

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 537.534.7:537.534.8

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ АТОМОВ КОМПОНЕНТ НАЗАД И НА  
ПРОСТРЕЛ ПРИ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКЕ  
МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ И КВАЗИАМОРФНОЙ  
ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ МИШЕНЕЙ**

В. Н. Самойлов, В. А. Эльтеков, Б. Фритч (ГДР), Н. Г. Анянзева

*(кафедра общей физики для физического факультета; кафедра математики)*

Для сравнения характеристик распыления двухкомпонентных монокристаллической и аморфной мишеней применена динамическая модель блока атомов. Показано, что различие этих характеристик обусловлено не только нарушением структуры, но и двухкомпонентным составом мишени.

**Введение.** Под действием ионной бомбардировки в ряде материалов (в том числе двухкомпонентных) происходит аморфизация поверхности, что приводит к изменению распространения каскадов столкновений и изменению характеристик распыленных частиц. Широкое использование процесса распыления, разработка методов анализа структуры и состава поверхности с помощью ионных пучков определяют растущий интерес к исследованиям особенностей взаимодействия ионов с аморфной мишенью по сравнению с взаимодействием с монокристаллической мишенью того же состава. Такие исследования могут углубить представления о взаимодействии ионов с твердым телом в зависимости от его структуры. Аналитическое рассмотрение распространения каскадов столкновений уже проводилось в ряде работ для аморфных мишеней бинарного состава. В случае монокристаллической мишени аналитические методы сталкиваются с серьезными трудностями не только для двухкомпонентной, но и для однокомпонентной монокристаллической среды. Поэтому большое значение приобретает моделирование на ЭВМ.

В настоящее время имеется большое число работ по машинному моделированию распыления как монокристаллических, так и аморфных твердых тел. До настоящего времени моделирование процесса распыления аморфной среды под действием ионной бомбардировки проводилось по методу Монте-Карло с использованием приближения бинарных взаимодействий. Бинарная и динамическая модели достаточно широко используются для расчетов распыления монокристаллов. Однако до сих пор не проводилось сравнение рассчитанных по одной модели характеристик распространения каскадов столкновений и распыления при ионной бомбардировке аморфной и монокристаллической мишеней, в том числе для двухкомпонентного случая. В настоящей работе сделана попытка такого сравнения на базе динамической модели блока атомов. Для обоих типов мишени рассчитаны коэффициенты распыления и энергетические спектры атомов компонент, распыленных назад и на прострел.

**Модель расчета.** В наших предыдущих работах мы применили метастабильную динамическую модель блока атомов для исследования особенностей распыления назад и на прострел как однокомпонентных (Co, Ni) (см., например, [1]), так и двухкомпонентной ( $VSi_2$ ) [2] монокристаллических мишеней. Эта модель была использована и в настоящей работе. Кристаллит состоял из 397 атомов, расположенных в пяти слоях идеальной решетки кристалла  $VSi_2$  (структура типа C40), парал-

лельных плоскости (0001). Блок атомов такой величины широко используется в расчетах распыления монокристаллов по динамической модели. Кристаллит имел форму цилиндра высотой  $\sim 9 \text{ \AA}$  и радиусом  $\sim 12 \text{ \AA}$ . Он был окружен областью взаимодействия в форме прямоугольного параллелепипеда, грани которого отстояли от блока атомов на  $4 \text{ \AA}$ . Ионы  $\text{Ne}^+$  ( $m_{\text{Ne}^+} < m_{\text{Si}} < m_{\text{V}}$ ) с энергией  $10 \text{ кэВ}$  падали по нормали к бомбардируемой грани (0001). Взаимодействие ион-атом и атом-атом описывалось потенциалом, состоящим из двух частей: обратно-квадратичного потенциала и потенциала Борна-Майера. Константы потенциала выбирались, как в работе [2]. Интегрирование уравнений движения в задаче многих тел проводилось по методу «средней силы»; процесс интегрирования прекращался, когда энергия каждого из атомов внутри области взаимодействия становилась меньше  $4,64 \text{ эВ}$ . При моделировании распыления монокристалла  $\text{VSi}_2$  тепловые смещения атомов кристалла не учитывались. Коэффициенты распыления назад  $S_{\uparrow\text{V}}$  и  $S_{\uparrow\text{Si}}$  и на прострел  $S_{\downarrow\text{V}}$  и  $S_{\downarrow\text{Si}}$  и энергетические спектры распыленных атомов компонент рассчитывались с учетом сферического потенциального барьера на поверхности (учитывались только частицы, распыленные через верхнюю и нижнюю грани области взаимодействия). Разница энергий связи атомов V и Si на поверхности не учитывалась. Значение энергии связи полагалось равным  $4,64 \text{ эВ}$ . В качестве модели аморфной среды было предложено использовать модель жидкости. Попытка создать модель «жидкого» блока с помощью случайных смещений всех атомов кристаллита, равномерно распределенных по каждой координате и имеющих максимальное отклонение от узла, равное половине расстояния до ближайшего соседа, не привела к успеху, так как создавала в блоке собственный источник энергии из-за сильного отталкивания отдельных слишком близко расположенных друг к другу атомов. Поэтому переход к модели жидкости проводился путем аномального увеличения «тепловых» смещений атомов из узлов решетки в модели Дебая-Валлера, соответствующих температуре плавления. В настоящей работе амплитуды смещений атомов V и Si из узла считались одинаковыми и равными  $x_{\text{max}} = 0,337 \text{ \AA}$ . Смещения атомов по любой координате не зависели от смещений по другим координатам и от смещений остальных атомов кристалла и были распределены равномерно в интервале  $(-x_{\text{max}}, x_{\text{max}})$ . Каждый следующий ион падал на новую реализацию такой квазиаморфной среды.

**Полученные результаты и обсуждение.** Рассчитанные коэффициенты распыления атомов компонент назад и на прострел для  $\text{VSi}_2$  с идеальной решеткой и квазиаморфного  $\text{VSi}_2$  представлены в таблице.

Коэффициенты распыления атомов V и Si назад и на прострел, ат./ион

	$S_{\uparrow\text{V}}$	$S_{\downarrow\text{V}}$	$S_{\uparrow\text{Si}}$	$S_{\downarrow\text{Si}}$	$1/2 S_{\uparrow\text{Si}}$	$1/2 S_{\downarrow\text{Si}}$
Идеальная решетка	0,31	0,38	0,66	0,83	0,33	0,42
Квазиаморфная мишень	0,20	0,41	0,56	0,74	0,28	0,37

Там же даны коэффициенты распыления атомов Si, приведенные к равной концентрации атомов компонент ( $1/2 S_{\uparrow\text{Si}}$  и  $1/2 S_{\downarrow\text{Si}}$ ). При моделировании распыления монокристалла кобальта ионами  $\text{Ar}^+$  с энергией

10 кэВ, падающими по нормали к облучаемой поверхности, введение тепловых колебаний приводило к росту коэффициентов распыления атомов назад и на прострел при облучении грани (0001) г.п.у. Со и к их уменьшению при облучении грани (111) г.ц.к. Со. Полученные для кобальта результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [3] для разных по прозрачности граней монокристалла меди (ростом коэффициента распыления более прозрачной грани (011) Cu и уменьшением коэффициента распыления менее прозрачной грани (111) Cu при возрастании температуры мишени). Сравнение позволяет установить аналогию между рассматриваемым случаем бомбардировки грани (0001)  $VSi_2$  ионами  $Ne^+$  и облучением грани (111) г.ц.к. Со ионами  $Ag^+$ . Несмотря на то что при переходе от идеального кристалла к квазиаморфной среде вероятность столкновения ионов  $Ne^+$  с атомами повышается, что сопровождается уменьшением прохождения ионами пяти слоев кристалла и увеличением вклада энергии в кристаллит, как видно из таблицы,  $S_{\uparrow V}$ ,  $S_{\uparrow Si}$  и  $S_{\downarrow Si}$  уменьшаются, а  $S_{\downarrow V}$  лишь слабо меняется. Это уменьшение связано с тем, что число атомов компонент, пересекающих верхнюю и нижнюю грани области взаимодействия с энергией  $E > 4,64$  эВ, уменьшается (для  $E < 4,64$  эВ оно может возрастать). Отношение  $^{1/2}S_{\uparrow Si}/S_{\uparrow V}$  для случая идеальной решетки больше единицы ( $\sim 1,06$ ), что свидетельствует о преимущественном распылении атомов легкой компоненты. При переходе к квазиаморфной среде это отношение существенно возрастает (до  $\sim 1,40$ ) и, таким образом, эффект преимущественного распыления атомов легкой компоненты усиливается. Преимущественное распыление назад атомов легкой компоненты соответствует результатам большого числа экспериментальных работ по распылению поликристаллов, а также результатам машинного моделирования распыления аморфных двухкомпонентных мишеней (см., напр., [4]). Отношение  $S_{\downarrow V}/^{1/2}S_{\downarrow Si}$  для случая идеальной решетки меньше единицы ( $\sim 0,92$ ), что соответствует преимущественному прохождению на прострел атомов легкой компоненты. При переходе к квазиаморфной среде отношение  $S_{\downarrow V}/^{1/2}S_{\downarrow Si}$  становится больше единицы ( $\sim 1,11$ ). Таким образом, в случае квазиаморфной среды на прострел преимущественно распыляются атомы тяжелой компоненты (как это наблюдалось экспериментально при распылении поликристаллов и было получено в расчетах на ЭВМ распыления аморфной мишени [5]).

Энергетические спектры атомов V и Si, распыленных на прострел,  $N(E)_{\downarrow V}$  и  $^{1/2}N(E)_{\downarrow Si}$  для случая бомбардировки идеальной решетки представлены на рис. 1. Основная доля частиц в обоих спектрах имеет

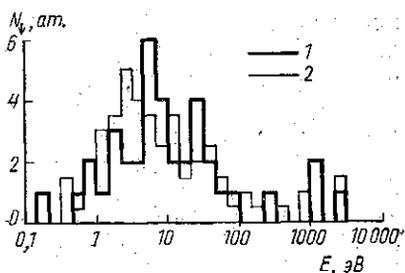


Рис. 1. Энергетические спектры атомов V  $N(E)_{\downarrow V}$  (1) и Si  $^{1/2}N(E)_{\downarrow Si}$  (2), распыленных на прострел при нормальном падении ионов  $Ne^+$  с энергией 10 кэВ на грань (0001) монокристалла  $VSi_2$ . Спектр атомов Si приведен к равной концентрации атомов компонент

энергию в диапазоне от 1 до 70 эВ. Максимум спектра прошедших атомов Si смещен по сравнению с максимумом спектра атомов V в сторону меньших энергий (на  $\sim 3$  эВ), хотя при столкновении ион  $Ne^+$  пе-

редает атому Si большую энергию, чем атому V (последнее обстоятельство обусловлено тем, что разница масс иона и атома V больше, нежели иона и атома Si). Относительное смещение спектра распыленных на прострел атомов Si в сторону меньших энергий связано с большой разницей масс атомов компонент ( $m_V/m_{Si} \approx 1,814$ ). Вследствие этого для легких атомов Si, движущихся в глубь кристалла, велика вероятность отразиться от нижележащих тяжелых атомов V. Поэтому при прохождении через пять слоев кристалла атомы кремния теряют много энергии, передавая ее атомам ванадия. Тяжелые атомы V не останавливаются при своем движении в глубь кристалла при столкновении с легкими атомами Si, а при столкновении с атомами V передают им свой импульс. Это приводит также к отмеченным выше преимущественному распылению назад атомов Si и преимущественному распылению на прострел атомов V. Высокоэнергетичные атомы V и Si ( $E > 1$  кэВ) в спектрах атомов, распыленных на прострел, были, видимо, выбиты из нижних слоев кристаллита ионами, прошедшими в глубь кристалла вдоль канала.

При ионной бомбардировке идеальной решетки  $VSi_2$  максимум спектра атомов Si, распыленных назад, смещен в сторону больших энергий относительно максимума спектра атомов Si, распыленных на

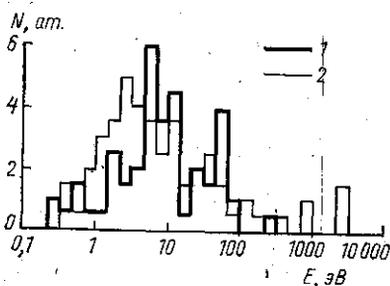


Рис. 2. Энергетические спектры атомов Si, распыленных назад (1) ( $^{1/2}N(E)_{\uparrow Si}$ ) и на прострел (2) ( $^{1/2}N(E)_{\downarrow Si}$ ) (монокристаллическая мишень)

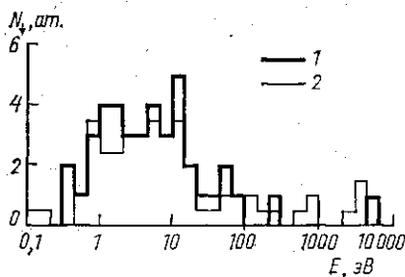


Рис. 3. Энергетические спектры атомов V  $N(E)_{\downarrow V}$  (1) и Si  $^{1/2}N(E)_{\downarrow Si}$  (2), распыленных на прострел (квазиаморфная мишень)

прострел (рис. 2). Смещение связано с высокой вероятностью отражения легких атомов Si от нижележащих атомов V. При этом энергия большей доли атомов Si, распыленных назад, будет больше энергии подавляющего числа атомов Si, распыленных на прострел, выбивание которых обусловлено развитием каскада столкновений. В то же время в спектре атомов Si, распыленных на прострел, присутствуют атомы с энергией  $E > 500$  эВ (появление таких атомов в спектре обусловлено, как было предположено выше, возможностью выбивания их ионами  $Ne^+$  из нижних слоев кристаллита). Атомы Si с  $E > 500$  эВ отсутствуют в спектре распыления назад, что связано с высокими потерями энергии при повороте импульса атомов назад (атом Si в лобовом столкновении с атомом V теряет приблизительно 92% своей энергии).

При переходе к квазиаморфной среде происходит уменьшение максимума и уширение спектров атомов V и Si, распыленных на прострел (рис. 3), что согласуется с изменениями спектров атомов, распыленных при ионном облучении однокомпонентной монокристаллической среды (поверхности грани (111) монокристалла Co), при учете тепло-

вых колебаний атомов решетки. При переходе к квазиаморфной среде спектры атомов V и Si, распыленных на прострел, сближаются по сравнению со случаем ионной бомбардировки идеальной решетки (ср. рис. 3 и 1). При таком переходе появляются атомы V и Si с большими энергиями, чем для случая облучения идеальной решетки. Это связано с тем, что при переходе к квазиаморфной модели возрастает вероятность столкновения иона, прошедшего по каналу в глубь кристалла, с атомами V и Si при их смещении из узла решетки. Переход к квазиаморфной среде приводит также к увеличению средней энергии и общей энергии, уносимой атомами компонент, распыленными как назад, так и на прострел. Это объясняется возросшей вероятностью сильного столкновения иона с атомами решетки и последующим перераспределением энергии в каскадах столкновений между компонентами по разным направлениям.

**Заключение.** В настоящей работе сделана попытка применить динамическую модель блока атомов к исследованию распыления аморфной мишени. Расчеты распыления квазиаморфной и монокристаллической мишеней в рамках одной модели позволили выявить особенности взаимодействия ионов с твердым телом при изменении степени упорядоченности в расположении его атомов и определить тенденцию изменений в распылении атомов компонент назад и на прострел при введении в модель тепловых колебаний атомов кристалла. Особенности коэффициентов распыления и энергетических спектров атомов компонент, распыленных назад и на прострел при облучении квазиаморфной мишени (по сравнению со случаем идеального кристалла) при ионной бомбардировке двухкомпонентного твердого тела, связаны не только с нарушением структуры, но и с двухкомпонентным составом мишени, в частности с большой разницей масс атомов компонент, образующих соединение.

Авторы выражают благодарность В. Е. Юрасовой за идею расчета распыления аморфной двухкомпонентной мишени и обсуждение части результатов и П. Вайсбротту, В. С. Чернышу, С. П. Линнику и Ю. Н. Иващенко за дискуссии по распылению двухкомпонентных соединений.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Eltekov V. A., Samoylov V. N., Yurasova V. E., Motaweh H. A. // Nucl. Instr. and Meth. 1986. **V13**, N 1—3. P. 443—448. [2] Вайсбротт П., Самойлов В. Н., Эльтеков В. А. // Диагностика поверхности ионными пучками: Тез. докл. Всесоюз. совещ.-семинара. Ужгород, 1985. С. 193—194. [3] Евдокимов И. Н., Молчанов В. А., Одинцов Д. Д., Чичеров В. М. // ДАН СССР. 1967. **177**, № 3. С. 550—553. [4] Пугачева Т. С., Гусев О. В., Рослякова Т. Л. // Взаимодействие атомных частиц с твердым телом. Матер. VI Всесоюз. конф. Минск, 1981. Ч. 1. С. 3—5. [5] Goktere O. F. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1986. **V13**, N 1—3. P. 434—438.

Поступила в редакцию  
23.06.86