

УДК 621.382:537.534.8

РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИОНОВ С ПОРИСТЫМИ СТРУКТУРАМИ

© 2024 г. Н. Н. Никифорова^{a, b}, Б. Л. Оксенгендлер^{b, c, *, *}, Х. Б. Ашуров^a,
Б. Р. Кутлимуротов^a, С. Е. Максимов^a, О. А. Галкина^c

^aИнститут ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова Академии наук Республики Узбекистан,
Ташкент, 100125 Узбекистан

^bИнститут материаловедения НПО “Физика-Солнце” Академии наук Республики Узбекистан,
поселок “Солнце”, Паркентский район, Ташкентская область, 102226 Узбекистан

^cИнститут химии и физики полимеров Академии наук Республики Узбекистан, Ташкент, 100128 Узбекистан

*e-mail: oksengendlerbl@yandex.ru

Поступила в редакцию 29.12.2023 г.

После доработки 28.02.2024 г.

Принято к публикации 28.02.2024 г.

Для объектов с топологической и фрактальной размерностью (на примере “кулоновского взрыва”) рассмотрена физика модификации электронно-стимулированных процессов в пористых средах при облучении многозарядными ионами. Построена квазиодномерная модель, представляющая собой удобный методический аппарат, описывающий характерные явления в различных средах. Полученные результаты оценены в рамках концепции “сложность”.

Ключевые слова: радиационные эффекты, пористые структуры, “кулоновский взрыв”, оже-процесс, синергетика, “сложность”, ионное распыление.

DOI: 10.31857/S1028096024100104, **EDN:** SGYZCX

ВВЕДЕНИЕ

В начале XXI века в физике конденсированного состояния вещества произошли существенные изменения: интерес исследователей сместился к объектам, для которых роль структуры оказалась более важной, чем природа их физико-химической связи. С большой степенью общности как для живой, так и для неживой природы были выявлены пять типов таких структурных характеристик: “нано”, “фрактальность”, “малая размерность”, “хиральность”, “иерархичность”. В науках, связанных с радиационным воздействием, универсальная значимость указанных характеристик проявилась наиболее ярко, чему способствовали характерные для радиации условия сильной неравновесности и нелинейности [1]. Обнаруженная возможность трактовки радиационных процессов (включая ионное распыление) в рамках синергетики [2] на современ-

ном этапе позволила объединить более ранние и современные результаты в рамках концепции “сложность” (complexity) [3]. Эта концепция, введенная в 1977 г. и сконструированная на базе аксиом нескольких наук (физики, химии, биологии, кибернетики) [4], оказалась очень эффективной именно для сложных систем, в том числе и радиационной физики конденсированных сред. Применительно к радиационной физике ее использование дало возможность сформулировать три парадигмы методологии радиационных эффектов (рис. 1).

В настоящей работе проявления конкретного эффекта локальной деструкции поверхности и приповерхностных областей неметаллических твердых тел при воздействии медленных многозарядных ионов по механизму оже-деструкции (“кулоновский взрыв” [5]) рассмотрены с акцентом на комбинацию локальных (структурных)

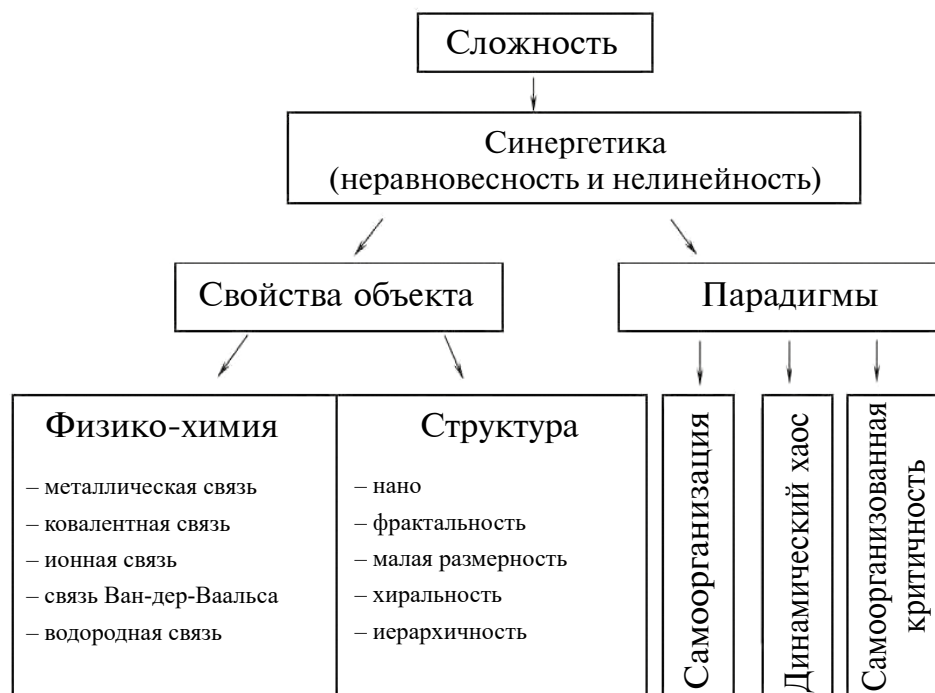


Рис. 1. Схема расширенной концепции “Сложность” применительно к радиационным эффектам в сложных средах.

и нелокальных (физико-химических) особенностей облучаемой среды, что наиболее ярко проявляется в пористых объектах.

СОВРЕМЕННЫЕ АСПЕКТЫ МЕХАНИЗМА ОЖЕ-ДЕСТРУКЦИИ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ И ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Проблемы деструкции молекулярных и твердотельных систем при ионизации глубоких оболочек радиацией различного типа имеют весьма богатую историю. С момента открытия эффекта Оже [6, 7] все дальнейшие исследования явления с большой степенью общности можно разделить на два класса: чисто электронные явления и электронные явления, приводящие к деструкции атомной структуры [8]. Именно к последнему классу явлений и относится оже-деструкция молекулярных и твердотельных систем, изучению которых посвящены многие работы, в том числе основополагающие [9, 10]. Особо важную роль сыграли многочисленные исследования оже-деструкции, приводящей к дефектам в кристаллах [11–16]. Параллельно с изучением этих объемных явлений очень серьезные результаты были получены и в радиационной физике поверхности (распыление многозарядными ионами) [8, 17]. Наиболее острая и многолетняя дискуссия была по поводу конкуренции двух процессов: разлета ионов с образованием дефекта или нейтрализа-

ции заряженной области электронным окружением [12, 13]. Это сформулировало парадокс Декстера–Варли, суть которого состоит в разрушении локальной области кристалла с нескомпенсированным зарядом $Z \gg 1$, несмотря на то, что характерные времена релаксации этого заряда путем разлета ионов (деструкции) τ_+ много больше среднего времени “заливания” электронной жидкостью τ_e , т.е. $\tau_+ \gg \tau_e$. Решение этого парадокса, представленное позднее в [14], связано исключительно с квантовой природой электронов, для которых характерны процессы и с $\tau < \tau_e$, и с $\tau > \tau_e$. Деструкция происходит, когда $\tau > \tau_+$, а вероятность этого процесса определяется величиной $\chi = \exp\left(-\frac{\tau_+}{\tau_e}\right)$ [14]. Следует отметить, что разре-

шение парадокса Декстера–Варли смогло объяснить разницу в вероятности оже-деструкции различных материалов [18]. Термин “оже-деструкция” здесь объединяет локальное разрушение объектов, обусловленное совокупностью последовательных оже-каскадов, инициированных ионизацией K -оболочек атомов объекта. Принципиально важно, что решение парадокса Декстера–Варли оказалось основополагающим для решения проблемы дезактивации коронавируса (оже-деструкция молекулы РНК), став базой для лечения ковид-пневмоний рентгеновским подпороговым низкодозовым облучением [19]. Последнее исследование

такого типа, в котором обнаружена возможность дезактивации паразитных мутаций оже-каскадом единичных оже-переходов на основе так называемой радиационной тряски, существенно расширило понимание деталей оже-процессов в плане их применения в медицине [20, 21].

Классическая схема реализации кулоновского взрыва, инициированного оже-каскадом при ионном облучении [8], обогащенная идеей электронно-ионной конкуренции [14], состоит в следующем. Многозарядный ион, оказавшись на малом расстоянии от поверхности, в результате квантового процесса перехватывает электроны из i -й оболочки атома облучаемого вещества, образуя i -ю дырку (сечение σ_i). Она распадается и путем оже-каскада, размножаясь, “всплывает” в валентную оболочку, образованную облучаемым атомом и его окружением (вероятность этого процесса $\alpha_A(Z)$, где Z — заряд). Отметим, что понятия “заливание” и “всплывание” электронов нередко употребляют вместо термина “многоэлектронная рекомбинация” для подчеркивания именно “многоэлектронности” процесса (происходит из концепции ферми-жидкости Ландау). Это крайне нестабильное состояние в твердом теле, образовавшееся за краткое время ($\tau_A \approx 10^{-15}$ с), в дальнейшем распадается за время порядка $\tau_+ \approx 10^{-14} - 10^{-13}$ с путем разлета положительных осколков молекулярной системы. Однако этому разлету противодействует другой канал дезактивации неустойчивого возбужденного состояния, а именно электронное “заливание”. В такой конкуренции оже-деструкция локальной области реализуется с конечной вероятностью $\chi = \exp\left(-\frac{\tau_+}{\tau_e}\right)$ [14], где τ_e — среднее время заливания (многоэлектронной рекомбинации), и именно эта величина регулирует вероятность (сечение) всего процесса кулоновского взрыва.

Таким образом, сечение деструкции окончательно определяется в виде, который учитывает и процесс электронной встряски, приводящей к спектру оже-зарядов [3, 16, 19]:

$$\sigma_d = \int_{(Z)} \left\{ \sum_i \sigma_i \tilde{\alpha}_i(Z) \exp(-\tau_+/\tau_e(Z)) \right\} dZ \approx \sigma_k \alpha_A \exp(-\tau_+/\tau_e). \quad (1)$$

Важно, что формула (1) сочетает локальность процесса через σ_i и $\alpha(Z)$ и нелокальность объекта через τ_e . Именно τ_e , отражая свойства материала, фактически регулирует величину эффекта оже-деструкции.

РОЛЬ ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ РАЗМЕРНОСТИ В ПРОТЕКАНИИ КУЛОНОВСКОГО ВЗРЫВА В КРИСТАЛЛЕ

На рис. 1 в колонке структурных характеристик особую роль играет пара “фракталы—малая размерность”. Действительно, простейшие (и весьма показательные) варианты — топологические размерности D_T локальной области, в которой имеет место оже-деструкция. Подчеркнем, что топологическая размерность D_T — целочисленная величина в отличие от нецелого числа фрактальной размерности D_f . Из формулы (1) следует, что особенно чувствителен вклад (экспоненциальный) величины τ_e . В связи с этим рассмотрим роль D_T в τ_e (рис. 2).

Видно, что оже-каскад — трехмерное событие, т.е.

$$\frac{1}{\tau_e} \approx 2D_3 \left(\frac{I}{\hbar} \right), \quad (2)$$

где I — обменный интеграл между позициями X_i ($i = 1, 2, 3, \dots$). Таким образом, сечение оже-дефектообразования зависит от размерности как

$$\sigma_d^3 = a_3 \exp(-b_3 D_3), \quad (3)$$

где a, b — константы. Для плоского случая (поверхность, $D_T = D_2$) имеем (рис. 2б):

$$\sigma_d^2 = a_2 \exp(-b_2 D_2). \quad (4)$$

В упрощенном одномерном случае (рис. 2в) имеем:

$$\sigma_d^1 = a_1 \exp(-b_1 D_1), \quad (5)$$

Обобщая, получим (рис. 3):

$$\ln \sigma_d^{D_T} = A_T - B_T D_T, \quad (6)$$

Здесь константы A_T и B_T — безразмерные величины, означающие, во-первых, линейность по D_T , а во-вторых, то, что речь идет о топологических объектах в отличие от возможных случаев с D_f .

РОЛЬ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТИ (ФРАКТАЛЬНОСТИ) СТРУКТУРЫ ОБЪЕКТА В ОЖЕ-ДЕСТРУКЦИИ

Значительный интерес представляет вопрос о модификации оже-деструкции при переходе к фрактальным средам. В рамках грубой “плотностной оценки”, поскольку число атомов обла-

сти с характерным размером R выражается в виде $N \sim R^{D_T}$ и $N \sim R^{D_f}$ для нефрактальной и фрактальной сред, а зависимость объемов $V_T \sim R^{D_T}$ и $V_f \sim R^{D_f}$, соответственно, отношение плотностей для размерностей D_T и D_f будет:

$$\rho_{rel} \sim R^{-(D_T - D_f)}. \quad (7)$$

Таким образом, $\rho_{rel} \neq 1$.

В соответствии с этим имеем:

$$\ln \left[\frac{\sigma_d^T}{\sigma_d^f} \right] \sim \text{const} (D_f - D_T). \quad (8)$$

Из формулы (1) видно, что фрактальность среды важна именно для множителя $\exp(-\tau_+/\tau_e)$, т.е. для τ_e . Для изучения этого аспекта может быть построена модель квазиодномерной цепи (потенциальных ящиков), на которую наложен кулоновский потенциал оже-заряда Z . Схемы этих двух случаев представлены на рис. 4.

Упорядоченная цепочка

Видно, что потенциал $-Ze^2/r$ снимает все барьеры в области:

$$R_{\text{безбар}} = \delta \sqrt{Ze^2/\delta \epsilon}, \quad (9)$$

где δ — половина ширины барьера, ϵ — диэлектрическая проницаемость. В этом случае заливание дырки идет по типу металла, т.е. $\tau_e \approx 1/\omega_{pl}$, где ω_{pl} — плазменная частота, имеем $\exp(-\tau_+/\tau_e) \rightarrow \exp(-\tau_+ \omega_{pl})$.

Неупорядоченная цепочка

Выберем тип неупорядоченности по модели Андерсона [22] (рис. 4б). Очевидно, что $R_{\text{безбар}}$ будет в области, в которой снимается максимум барьера, что соответствует максимальной глубине электронных состояний в ямах Андерсона [22]:

$$Ze^2 e^2 (\delta/R_{\text{безбар}}^2) = \epsilon_{\text{max}}, \quad (10)$$

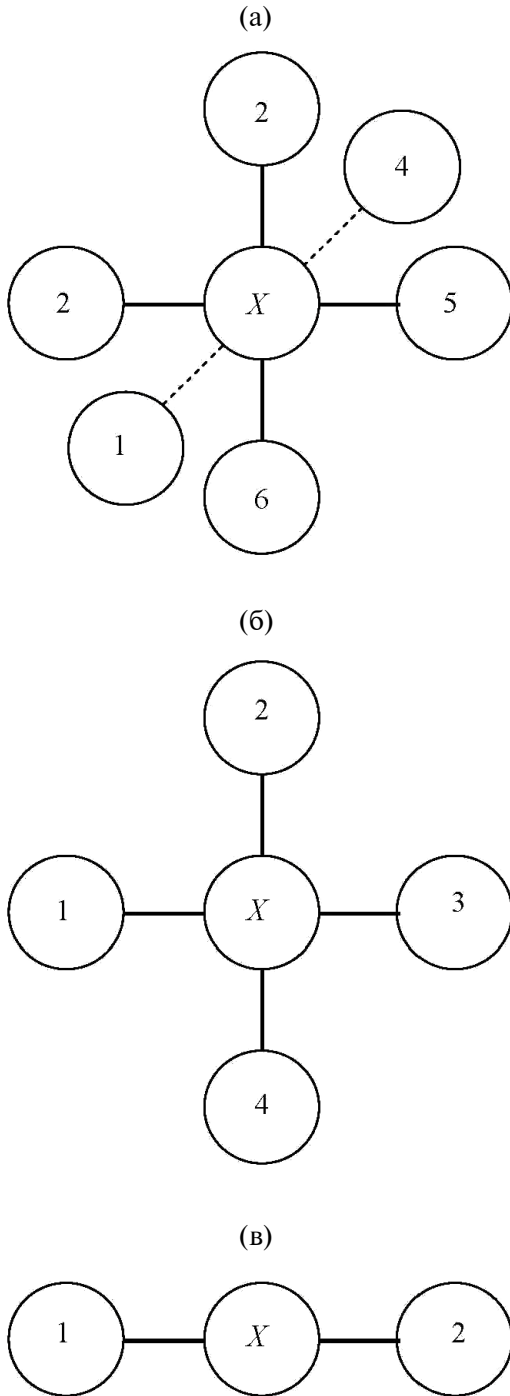


Рис. 2. Атомные структуры с различной топологической размерностью: а — трехмерная; б — двумерная; в — одномерная цепочка.

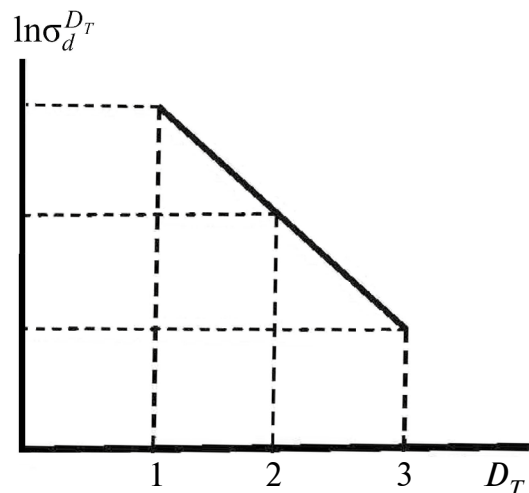


Рис. 3. Характерная зависимость сечения деструкции от топологической размерности.

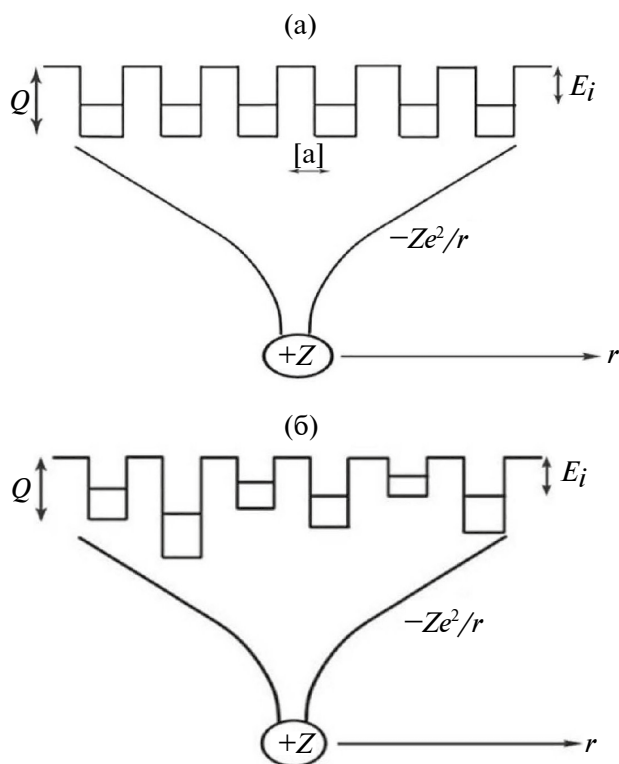


Рис. 4. Схема наложения кулоновского поля оже-заряда на потенциальный рельеф электронов в случае: а — строго периодического рельефа электронного потенциала; б — аperiodической цепи Андерсона.

Тогда образующаяся область металлизации будет существенно иной, что дает $Ze^2e^2(\delta/R_{\text{безбар}}^2) = \epsilon_{\text{max}}$. Говоря о физике явления, можно сказать, что если бы ямы были одинаковы, то движение электрона ускорялось бы в области металлизации без потерь когерентности, тогда как в случае неодинаковых ям (например, фрактального типа, что имеет место при взаимодействии ионов с пористыми структурами) теряется когерентность состояния электрона в области металлизации и его движение замедляется, что немедленно увеличивает χ .

ОЖЕ-ДЕСТРУКЦИЯ НА ВНУТРЕННЕЙ ПОВЕРХНОСТИ ФРАКТАЛЬНЫХ ПОР

Среди фрактальных объектов особое значение с практической точки зрения имеют неправильные поры [23]. Эти “неправильности” [24] удобно характеризовать фрактальной размерностью (D_f). Пример такой фрактальной поры со случайным чередованием кривизны внутренней поверхности показан на рис. 5. Случайность кривизны приводит к случайности интегралов переноса I электронных

волновых функций соседних атомов $I = I(\text{var})$ (рис. 6), а значит, и времени оседлой жизни дырок, что пропорционально времени заливания оже-зарядов Z , т.е. $\tau_e \sim \hbar/I(\text{var})$. Это приводит к выраже-

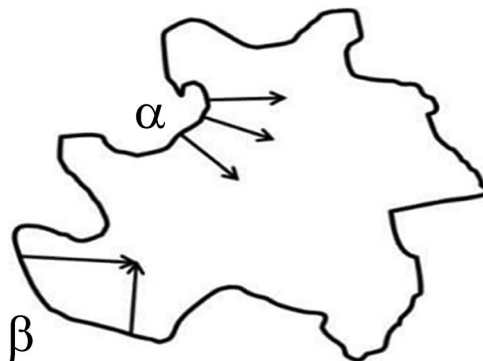


Рис. 5. Фрактальная пора, содержащая как области вогнутой поверхности α , где взаимодействие соседних атомов подавлено, так и выпуклую область β , в которой взаимодействие соседних атомов усилено.

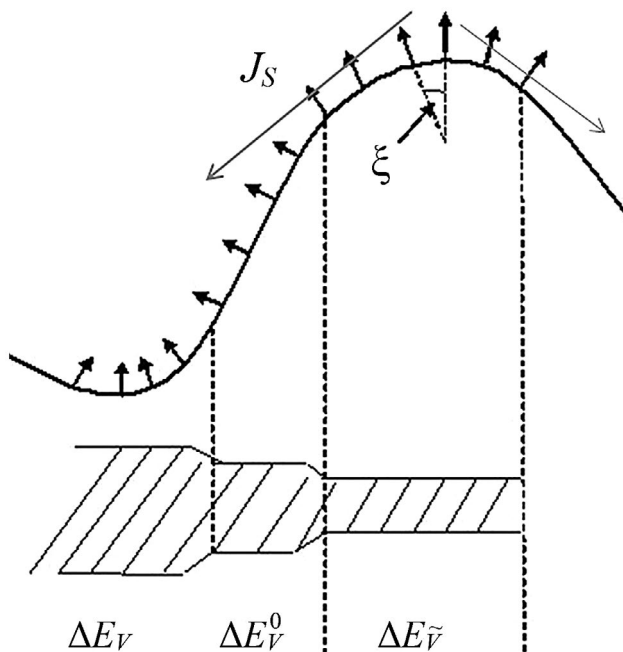


Рис. 6. Области фрактальной поверхности с различной кривизной локальных областей и, соответственно, с различным перекрытием волновых функций соседних атомов: ΔE_V^0 — соответствует ширине разрешенной валентной зоны для плоских участков поверхности; ΔE_V — для вогнутых участков поверхности с увеличенной шириной валентной зоны; $\Delta E_{\tilde{V}}$ — для выпуклых участков с уменьшенным перекрытием волновых функций соседних атомов и с сужением валентной зоны. Этому соответствуют как меньшая, так и большая радиационная повреждаемость соответственно.

нию $\sigma_d(\text{var}) \sim \exp(-\tau_+/\tau_e(\text{var}))$. Здесь $I(\text{var})$ означает, что интеграл переноса I — изменяющаяся величина, поэтому $\tau_e(\text{var})$ — также изменяющаяся величина (рис. 6). Качественно можно сделать вывод, что повреждаемость поверхности поры путем “кулоновском взрыва” (через механизм оже-деструкции) такова: в большей степени повреждаются выпуклые локальные области на внутренней поверхности поры, что приводит к сфероидизации пор по мере увеличения дозы ионизирующего облучения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построенная модель “кулоновского взрыва” по механизму оже-деструкции хорошо иллюстрирует модификацию радиационного процесса дефектообразования для широкого класса сред, являющихся актуальными объектами на сегодняшний день (рис. 1). Существенно, что непосредственное применение подобного типа моделирования особенно реально проявляется в пористых средах при ионном облучении. Помимо очевидной прикладной значимости исследование процессов взаимодействия ионов с пористыми материалами как с уникальным типом облучаемых объектов с фундаментальной точки зрения вносит существенный вклад в развитие новой концепции “сложность” [4]. Она существенно шире концепции синергетики, в частности, к ней добавляется еще одна парадигма (рис. 1) — “самоорганизованная критичность”. Кроме того, вместо моделей Пригожина [25], использующих коэффициенты диффузии компонентов, есть такой многообещающий подход, как дифференциальные уравнения с дробными производными [26, 27]. Развитие новой концепции “сложность”, касающейся и общей физики конденсированного состояния вещества, а также ее распространение в области взаимодействия ионов с различными объектами и радиационной физики в целом представляется весьма значимым и актуальным.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Oksengendler B.L., Maksimov S.E., Turaeva N.N., Djurabekova F.G.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2014. V. 326. P.45. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2013.09.040>
2. *Максимов С.Е., Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю.* // Поверхность. Рентген., синротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 4. С. 42. <https://doi.org/10.7868/S0207352813040161>
3. *Оксенгендлер Б.Л., Зацепин А.Ф., Аширметов А.Х., Тураева Н.Н., Сулейманов С.Х., Никифорова Н.Н., Ашууров Х.Б.* // Поверхность. Рентген., синротр. и нейтрон. исслед. 2022. № 6. С. 53. <https://doi.org/10.31857/S1028096022060139>
4. *Бак П.* Как работает природа. М.: УРСС, 2013. 276 с.
5. *Parilis E.S., Kishinevsky L.M., Turaev N.Y., Baklitzky B.E., Umarov F.F., Verleger V.Kh., Nizhnaya S.L., Bitensky I.S.* Atomic Collisions on Solid Surfaces. Amsterdam: North-Holland, 1993. 664 p.
6. *Auger P.* // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. 1923. V. 177. P. 169.
7. *Meitner L.* // Z. Physik. 1922. B. 9. № 1. S. 131. <https://doi.org/10.1007/BF01326962>
8. *Парилус Э.С.* Эффект Оже. Ташкент: Фан, 1969. 205 с.
9. *Szilard L., Chalmers C.A.* // Nature. 1934. V. 134. P. 462. <https://doi.org/10.1038/134462b0>
10. *Cooper J.W.* // Phys. Rev. 1962. V. 128. P. 681. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.128.681>
11. *Platzman R.L.* // Radiat. Res. 1955. V. 2. P. 1. <https://doi.org/10.2307/3570224>
12. *Varley J.A.* // Nature. 1954. V. 174. P. 886. <https://www.nature.com/articles/174886a0>
13. *Dexter D.L.* // Phys. Rev. 1960. V. 118. P. 934. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.118.934>
14. *Yunusov M.S., Zaikovskaya M.A., Oksengendler B.L., Tokhirov K.R.* // Phys. Stat. Sol. A. 1976. V. 35. P. 145. <https://doi.org/10.1002/pssa.2210350260>
15. *Turaeva N.N., Oksengendler B.L., Ruban I.N., Rashidova S.* // Dokl. Chem. 2002. V. 387. P. 302. <https://doi.org/10.1023/A:1021174422477>
16. *Suleymanov S.X., Oksengendler B.L., Kulagina N.A.* // Crystallogr. Rep. 2021. V. 66. № 6. P. 1066. <https://doi.org/10.1134/S1063774521060419>
17. *Fleischner R., Price P., Walker R.* Nuclear Tracks in Solids. Berkeley: University of California Press, 1975. 605 p.
18. *Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н.* Радиационная физика конденсированных сред. Т. 1. Ташкент: Фан, 2006. 136 с.
19. *Oksengendler B.L., Ashirmetov A.Kh., Turaeva N.N. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2022. V. 512. P. 66. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2021.12.009>
20. *Yokoya A., Ito T.* // Int. J. Radiat. Biol. 2017. V. 93. № 8. P. 743. <https://doi.org/10.1080/09553002.2017>

21. *Gharibkandi N.A., Gieraltowska J., Wawrowicz K., Bilewicz A.* // *Materials*. 2022. V. 15. № 3. P. 1143. <https://doi.org/10.3390/ma15031143>
22. *Anderson P.W.* // *Phys. Rev.* 1958. V. 109. P. 1492. [http://refhub.elsevier.com/S0168-583X\(21\)00419-5/h0255](http://refhub.elsevier.com/S0168-583X(21)00419-5/h0255)
23. *Тихомиров В.П., Горленко О.А., Измеров М.А.* // *Изв. Самарского науч. центра РАН*. 2011. Т. 13. № 4(3). С. 879.
24. *Федер Е.* Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.
25. *Nicolis G., Prigogine I.* *Exploring Complexity, An Introduction*, New York: W. H. Freeman & Company, 1989. 328 p.
26. *Чукбар К.В.* // *ЖЭТФ*. 1995. Т. 108. Вып. 5 (11). С. 1875.
27. *Олемской А.И., Флат А.Я.* // *УФН*. 1993. Т. 13. Вып. 12. С. 1.

Radiation-Stimulated Processes under Interaction of Ions with Porous Structures

**N. N. Nikiforova^{1,2,*}, B. L. Oksengendler^{2,3}, Kh. B. Ashurov¹, B. R. Kutlimurotov¹,
S. E. Maksimov¹, O. A. Galkina³**

¹*Arifov Institute of Ion Plasma and Laser Technologies, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Tashkent, 100125 Uzbekistan*

²*Institute of Materials Science, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Scientific and Production Association “Physics-Sun”, Tashkent, 100084 Uzbekistan*

³*Institute of Polymer Chemistry and Physics, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Tashkent, 100128 Uzbekistan*

*e-mail: oksengendlerbl@yandex.ru

For objects with topological and fractal dimensions (using the example of a “Coulomb explosion”), the physics of modification of electron-stimulated processes in porous media under irradiation with multiply charged ions is considered. A quasi-one-dimensional model has been constructed, which is a convenient methodological approach that describes characteristic phenomena in various media. The results obtained are assessed within the framework of the “complexity” concept.

Keywords: radiation effects, porous structures, “Coulomb explosion”, Auger process, synergetics, “complexity”, ion sputtering.