

УДК 537.534

**РАСПЫЛЕНИЕ НА ПРОСТРЕЛ МОНОКРИСТАЛЛА НИТРИДА БОРА****В. А. Эльтеков, Н. Н. Негребецкая***(кафедра математики)*

С помощью динамической модели блока атомов исследован процесс распыления на прострел графитоподобного нитрида бора ионами аргона с энергией  $E_0 = 0,3-4$  кэВ, падающими на грань (0001). Рассчитаны интегральные и дифференциальные характеристики распыления на прострел. Расчет показывает, что преимущественно распыляются атомы азота. Картина угловых распределений эмитированных атомов имеет симметрию третьего порядка. Обсуждаются механизмы распыления на основе различных моделей структуры мишени BN(0001).

**Введение**

Вопросы распыления монокристаллов ускоренными ионами приобрели в последние годы большое значение в связи с использованием ионных пучков для направленного изменения свойств материалов и диагностики поверхности твердого тела, а также в связи с проблемами разрушения конструкционных материалов многих плазменных приборов. Важное место среди конструкционных материалов занимают неметаллические тугоплавкие соединения, среди которых одним из наиболее перспективных является нитрид бора. Существует несколько полиморфных модификаций нитрида бора (BN) [1]. В настоящей работе рассматривалась графитоподобная кристаллическая форма нитрида бора, имеющая гексагональную ( $BN_h$ ) и ромбоэдрическую ( $BN_r$ ) модификации.

Исследование распыления тыльной стороны пленочной мишени при облучении ее ускоренными частицами, обычно называемое распылением на прострел [2], является важной составной частью в изучении основных закономерностей взаимодействия бомбардирующих частиц с мишенями различных материалов. Получение дифференциальных и интегральных характеристик атомов мишени, эмитированных на прострел, позволяет оценить влияние приповерхностного слоя на процесс распыления.

В данной работе исследовался процесс распыления на прострел тонкослойной мишени нитрида бора гексагональной и ромбоэдрической модификаций при облучении ионами аргона с начальной энергией  $E_0 = 0,3-4$  кэВ. Расчет проводился на основе модели молекулярной динамики [3, 4]. Кристаллит каждой из модификаций нитрида бора моделировался в виде блока из 216 атомов, расположенных в шести слоях идеальной решетки BN. Также для выяснения механизмов распыления на прострел были использованы мишени, содержащие один и два слоя BN. Пучок бомбардирующих мишень ионов был ориентирован нормально относительно поверхностной грани (0001).

**Полученные результаты и обсуждение**

**Интегральные характеристики распыления на прострел**

На рис. 1 представлены энергетические зависимости парциальных коэффициентов распыления на прострел монокристаллов гексагонального ( $S_h$ ) и ромбоэдрического ( $S_r$ ) нитрида бора. Видно, что для всех

значений энергии  $E_0$   $\text{BN}_r$  распыляется на прострел значительно сильнее, чем  $\text{BN}_h$ . Объяснение наблюдаемого различия базируется на пред-

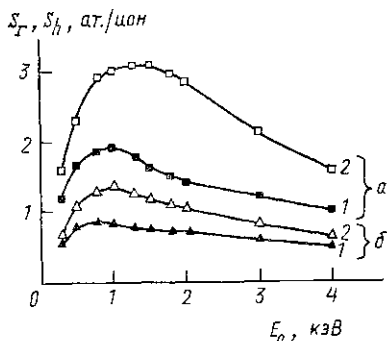


Рис. 1. Энергетические зависимости парциальных коэффициентов распыления на прострел  $S_r$  и  $S_h$  ромбоэдрического (а) и гексагонального (б) нитрида бора от энергии ионов аргона  $E_0$ : 1 — бор, 2 — азот

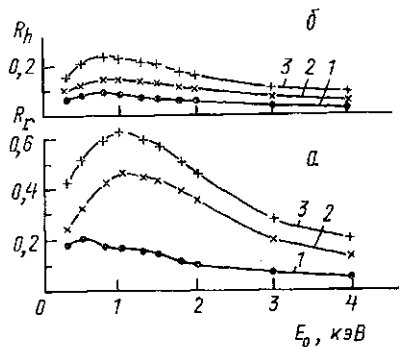


Рис. 2. Зависимости коэффициентов энергопереноса  $R_r$  и  $R_h$  эмитированных атомов бора (1), азота (2), атомов бора и азота (3) для  $\text{BN}_r$  (а) и  $\text{BN}_h$  (б) от энергии атомов аргона  $E_0$

ставлении о существенно различных кристаллографических структурах двух модификаций. В отличие от решетки  $\text{BN}_h$ , обладающей широкими шестигранными каналами  $\langle 0001 \rangle$ , структура  $\text{BN}_r$  имеет в направлении падения ионов —  $\langle 0001 \rangle$  — более узкие несимметричные треугольные каналы. Поэтому ионы аргона свободно проходят по широким каналам  $\text{BN}_h$ , приводя к относительно невысокому распылению, а в решетке  $\text{BN}_r$  претерпевают большее число столкновений и, следовательно,  $S_r > S_h$ .

Из рис. 1 видно, что как для  $\text{BN}_h$ , так и для  $\text{BN}_r$  коэффициент распыления на прострел для атомов азота почти в два раза больше, чем для атомов бора.

На рис. 2 представлены энергетические зависимости коэффициентов энергопереноса (отношение энергии, уносимой атомами данного сорта, к энергии бомбардирующих частиц) эмитируемых из  $\text{BN}_r$  (а) и  $\text{BN}_h$  (б) атомов бора и азота. Рассматривались все атомы, вылетающие как с тыльной, так и с бомбардируемой грани моделируемого кристаллита.

Из рис. 2 видно, что атомы азота вылетают из мишени, унося большую часть энергии (в среднем в 1,5 раза для  $\text{BN}_h$  и в 2,8 раза для  $\text{BN}_r$ ), чем атомы бора. Это происходит потому, что при столкновении более тяжелые атомы (N) приобретают в среднем большую энергию, чем легкие атомы (B), и, получив импульс в сторону тыльной стороны мишени, т. е. по направлению первоначального движения ионов, имеют большую вероятность выйти на прострел. При распылении  $\text{BN}_r$  атомы бора и азота выносятся из мишени большей частью энергии (в среднем в 2,5 раза), чем при распылении  $\text{BN}_h$ , что объясняется более плотной упаковкой структуры  $\text{BN}_r$  в направлении  $[0001]$ .

#### Дифференциальные характеристики распыления на прострел

Рассчитаны угловые двумерные распределения атомов бора и азота, эмитируемых на прострел из  $\text{BN}_r$ - и  $\text{BN}_h$ -пленок при бомбардировке ионами аргона с начальными энергиями  $E_0 = 0,3-4$  кэВ.

На рис. 3, *а, б* приведены угловые распределения вылетевших на прострел из  $\text{BN}_7$ -мишени атомов бора и азота для  $E_0=4\text{кэВ}$ . Распределения частиц по углам их вылета из мишени представлены в прямо-

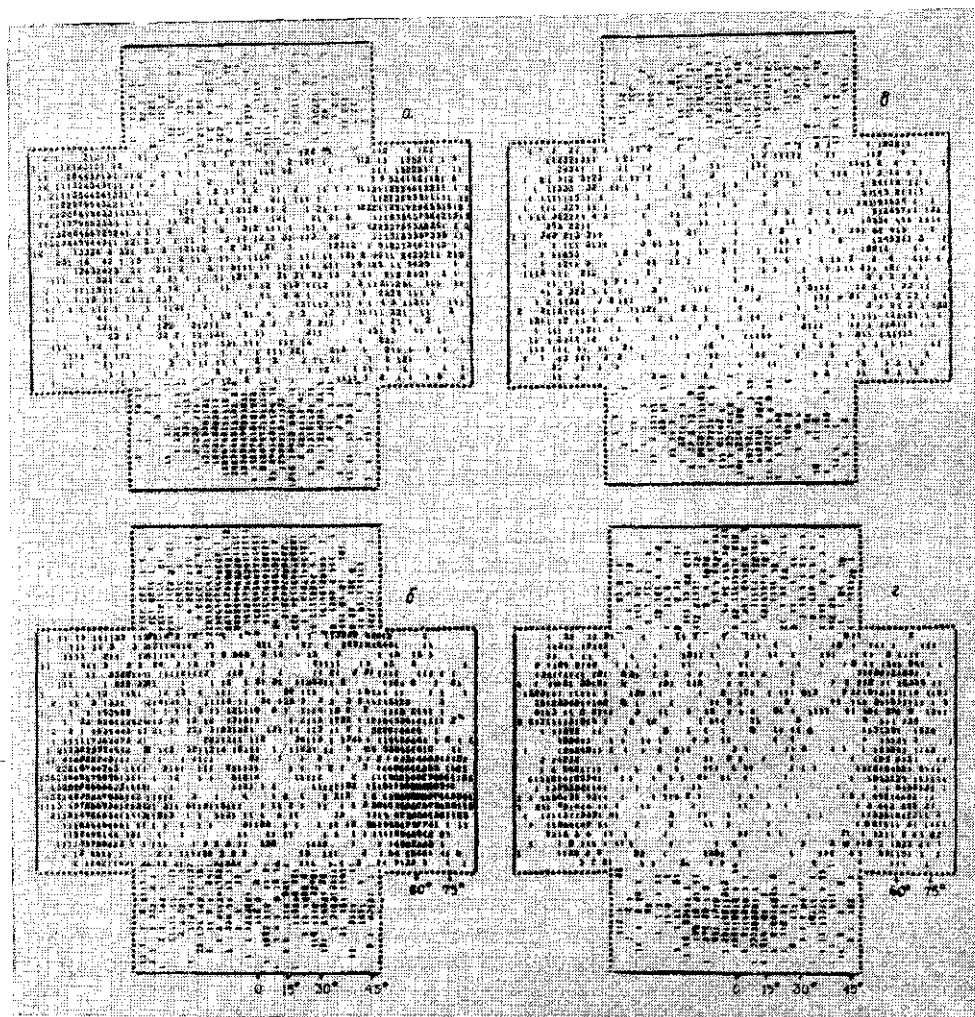


Рис. 3. Угловые распределения расплывших на прострел из  $\text{BN}_7$ -мишени (*а, б*) и  $\text{BN}_7$ -мишени (*в, г*) атомов бора (*а, в*) и азота (*б, г*) для энергии ионов аргона  $E_0=4\text{кэВ}$

угольных декартовых координатах в проекции на внутреннюю поверхность бесконечно большого куба, в центре которого находится облучаемая мишень. «Верхняя» половина куба примерно соответствует частицам, эмитируемым с бомбардируемой поверхности, «нижняя» — частицам, эмитируемым на прострел. На рис. 3 угловые распределения представлены в виде развернутых на плоскость «нижних» половинок куба. Видно, что распыление на прострел пленки ромбоздрического нитрида бора (рис. 3, *а, б*) неизотропно: наблюдаются три «пятна» атомов бора и три «пятна» атомов азота. В обеих системах пятен максимумы интенсивности, разность азимутальных углов между

которыми составляет  $\sim 120^\circ$ , имеют полярный угол, отсчитываемый от нормали к тыльной стороне мишени,  $\sim 65^\circ$ . Системы пятен бора повернуты относительно пятен азота на  $60^\circ$ . Обнаружено, что с уменьшением энергии падающих ионов четкость пятен ухудшается.

В угловых распределениях атомов бора и азота, эмитируемых на прострел из  $\text{BN}_h$ -пленки (рис. 3, в, г), наблюдается тенденция к образованию шести пятен с полярным углом  $\sim 65^\circ$ , а разность азимутальных углов между ближайшими пятнами составляет  $\sim 60^\circ$ .

Рассчитаны энергетические спектры атомов бора и азота, выходящих на прострел из тонкослойных мишеней  $\text{BN}_h$  и  $\text{BN}_r$  при бомбардировке ионами аргона с энергией  $E_0=0,3\text{--}4$  кэВ. На рис. 4 приведены энергетические спектры вылетающих на прострел из  $\text{BN}_r$ - и  $\text{BN}_h$ -пленок атомов бора и азота для начальной энергии ионов аргона  $E_0=4$  кэВ. Энергетические спектры представлены в полулогарифмическом масштабе. Такое представление дает более детальную картину спектров, что позволяет выявить особенности, незаметные при обычной форме представления. Видно, что в спектрах наблюдается один основной максимум.

Обнаружено, что положение главного максимума смещается в сторону более высоких значений энергии выходящих на прострел атомов при увеличении начальной энергии  $E_0$ . Для обеих модификаций нитрида бора сдвиг максимумов в энергетических спектрах при изменении  $E_0$  значительнее для атомов азота, чем для атомов бора. Так, при  $E_0=0,3$  и  $4$  кэВ энергия максимального выхода для атомов азота составляет соответственно  $30$  и  $160$  эВ, а для атомов бора  $30$  и  $100$  эВ. То есть в низкоэнергетической части исследованного диапазона энергий  $E_0$  положение максимумов в энергетических спектрах атомов бора и азота обеих модификаций различается слабо, а в высокоэнергетической части это отличие существенно.

Для выяснения относительной роли поверхностных и объемных процессов в распылении на прострел мишени гексагонального и ромбоэдрического нитрида бора были проведены расчеты с одно- и двухслойным блоками атомов. Для этих расчетов была выбрана начальная энергия ионов аргона  $E_0=2$  кэВ.

На основе расчетов с двухслойным блоком атомов  $\text{BN}_r$  и  $\text{BN}_h$  найдено, что вклад в распыление на прострел второго слоя (по отношению к бомбардируемой поверхности) мишени  $\text{BN}_r$  в  $10$  раз меньше вклада первого слоя, т. е.  $(S^{(1)}/S^{(2)})_r=10$ . Для  $\text{BN}_h$  вклады обоих слоев отличаются незначительно:  $(S^{(1)}/S^{(2)})_h=0,9$ .

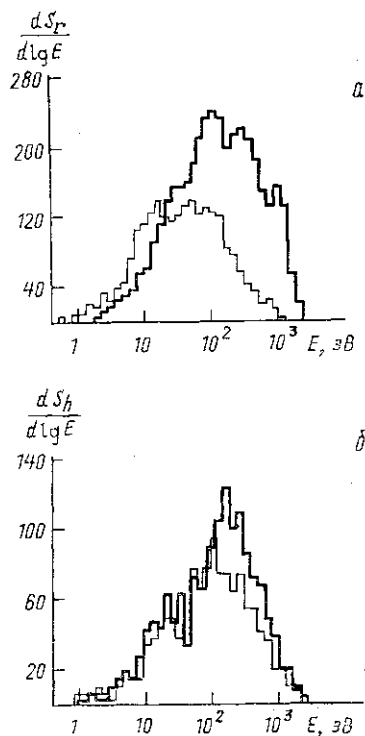


Рис. 4. Энергетические спектры эмитированных на прострел из  $\text{BN}_r$ -мишени (а) и  $\text{BN}_h$ -мишени (б) атомов бора (тонкая линия) и азота (толстая линия) для энергии ионов аргона  $E_0=4$  кэВ ( $E$  — энергия эмитированных атомов,  $S_r$  и  $S_h$  — парциальные коэффициенты распыления на прострел  $\text{BN}_r$  и  $\text{BN}_h$ )

На рис. 5 приведены угловые двумерные распределения атомов бора, эмитируемых на прострел из однослойного блока (который одинаков для обеих мишеней) и двухслойного блока  $\text{BN}_1$  и  $\text{BN}_2$ . Видно, что вклад первого слоя в образование пятен угловых распределений

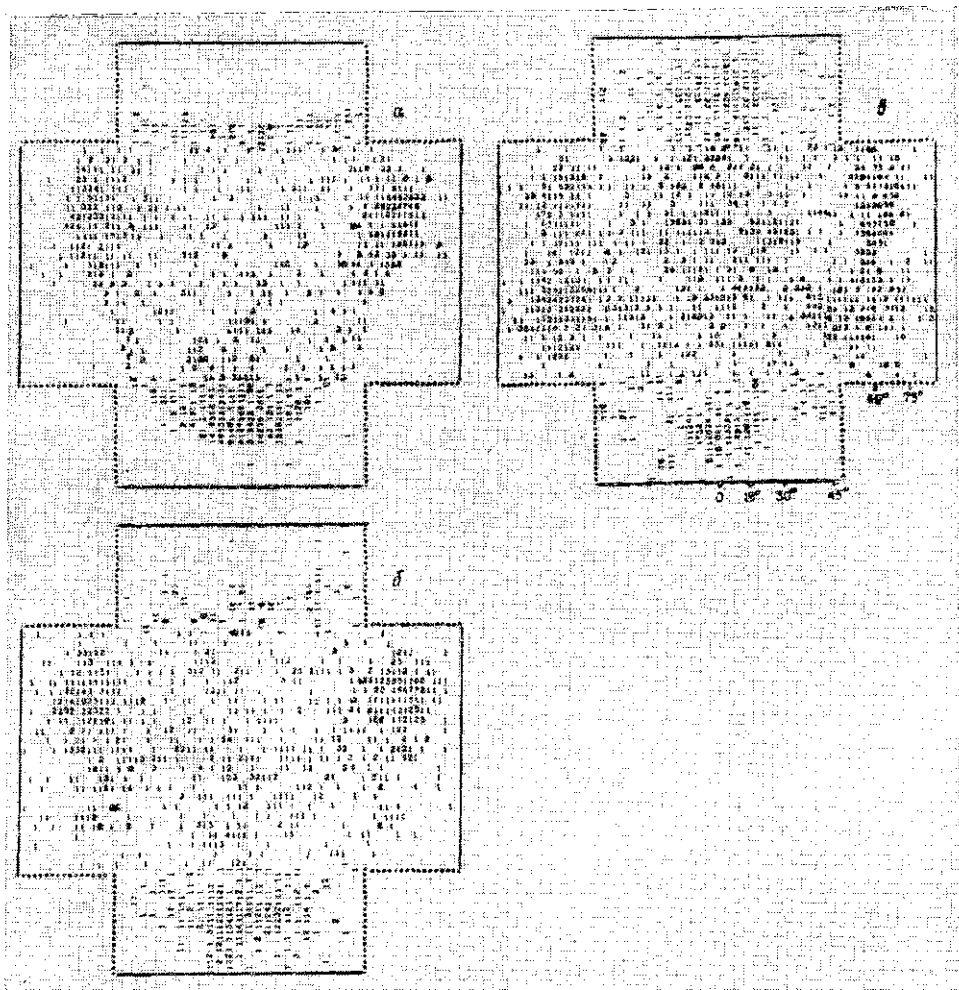


Рис. 5. Угловые распределения распыленных на прострел атомов бора из однослойного блока  $\text{BN}$  (а), двухслойного блока  $\text{BN}_1$  (б) и двухслойного блока  $\text{BN}_2$  (в) для энергии ионов аргона  $E_0=2$  кэВ

наиболее значительный (см. рис. 3) и даже второй слой уже не играет существенной роли. Анализ показал, что формирование пятен в угловых распределениях при  $\alpha=65^\circ$  происходит в результате выбивания атомов первого слоя падающими ионами. Для гексагонального нитрида бора подобный процесс во втором слое ведет к образованию трех дополнительных пятен при  $\alpha=65^\circ$  (которые не присутствуют в угловом распределении атомов, эмитируемых из однослойного блока). По-видимому, быстрые атомы отдачи каналируют сквозь рыхлую решетку нитрида бора и образуют анизотропную картину в угловых распределениях, проходя как через тыльную, так и через боковые грани ми-

шени под углом  $\alpha$  к нормали тыльной стороны мишени. Так же атомы распыляются в результате каскадного механизма и выходят из мишени под различными углами.

### Заключение

1. В диапазоне энергий первичных ионов аргона  $E_0=0,3\text{--}4$  кэВ монокристалл ромбоэдрического нитрида бора распыляется на прострел сильнее, чем гексагональный. В процессе распыления атомы бора и азота уносят из  $\text{BN}_r$ -мишени большую часть энергии, чем из  $\text{BN}_h$ -мишени. Для обеих модификаций нитрида бора наблюдается преимущественное распыление на прострел атомов азота.

2. Средняя энергия атомов, эмитируемых на прострел, меньше у бора, чем у азота для обеих модификаций нитрида бора.

3. Картина угловых распределений атомов, эмитируемых на прострел из  $\text{BN}_h(0001)$  и  $\text{BN}_r(0001)$ , имеет симметрию третьего порядка и состоит из шести пятен. Угловые распределения эмитируемых на прострел из  $\text{BN}_h$  и  $\text{BN}_r$  атомов бора и азота аналогичны, но повернуты друг относительно друга на  $60^\circ$ . Пятна в угловых распределениях эмитируемых на прострел из  $\text{BN}_h$  и  $\text{BN}_r$  атомов бора и азота формируются главным образом быстрыми атомами отдачи.

Работа осуществлялась при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант N 94-01-00369).

### ЛИТЕРАТУРА

1. Голубев А. С., Курдюмов А. В., Пилянкевич А. Н. Нитрид бора. Структура, свойства, получение. Киев, 1987.
2. Бериш Р. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. М., 1984.
3. Эльтеков В. А. Взаимодействие атомных частиц с твердым телом. Компьютерное моделирование. М., 1993.
4. Эльтеков В. А., Негребецкая Н. Н. // Изв. АН, сер. физ. 1993. 57, № 8. С. 181.

Поступила в редакцию  
16.11.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА, АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 4

УДК 621.382

### ОСОБЕННОСТИ КРАЕВОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ДИАРСЕНИДА КАДМИЯ

Т. В. Семенова, В. А. Морозова

(кафедра физики полупроводников)

Проведены совместные исследования спектров оптического поглощения  $\alpha(h\nu)$  и фотопроводимости структурно совершенных анизотропных монокристаллов  $\text{CdAs}_2$  для поляризаций  $E\parallel C$  и  $E\perp C$ . Показано, что поведение спектров  $\alpha(h\nu)$  в области края собственного поглощения хорошо описывается теорией образования экситонов посредством непрямых переходов. Оценена энергия связи экситонов в  $\text{CdAs}_2$ :  $G \approx 10$  мэВ. В области температур 293–78 К определены величины экситонной ширины запрещенной зоны (так,  $\epsilon_{ge}^{\parallel} = 0,980$ ,  $\epsilon_{ge}^{\perp} = 0,985$  эВ для 293 К) и энергии фотонов, участвующих в переходах.

Полупроводниковое соединение  $\text{CdAs}_2$  группы  $A^2B^5$  кристаллизуется в тетрагональной модификации и обладает значительной анизотропией электрических и оптических свойств [1, 2]. Расчеты зонной