

О СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ РАСПЫЛЕННЫХ АТОМОВ

В.И. Шульга

НИИЯФ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

vish008@yandex.ru

Энергетические распределения и средние энергии распыленных частиц рассчитаны с использованием программ OKSANA и SRIM-2013. Расчеты выполнены для ряда аморфных мишеней, бомбардируемых ионами Ar с энергиями 1 кэВ. Показано, что для мишеней, распыляемых более легкими ионами, SRIM может сильно завышать вклад быстрых атомов отдачи. Это особенно заметно в расчетах с поверхностной энергией связи, найденной путем подгонки расчетных коэффициентов распыления к экспериментальным. Отмечено хорошее согласие расчетов по программам OKSANA, TRIM.SP и ACAT.

ВВЕДЕНИЕ

Недавно в работе /1/ проведены расчеты энергетических спектров и средних энергий распыленных атомов $\langle E \rangle$ для большой группы переходных металлов и ряда других материалов при облучении ионами Ar с энергией 0.3-1.2 кэВ (падение по нормали к поверхности). В расчетах использовали программу SRIM-2013. Поверхностную энергию связи E_s находили подгонкой расчетных коэффициентов распыления к экспериментальным. Некоторые результаты работы /1/ вызывают сомнение (например, сильное различие энергетических спектров распыленных атомов для Si и Ti), что может указывать на существенные недостатки модели, лежащей в основе расчета.

В данной работе проведено сравнение результатов компьютерного моделирования, выполненного с помощью программ OKSANA и SRIM-2013. Рассмотрено распыление аморфных мишеней Si, Ti, Ni, V и Nb ионами Ar с энергией 1 кэВ при нормальном падении.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Программа OKSANA использовалась в варианте, который описан в /2/. Как и в SRIM, упругое взаимодействие частиц задавалось потенциалом ZBL, а электронное торможение – комбинацией локальных потерь энергии (модель Оэна-Робинсона) и нелокальных потерь (модель Линдхарда-Шарффа). В качестве поверхностной энергии связи E_S бралась теплота сублимации U_0 . В расчетах по программе SRIM использовались также значения E_S , предложенные в /1/.

Расчетные спектры сравнивались с распределением, полученным в теории линейных каскадов (формула Зигмунда-Томпсона):

$$N(E) \sim E/(E + E_S)^{3-2m}, \quad (1)$$

где m зависит от межатомного потенциала ($0 < m < 1$) и приближается к 0 при низких энергиях взаимодействия. При $m = 0$ интегрирование (1) в пределах от 0 до максимально переданной энергии E_{\max} дает /3/:

$$\langle E \rangle \approx 2E_S \ln(E_{\max}/E_S) - 3E_S. \quad (2)$$

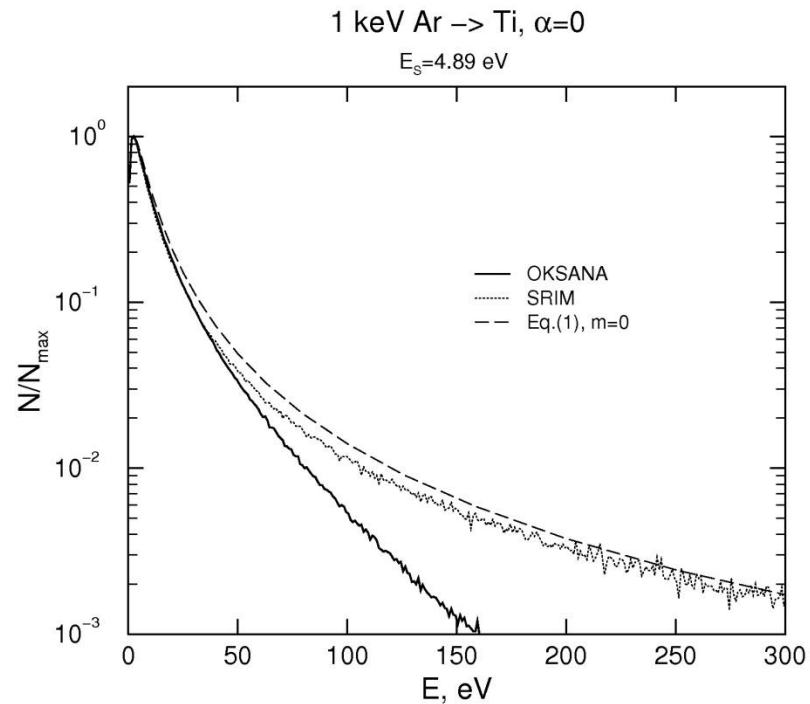
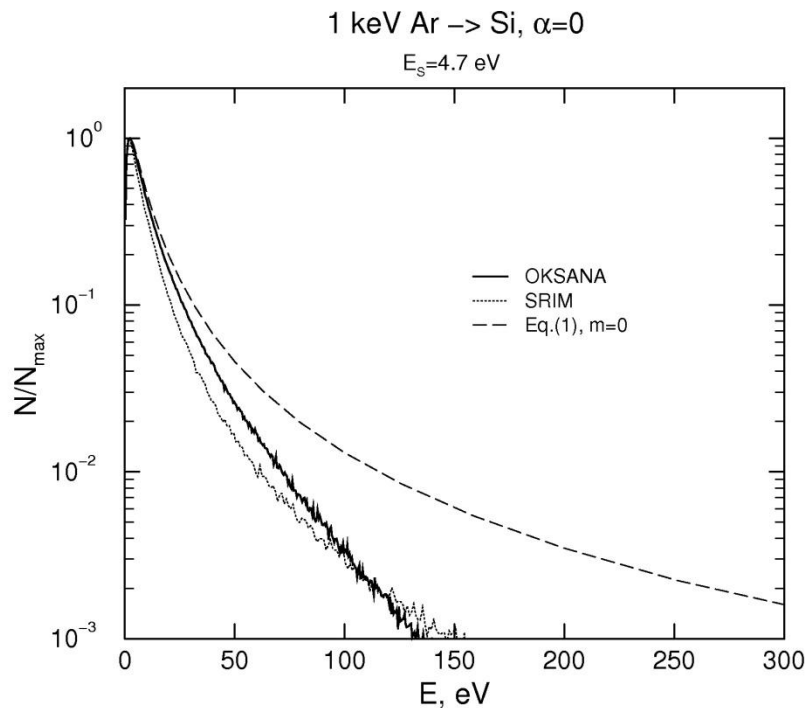


Рис. 1. Энергетические распределения распыленных атомов. Расчет по программам OKSANA и SRIM для Si и Ti мишеней, бомбардируемых ионами Ar с энергией 1 кэВ при угле падения $\alpha = 0$. Мишени Si и Ti имеют близкие значения атомной плотности и теплоты сублимации, поэтому программа OKSANA дает для этих мишеней похожие спектры.

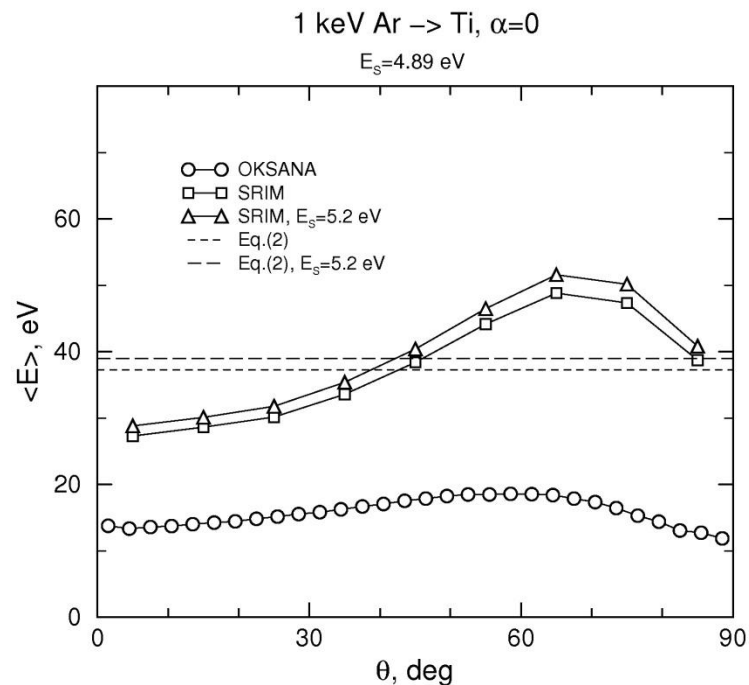
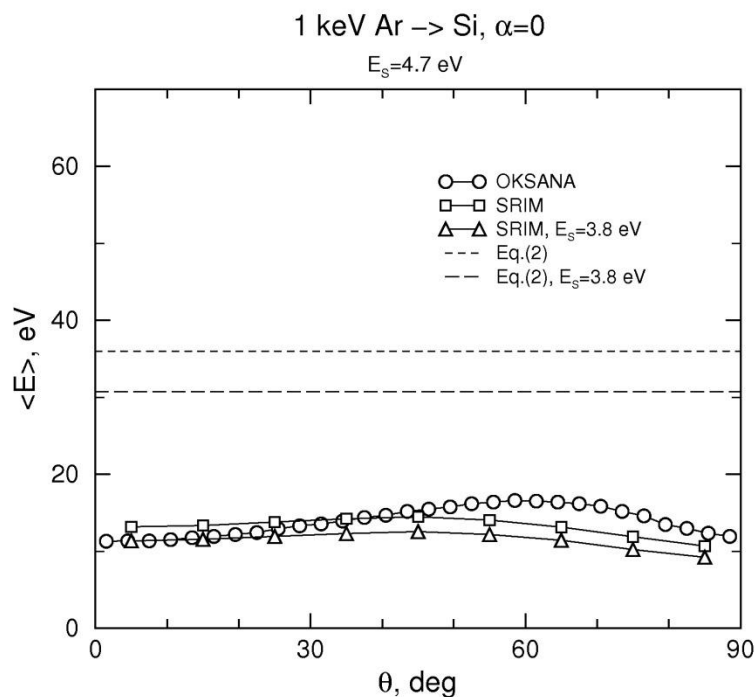


Рис. 2. Средняя энергия распыленных атомов как функция угла эмиссии для мишеней Si и Ti, бомбардируемых ионами 1 кэВ Ar (угол $\theta = 0$ соответствует нормали к поверхности). На рисунках показаны также результаты расчетов с использованием модифицированных значений E_s , предложенных в работе /1/. Видно резкое изменение SRIM значений $\langle E \rangle$ при переходе от Si к Ti, что не согласуется с аналитической оценкой.

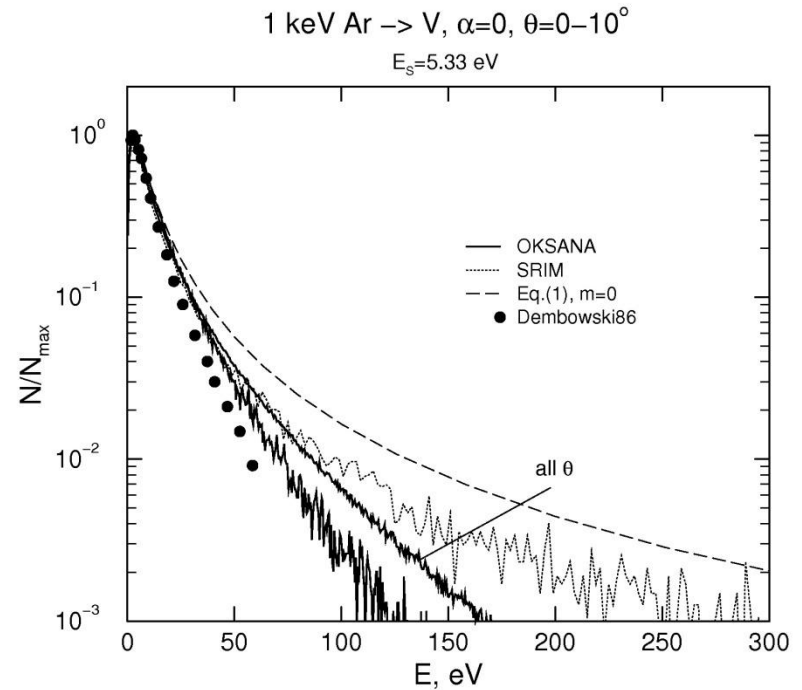
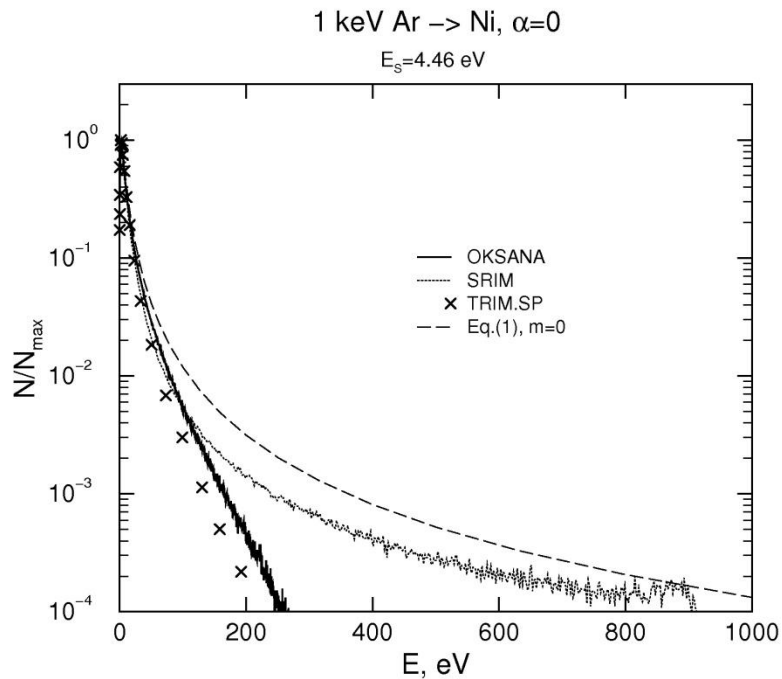


Рис. 3. Энергетические спектры атомов при распылении Ni (а) и V (б) ионами 1 кэВ Ar. (а) Расчет по программам OKSANA, SRIM и TRIM.SP /4/ для всех распыленных частиц ($\theta = 0-90^\circ$). (б) Расчеты OKSANA и SRIM для атомов, распыленных в интервал $\theta = 0-10^\circ$. Показаны также данные эксперимента /5/ для нейтральных атомов, распыленных вблизи нормали к поверхности. Видно, что высокоэнергетический хвост SRIM спектра не подтверждается ни расчетом по программе TRIM.SP, ни экспериментом.

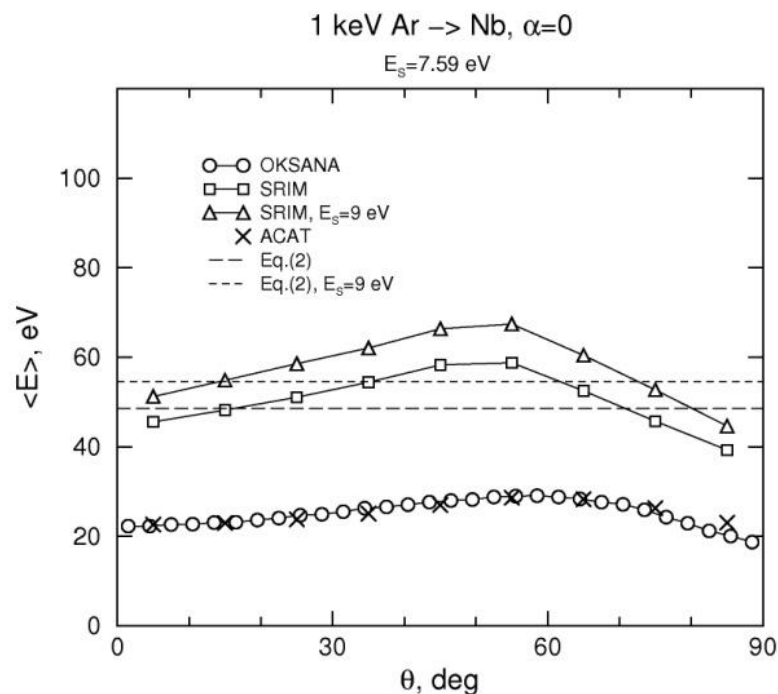
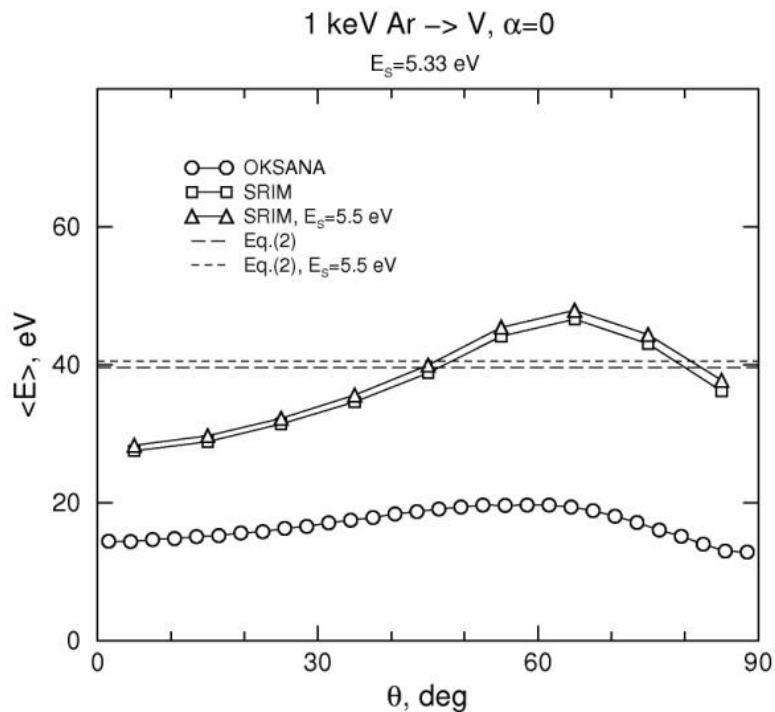


Рис. 4. Зависимость $\langle E \rangle$ от угла эмиссии θ для V и Nb мишеней при бомбардировке ионами 1 кэВ Ar. Расчеты по программам OXSANA, SRIM и ACAT [5] для значений $E_s = U_0$ сравниваются с расчетом по программе SRIM с использованием модифицированных значений E_s [1]. Видно, что последний дает еще более завышенные значения $\langle E \rangle$, особенно для Nb, имеющего высокую поверхностную энергию связи.

ВЫВОДЫ

Методом компьютерного моделирования (программы OKSANA и SRIM) проведен расчет распыления ряда аморфных мишеней ионами Ar с энергией 1 кэВ при падении по нормали к поверхности. Показано, что для мишеней, атомы которых тяжелее налетающих частиц, SRIM переоценивает вклад быстрых распыленных атомов и, как результат, сильно завышает значение их средней энергии $\langle E \rangle$. Это подтверждается также результатами расчетов по программам TRIM.SP и ACAT. Использование поверхностной энергии связи, предложенной в работе /1/, не устраняет указанный недостаток программы SRIM, а лишь усиливает его проявление.

Литература

1. N. Mahne, M. Čekada, M. Panjan // Coatings, 2023, V.13, P.1448.
2. V.I. Shulga, W. Eckstein // NIMB, 1998, V.145, P.492.
3. J. Held, A. Hecimovic et al. // Plasma Sources Sci. Technol. 2018, V.27, P.105012.
4. W. Eckstein // NIMB, 1986, V.18, P.344.
5. J. Dembowski, H. Oechsner, Y. Yamamura, M. Urbassek // NIMB, 1986, V.18, P.464.