

Раздел первый

ФИЗИКА РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ И ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

УДК 539.1.043

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ОБЛАСТЕЙ ВИДОИЗМЕНЕННОГО ВЕЩЕСТВА ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ТЯЖЕ- ЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ СФЕРИЧЕСКИХ ТРЕКОВ

*А.Б. Демчишин**, *А.Ю. Дидык***, *П.А. Селищев**

**Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина*

E-mail: ma3cs7@gmail.com, selyshchev@mail.univ.kiev.ua;

***Объединенный институт ядерных исследований,*

Дубна, Московская область, Россия

E-mail: didyk@jinr.ru

Прохождение тяжелых ионов высоких энергий в твердом теле создает вдоль их траекторий области с измененной структурой материала (треки). Треки различных ионов могут пересекаться, формируя сложную структуру. При помощи химической обработки можно удалить модифицированное вещество и создать разветвленную структуру полостей, что значительно увеличивает площадь облучаемой поверхности. В работе моделировалось образование структуры областей модифицированного вещества (или системы полостей, если модифицированное вещество вытравлено) в результате стационарного воздействия ионами высоких энергий. Полагалось, что каждый ион создает свой трек; треки имеют сферическую форму и их образование в любой точке образца равновероятно. Положения треков выбирались случайным образом с использованием метода Монте-Карло. В результате проведенного моделирования найдена зависимость площади эффективной поверхности образца, подвергаемой облучению, и доли модифицированного вещества от флюенса и от размера трека. Установлено, что зависимость эффективной площади поверхности от времени имеет ярко выраженный максимум, положение которого определяется величиной трека.

ВСТУПЛЕНИЕ

Прохождение тяжелых ионов высоких энергий в твердом теле создает вдоль их траекторий области с измененной структурой материала (треки). При этом может формироваться как квазинепрерывный, так и прерывистый трек. Например, прерывистые треки формируются в $NiZr_2$, когда скорость выделения энергии на электронные возбуждения превышает $40 \text{ кэВ}\cdot\text{нм}^{-1}$ [1]. Эффективный диаметр трека может достигать величины до нескольких нанометров (например, ионы Pb и U вдоль своей траектории в Bi создают цилиндрические треки с радиусом $r = 20 \text{ нм}$ [2,3]). В результате облучения ксеноном в InP создаются вытянутые дефекты, имеющие вид цепочки сфер, расположены они вдоль траектории ионов на глубине $35\dots 100 \text{ нм}$ и $7\dots 10 \text{ мкм}$ с диаметром $7\dots 15 \text{ нм}$ [4]. Весьма иллюстративными и интересными являются результаты работы [5], в которой методом микроскопии высокого разрешения в монокристаллическом GeS , имплантированном тяжелыми ионами с энергиями $5,9\dots 13 \text{ МэВ}\cdot\text{а.е.м}^{-1}$, выявлены скрытые эллиптические треки размером $21,8 \times 15 \text{ нм}$.

При помощи химической обработки возможно в ряде случаев удалить модифицированное вещество (например, для $Y_3Fe_5O_{12}$, $BaFe_{12}O_{19}$, $NiFe_2O_4$ и $MgFe_2O_4$ [6]). Это приводит к образованию приповерхностной пористой структуры и значительному

увеличению площади поверхности материала. Таким образом, создается материал с повышенными абсорбиционными свойствами.

В работе при помощи компьютерного моделирования исследована динамика изменения эффективной поверхности, с которой связывают абсорбиционные свойства материалов, в процессе образования треков. Найдена зависимость площади поверхности облученного образца от флюенса и размеров трека.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Облучаемый образец моделировался кубом с ребром, равным 100 нм . Одна из граней куба подвергалась стационарному радиационному воздействию. Плотность потока налетающих ионов равна $10^{13} \text{ м}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}$. Полагалось, что каждый налетающий ион создает трек, т.е. треки в образце создаются через $0,1 \text{ с}$. Каждый трек имеет форму сферы. При расчетах радиусы сферы варьировались в диапазоне $1,5\dots 7,5 \text{ нм}$.

Положения треков в материале моделировались случайным образом с использованием метода Монте-Карло. При этом рассматривалось равновероятное распределение треков в объеме образца.

По мере облучения области модифицированного вещества отдельных треков перекрываются, вследствие чего форма области видоизмененного вещества усложняется, образуя разветвленную структуру.

Для расчета площади поверхности, ограничивающей области модифицированного вещества и имеющих выход к грани, подвергнутой облучению, и в общем для расчета объема всего множества создаваемых сферических полостей и их кластеров используется метод включений-исключений, который реализуется формулой

$$\left| \bigcup_i S_i \right| = \sum_i |S_i| - \sum_{i,j,i \neq j} |S_i \cap S_j| + \sum_{i,j,k,i \neq j, k \neq i, k \neq j} |S_i \cap S_j \cap S_k| - \dots \quad (1)$$

где S_i, S_j, S_k - объем или площадь одной сферической полости; $\bigcup_i S_i$ - объем или площадь структуры, созданной пересечением сферических полостей; $S_i \cap S_j$ - объем или площадь двукратного пересечения сфер; $S_i \cap S_j \cap S_k$ - объем или площадь трехкратного пересечения сфер и т.д.

В модели при расчете объема всех полостей учитывается только двукратное пересечение сфер, а для расчета площади поверхности системы сферических полостей учитывается двукратное и трехкратное пересечения сфер.

В силу трансляционной симметрии граничные условия для модели расчета эффективной площади были такими, что выходящие за границы образца части сферических полостей не учитывались.

ОБЪЕМ И ПЛОЩАДЬ ПОВЕРХНОСТИ ПЕРЕСЕЧЕНИЯ СФЕР

Чтобы воспользоваться формулой (1), найдем объем и площадь поверхности пересечения сферических полостей, площади поверхности и объемы частей сферы, что пересекаются с плоскостью (рис.1).

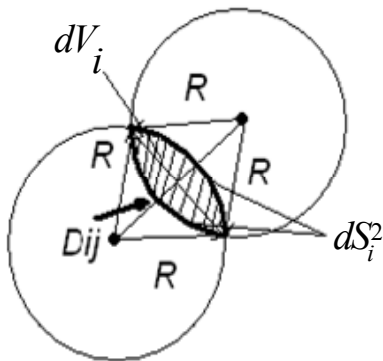


Рис. 1. Плоскостное сечение перекрывания сфер: R - радиус сфер; D_{ij} - расстояние между их центрами

Для нахождения объема и площади поверхности пересечения двух сферических полостей имеем выражения:

$$dV_i = \frac{\pi}{12} (2R - D_{ij})^2 (4R + D_{ij}), \quad (2)$$

$$dS_i^2 = 2\pi R(2R - D_{ij}), \quad (3)$$

где dV_i - объем пересечения двух сфер, а dS_i^2 - его площадь поверхности; R - радиус сферы; D_{ij} - расстояние между центрами сфер.

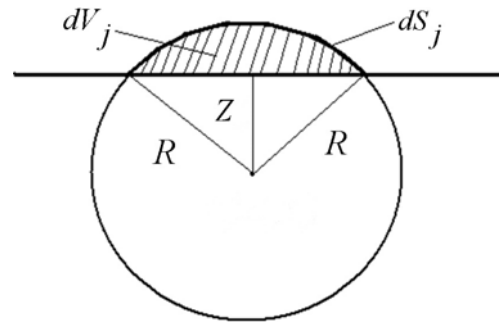


Рис.2. Плоскостное сечение перекрытия сферы с поверхностью. R - радиус сферы, Z - расстояние от центра сферы к грани

Для нахождения объема и площади поверхности (рис. 2) части сферы, отсекаемой плоскостью, имеем:

$$dV_j = \frac{\pi}{3} (R - Z)^2 (2R + Z); \quad (4)$$

$$dS_j = 2\pi R(R - Z); \quad (5)$$

$$dS_j^{per} = \pi(R^2 - Z^2), \quad (6)$$

где dV_j - объем, а dS_j - площадь поверхности части сферической полости вне образца в результате пересечения последней с гранью образца, подвергнутой облучению; dS_j^{per} - площадь пересечения

j -й сферической полости с гранью образца, подвергнутой облучению; R - радиус первичной сферы; Z - расстояние от центра сферы до грани.

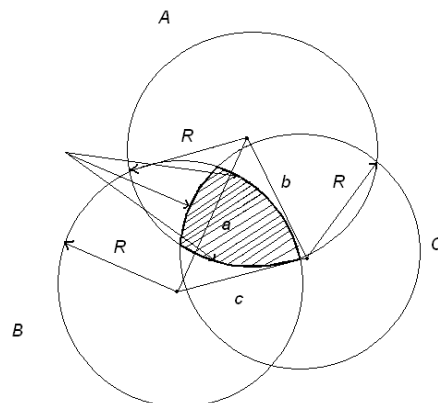


Рис.3. Плоскостное сечение троекратного перекрытия сфер: a, b, c - расстояния между центрами сфер B и C, A и C, A и B соответственно

Площадь поверхности пересечения трех сферических полостей (рис.3) определяется выражениями:

$$dS_i^3 = 4R^2 \left(\frac{1}{\tan(aw/Rq_1)} + \frac{1}{\tan(bw/Rq_2)} + \frac{1}{\tan(cw/Rq_3)} \right) - 2R \left(\frac{a}{\tan(2w/q_1)} + \frac{b}{\tan(2w/q_2)} + \frac{c}{\tan(2w/q_3)} \right); \quad (7)$$

$$w = \sqrt{R^2(a^2 + b^2 + c^2 - 2(a^4 + b^4 + c^4)) - a^2 b^2 c^2};$$

$$q_1 = a(b^2 + c^2 - a^2);$$

$$q_2 = b(c^2 + a^2 - b^2);$$

$$q_3 = c(a^2 + b^2 - c^2); \quad (8)$$

где dS_i^3 - площадь поверхности пересечения трех сфер, а R - радиусы сфер; a, b, c - расстояния между центрами сфер.

ИЗМЕНЕНИЕ ПЛОЩАДИ ОБЛУЧАЕМОЙ ПОВЕРХНОСТИ В ПРОЦЕССЕ ОБЛУЧЕНИЯ

На рис. 4, а-г приведено сечение образца плоскостью, перпендикулярной облучаемой поверхности, при разном времени облучения. Черным цветом обозначены области модифицированного вещества.

За время $T = 20$ с достаточно мало областей видоизмененного вещества граничит с облученной поверхностью (см. рис. 4,а). За время $T = 44,4$ с появляются сложные области модифицированного вещества, образованные несколькими треками, однако после травления эффективная площадь поверхности вырастет слабо, в основном за счет областей, что лежат у подвергаемой облучению поверхности (см. рис. 4,б).

За время $T = 140$ с происходит прорастание и выход на облучаемую поверхность кластеров с измененной структурой вещества, которые сформировались в объеме образца вследствие наложения нескольких треков (см. рис. 4,в).

При достижении времени $T = 200$ с происходят процессы полной или почти полной модификации вещества в результате облучения. Эффективная площадь достигает своего максимума и начинает уменьшаться (см. рис. 4,г).

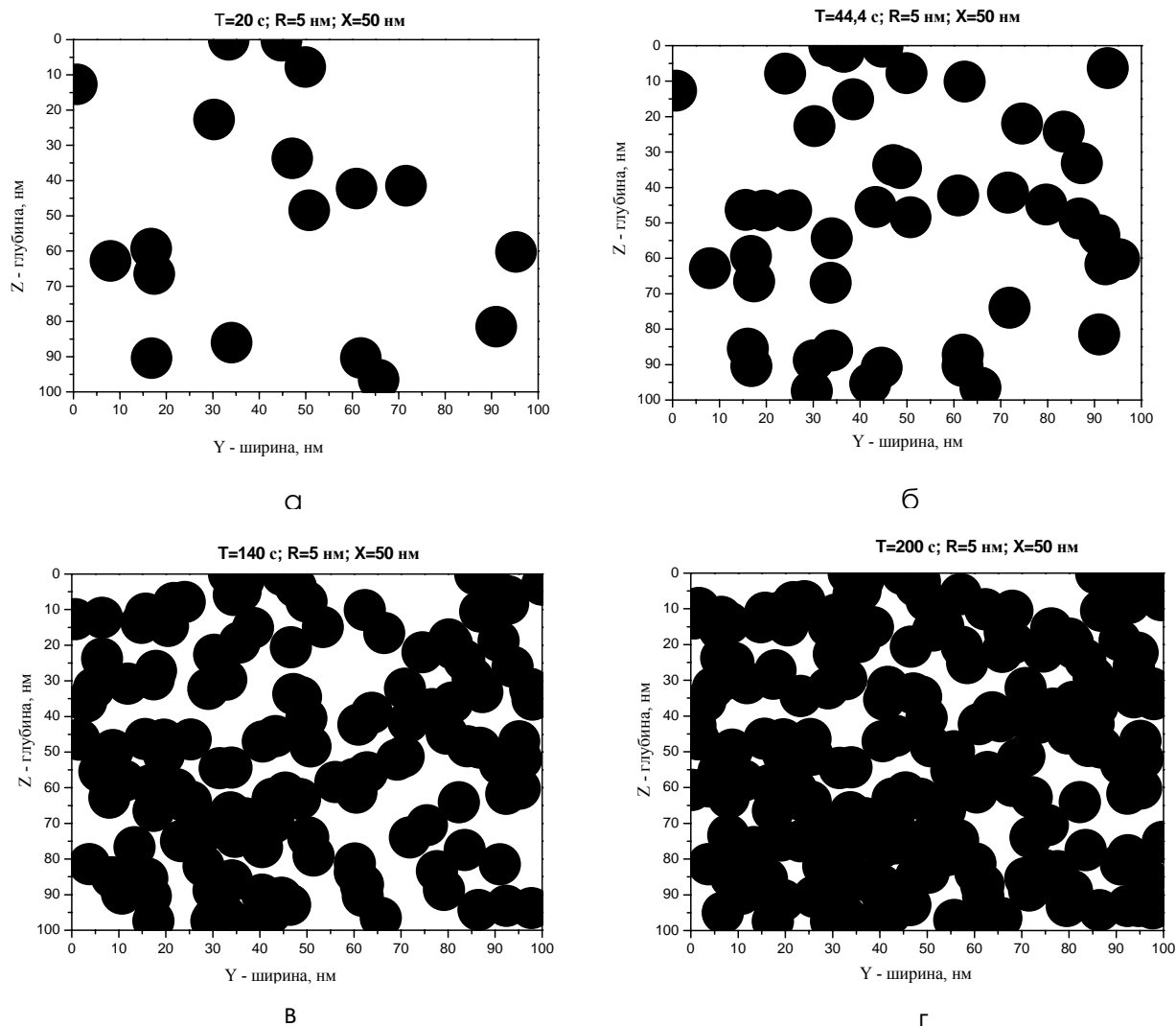


Рис. 4. Распределение видоизмененных областей, образующихся в сечении длины образца $X=50$ нм, радиусом $R=5$ нм за время $T=20$ с (а); 44,4 с (б); 140 с (в); 200 с (г) соответственно

На рис. 5,а и б приведены зависимости средних значений доли модифицированного вещества и эффективной площади поверхности облученного образца и их дисперсий от времени облучения. Усреднение проводилось по независимым реализациям.

Доля видоизмененного вещества, созданного треками налетающих ионов по мере облучения, монотонно растет и достигает насыщения.

Площадь эффективной поверхности материала со временем облучения возрастает, достигает максимального значения, а затем уменьшается. Можно выделить три стадии этой зависимости: медленный рост, резкий рост, стадия спада. Медленный рост

площади облучаемой поверхности объясняется тем, что малая доля треков начинается на поверхности, большая часть областей модифицированного вещества пока на поверхность выхода не имеет (см. рис. 4, а, б).

Резкое возрастание эффективной площади облучаемой поверхности происходит в результате прорастания и выхода на нее кластеров модифицированного вещества (см. рис. 4,в).

Стадия спада эффективной площади поверхности связана с полной или почти полной модификацией вещества облучаемого образца налетающими ионами (см. рис. 4,д).

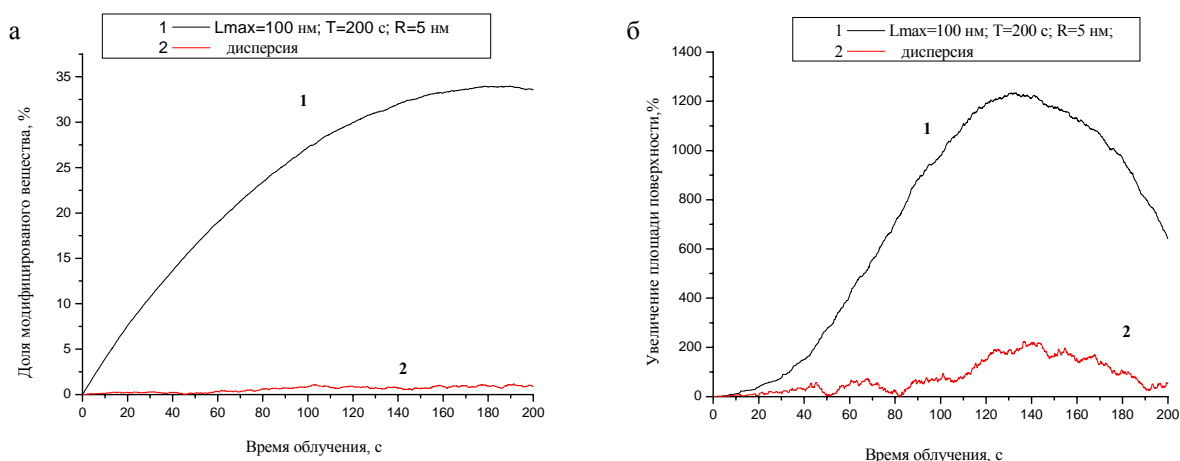


Рис. 5. Зависимость доли модифицированного вещества материала (а) и эффективной площади поверхности (б) от времени радиационного легирования тяжелыми высокоэнергетическими ионами

На рис. 6 приведена зависимость площади эффективной поверхности образца от времени облучения и от радиуса треков (начальных образований модифицированного вещества). Величина максимального значения эффективной площади поверхности и время достижения этого максимума меняются немонотонно с ростом радиуса треков.

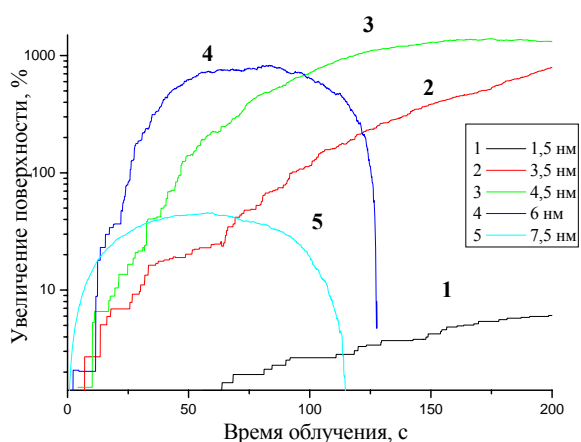


Рис. 6. Зависимость площади эффективной поверхности от времени радиационного легирования тяжелыми высокоэнергетическими ионами (флюенса падающего энергетического пучка) и радиуса треков

ВЫВОДЫ

Таким образом, численным моделированием динамики образования областей видоизмененного вещества вследствие прохождения в нем тяжелых высокоэнергетических ионов установлено, что облучение (при последующем травлении) приводит к заметному увеличению площади облучаемой поверхности, дозовая зависимость которой имеет ярко выраженный максимум. Данная зависимость чувствительна к размерам треков, которые определяются энергией налетающего иона, а точнее потерями его энергии при прохождении через вещество.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Barbu, A. Dunlop, D. Lesueur, R.S. Averback. Latent Tracks Do Exist in Metallic Materials// *Europhysics Letters*. 1991, №15, p. 37-42.
2. H. Dammak, A. Dunlop, D. Lesueur. Phase transformation induced by swift heavy ion irradiation of pure metals // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1996, Section B, v. 107, p. 204-211.
3. M. Dufour, C. Paumier, E. Toulemonde. Transient Thermodynamic Model for Track Formation in Amorphous Metallic Alloys// *Radiation effects and defects in solids*. 1993, v. 126, N 1/4, p. 119.
4. Л.А. Власукова, А.А. Комаров, Ф.Ф. Комаров // *Труды IX Межнац. совещ. "Радиационная физика твердого тела"*. Севастополь, 1999, т. 1, с. 252.

5. J. Vetter, R. Scholz, N. Angert. Investigation of latent tracks from heavy ions in GeS crystals by high resolution TEM// *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1994, Section B, v. 91, Issue 1-4, p. 129-133.

6. Ch. Houpert. Transition from localized defects to continuous latent tracks in magnetic insulators irradiated by high energy heavy ions: A HREM investigation// *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1989, Section B, v. 39, Issue 1-4, p. 720-723.

Статья поступила в редакцию 24.10.2008 г.

МОДЕЛЮВАННЯ УТВОРЕННЯ СТРУКТУРИ ОБЛАСТЕЙ ВИДОЗМІНЕНОЇ РЕЧОВИНИ ПРИ ФОРМУВАННІ ВАЖКИМИ ІОНАМИ ВИСОКИХ ЕНЕРГІЙ СФЕРИЧНИХ ТРЕКІВ

А.Б. Демчишин, О.Ю. Дідик, П.О. Селищев

Проходження важких іонів високих енергій створює уздовж їхніх траєкторій у твердому тілі області зі зміненою структурою матеріалу («треки»). Треки різних іонів можуть перетинатися, при цьому формуючи складну структуру. За допомогою хімічної обробки можна видалити модифіковану речовину і утворити розвинену структуру порожнин, що значно збільшує площу опроміненої поверхні. В роботі моделювалось утворення структури областей модифікованої речовини (чи системи порожнин, якщо модифікована речовина витравлена) в результаті стаціонарного впливу іонами високих енергій. Вважалося, що кожен іон, що налітає, створює трек, треки мають сферичну форму і їх утворення в будь-якій точці зразка рівноймовірне. Положення цих областей у матеріалі моделювалося випадковим чином з використанням методу Монте-Карло. У результаті проведеного моделювання знайдена залежність ефективної площі поверхні зразка підданої опроміненню і долі модифікованої речовини від флюенса опромінення і від розміру трека. Встановлено, що залежність ефективної площі поверхні від часу має ярко виражений максимум, положення якого визначається величиною трека.

MODELING OF CREATION OF MODIFIED SUBSTANCE AREAS STRUCTURE IN THE FORMATION OF SPHERICAL TRACKS BY HEAVY IONS OF HIGH ENERGY

A.B. Demchyshyn, A.Yu. Didyk, P.A. Selyshchev

Passage of high energy heavy ions creates in solids along their trajectories areas with the changed structure of a material ("tracks"). Tracks of various ions can be crossed, forming difficult structure. By means of chemical processing it is possible to remove the modified substance and to create the branched out structure of cavities that considerably increases the irradiated surface area. Formation of modified substances areas structure (or systems of cavities if the modified substance is etched) was modeled as a result of stationary influence by high energy ions in this work. It was supposed that each incident ion creates track, tracks have the spherical form and their formation in any point of the sample equiprobably. Position of these areas in a material was modeled in a random way with use of a Monte-Carlo method. As a result of the realized simulating is search out dependence of the effective surface area which was irradiated and dependence of modified matter part from irradiation fluence and from the radius of track. It has been found that dependence of effective surface area on time has the vividly expressed maximum position which is determined by the size of the track.