# Эффекты кристаллической структуры мишени и поверхностного рельефа в распылении

### В.И. Шульга

# НИИЯФ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия vish008@yandex.ru

Работа мотивирована тем, что для ионов с энергией  $E_0 > 1$  кэВ коэффициенты распыления ряда металлов, полученные в расчетах для аморфной мишени с гладкой поверхностью, существенно отличаются от экспериментальных. Это может быть связано как с кристалличностью мишени, так и ионно-индуцированным рельефом поверхности. В работе методом компьютерного моделирования проведен расчет коэффициентов распыления аморфных и кристаллических мишеней, бомбардируемых ионами 0.1-100 кэВ Ar. Расчеты для никеля и вольфрама, облученных ионами Ar с энергией 30 кэВ, выполнены без учета и с учетом поверхностного рельефа.

#### ВВЕДЕНИЕ

Распыление твердых тел ионной бомбардировкой изучается уже давно, но многие аспекты этого явления все еще недостаточно выяснены. При теоретическом рассмотрении облучаемые мишени часто считаются аморфными. В действительности не все материалы являются или становятся таковыми при ионной бомбардировке. Ожидаемые различия в коэффициентах распыления аморфных и поликристаллических материалов упоминались в литературе, однако исследования в этой области крайне ограничены. В работе /1/ показано, что при  $E_0 > 1$  кэВ коэффициент распыления поликристалла Рt существенно превышает коэффициент распыления аналогичной аморфной мишени, тогда как при низких энергиях коэффициенты распыления практически совпадают. Более сильное распыление поликристалла W по сравнению с аморфным аналогом отмечено в /2/. Различия в значениях коэффициента распыления У объяснялись /1,2/ распылением за счет линейных цепочек соударений.

В данной работе продолжено обсуждение этой темы.

### МЕТОДИКА РАСЧЕТА

В расчетах использована программа OKSANA, которая позволяет моделировать распыление кристаллических и аморфных мишеней в приближении парных столкновений. Упругое взаимодействие частиц задается потенциалами ZBL, Kr-C, Ленца-Йенсена и Зиновьева /З/, а электронное торможение – комбинацией локальных и нелокальных потерь энергии. В качестве поверхностной энергии связи *E*<sub>S</sub> берется теплота сублимации *U*<sub>0</sub>. Поверхностный барьер считается плоским.

Аморфная мишень моделируется вращением кристаллического атомного блока, процедура вращения выполняется для каждой новой падающей частицы и затем повторяется OT столкновения К столкновению. Чтобы проследить переход от поликристалла к аморфной мишени, вращение блока после каждого соударения осуществляется с вероятностью w, которая может меняться от 0 (поликристалл) до 1 (аморфное тело). При 0 < w < 1 эта процедура позволяет моделировать мишень, которая содержит как неупорядоченные, так и кристаллические зерна (кристаллиты). Параметр *w* связан со средним размером кристаллита <L> простым соотношением: <L> ~  $R_n/w$ , где  $R_n$  – расстояние между ближайшими атомами кристалла.

Направление бомбардировки задается в прямоугольной системе координат, ось Z которой направлена внутрь мишени. В соответствии с экспериментальными данными /4/ рельеф имеет зубчатую форму и в плоскости X-Z описывается двумерной функцией с периодом 2x и высотой z. Такая же форма рельефа задается в плоскости Y-Z. Таким образом, поверхность мишени представляет собой набор пирамид. Учитывалось, что пирамиды распределены по поверхности хаотически. Результаты, представленные ниже, получены при x = y = 30 нм. Увеличение х и у не меняет результаты, но увеличивает время счета. Изменение формы рельефа в процессе ионной бомбардировки, не учитывается, т.е. моделируется стационарный режим распыления. Используется локальный плоский барьер высотой  $E_{\rm S} = U_0$ . Объемная энергия связи атома Е<sub>в</sub> варьируется. При расчете траекторий принято во внимание, что выбитые из мишени атомы, как и рассеянные бомбардирующие ионы, могут достигать стенок соседних поверхностных структур и вызывать их распыление.

Для аморфного Ni, облученного ионами 30 кэВ Ar, примеры траекторий ионов показаны на рис. 1.



Рис.1. Траектории ионов Ar с начальной энергией 30 кэВ при бомбардировке зубчатой поверхности Ni (*x* = *z* = 30 нм). Расчет с использованием потенциала ZBL. Кружки – начальные положения распыленных атомов. Траектории частиц даны в проекции на плоскость *X*-*Z*.  $\alpha_{loc}$  – локальный угол падения.



Рис. 2. Коэффициент распыления Zr и Mo, имеющих плоскую поверхность (z = 0), в зависимости от энергии ионов Ar для значений параметра *w* в диапазоне от 0 (поликристалл с большим размером зерен) до 1 (аморфная мишень). Точки – экспериментальные данные разных авторов. Отметим увеличение коэффициента распыления при переходе от аморфной к поликристаллической мишени при  $E_0 > 1$  кэВ.



Рис.3. То же, что на рис.2, но указанием вклада в распыление линейных последовательностей соударений (LCS). Учитывались цепочки соударений длиной два и больше межатомных расстояния. Разница в результатах связана в основном с тем, что цирконий имеет гексагональную решетку, которая не способствует формированию LCS. Молибден имеет объемно центрированную решетку, которая более благоприятна в этом отношении.



Рис. 4. Коэффициент распыления Cu и Au, имеющих г.ц.к. решетку, в зависимости от энергии ионов при различных значениях параметра w. × – расчет по программе TRIM.SP. Из рисунка следует, что в области энергий  $E_0 > 1$  кэВ модель аморфного тела плохо подходит для описания распыления этих материалов.



Рис.5. Коэффициенты распыления аморфного (а) и поликристаллического никеля (б), рассчитанные с учетом поверхностного рельефа, как функция аспектного отношения *z*/*x*. Точка – эксперимент /4/. Более высокие значения Y для поликристаллической мишени связаны с вкладом LCS. Видно, что значения Y для гладкой (*z*/*x* = 0) и рельефной поверхности (*z*/*x* = 7.1) близки. Из рисунка следует, что основной причиной высокого коэффициента распыления /4/ является кристалличность мишени, а не шероховатость ее поверхности. Похожие результаты получены для W.

## выводы

Методом компьютерного моделирования (программа OKSANA) проведен расчет распыления большого числа аморфных и поликристаллических мишеней (Ni, Cu, Zr, Mo, Ag, Au, W, Al, Fe, Ti, V, Cr, Be, Ta и др.) ионами Ar с энергией 0.1-100 кэВ при падении по нормали к поверхности. Как и в платины /1/, коэффициенты случае распыления распыления поликристаллов в области энергий выше 1 кэВ превышают коэффициенты распыления аналогичных аморфных мишеней. Это связано с распылением за счет линейных последовательностей соударений, вклад которых тесно связан с типом соответствующей кристаллической решетки. Наилучшее согласие с экспериментом получено при использовании потенциалов ZBL и Kr-C.

#### Литература

1. V.I. Shulga // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 174 (2001) 423.

- 2. K. Schlueter, K. Nordlund, G. Hobler et al. // Phys. Rev. Lett. 125 (2020) 225502.
- 3. A.N. Zinoviev // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 354 (2015) 308.
- 4. N.N. Andrianova, A.M. Borisov et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. 88 (2024) 478.