



УДК 539.211:535.827

**ПОВЕРХНОСТНАЯ САМОДИФФУЗИЯ ВОЛЬФРАМА И МОЛИБДЕНА,  
АКТИВИРОВАННАЯ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧНЫМ ОБЛУЧЕНИЕМ  
АТОМАМИ ГЕЛИЯ**

**SURFACE SELF-DIFFUSION OF TUNGSTEN AND MOLYBDENUM ACTIVATED BY  
LOW-ENERGY BOMBARDMENT BY HELIUM ATOMS**

**О.В. Дудка<sup>1</sup>, А.А. Мазиллов<sup>1,2</sup>, Ю.А. Гордиенко<sup>1</sup>  
O.V. Dudka<sup>1</sup>, A.A. Mazilov<sup>1,2</sup>, J.A. Gordienko<sup>1</sup>**

*<sup>1</sup>ИИЦ «Харьковский физико-технический институт»,  
ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина*

*NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology",  
1 Akademicheskaya St, Kharkov, 61108, Ukraine*

*<sup>2</sup>Белгородский национальный исследовательский университет,  
Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85*

*Belgorod National Research University,  
85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia*

*E-mail: dydo4ka.o@mail.ru; alexey.mazilov@gmail.com*

*Аннотация.* С помощью методов низкотемпературной полевой ионной микроскопии и математического моделирования исследовалось взаимодействие ускоренных атомов и ионов гелия с атомно-гладкой поверхностью вольфрама и молибдена. Изучены элементарные акты радиационно-индуцированной поверхностной самодиффузии адатомов. Установлено, что низкоэнергетическое облучение атомами гелия вызывает появление существенной подвижности поверхностных адатомов с преимущественным миграционным перемещением адатомов вдоль направления падающего пучка. Экспериментально обнаружены диффузионные скачки поверхностных атомов, длина которых существенно превышает расстояния между ближайшими соседями. Существование больших радиационно-индуцированных скачков поверхностных атомов вольфрама и молибдена подтверждается в математических экспериментах с использованием методов молекулярной динамики.

*Resume.* Using low-temperature field ion microscope techniques and mathematical modelling the interaction between helium atom and ions with atomically smooth tungsten and molybdenum surface was studied. The elementary events of radiation-induced surface diffusion were studied. It was demonstrated that the low-energy He atomic bombardment was able to induce a substantial surface mobility of adatoms preferentially along the beam direction. The long impact induced jumps of adatoms, spanning more than a nearest-neighbor distance, were revealed. Performed molecular dynamics simulations reproduce the general experimental trends and conclusions.

*Ключевые слова:* Полевая ионная микроскопия, математическое моделирование, ионная бомбардировка, вольфрам, молибден.

*Key words:* field ion microscopy, mathematical modelling, ion bombardment, tungsten, molybdenum.

## **Введение**

Одной из основных проблем разработки термоядерных реакторов является радиационная стойкость материалов диверторов и первой стенки в условиях облучения их поверхности низкоэнергетическими ионами и нейтральными атомами гелия [1]. Радиационно-индуцированные поверхностные эффекты также представляют значительный интерес в связи с разработкой современных технологий формирования высоко упорядоченных наноструктур. Применение пучков быстрых нейтральных атомов находит широкое применение во вторичной масс-спектрометрии диэлектрических или полупроводниковых материалов, позволяя избежать проблем неконтролируемой зарядки

исследуемых образцов [2]. Использование в полевой ионной микроскопии (ПИМ) быстрых нейтральных частиц для радиационного воздействия на поверхность металлических образцов позволяет проводить эксперименты в условиях наличия сверхсильных электрических полей, без электростатического воздействия на траектории бомбардирующих частиц. В результате, такие полевые ионные эксперименты могут быть использованы *in situ* для исследования на атомном уровне повреждений поверхности, вызванных индивидуальными радиационными событиями [3-5].

Одним из основных результатов, полученных в таких экспериментах, является установление существенного вклада в эрозию поверхности адатомов радиационного происхождения [6]. Аналогичные результаты были получены методами молекулярной динамики и сканирующей туннельной микроскопии, обеспечивающие глубокое понимание процессов радиационной эрозии поверхности [7]. Также особо следует отметить явление радиационно-индуцированной поверхностной диффузии, обнаруженное ранее в полуфеноменологических исследованиях эрозии поверхности в ПИМ экспериментах по взаимодействию низкоэнергетических ионов с поверхностью металлов [8]. Несмотря на значительный интерес к радиационно-индуцированной поверхностной диффузии, к настоящему времени отсутствуют прямые экспериментальные наблюдения элементарных актов этого явления. В настоящем исследовании, поверхностная диффузия адатомов вольфрама и молибдена, индуцируемая ионами и быстрыми нейтральными атомами гелия изучалась на атомном уровне с использованием *in situ* низкотемпературных методов ПИМ и математического моделирования.

### Методика и экспериментальная техника

Эксперименты проводились в двухкамерном сверхвысоковакуумном полевом ионном микроскопе с охлаждением образцов до 78 К. Полевые ионные изображения были сформированы с использованием в качестве изображающего газа гелия под давлением  $(2-4) \cdot 10^{-3}$  Па; давление остаточного газа составляло  $10^{-7}$  Па. Для ПИМ исследований образцы были получены из проволочного вольфрама диаметром 0.15 мм и чистотой 99.98 ат. % (0.01 ат. % Si, 0.002 ат. % Fe, 0.005 ат. % Mo). Образцы были выполнены методом электрохимического травления в водном растворе едкого натрия при переменном напряжении 4-10 В и имели форму острий с радиусом кривизны 10-15 нм. После установки в ПИМ, образцы очищались методом полевой десорбции, а затем формировалась атомно гладкая поверхность за счет низкотемпературного полевого испарения. Молибденовые образцы изготавливались с помощью этой же методики из проволоки диаметром 0.2 мм, чистотой 99.9 ат. %.

В процессе облучения напряженность поля снижалась до  $30-35 \text{ В} \cdot \text{нм}^{-1}$ . При таких полях для остаточных атомов и молекул газов на поверхности образца существует ионизационный барьер, так как они имеют сравнительно с атомами гелия низкий потенциал ионизации и легко ионизируются. Такой барьер предотвращает загрязнение поверхности образца остаточными газами. Таким образом, высокий вакуум и полевой ионизационный барьер обеспечивают идеальную чистоту исследуемой поверхности в процессе облучения. Для усиления изображения в полевом ионном микроскопе использовался микроканальный усилитель яркости. Ориентация образцов определялась с использованием стандартных стереографических методов ПИМ, путем анализа полевых ионных изображений. Радиус образца определялся подсчетом количества колец между двумя кристаллографическими полюсами с известными углами между ними [3]. Знание радиусов кривизны позволяло опре-

делить локальные увеличения, необходимые для количественного описания радиационно-индуцированных поверхностных скачков адатомов (с точностью до 5%).

Облучение осуществлялось с использованием источника ускоренных нейтральных атомов гелия с энергией 2–7 кэВ и потоком в интервале  $(0.1-8) \cdot 10^{15}$  атомов  $\cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ . Схема источника, основанного на принципе работы высоковакуумного ионизационного манометра Байярда-Альперта, изображенная на рис. 1, включала ионизатор и блок извлечения электронов. Ионы, образующиеся за счет электронных ударов, с помощью электростатической линзы фокусировались на вход камеры перезарядки, где происходила нейтрализация пучка. С учетом того, что поперечные сечения такого процесса существенно больше, чем сечения передачи энергии при столкновении атомов гелия, ионы нейтрализовались без существенного рассеяния кинетической энергии.

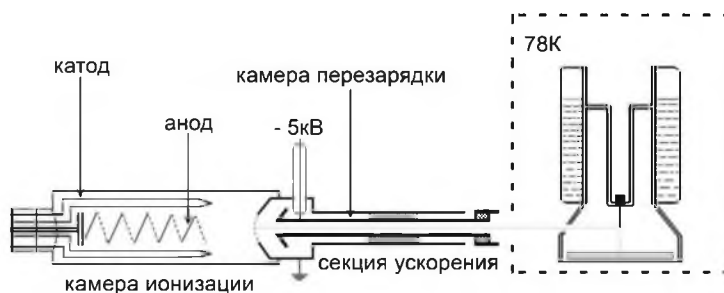


Рис. 1. Полевой ионный микроскоп с источником ускоренных атомов гелия.  
Fig. 1. The field ion microscope with a source of accelerated helium atoms

Нейтральные атомы гелия, возникшие в камере перезарядки, не взаимодействуют с положительно заряженной поверхностью образца, поэтому рабочее напряжение ПИМ не выключалось во время облучения. Так как нейтральные атомы гелия не отклонялись под действием электрического поля, в наших экспериментах было возможно прямое наблюдение элементарных актов радиационно-индуцированной поверхностной диффузии. Принимая во внимание, что во всех случаях направление пучка было перпендикулярно к образцу, его кристаллографическая ориентация соответствовала одному из полюсов, расположенных на большом круге стереографической проекции. Таким образом, локальные углы падения пучка на поверхность грани с известными индексами Миллера, рассчитывались аналитически с использованием стандартных кристаллогеометрических методик.

Для анализа атомных механизмов эрозии поверхности под действием низкоэнергетичной бомбардировки ионами и нейтральными атомами в настоящей работе использовался пакет программ математического моделирования методом молекулярной динамики Калипсо, разработанный Каролевским [9]. Программный пакет «Калипсо» базируется на классической МД модели взаимодействия бомбардирующих атомов с атомами металла, образующими расчетную ячейку. В расчетах используются составные многочастичные потенциалы, включающие экранированное кулоновское взаимодействие и приближение сильной связи для описания взаимодействия между атомами мишени. Отталкивающий экранированный кулоновский потенциал применялся при малых расстояниях между взаимодействующими ядрами и притягивающий многочастичный потенциал сильной связи при расстояниях между частицами, сравнимыми с длинами химической связи. При промежуточных расстояниях отталкивающий и притягивающий потенциалы соединялись плавно с помощью интерполяционных функций.

Для получения информации об эрозии поверхности при сравнительно высоких флюенсах облучения (до  $10^{19}$ – $10^{20}$  ат·м<sup>-2</sup>) применялась методика облучения низкоэнергетичными ионами гелия, образуемыми в камере ПИМ при пропускании автоэлектронного тока [10]. Такая бомбардировка характеризуется относительно широким спектром энергий, близким к максвелловскому. Средняя энергия ионов гелия в проводившихся экспериментах варьировалась в пределах 30–600 эВ. Максимальная энергия бомбардирующих ионов приблизительно в пять раз превышала среднее значение и соответствовала полному ускоряющему напряжению микроскопа в автоэлектронном режиме. Такой спектр облучения острых образцов тугоплавких металлов соответствует радиационным условиям вблизи поверхности дивертора, диагностических зеркал и первой стенки современных термоядерных устройств.

Следует отметить, что ионы при приближении к поверхности металла подвергаются быстрой перезарядке. Это приводит к нейтрализации ионов инертных газов на поверхности металла, что и является ответственным за отсутствие существенной разницы в эрозии металлических поверхностей при облучении их ионами и нейтральными атомами [3].

## Результаты и обсуждения

### **1. Элементарные акты эрозии поверхности при бомбардировке ускоренными нейтральными атомами гелия**

Большинство проведенных исследований явления радиационно-индуцированной поверхностной диффузии вольфрама и молибдена было проведено при значениях энергии атомов гелия 5 кэВ и углах падения пучка на поверхность  $\theta_i$  в диапазоне от  $55^\circ$  до  $85^\circ$  и флюенсах в диапазоне  $10^{16}$ – $10^{17}$  ат·м<sup>-2</sup>. С одной стороны, такой уровень облучения обеспечивает удовлетворительную статистику экспериментальных данных, а с другой стороны – достаточно большие средние расстояния между адатомами, необходимые для прецизионного определения радиационно-индуцированных поверхностных перестроек. Для подавления нормальной термической диффузии поверхности эксперименты проводились при 78 К. Большинство дислокаций были удалены с образцов за счет высокой напряженности и сил изображения [3]. Поэтому ПИМ образцы могут рассматриваться как идеальные кристаллы без примесей и дислокаций. Элементарные акты радиационно-индуцированной эрозии были изучены на изначально идеальной поверхности образцов.

На рис. 2 представлены микрофотографии вольфрамового образца до и после облучения атомами гелия при 78 К. Черная стрелка указывает направление падающего пучка. Дополнительные яркие точки на ионно-микроскопических изображениях, соответствующие изображениям адатомов [3], появлялись в процессе облучения по обе стороны поверхности образца, но преимущественно на облучаемой стороне. Изучаемая поверхность была покрыта единичными адатомами (покрытие  $\theta \ll 1$ ). Это позволило зарегистрировать и точно оценить большие скачки адатомов, индуцированных низкоэнергетичным облучением атомами гелия. В процессе облучения регистрировались скачкообразные смещения адатомов вдоль поверхности, длина которых варьировалась в нанометровом и субнанометровом диапазонах. Рис. 2 иллюстрирует наличие длинных скачков адатомов, существенно превышающих расстояние между ближайшими соседями в элементарной решетке вольфрама.

ПИМ изображения на рис. 2 (а) получены при напряженности поля ниже ПНИ (поле наилучшего изображения) ( $44 \text{ В}\cdot\text{нм}^{-1}$  [3]) после сглаживания поверхности низкотемпературным левым испарением и облучения атомами гелия флюенсом  $3.0 \cdot 10^{16}$  атом·м<sup>-2</sup> с энергией 5 кэВ. Нако-

нечник стрелки указывает на плотноупакованный атомный кластер, сформировавшийся во время облучения. Изображения (рис 4 (b–d)) были получены в процессе облучения при флюенсах  $3.5 \cdot 10^{16}$  (b),  $4.2 \cdot 10^{16}$  (c), и  $4.8 \cdot 10^{16}$  атом·м<sup>-2</sup>(d). Адамом на грани (121) на рис. 4 (b) (показан стрелкой) появился за счет разрушения плотноупакованного атомного кластера, показанного на рис. 4 (a). Направление поверхностного скачка адатома находится под углом  $\theta_j = 18 \pm 2$  к проекции гелиевого пучка на поверхность. Так как угол  $\theta_j$  меньше  $90^\circ$ , то скачок имел компоненту смещения вдоль направления облучения. После этого адатом претерпевал несколько смещений вдоль поверхности, отмеченных стрелками на ПИМ изображениях (b-d) и схеме (e). ПИМ изображения, представленные на рис. 2, демонстрируют элементарные акты радиационно-индуцированных смещений адатомов. Расстояния между их конечными и начальными позициями значительно больше, чем расстояния между ближайшими соседями. Длины радиационно-индуцированных скачков адатомов, отмеченных стрелками на рис. 2 (c) и (d), равны 16 и 18 Å. Для обоих диффузионных скачков  $\theta_j > 90^\circ$ , т.е. скачки имеют компоненту смещения против направления облучения. В общей сложности в 62 радиационных экспериментах, 61% элементарных скачков имеют компоненту смещения вдоль направления падающего пучка гелия, 39% имеют компоненту смещения против направления пучка.

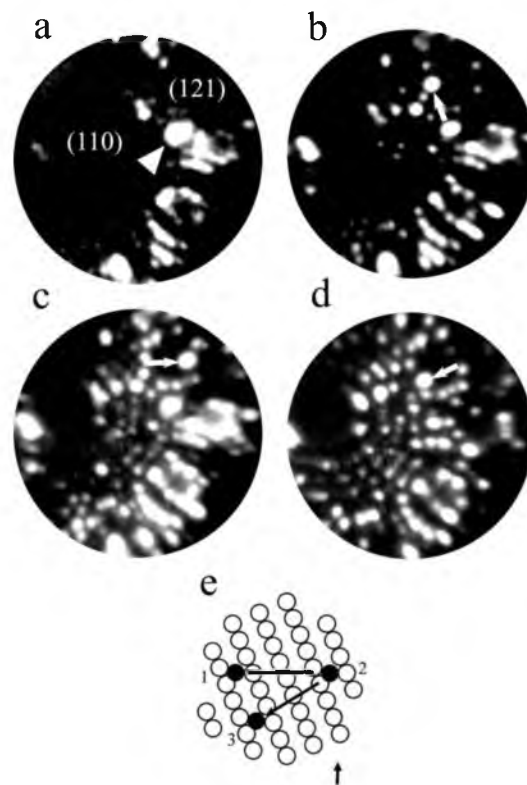


Рис. 2. ПИМ изображения полусферической поверхности монокристалла вольфрама в электрическом поле  $30 \text{ В} \cdot \text{нм}^{-1}$  после облучения при 78 К нейтральными атомами гелия с энергией 5 кэВ (a)  $3.0 \cdot 10^{16}$ , (b)  $3.5 \cdot 10^{16}$ , (c)  $4.2 \cdot 10^{16}$ , и (d)  $4.8 \cdot 10^{16}$  атом м<sup>-2</sup>. Стрелки на схеме (e) ориентированы вдоль направления пучка атомов гелия и скачков адатомов

Fig. 2. PIM image of the hemispherical surface of a single crystal of tungsten in the electric field, in  $30 \text{ V} \cdot \text{nm}^{-1}$  after irradiation at 78 K the neutral helium atoms with an energy of 5 keV (a)  $3.0 \cdot 10^{16}$ , (b)  $3.5 \cdot 10^{16}$ , (c)  $4.2 \cdot 10^{16}$ , and (d)  $4.8 \cdot 10^{16}$  atom m<sup>-2</sup>. The arrows in the diagram (e) are oriented along the direction of the beam of helium atoms and jumps of adatoms

В рамках классической баллистической модели биатомных взаимодействий, адатомы рассеиваются по направлению падающего пучка [7]. Появление скачков адатомов в противоположном направлении ( $\theta_j > 90^\circ$ ) указывает на возможность развития небаллистических процессов, ответ-

ственных за радиационно-индуцированные скачки адатомов вдоль поверхности. Длинные скачки адатомов вдоль поверхности, при обычном процессе термодиффузии, охватывающие несколько поверхностных межатомных расстояний, были впервые обнаружены методами молекулярной динамики и позже подтверждены в ПИМ экспериментах [11]. Радиационно-индуцированные смещения адатомов, показанные на рис. 2, в отличие от обычных термически активированных смещений дальнего порядка, происходили не строго одномерно. Такие элементарные смещения адатомов обычно совершались параллельно случайным высоко-индексным направлениям вдоль поверхности исследуемых образцов вольфрама и молибдена. Вероятность последовательных столкновений нескольких атомов гелия с одним из адатомов на локализованной области поверхности незначительна. Адатомы могут быть смещены напрямую (баллистически) атомами гелия, однако наиболее вероятно, что это происходит в результате развития приповерхностных каскадов столкновений, индуцированных бомбардирующими частицами. Средний диаметр такой локальной возбужденной области рассчитывался по максимальному расстоянию между адатомами вольфрама в компактных группах и составил  $9 \pm 3 \text{ \AA}$ .

Экспериментальные наблюдения радиационно-индуцированной поверхностной диффузии демонстрируют множество атомных скачков вдоль облученной поверхности, включая смещения в положения ближайших соседей. ПИМ изображения на рис. 3 демонстрируют элементарные акты радиационного нарушения морфологии поверхности вольфрама в окрестности полюса [110] в результате облучения нейтральными атомами гелия при 78 К флюенсом (а)  $3.4 \cdot 10^{16}$  и (б)  $4.0 \cdot 10^{16}$  атом·м<sup>-2</sup>. Маленькие и большие треугольники на рис. 3 (а) показывают единичный и двойной адатомы, соответственно. В результате дополнительного облучения единичный атом был удален (распылился).

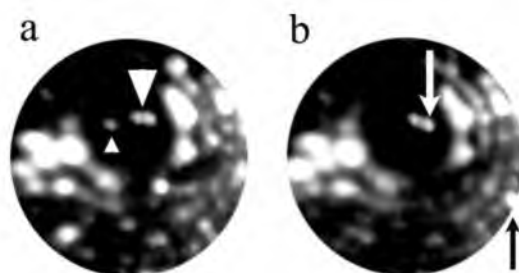


Рис. 3. ПИМ изображения поверхности W (110) после облучения атомами гелия с энергией 5 кэВ и флюенсом (а)  $3.4 \cdot 10^{16}$  и (б)  $4.0 \cdot 10^{16}$  атом·м<sup>-2</sup>. Белая стрелка указывает направление смещения адатомов, черная стрелка направление пучка

Fig. 3. PIM images of the surface W (110) after irradiation by helium atoms with an energy of 5 keV and a fluence of (a)  $3.4 \cdot 10^{16}$  and (b)  $4.0 \cdot 10^{16}$  atom·m<sup>-2</sup>. The white arrow indicates the direction of displacement of adatoms, the black arrow the direction of the beam

Сравнение ПИМ изображения на рис. 3 (а) и (б) показывает, что один из атомов в двух-атомном комплексе (димере) радиационного происхождения (отмеченном треугольником) сместился на  $2.7 \text{ \AA}$ . Этот процесс, в частности, привел к радиационной переориентации димера, переориентации его оси. Принимая во внимание, что длина элементарного скачка адатома близка к максимальному латеральному разрешению микроскопа, в большинстве случаев возникают трудности в идентификации таких скачков. Эксперименты с компактными комплексами адатомов позволяют однозначно определить направление и величину радиационно-стимулированного смещения одного из адатомов комплекса. Это связано с тем, что при наличии на ПИМ микрофо-

тографиях изображений неподвижных атомов, минимальные значения регистрируемых латеральных смещений атомов составляют  $0.5 \text{ \AA}$  [3]. Таким образом, описанные выше эксперименты с радиационно-стимулированной переориентацией оси биатомов однозначно подтверждают доминирующий вклад элементарных скачков адатомов поверхностную диффузию, активированной ионной бомбардировкой.

С помощью программного комплекса «Калипсо» [9] проведено компьютерное моделирование бомбардировки кристаллов вольфрама и молибдена атомами гелия. Элементарные акты поверхностной эрозии монокристаллов вольфрама и молибдена моделировались на кристаллите, включавшем 20 атомных слоев (110) (всего 1500 атомов). Боковые поверхности расчетной ячейки были ориентированы вдоль плоскостей (011) и (100). Облучение атомами гелия осуществлялось вдоль нормали к поверхности [110] при начальной температуре 0 К. В качестве притягивающего потенциала использовался стандартный многочастичный потенциал сильной связи с параметрами, определенными для молибденовых ОЦК-кристаллов [9]. Результаты моделирования находятся в качественном соответствии с ионно-микроскопическими наблюдениями явления радиационно-стимулированной поверхностной диффузии. В частности, было обнаружено, что при облучении молибденовых модельных кристаллитов атомами гелия с энергией 5 кэВ диаметр зоны, в которой обнаруживается повышенная диффузионная активность адатомов, достигает  $35 \text{ \AA}$ . При этом время, в течение которого наблюдается радиационно-стимулированная поверхностная подвижность адатомов, достигает 5 пс.

Серия модельные изображения расчетного кристаллита на рис. 4 (а–е), иллюстрирует изменения атомной топографии его поверхности в результате облучения одним атомом гелия с энергией 5 кэВ.

Изображения рис 4 (а–е) иллюстрируют развитие изменения атомной топографии поверхности со временем: 1.9 фс (а), 133 фс (б), 328 фс (в), 505 фс (г), 646 фс (д) и 863 фс (е). Модельное изображение (а) получено в момент касания поверхности атомом гелия. Изображение (б) и (в) иллюстрируют развитие приповерхностных каскадов соударений с амплитудами смещений, лежащими существенно за пределами упругой области. Наблюдается также выход на поверхность атомов, обладающих избыточной энергией в интервале 1–3 эВ, что существенно превышает известные оценки высот барьеров для термически активированной поверхностной диффузии [11]. Сопоставление модельных изображений (г–е) обнаруживает образование 10 адатомов, претерпевших тангенциальные смещения вдоль поверхности длиной в интервале 1–12 элементарных диффузионных поверхностных скачков. Один такой скачок дальнего порядка отмечен на рис. 4 (д) стрелкой. Изображения (д) и (е) иллюстрируют типичный механизм поверхностной самодиффузии, активированной ионной бомбардировкой, на периферийных участках плотноупакованных террас в окрестности атомных ступенек и уступов. Отмеченный стрелкой на рис. 4 (г) атом после соударения с поверхностью не отскакивает, а замещает поверхностный атом, который не только смещается на поверхность, но и получает избыточную кинетическую энергию около 1.5 эВ, что позволяет сделать ему два диффузионных скачка дальнего порядка. Такой «обменный» механизм наблюдался ранее при классической термически активированной поверхностной диффузии при сравнительно высоких температурах [11].

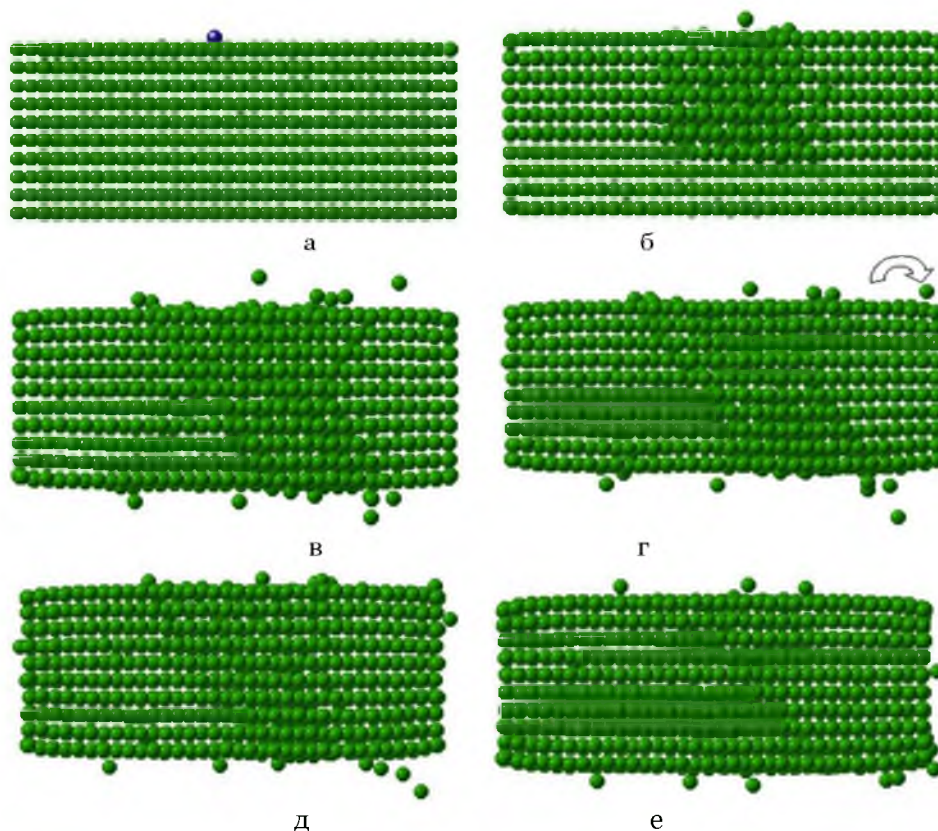


Рис. 4. Модельные изображения нанокристалла молибдена, подвергнутого облучению одним атомом гелия с энергией 5 кэВ, полученные методом молекулярной динамики. Изображения (а–е) иллюстрируют развитие изменения атомной топографии поверхности со временем: 1.9 фс (а), 133 фс (б), 328 фс (в), 505 фс (г), 646 фс (д), 863 фс (е)

Fig. 4. Model image of a nanocrystal of molybdenum, irradiated by one of the ATU-MW helium with energy of 5 keV, obtained by the method of molecular dynamics. Images (a–e) illustrate the development of the atomic topography of the surface over time: 1.9 fs (a), 133 fs (b), 328 fs (v), 505 fs (r), 646 fs (d), 863 fs (e)

На рис. 5 приведена гистограмма распределения радиационно-индуцированных диффузионных скачков на поверхности нанокристалла молибдена, ориентированного в направлении [110], совпадающем с направлением пучка атомов гелия с энергией 5 кэВ. Интерполяционная кривая соответствует экспоненциальному падению, качественно соответствующему наблюдениям термически активированной поверхностной самодиффузии [11].

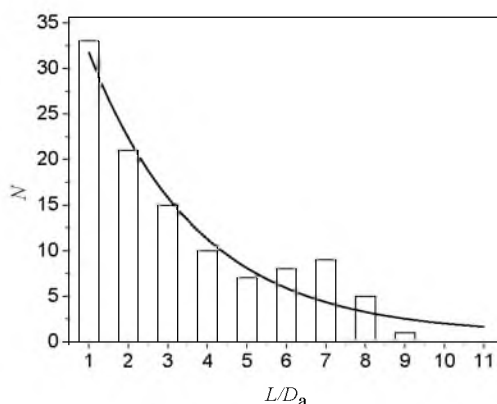


Рис. 5. Гистограмма распределения радиационно-индуцированных диффузионных скачков на поверхности нанокристалла молибдена, ориентированного в направлении [110], совпадающем с направлением пучка атомов гелия с энергией 5 кэВ

Fig. 5. A histogram of the distribution of radiation-induced diffusive jumps at the surface of the nanocrystal molybdenum, oriented in the [110] direction coinciding with the direction of a beam of helium atoms with an energy of 5 keV



## 2. Эрозия поверхности под действием низкоэнергетичной бомбардировки ионами гелия

Увеличение флюенса бомбардирующих атомов и ионов гелия сопровождается полным нарушением регулярности расположения атомов на поверхности нанокристаллов и формировании поверхностных нановыступов. В качестве примера на рис. 6 (а и б) приведены изображения нанокристалла молибдена до (а) и после (б) облучения ионами гелия со средней энергией 350 эВ флюенсом  $4.8 \cdot 10^{20}$  атом $\cdot$ м $^{-2}$ , а также после полевого испарения поверхностных атомов на нановыступах (с). Эти эксперименты, проведены с использованием методики облучения ионами гелия, образующимися при отборе автоэлектронного тока [10].

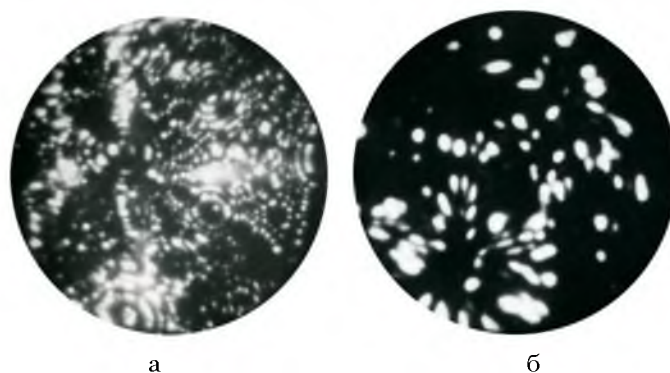


Рис. 6. ПИМ изображения поверхности монокристалла молибдена до (а) и после (б) облучения ионами гелия со средней энергией 350 эВ флюенсом  $4.8 \cdot 10^{20}$  атом $\cdot$ м $^{-2}$   
Fig. 6. PIM images of the surface of a single crystal of molybdenum before (a) and after (b) irradiation by helium ions with an average energy of 350 eV and a fluence of  $4.8 \cdot 10^{20}$  atom $\cdot$ м $^{-2}$

Из рис. 6 следует, что в результате такого облучения на первоначально атомно-гладкой поверхности молибденового образца формируются нановыступы высотой до 20–30 Å. При этом практически вся полевая ионная эмиссия локализовалась на нановыступах. Радиационный рост таких нановыступов сопровождался повышением локальной напряженности электрического поля над ними и, соответственно, ростом автоэлектронного тока и увеличением амплитуды его флуктуаций до 30–40%.

Как следует из серии полевых ионных микрофотографий, представленных на рис. 6, полевое испарение приводит к увеличению локальных радиусов кривизны и расширению нановыступов, а также к включению в формирование эмиссионной картины новых нановыступов. Высота нановыступов, определенная методом контролируемого полевого испарения, при флюенсах в интервале  $10^{19}$ – $10^{20}$  атом $\cdot$ м $^{-2}$  составляла 4–15 Å. Скорость радиационного роста практически линейно зависела от интенсивности облучения и при типичных для данных экспериментов потоках ионов порядка  $10^{18}$  атом $\cdot$ м $^{-2}$ с $^{-1}$  составляла порядка 1 Å $\cdot$ мин $^{-1}$ . Как следует из рис. 7, толщина эродированного приповерхностного слоя на грани {110} молибденового монокристалла существенно зависит от средней энергии бомбардирующих ионов гелия.

На рис. 8 приведена гистограмма распределения диаметров нановыступов по диаметрам у основания для типичных условий облучения поверхности монокристалла молибдена ионами He со средней энергией 350 эВ флюенсом  $4.8 \cdot 10^{20}$  атом $\cdot$ м $^{-2}$ .

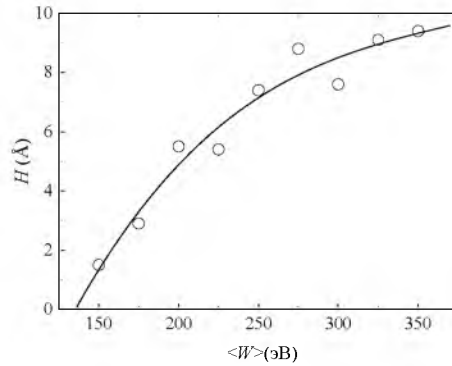


Рис. 7. Зависимость толщины эродированного приповерхностного слоя на грани {110} молибденового монокристалла от средней энергии бомбардирующих ионов гелия

Fig. 7. The dependence of the thickness eroded surface layer on a face {110} single crystal molybdenum from the average energy of the bombarding helium ions

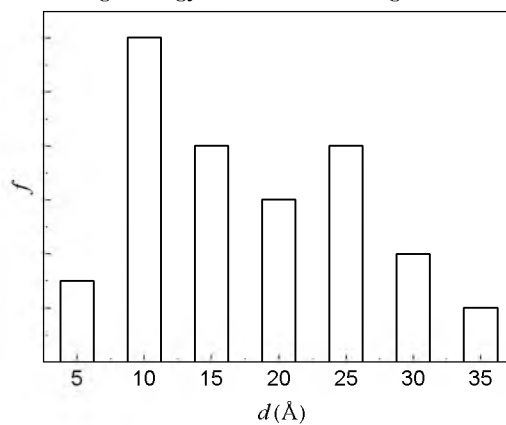


Рис. 8. Распределения по диаметрам эмитирующих вершин нановыступов, сформированных при облучении поверхности монокристалла молибдена ионами He со средней энергией 350 эВ флюенсом  $4.8 \cdot 10^{20}$  атом·м<sup>-2</sup>

Fig. 8. The distribution by diameter of the emitting peaks of nanosystem formed by irradiation of the surface of a single crystal of molybdenum ions Not with the average energy of 350 eV and a fluence of  $4.8 \cdot 10^{20}$  atom·m<sup>-2</sup>

Гистограмма на рис. 9 иллюстрирует распределение геометрических факторов усиления электрического поля над нановыступами, сформировавшимися в процессе бомбардировки ионами гелия со средней энергией 350 эВ флюенсом  $4.8 \cdot 10^{20}$  атом·м<sup>-2</sup>. Здесь  $F$  – напряженность поля над нановыступом при фиксированном напряжении, а  $F_0$  – напряженность поля над атомно-гладкой поверхностью образца при том же напряжении. Максимальные значения отношения  $F/F_0$  соответствуют нановыступам с минимальными диаметрами у основания (рис. 8).

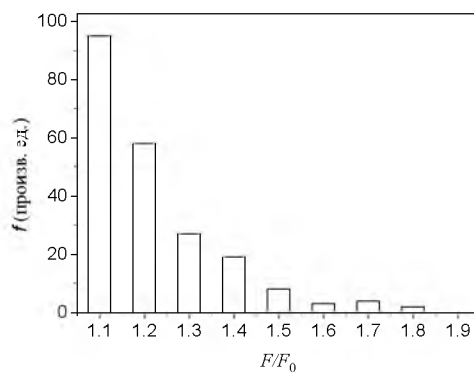


Рис. 9. Гистограмма распределения геометрических факторов усиления электрического поля над нановыступами, сформировавшимися в процессе бомбардировки ионами гелия со средней энергией 350 эВ флюенсом  $4.8 \cdot 10^{20}$  атом·м<sup>-2</sup>

Fig. 9. A histogram of the distribution of geometrical factors of increase of the electric field over nanosysteme, which formed during the bombardment of helium ions with an average energy of 350 eV and a fluence of  $4.8 \cdot 10^{20}$  atom·m<sup>-2</sup>



Наличие таких нановыступов на облученной поверхности не только полностью локализует ионную и электронную эмиссии, но и в значительной степени определяет предельное время функционирования игольчатых эмиттеров в режиме отбора автоэлектронного тока. Как следует из рис. 10, вероятность разрушения молибденовых игольчатых эмиттеров при отборе автоэлектронного тока становится существенной при флюенсах облучения ионами гелия, превышающих  $3 \cdot 10^{20}$  атом·м<sup>-2</sup>.

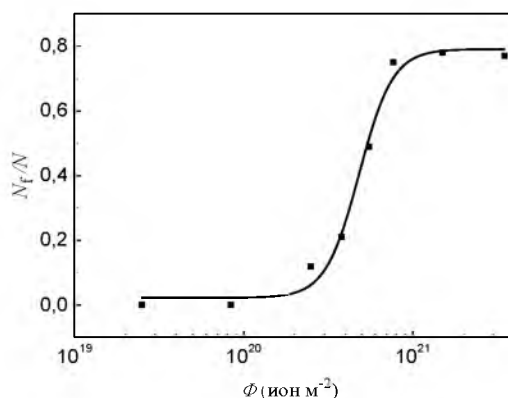


Рис. 10. Гистограмма зависимости вероятности инициирования разрушения молибденовых эмиттеров бомбардировкой ионами гелия от флюенса.  $\langle W \rangle = (200-350)$  эВ,  $F = (4.0-4.3) \cdot 10^9$  В·м<sup>-1</sup>

Fig. 10. The histogram based on the probability of fracture initiation molybdenum emitte-ditch bombardment with ions from helium fluence.  $\langle W \rangle = (200-350)$  eV,  $F = (4.0-4.3) \cdot 10^9$  V·m<sup>-1</sup>

### Выводы

Исследованы на атомном уровне элементарные акты радиационной повреждаемости поверхности нанокристаллов вольфрама и молибдена. В результате ионно-микроскопических экспериментов и математического моделирования установлено, что:

Низкоэнергетичная бомбардировка ускоренными атомами и ионами гелия приводит к существенной подвижности адатомов.

Большинство диффузионных скачков ориентировано вдоль направления пучка бомбардирующих частиц.

Существует широкий спектр длин радиационно-стимулированных скачков, включая прыжки дальнего порядка, существенно превышающие значения межатомных расстояний.

Помимо традиционного прыжкового механизма, на периферийных участках плотноупакованных террас обнаружен «обменный» механизм радиационно-стимулированной поверхностной самодиффузии.

Облучение низкоэнергетичными ионами флюенсами, превышающими  $10^{19}$  атом·м<sup>-2</sup> приводит формированию на поверхности нановыступов, существенно изменяющих полевую эмиссионную способность игольчатых эмиттеров.

**Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект №15-12-10019). А также НАН Украины в рамках совместных научных проектов НАНУ–РФФИ (проект 32-08-15/1).**



### Список литературы

1. Nguyen-Manh D., Lavrentiev M.Y., Muzyk M., Dudarev S.L. 2012. First-principles models for phase stability and radiation defects in structural materials for future fusion power-plant applications. *Journal of Materials Science*, 21 (47): 7385-7398.
2. Dranova Zh.I., Ksenofontov V.A., Kul'ko V.B., Mikhailovskij I.M., Sadanov E.V. 1980. Ion field microscope with a source of accelerated atoms. *Instruments and Experimental Techniques*, 6(13). Iss. 02: 166-167.
3. Miller M.K., Cerezo A., Hetherington M.G. and Smith G.D.W. 1996. *Atom Probe Field Ion Microscopy*. Oxford University: Oxford: 520.
4. Mazilova T.I., Sadanov E.V., Ksenofontov V.A., Mikhailovskij I.M. 2013. One-dimensional surface damage at grazing projectile incidence: linear vacancy chains on channeled planes. *Surface Science*, 617: 136-140.
5. Neklyudov I.M., Sadanov E.V., Tolstolutskaia G.D., Ksenofontov V.A., Mazilova T.I. and Mikhailovskij I.M. 2008. Interstitial atoms in tungsten: Interaction with free surface and in situ determination of formation energy. *Phys. Rev. B.*, 78: 115418 (4pp).
6. Mazilova T.I., Mikhailovskii, Sadanov E.V. 2001. Mechanism of low-temperature ion-bombardment-activated surface self- I. M. diffusion. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 73. Iss. 8: 425-428.
7. Yudi Rosandi, Herbert M. Urbassek. 2006. Grazing incidence impact of ions on an adatom-covered surface: Molecular-dynamics study of sputtering, surface-damage formation and ion-induced adatom mobility. *Surface Science*, 600. Iss. 6: 1260-1264.
8. Dranova Zh.I., Mikhailovskii I.M. 1970. Low-temperature surface migration of tungsten, activated by ion bombardment. *Sov. Phys.-Solid State (Engl. Transl.)*, 12, 1970: 104. : Translated from *Fiz. Tverd. Tela*; 12,1970: 132.
9. Karolewski M.A. 2001. Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals. *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, 153. Iss. 3.: 239-255.
10. Mazilov A.A. 2015. Determination of the spectra of ion He and H<sub>2</sub> bombardment of autoemitter surface. *Problems of atomic science and technology*, № 2: 35-38.
11. Antezak G., Ehrlich G. *Surface Diffusion: Metals, Metal Atoms, and Clusters*. Cambridge University Press, 2010.