $\check{T}_e = T_e/T_0$, $\check{T}_i = T_i/T_0$, $\check{r} = r/\Delta r$, $\check{z} = z/\Delta z$, $\check{t} = t/\Delta t$, где Δr , Δz и Δt — единицы измерения расстояния и времени. Эти единицы имеют вид $\Delta t = \alpha_1 t_0$ и $\Delta r = \Delta z = \alpha_2 r_0$. Здесь α_1 и α_2 — произвольные безразмерные константы. Значения этих констант приняты равными $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$. Тогда систему уравнений (2а) и (2б) в случае отсутствия анизотропии в кристалле (т. е. при $\lambda_i^{\parallel} = \lambda_i^{\perp} = \lambda_i$) можно записать в следующей форме (верхние индексы безразмерных величин опущены):

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{B_1}{C_e(T_e)} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) \right] - \frac{B_3 g(T_e)}{C_e(T_e)} (T_e - T_i) + \frac{A(r, z, t)}{C_e(T_e)}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{B_2}{C_i(T_i)} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) \right] + \frac{B_4 g(T_e)}{C_i(T_i)} (T_e - T_i),$$
(10)

где

$$B_{1} = \frac{\lambda_{e}(T_{0})\alpha_{1}t_{0}}{C_{e}(T_{0})(\alpha_{2}r_{0})^{2}}, \quad B_{2} = \frac{\lambda_{i}(T_{0})\alpha_{1}t_{0}}{C_{i}(T_{0})(\alpha_{2}r_{0})^{2}},$$
$$B_{3} = \frac{g(T_{0})\alpha_{1}t_{0}}{C_{e}(T_{0})}, \quad B_{4} = \frac{g(T_{0})\alpha_{1}t_{0}}{C_{i}(T_{0})}.$$

Начальные и граничные условия (6)-(8) записываются в виде

$$T_{\beta}(r, z, 0) = 1;$$
 (11)

$$\frac{\partial T_{\beta}}{\partial r}\Big|_{r=0} = 0; \quad \frac{\partial T_{\beta}}{\partial z}\Big|_{z=0} = 0;$$

$$T_{\beta}(R_{\max}, z, t) = 1; \quad T_{\beta}(r, Z_{\max}, t) = 1,$$
(12)

где $\beta = i, e$.

Безразмерная объемная плотность мощности A(r, z, t) в уравнении (9) определяется выражением

$$A(r, z, t) = A_0 \exp(-\alpha_2 r) \exp\left[-\frac{\alpha_1^2}{2}(t - 0, 05)^2\right] \mu(z),$$
(13)

где $A_0 = bS_{\text{inel0}} \alpha_1 t_0 / (C_e(T_0)T_0).$

Можно сделать вывод, что представление A(r, z, t) в форме (13) по сравнению с выражением, приведенным в (3), имеет отличие. Множитель, зависящий от времени, в выражении (3) представлен как $\exp\left[-(t - t_0)^2/(2t_0^2)\right]$, а в выражении (13) — как $\exp\left[-(t - 5t_0)^2/(2t_0^2)\right]$. Из формулировки задачи вытекает, что функция источника A(r, z, t) при t = 0 также должна равняться нулю. Таким образом, введение коэффициента 5 в качестве множителя для t_0 позволяет значительно уменьшать значение этого зависящего от времени множителя в e^{12} раз. Это дает возможность сделать временную зависимость более реалистичной.

2.1. Однослойные мишени. При исследовании температурных эффектов в материалах после их облучения сильно ионизирующими быстрыми тяжелыми ионами возможны две постановки задачи:

 решение системы уравнений (9), (10) с начальными (11) и граничными (12) условиями при постоянных теплофизических параметрах, которые не зависят от температуры и имеют значения, соответствующие комнатной температуре;

 решение системы уравнений (9), (10) с начальными (11) и граничными (12) условиями с теплофизическими параметрами, которые зависят от температуры.

Теплофизические процессы в металлах, в том числе и в никеле, при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ были рассмотрены в работе [63].

Были взяты следующие теплофизические параметры никеля при комнатной температуре $T_0 = 300$ K:

$$\begin{split} C_e(T_0) &= 2,733 \cdot 10^{-2} \ \mathrm{Jm}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \quad C_i(T_0) &= 3,91 \ \mathrm{Jm}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \\ g(T_0) &= 4,05 \cdot 10^{12} \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \quad \lambda_e(T_0) &= 4,1 \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm} \cdot \mathrm{K}), \\ \lambda_i(T_0) &= 0,91 \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm} \cdot \mathrm{K}), \quad S_e(0) &= 1,157 \cdot 10^{-7} \ \mathrm{Jm}/\mathrm{cm}. \end{split}$$

Нелинейные параметры модели $C_e(T_e)$, $C_i(T_i)$, $g(T_e)$, $\lambda_e(T_e)$, $\lambda_i(T_i)$, нормированные на их значения при комнатной температуре $T_0 = 300$ K, имеют следующий вид [63]:

$$\begin{split} C_e(T_e) &= \left\{ \begin{array}{ll} T_e & \text{при } T_e < T_F, \\ 128,16 & \text{при } T_e > T_F, \end{array} \right. \\ \lambda_e(T_e) &= \left\{ \begin{array}{ll} \frac{0,973}{T_e} + 0,026T_e & \text{при } T_e < T_F, \\ 3,53 \cdot 10^{-4}T_e^{3/2} & \text{при } T_e > T_F, \end{array} \right. \\ C_i(T_i) &= \left\{ \begin{array}{ll} 0,876 + 0,128T_i - 0,667T_i^2 + 0,0023T_i^3 & \text{при } T_i < T_{\text{melt}}, \\ 1,393 & \text{при } T_i > T_{\text{melt}}, \end{array} \right. \end{split} \end{split}$$

$$\begin{split} \lambda_i(T_i) = &\begin{cases} 3.079 - 3.53T_i + 1.793T_i^2 - 0.3667T_i^3 + 0.0264T_i^4 & \text{при } T_i < T_{\text{melt}}, \\ 0.4528 & \text{при } T_i > T_{\text{melt}}, \end{cases} \\ g(T_e) = & \frac{1}{\lambda_e(T_e)}, \end{split}$$

где $T_F = 454,3$ — безразмерная температура Ферми; $T_{melt} = 5,75$ — безразмерная температура плавления никеля. Зависимость ионизационных потерь энергии $\mu(z)$ ионов урана ²³⁸U, нормированных на максимальное значение (S_{inel0}) , как функция безразмерной глубины в никеле представлена на рис. 18 (см. выражения (3) и (4)). Вычисления были выполнены с использованием программы TRIM-98 [61].

2.2. Двухслойные мишени. Для исследования тепловых процессов в двухслойных материалах при их облучении быстрыми тяжелыми ионами систему уравнений (9), (10) с начальными (11) и граничными (12) условиями следует решать со следующими условиями сопряжения на границе раздела двух материалов:

а) идеальный контакт:

$$T_{e,1}(r, z = H - 0, t) = T_{e,2}(r, z = h + 0, t),$$

$$T_{i,1}(r, z = H - 0, t) = T_{i,2}(r, z = h + 0, t),$$

$$\lambda_{e,1}(T_{e,1}) \frac{\partial T_{e,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} = \lambda_{e,2}(T_{e,2}) \frac{\partial T_{e,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z}, \quad (14)$$



Рис. 18. Зависимость ионизационных потерь энергии $\mu(z)$ ионов урана ²³⁸U в никеле, нормированных на максимальное значение ($S_{\rm inel0}$), от безразмерного пробега

$$\lambda_{i,1}(T_{i,1})\frac{\partial T_{i,1}(r,z=H-0,t)}{\partial z} = \lambda_{i,2}(T_{i,2})\frac{\partial T_{i,2}(r,z=H+0,t)}{\partial z}$$

где $0 < r < R_{\max}$, $0 < t < t_{\max}$. Эти условия означают непрерывность температуры и теплового потока на границе раздела между двумя материалами при z = H.

б) неидеальный контакт:

$$-\lambda_{e,1}(T_{e,1}) \frac{\partial T_{e,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} = \\ = \theta \left[T_{e,1}(r, z = H - 0, t) - T_{e,2}(r, z = H + 0, t) \right],$$

$$-\lambda_{e,2}(T_{e,2})\frac{\partial T_{e,2}(r,z=H+0,t)}{\partial z} = \\ = \theta \left[T_{e,1}(r,z=H-0,t) - T_{e,2}(r,z=H+0,t)\right], \quad (15)$$

$$\begin{split} &-\lambda_{i,1}(T_{i,1})\frac{\partial T_{i,1}(r,z=H-0,t)}{\partial z} = \\ &= \theta \left[T_{i,1}(r,z=H-0,t) - T_{i,2}(r,z=H+0,t)\right], \end{split}$$

$$-\lambda_{i,2}(T_{i,2}) \frac{\partial T_{i,2}(r,z=H+0,t)}{\partial z} = \\ = \theta \left[T_{i,1}(r,z=H-0,t) - T_{i,2}(r,z=H+0,t) \right],$$

где θ — эффективный коэффициент передачи энергии.

Далее предполагаем, что $R_p < Z_{\max} \leq l_p$, $H < R_p$, где R_p — длина проективного пробега иона; l_p — толщина второго слоя (подложки); R_{\max} — максимальный радиус удаления от траектории иона; Z_{\max} — максимальная глубина, превышающая длину проективного пробега иона. При $r > R_{\max}$ и $z > Z_{\max}$ температура решетки равна T_0 .

Случай двухслойного материала в виде подложки из вольфрама, покрытой слоем никеля толщиной 2 мкм (Ni(2 мкм)/W), при облучении быстрыми тяжелыми ионами ²⁰⁹Bi с энергией 710 МэВ при постоянных теплофизических параметрах и комнатной температуре был исследован в работе [74]. При комнатной температуре $T_0 = 300$ K взяты следующие теплофизические параметры для двухслойного материала мишени:

$$\begin{split} C_e^{\mathrm{Ni}}(T_0) &= 2,733 \cdot 10^{-2} \ \mathrm{Jk}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \quad C_i^{\mathrm{Ni}}(T_0) &= 3,91 \ \mathrm{Jk}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \\ g_{\mathrm{Ni}}(T_0) &= 4,05 \cdot 10^{12} \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \quad \lambda_e^{\mathrm{Ni}}(T_0) &= 4,1 \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm} \cdot \mathrm{K}), \\ \lambda_i^{\mathrm{Ni}}(T_0) &= 0,91 \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm} \cdot \mathrm{K}), \quad S_e(0) &= 1,157 \cdot 10^{-7} \ \mathrm{Jk}/\mathrm{cm}, \\ C_e^{\mathrm{W}}(T_0) &= 3,5 \cdot 10^{-2} \ \mathrm{Jk}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \quad C_i^{\mathrm{W}}(T_0) &= 2,71 \ \mathrm{Jk}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \\ g_{\mathrm{W}}(T_0) &= 1,24 \cdot 10^{12} \ \mathrm{Jk}/(\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{K}), \\ \lambda_e^{\mathrm{W}}(T_0) &= 5,25 \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm} \cdot \mathrm{K}), \quad \lambda_i^{\mathrm{W}}(T_0) &= 1,74 \ \mathrm{Bt}/(\mathrm{cm} \cdot \mathrm{K}). \end{split}$$

Пусть функции $A_v(r, z, t)$ — объемные плотности мощности, вносимой ионом, в обоих слоях в общем случае. Эти функции можно представить в виде наиболее часто используемых выражений [39,56,66–68]:

$$A_{v}(r, z, t) = b_{v} S_{\text{inel0}} \exp\left[\frac{-(t - t_{0v})^{2}}{2\sigma_{tv}^{2}}\right] \exp\left(-\frac{r}{r_{0v}}\right) \mu(z).$$
(16)

Рис. 19. Зависимость ионизационных потерь энергии $\mu(z)$ иона ²⁰⁹Ві с энергией 710 МэВ, нормированных на максимальное значение (S_{inel0}) ионизационных потерь энергии, как функция безразмерного проективного пробега для двухслойной структуры Ni(2 мкм)/W



Зависимость ионизационных потерь энергии $\mu(z)$ иона ²⁰⁹Ві с энергией 710 МэВ, нормированных на максимальное значение (S_{inel0}) ионизационных

потерь энергии, как функция безразмерного проективного пробега для двухслойной структуры Ni(2 мкм)/W представлена на рис. 19. Обычно разница между значениями ионизационных потерь энергии в материалах покрытия и подложки составляет не более одного порядка величины, тогда численные значения параметров t_{0v} , σ_{tv} и r_{0v} при v = 1 и v = 2 можно считать идентичными. Время t_0 достижения равновесного распределения, т.е. время свободного пробега δ -электронов со средней энергией $\varepsilon_e = \sqrt{Q_{e0}/(1,5\alpha + \beta)}$ (см. разд. 1) составляет $t_0 \approx (1-5) \cdot 10^{-15}$ с. Полуширина распределения по времени t принята равной $\sigma_{tv} = t_0$ [69]. Скорость экспоненциального спада или пространственная ширина возбужденной области с «горячими» электронами имеет значение $r_0 \leq 2,5$ нм [68] или $r_0 \approx 1$ нм [28].

Нормировочные множители b_v определяются из условий нормировки (5). Таким образом, нужно решить следующие задачи:

- а) задачу идеального контакта (9)-(12) и
- б) задачу с неидеальным контактом (9)-(12), (14).

При численном решении соответствующих уравнений (2а), (2б) для однослойного материала с начальными (6) и граничными (7), (8) условиями и для двухслойного материала с теми же начальными (6) и граничными (7), (8) условиями, учитывая условия сопряжения (связи) (14), (15) на границе раздела двух материалов, использовали явную схему (см., например, монографии [70–73]).

2.3. Численный анализ системы уравнений. Результаты и обсуждение. Анализ временных и координатных зависимостей температур электронного газа T_e и решетки T_i для одного и двух слоев был выполнен с использованием системы уравнений (2a), (2б). На рис. 20 представлены временные зависимости температур электронного газа (*a*) и решетки (*б*) на поверхности образца



Рис. 20. Зависимости от времени температуры электронного газа (*a*) и решетки (*б*) на поверхности z = 0 облучаемого ионами урана никеля для различных расстояний от оси трека в рамках линейной модели термопика (штрихованной прямой выделена температура плавления T_{melt}): $I - r_1 = 0$; $2 - r_2 = 50$ Å; $3 - r_3 = 100$ Å; $4 - r_4 = 150$ Å

никеля, облученной ионами урана, на различных расстояниях от траектории иона: r = 0; 50; 100; 150 Å, вычисленные в рамках линейной двухтемпературной модели термического пика. На рис. 21 приведены зависимости от времени



Рис. 21. Зависимости от времени температуры электронного газа (*a*) и решетки (*б*) на поверхности z = 0 облучаемого ионами урана никеля для различных расстояний от оси трека в рамках нелинейной модели термопика (штрихованной прямой выделена температура плавления T_{melt}): $I - r_1 = 0$; $2 - r_2 = 50$ Å; $3 - r_3 = 100$ Å; $4 - r_4 = 150$ Å



Рис. 22. Зависимости электронных (*a*, *b*) и решеточных (*б*, *c*) температур в слоях от глубины *z* (глубина раздела слоев $H = 20 \cdot 10^3$ Å). Обозначения кривых *1–4* такие же, как на рис. 21



Рис. 23. Зависимости от времени температуры электронного газа (*a*) и решетки (б) на поверхности образца первого слоя никеля и второго слоя вольфрама (*в*, *г*) на различных расстояниях от траектории ($H = 2 \cdot 10^4$ Å): I - r = 0; 2 - r = 25; 3 - r = 50 Å

температур электронного газа (a) и решетки (б) на поверхности никеля при облучении ее ионами урана на различных расстояниях от траектории иона: r = 0; 50; 100; 150 Å, вычисленные в рамках нелинейной двухтемпературной модели термического пика. Из сравнения этих зависимостей (рис. 20 и 21) видно, что температуры электронного газа T_e и решетки T_i с учетом зависимости от температуры теплофизических параметров намного меньше, чем при использовании постоянных теплофизических параметров, взятых при комнатной температуре. Нелинейная модель определяет более медленные тепловые процессы, чем линейная. Отметим следующие результаты.

1. Температура кристаллической решетки в линейном случае при r = 0, z = 0 превышает температуру плавления через относительно малый промежуток времени, а именно: при $t > 4,5 \cdot 10^{-15}$ с, тогда как в нелинейном случае этот процесс начинается после $t > 1,8 \cdot 10^{-13}$ с.

2. Температуры электронного газа и решетки достигают одинаковых значений при $t = 0.25 \cdot 10^{-13}$ с в линейной модели и при $t = 3.06 \cdot 10^{-13}$ с в нелинейной модели.

3. Временной интервал δt , в течение которого температура кристаллической решетки в точке r = 0, z = 0 становится выше температуры плавления, равен $\delta t = 13,45 \cdot 10^{-13}$ с в линейной модели и $\delta t = 15,4 \cdot 10^{-13}$ с в нелинейной модели.

Зависимости электронной и решеточной температур в слоях Ni и W двухслойной структуры Ni(2 мкм)/W вдоль проективного пробега иона от глубины z для двух моментов времени: $t_1 = 3 \cdot 10^{-15}$ с и $t_2 = 6 \cdot 10^{-15}$ с, и для четырех расстояний от оси трека иона: r = 0; 25; 50 и 75 Å, представлены на рис. 22 (соответственно кривые *1-4*) [74]. Видно, что профиль температуры очень похож на профиль ионизационных потерь энергии быстрого тяжелого иона (см. рис. 19). В то же время температура решетки T_i в никелевом слое выше, чем температура в подложке из вольфрама, и растет быстрее, учитывая корреляцию коэффициентов, характеризующих тепловые процессы. Необходимо указать, что в момент времени $t_2 = 6 \cdot 10^{-15}$ с температура в слое Ni выше температуры плавления $T_{melt,Ni} = 5,75 \cdot 300$ K.

Временные зависимости температур электронного газа и решетки на различных расстояниях от траектории иона, r = 0; 25; 50 Å, представлены на рис. 23. Видно, что для всех значений радиуса температура решетки никеля и вольфрама при определенных временах может превышать температуру плавления как никеля, $T_{melt.Ni}$, так и вольфрама, $T_{melt.W} = 11, 3 \cdot 300$ K.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Для моделирования динамики фазовых переходов плавления и затвердевания используется модель задачи Стефана для фазовых переходов первого рода. Решение этой задачи сводится к системе уравнений (2a), (2б) в области с неизвестной подвижной поверхностью $\xi = \xi(r, z, t)$, которая разделяет твердую и жидкую фазы. Эта поверхность — так называемая изотермическая поверхность, где

$$T_{i,\nu}(r,z,t) = T_{\text{melt},\nu},\tag{17}$$

где $T_{\text{melt},\nu}$ — температура плавления.

Скорость распространения изотермической поверхности можно вычислить с помощью следующего выражения [75]:

$$V = -\frac{1}{H_{\nu}^{T}} \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial t},\tag{18}$$

где $H_{\nu}^{T} = \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial n} = |\nabla T_{i,\nu}|.$

На межфазной поверхности, между расплавом и твердой фазой, должно выполняться так называемое условие Стефана (см. обзор [76]):

$$\lambda_{i,\nu,1} |\nabla T_{i,\nu,1}| - \lambda_{i,\nu,2} |\nabla T_{i,\nu,2}| = \pm L_{\nu} \rho_{\nu,2} V, \tag{19}$$

где индекс 1 соответствует жидкой фазе, а индекс 2 — твердой фазе; L_{ν} — удельная теплота плавления материала (L_1 относится к материалу покрытия, т. е. первого слоя, L_2 — материалу подложки, т. е. второго слоя), $\rho_{\nu,2}$ — плотности материалов. Знаки надо брать так, чтобы они соответствовали рассматриваемой задаче. Таким образом, задачу фазовых переходов мы можем решать, добавляя условие (19) к задачам 1) и 2) предыдущего раздела.

Численный метод решения задачи Стефана (фазовый переход типа плавление-затвердевание) был развит в работах [77,78], а в [79,80] изучен процесс испарения для металлического образца, облучаемого сильноточным источником ионов углерода.

Ясно, что испарение материала возможно только с поверхности первого слоя, а нагревание второго слоя (подложки) до температур испарения может вызвать, например, частичное отслаивание первого слоя от второго за счет возникающего давления во втором слое на поверхности раздела. Это значит, что такой процесс будет напоминать явления типа флекинга, т.е. отслоения материала от поверхности первого слоя, особенно при его небольшой толщине по сравнению с длиной пробега тяжелого иона.

Для оценок скорости испарения атомов с поверхности твердого тела в зависимости от температуры поверхности можно использовать выражение, приведенное в работе [81], в следующем виде:

$$\frac{dn}{dt} = 3.5 \cdot 10^{22} v P_1(T_{1,1}) / \{M_i T_{1,1}\}^{1/2} \text{ at.} / (\text{cm}^2 \cdot \text{c}),$$

где v — вероятность прилипания атома металла к поверхности (sticking probability); $P_1(T_{1,1})$ — равновесное давление газа (Topp) при температуре $T_{1,1}(K)$; M_1 — масса атома решетки первого слоя. Обычно [81] значение параметра $v \approx 0,6-0,9$. При значении параметра v = 1 в этой работе представлены зависимости давления испарения и коэффициенты испарения для ряда материалов (W, Ta, Nb, Mo, C, V, Ni, Fe и Cr). Равновесное давление паров для металлов хорошо известно [81] и может быть записано как

$$P(T) = P_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right),$$

где $\triangle H$ — теплота сублимации, слабо зависящая от температуры [81,82].

В работе [34] развита модель распыления на основе вспышки упругих столкновений, которая далее называется стандартной теорией вспышки [83]. Выражение для скорости испарения атомов с поверхности, введенное в работе

[31], использовано для объяснения экспериментальных результатов в области высоких ионизационных потерь энергии в [38]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = N \left[\frac{k_B T(r,t)}{2\pi M_1} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{U_0}{k_B T(r,t)} \right),$$

где N — число атомов в единице объема в жидкой фазе первого слоя; U_0 — энергия связи атомов на поверхности жидкости, которая может быть оценена как ~ 1 эВ [38,84].

При торможении быстрого тяжелого иона в конденсированных средах такая частица теряет свою энергию на возбуждение электронов и ионизацию атомов решетки. Удельные неупругие потери энергии ускоренного иона $E_{\nu}^{\rm inel}(z) = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\rm inel,\nu}$ составляют десятки кэВ/нм, а плотности возбужденных электронов в цилиндрической области диаметром 100 Å могут быть порядка 10^{20} см⁻³ или выше. Процессы релаксации энергии возбужденных электронов следующие: электрон-решеточная релаксация (время релаксации $\tau_{\rm th} \approx 10^{-15} - 10^{-13}$ с); электрон-решеточная релаксация (время релаксации $\tau_L \approx 10^{-12}$ с). Необходимо указать, что введение термодинамического понятия температуры решетки и описание процессов перераспределения температуры с помощью уравнения теплопроводности с равновесными значениями термодинамических параметров возможно в случае, если атомы решетки образуют статистически-равновесный ансамбль, т.е. при временах более 10^{-12} с.

Если характерное время меньше 10^{-12} с, следует использовать иную температурную модель, учитывающую волновой характер переноса тепловой энергии (см., например, [85–87]).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В первом разделе работы были представлены экспериментальные результаты исследования изменений структуры поверхности и объемных свойств чистых металлов: поликристаллического Ni и монокристаллического W, металлических сплавов Fe₇₂Cr₁₈Ni₁₀ и Fe₇₂Cr₁₈Ni₁₀ Ti (хромоникелевых нержавеющих сталей), аморфных сплавов (на примере Ni₅₈Nb₄₂), высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) и серии полупроводниковых монокристаллов (Si, GaAs, InP) при их облучении быстрыми тяжелыми ионами при относительно малых флюенсах (флюенсы ионного облучения составили $Ft < 5 \cdot 10^{12}$ см⁻²) для изучения структуры и поведения в области изолированного трека, т. е. без перекрытия, и при высоких флюенсах облучения ($Ft \ge 10^{14}$ см⁻² и более высоких) для исследования коллективных эффектов,

вызванных быстрыми тяжелыми ионами. На основе представленных данных можно сделать следующие выводы.

Коэффициенты распыления поликристаллических и монокристаллических материалов при их облучении быстрыми тяжелыми ионами в диапазоне неупругих потерь энергии, не прерывающих пороговое значение, мало отличаются [9,47–53,60,64] от прогнозов, сделанных на основе упругой каскадной модели [29–31].

Монокристаллические твердые тела (металлы, полупроводники) со структурами, близкими к совершенным, благодаря рассеянию энергии, переданной бомбардирующим ионом электронам в объеме вокруг траектории тяжелого иона, имеют коэффициенты распыления, согласующиеся с теорией каскадной модели упругого рассеяния. При этом коэффициенты распыления $S_{\rm sput}^{\rm el} \approx 1-3$ ат./ион.

Границы между отдельными зернами, обладающие повышенной дефектностью, имеют коэффициенты распыления, которые на несколько порядков величины выше характерных значений, предсказанных каскадной моделью упругого рассеяния. Коэффициенты распыления могут достигать $S_{\rm sput}^{\rm inel} \ge 10^3$ ат./ион.

Распыление металлов (Ni, W) и хромоникелевых нержавеющих сталей ($Fe_{72}Cr_{18}Ni_{10}$ и $Fe_{71}Cr_{18}Ni_{10}Ti$) было исследовано детально. Для измерения коэффициента распыления поликристаллического никеля был использован так называемый метод «ступеньки».

Распыление модельного кристалла высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) было исследовано при различных флюенсах после его облучения ионами 86 Kr (с энергиями 253 и 245 МэВ) и 209 Bi (с энергией 710 МэВ).

Было показано, что отдельный кристаллит ВОПГ не имеет каких-либо особенностей после его облучения ионами ⁸⁶Kr (на поверхности кристаллита нет дефектов, вызванных прохождением ионов криптона), однако границы между разориентированными кристаллитами распыляются значительно.

Показано, что плотность кратеров на поверхности ВОПГ после его облучения ионами ²⁰⁹Ві с высоким уровнем неупругих потерь энергии имеет значение в пределах 2–3 % от полного флюенса ионов висмута. Это означает, что распыление в этом случае имеет вероятностный стохастический характер и может объясняться моделью тепловых флуктуаций.

Были изучены изменения поверхности монокристалла кремния после его облучения ионами ⁸⁶Kr при высоком флюенсе. Коэффициент распыления образцов кремния был оценен с использованием сравнительного анализа поверхностных эффектов при упругом распылении кремния.

Структуры облученных поверхностей монокристаллов GaAs и InP были изучены с применением методов оптической, электронной сканирующей и атомно-силовой микроскопий. Оба этих монокристалла были облучены дважды: вначале электронами с энергиями 4 и 23 МэВ, а затем ионами криптона с энергией 253 МэВ. Кроме того, поперечное сечение двукратно облученного монокристалла GaAs по методу поперечного сечения типа «cross-section» было исследовано вдоль длины проективного пробега бомбардировавшего иона висмута с энергией 710 МэВ. Установлено, что происходят процессы образования глубоких трещин на поверхности обоих полупроводников после их облучения ионами криптона с высоким флюенсом (см. рис. 16, 17). От поверхности монокристалла InP происходит отслоение значительных поверхностных слоев, которые в целом при этом значительно распухают, кроме того, на поверхности образуются структуры, напоминающие отдельные зародыши кристаллической фазы (см. рис. 17). В зоне максимума дефектообразования в монокристалле GaAs образуется область с шириной до 5-6 мкм с сильно развитой дефектной структурой, а именно с трещинами (см. рис. 15, б, в). Наличие трещин свидетельствует о значительных механических напряжениях в данном слое, превышающих предел прочности и вызывающих деформации с образованием трещин. Предложена модель, объясняющая наблюдаемые эффекты.

Общий вывод, который можно сделать на основе экспериментальных исследований, следующий: неупругие потери энергии быстрых тяжелых ионов оказывают сильное влияние на распыление металлов, металлических и аморфных сплавов, ВОПГ и монокристаллов Si, GaAs и InP, особенно в материалах с высоким уровнем концентрации дефектов.

Высокий уровень распыления полупроводниковых монокристаллов и металлов и некоторых других материалов необходимо учитывать при исследовании глубинной имплантации примесей при высоких флюенсах облучения, а также при комбинированном облучении различными ядерно-физическими излучениями, например, осколками деления и высокоэнергетическими электронами.

Во втором разделе работы представлены результаты численного анализа температур электронного газа и кристаллической решетки в никелевой мишени при ее облучении ионами урана с энергией 700 МэВ и в двухслойном материале Ni(2 мкм)/W при его облучении ионами ²⁰⁹Bi с энергией 710 МэВ, полученные с использованием модели термического пика [12,14–17,28,36,38, 39,42–44,56,57,63].

Показано, что в случае использования никеля при его облучении ионами урана с энергией 700 МэВ температура в области вокруг траектории тяжелого иона может быть выше температур плавления и испарения, т. е. возможны фазовые переходы типа плавления и испарения. При учете температурной зависимости теплофизических параметров тепловые процессы в кристаллической решетке происходят намного медленнее, чем при постоянных теплофизических параметрах. Это приводит к резкому снижению достигаемых температур в области трека иона. Максимальные размеры объема никеля, где температура выше температуры плавления, практически одинаковы в линейном и нелинейном случаях и равны $D_{\max}^{melt} \approx 230$ Å; $Z_{\max}^{melt} \approx 140 \cdot 10^3$ Å (D_{\max}^{melt} — оценка максимального диаметра и Z_{\max}^{melt} — оценка максимальной глубины, на которой может происходить плавление). Таким образом, если трек иона образуется, то его размеры не могут быть больше этих значений. Для более точной оценки необходимо решить систему уравнений (9), (10) с учетом фазовых переходов, т.е. решить задачу Стефана.

В случае облучения двухслойных материалов Ni(2 мкм)/W ионами ²⁰⁹Bi с энергией 710 МэВ фазовый переход плавления имеет место в обоих слоях, но испарение, естественно, возможно только с поверхности первого слоя.

Характерные размеры областей (объемов) с фазовыми переходами можно выделить на основе полученных результатов. Уровень температуры поверхности, равный температуре плавления, которая имеет вид цилиндрического параболоида, достигается при следующих значениях координат: $D_{\max}^{\text{melt}}|_{z=0} \approx 222$ Å, $D_{\max}^{\text{melt}}|_{z=2\cdot 10^4 \text{\AA}} \approx 219$ Å, $Z_{\max}^{\text{melt}}|_{r=0} \approx 7,2\cdot 10^4$ Å. Процессы плавления могут также происходить в этом объеме, кроме того, тут может иметь место взаимное интенсивное перемешивание компонентов. Аналогичная поверхность для температуры испарения имеет размеры $D_{\max}^{\text{evap}}|_{z=0} \approx 149$ Å, $D_{\max}^{\text{evap}}|_{z=2\cdot 10^2 \text{\AA}} \approx 147$ Å.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 06-01-00228 и № 05-01-00645-а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Neuman R. Scanning probe microscopy of ion-irradiated materials // Nucl. Instr. Meth. B. 1999. V. 151, No. 1–4. P. 42–55.
- 2. *Toulemonde M.* Nanometric phase transformation of oxide materials under GeV energy heavy ion irradiation // Ibid. V. 156, No. 1–4. P. 1–11.
- 3. Баранов И.А. и др. Неупругое распыление твердых тел // УФН. 1988. Т. 156, № 3. С. 476-511.
- Chanel M. et al. Experimental investigations of impact-induced molecular desorption by 4.2 MeV/u Pb ions // Materials of Particle Accelerator Conf., Chicago, USA, June 18–22, 2001. CERN/PS 2001-040 (AE).
- 5. Баранов И.А., Кривохатский А. С., Обнорский В. В. Механизм распыления материалов многозарядными тяжелыми осколками деления // ЖТФ. 1981. Т. 51, № 12. С. 2457–2475.
- Nagaraja P. S. et al. Ion-induced craters on the surface of benzoyl glycine single-crystals studied by scanning force microscopy // Nucl. Instr. Meth. B. 2001. V. 185. P. 66–70.
- Pawlak F. et al. Carbon sputtering of polymer-like amorphous carbon by swift heavy ions // Nucl. Instr. Meth. B. 1999. V. 151. P. 140–145.
- Ghosh S. et al. Structure dependent electronic sputtering of a-C:H films by swift heavy ions // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 190. P. 164–168.
- 9. Дидык А. Ю. Радиационное влияние тяжелых ионов на хромоникелевую сталь при высоких температурах // Металлы. 1995. № 3. С. 128–135.

- Baranov I. et al. Desorption of nanoclusters (2–40 nm) from nanodispersed metal and semiconductor layers by swift heavy ions // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 193. P. 798–803.
- 11. Baranov I. et al. Sputtering of nanodispersed targets of gold and desorption of gold nanoclusters (2–100 nm) 6 MeV Au5 cluster ions // Ibid. P. 809–815.
- 12. Лифици И.М. О термических вспышках в средах, подвергнутых ядерным облучениям // Докл. АН СССР. 1956. Т. 109, № 6. С. 1109–1111.
- Fink D., Chadderton L. T. Ion-solid interactions: current status, new perspectives // Rad. Eff. & Def. in Solids. 2005. V. 160, No. 3–4. P. 67–83.
- Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В. Теория релаксационных изменений в металлах // АЭ. 1959. Т. 6. С. 391–402.
- Каганов М. И., Лифици И. М., Танатаров Л. В. Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. Т. 31, № 2(8). С. 32–237.
- 16. Гегузин Я. Е., Каганов М. И., Лифици И. М. Длина свободного пробега электрона при образовании траектории заряженной частицы в металле // ФТТ. 1973. Т. 15, № 8. С. 2425–2428.
- 17. Dufour C. et al. Modifications Induced by Irradiation in Glasses / Ed. P. Massoldi. Amsterdam, 1992. P. 61.
- 18. Milani P., Iannotta S. Cluster Beam Syntesis of Nanostructured Materials. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1999. 190 p.
- Henry J. et al. Track in MoS₂ irradiated with 20 MeV fullerenes and 1 GeV lead ions // Rad. Meas. 1997. V. 28, No. 1–6. P. 71–76.
- 20. *Meiwes-Broer K.-H.* Metal Clusters at Surfaces. Berlin: Springer-Verlag, 2000. 145 p. (and references therein).
- Popok V. N., Prosolovich S. V., Campbell E. E. B. Surface erosion under cluster ion implantation: crater and hillock formation // Nucl. Instr. Meth. B. 2003. V. 207, No. 2. P. 145.
- 22. Colder A. et al. Latent track formation in germanium irradiated with 20, 30 and 40 MeV fullerenes in electronic regime // Nucl. Instr. Meth. B. 2001. V. 174. P. 491–498.
- Dunlop A., Della-Negra S., Jensen J. Track induced in CaF₂ by MeV cluster irradiation // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. V. 5. P. 4573–4584.
- Henry J., Jaskiewich G., Dunlop A. Characterization by various microscopic technique of the damage created by MeV C₆₀ ions in amorphous Ni3B // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 146. P. 222–232.
- Della-Negra S., Dunlop A., Henry J. Craters, bumps and onion structures in MoS2 irradiated with MeV C₆₀ ions // Ibid. P. 405–411.
- Jaskiewich G., Della-Negra S., Dunlop A. Latent track formation in silicon irradiated by 30 MeV fullerenes // Ibid. P. 302–308.
- Dunlop A. et al. Track separation due to dissociation of MeV C₆₀ inside a solid // Nucl. Instr. Meth. B. 1997. V. 132. P. 93–108.
- Yavlinskii Yu. N. Track formation in amorphous metals under swift heavy ion bombardment // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 146. P. 142–146.
- 29. Smentkowski V. S. Trends in sputtering // Progress in Surface Sci. 2000. V. 64. P. 1-58.
- 30. Sigmund P. Sputtering by ion bombardment: Theoretical concepts. N.Y.: Springer-Verlag, 1981.
- Sigmund P., Claussen C. Sputtering from elastic-collision spikes in heavy-ion-bombarded metals // J. Appl. Phys. 1981. V. 52(2). P. 990–993.

- Facsko S. et al. Ion-induced formation of regular nanostructures on amorphous GaSb surfaces // Appl. Phys. Lett. 2002. V. 80, No. 1. P. 130–132.
- Ludwig F. et al. Si(100) surface morphology evolution during normal-incidence sputtering with 100–500 eV Ar⁺ ions // Ibid. V. 81, No. 15. P. 2770–2772.
- 34. Van der Berg N.G. et al. Argon bombardment-induced topography and sputter yield on Si_{0.84}Ge_{0.16} // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 193. P. 739–744.
- Datta D. et al. Evolution of surface morphology of ion sputtered GaAs (100) // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 193. P. 596–602.
- Комаров Ф. Ф. Дефекты и образование треков в твердых телах, облученных ионами сверхвысоких энергий // УФН. 2003. Т. 46(12). С. 1253–1282.
- Комаров Ф. Ф., Новиков А. П., Буренков А. Ф. Ионная имплантация. Минск: Изд-во Бел. гос. ун-та, 1994. 249 с.
- Berthelot A. et al. Irradiation of tin oxides nanometric powder with swift heavy ions // Nucl. Instr. Meth. B. 2000. V. 166–167. P. 927–932.
- Дидык А. Ю., Робук В. Н., Семина В. К. Температура трека тяжелого иона с высоким уровнем неупругих потерь энергии в материалах в модели термического пика. Сообщ. ОИЯИ Р17-2003-30. Дубна, 2003. 34 с.
- Waiblinger M. et al. Electrically conducting ion tracks in diamond-like carbon films for field emission // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. 239–240.
- Zollondz J.-H. et al. Conductivity of ion tracks in diamond-like carbon films // Diamond and Related Materials. 2003. V.12. P.938–941.
- Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M. Ion explosion spike mechanism for formation of chargedparticle tracks in solids // J. Appl. Phys. 1965. V. 36, No. 11. P. 3645–3652.
- Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M. Nuclear Track in Solids. Los Angeles: Univ. of California, 1975.
- 44. Yavlinskii Yu. N. // Rad. Eff. & Def. in Solids. 2000. V. 153. P. 75-91.
- 45. Акапьев Г. Н. и др. Распыление золота ионами криптона в области неупругих потерь энергии // ЖТФ. 1998. Т. 68, № 1. С. 134–135.
- Mieskes H.D. et al. Measuring sputtering yields of high energy ions on metals // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 146, No. 1–4. P. 162–171.
- Didyk A. Yu. et al. Changes of surface structure on Ni, W and chromium-nickel steel, irradiated with swift krypton ions // J. Adv. Mater. 2001. No. 1. P. 58–64.
- Cheblukov Yu. N. et al. Sputtering of metals by heavy ions in the inelastic energy loss // Vacuum. 2002. V. 66, No. 2. P. 133–136.
- 49. Cheblukov Yu. N. et al. The influence of the defect structure on the surface sputtering of metals under the irradiation of swift heavy ion in the inelastic energy loss region // Nukleonika. 2004. V. 49, No. 1. P. 15–21.
- Didyk A. Yu. et al. The behaviour of amorphous alloys under swift heavy ion irradiation at room temperature // Nukleonika. 2005. V. 50, No. 4. P. 149–152.
- 51. Дидык А. Ю. и др. Изучение эффекта воздействия ионов криптона с энергией 303 МэВ на высокоориентированный пиролитический графит // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26, № 17. С. 1–5.
- Cheblukov Yu. N. et al. Surface structure changes of high oriented pyrolytic graphite under influence of swift heavy ions // J. Adv. Mater. 2001. No. 5. P. 42–45.
- 53. Дидык А.Ю. и др. Эффекты поверхностной модификации и образование треков в кремнии при облучении быстрыми тяжелыми ионами // Поверхность. 2005. № 6. С. 53–55.

- Furuno S. et al. Tracks of high energy heavy ions in solids // Nucl. Instr. Meth. B. 1996. V. 107, No. 1–4. P. 223–226.
- Izui K., Furuno S. // Proc. of the 11th Intern. Congress on Electronic Microscopy (Kyoto) / Eds. T. Imura, S. Maruse and T. Suzuki. The Jap. Soc. of Electron Microscopy, 1986. P. 14362.
- Toulemonde M., Dufour C., Paumier E. Transient thermal process after a high-energy heavyion irradiation of amorphous metals and semiconductors // Phys. Rev. B. 1992. V. 46, No. 22. P. 1436–14369.
- 57. Szenes G. General features of latent track formation in magnetic insulators irradiated with swift heavy ions // Phys. Rev. B. 1995. V. 51, No. 13. P. 8096–8029.
- 58. Herre O. et al. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 4832.
- 59. Gaiduk P. I., Komarov F. F., Wesch W. Damage evolution in crystalline InP during irradiation with swift Xe ions // Nucl. Instr. Meth. B. 2000. V. 164–165. P. 377–383.
- 60. Власукова Л.А. и др. Влияние электронного и ионного облучения быстрыми ионами криптона на распухание и распыление монокристалла InP // Поверхность. 2006. № 6. С. 50–58.
- 61. Biersack J. P., Haggmark L. G. // Nucl. Instr. Meth. B. 1980. V. 174. P. 257.
- 62. Trautmann C. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 191. P. 144.
- Wang Z. G. et al. The Se sensitivity of metals under swift-heavy-ion irradiation: a transient thermal process // J. Phys.: Condens. Matter. 1994. V. 6. P. 6733–6750.
- 64. Didyk A. Yu. et al. Surface structure changes of InP and GaAs single crystals irradiated with high energy electrons and swift heavy ions // Nukleonika. 2006. V. 51, No. 2. P. 105–110.
- Жернов А. П., Инюшкин А. В. Кинетические коэффициенты в кристаллах с изотопическим беспорядком // УФН. 2002. Т. 172, № 5. С. 573–599.
- 66. Амирханов И.В. и др. Численное моделирование температурных эффектов в материалах при облучении тяжелыми ионами в рамках уравнений теплопроводности для электронов и решетки. Препринт ОИЯИ P11-2004-165. Дубна, 2004. 15 с.
- 67. Dufour C. et al. // Rad. Eff. & Def. in Solids. 1993. V. 126. P. 119.
- Waligorski M. R. P., Hamm R. M., Katz R. The radial distribution of dose around the path of heavy ion in liquid water // Nucl. Tracks and Rad. Meas. 1986. V. 82. P. 356–361.
- Bitensky I. S., Dimirev P., Sundqvist D. U. R. On model of fullerene formation from polymer under MeV ion impact // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 92. P. 356–361.
- 70. Самарский А.А. Теория разностных схем. М., 1983. С. 258-276.
- 71. Самарский А.А., Гулин А.В. Стабильность разностных схем. М., 1973. С. 308-338.
- 72. Турчак Л. И. Основы численных методов. М.: Наука, 1987. С. 277-284.
- 73. Самарский А.А. Введение в дифференциальные методы. М., 1982. С. 232-259.
- 74. Амирханов И.В. и др. Применение модели термического пика для расчета температуры в двухслойных структурах вдоль проективного пробега тяжелого иона высокой энергии. Препринт ОИЯИ Р11-2005-83. Дубна, 2005. 14 с.
- 75. Лыков А. В. Тепломассообмен. М.: Энергия, 1972. 561 с.
- 76. Карслоу Г., Эгер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 488 с.
- 77. Амирханов И.В. и др. Численное моделирование фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными источниками ионов. Сообщ. ОИЯИ P11-2001-164. Дубна, 2001. 14 с.
- Amirkhanov I. V. et al. Influence of the source form in the model of phase moves in metals exposed to pulsed ion beam // J. Comp. Methods in Sci. and Engin. 2004. V. 2, No. 3. P. 1–3.

- 79. Амирханов И.В. и др. Численное моделирование испарения металлов под действием импульсных ионных пучков. Препринт ОИЯИ Р11-2004-110. Дубна, 2004. 17 с.
- Amirkhanov I. V. et al. Numerical simulation of metal evaporation, under action of pulsed ion beams // Crystallograp. Rep. 2004. V. 49, Suppl. 1. P. S123–S128.
- Behrisch R. Evaporation for heat pulses on Ni, Mo, W and ATJ graphite as first wall materials // J. Nucl. Mater. 1980. V. 93–94. P. 498–504.
- 82. Hultgren P. et al. Selected values of thermodynamic properties of metals and alloys. Willey, 1972.
- Jakas M. Fluid dynamics calculation of sputtering // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 193. P. 723– 733.
- 84. Methfessel M., Hennig D., Scheffer M. Trends of the surface relaxation, surface energies and work functions of 4d transition metals // Phys. Rev. B. 1990. V. 46, No. 8. P. 4816–4829.
- 85. Глушцов А. И. и др. Локальные тепловые процессы при торможении быстрых заряженных частиц в полупроводниковых кристаллах // Докл. АН БССР. 1987. Т. 31, № 7. С. 609–611.
- Weymann H.D. Finite speed of propagation in heat conduction, diffusion, and viscous shear motion // Am. J. Phys. 1967. V.35, No.6. P. 488–496.
- 87. Новиков А. П. и др. Локальные тепловые и акустические процессы при торможении быстрых заряженных частиц в кристаллах // Вестн. БГУ. 1992. Сер. 1. № 1. С. 10–13.
- Фиалков А. С. Углерод, межслоевые соединения и композиты на его основе. М.: Аспектпресс, 1997. 505 с.