

01;05

Распыление атомов при ионной бомбардировке сред, содержащих в приповерхностной области наноразмерные частицы

© С.Е. Максимов, Б.Л. Оксенгендлер

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент,
Узбекистан
E-mail: maksimov_s@yahoo.com

Поступило в Редакцию 4 сентября 2014 г.

Для исследования процессов распыления атомов при ионной бомбардировке сред, содержащих в приповерхностной области наноразмерные частицы другого материала, теоретически рассмотрена модификация механизмов линейного каскада и ударных волн. Показано, что в случае линейного каскада учет наличия границы раздела между наночастицей и матрицей может приводить как к увеличению выхода продуктов распыления, так и к его уменьшению, тогда как при реализации механизма ударной волны всегда имеет место увеличение выхода эмиссии частиц.

В последние годы радиационная физика твердого тела (РФТТ) демонстрирует устойчивый интерес в области особенностей радиационных эффектов в нанобъектах [1–3]. Распыление под действием ионной бомбардировки, являясь одним из важных типов радиационных эффектов [4], естественно следует этой тенденции [5]. В работе [5] были сформулированы концепции радиационной нанофизики и намечена программа системного подхода к разработке этой новой области РФТТ. В данной работе в продолжение этой программы изучается проявление наноструктурированности материалов в ионном распылении, причем в качестве базовых факторов воздействия рассматриваются упругое рассеяние и ударные волны. Тем самым в определенной мере завершается программа, начатая в [5,6], где проанализирована роль электронных возбуждений и теплового пика.

Целью данной работы является изучение особенностей распыления наночастиц одного материала, внедренных в приповерхностную область

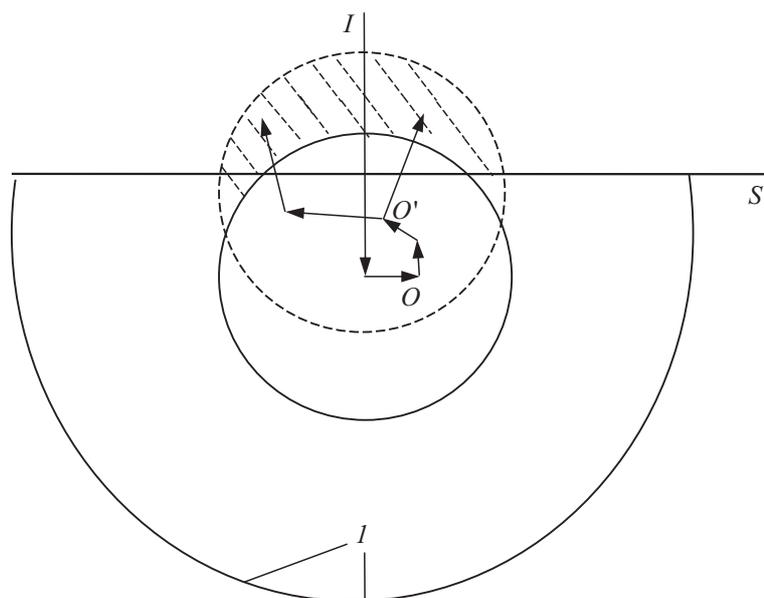


Рис. 1. Схема увеличения выноса линейного каскада за поверхность S . Заштрихованная область соответствует дополнительному выходу атомов, обусловленному воздействием границы раздела; I — падающий первичный ион, O и O' — центры областей каскадов, S — граница раздела „наночастица–матрица“.

другого материала, по сравнению с распылением объемного однородного материала первого типа.

Рассмотрим протекание линейного каскада, проявляющегося путем упругого рассеяния, в приповерхностной области, содержащей вкрапление инородного материала в виде полусферы (рис. 1), при попадании в данную полусферу бомбардирующего иона. Из важнейших свойств нанобъекта (наличия границы раздела и конфинмента элементарных возбуждений) рассмотрим наиболее существенное в аспекте изучаемой проблемы — границу раздела между наночастицей и матрицей. Физика влияния границы раздела на линейный каскад состоит в следующем. Образование линейного каскада в однородном материале (без наночастицы) изучено весьма подробно [4,7,8], и, согласно установившемуся

представлению, часть „горячих“ атомов (рекойлов) образовавшегося каскада достигает поверхности с энергией, достаточной для вылета из твердого тела; этот эффект принято характеризовать величиной выхода атомной эмиссии Y , приходящейся на один облучающий ион. Наличие границы раздела приводит к градиенту плотности атомов наночастицы. Это может быть описано как появление упругого взаимодействия этой границы со смещенными горячими атомами каскада. Учитывая фокусирующее действие полусферической границы раздела, влияние ее на смещенный атом можно моделировать однородным полем, так что дополнительная сила на каждый смещенный атом равна $F = a^3 \sigma_{el} / R_0$ [9], где a^3 — дилатационный объем смещенного атома, σ_{el} — суммарное упругое напряжение от границы раздела, R_0 — радиус наночастицы. Отметим, если граница сжата, то сила F направлена к поверхности, если же граница растянута, — в противоположную сторону. До тех пор пока смещенные атомы являются горячими, они полем F сносятся в сторону поверхности, и это смещение равно $\Delta x = \mu Ft$, где $\mu = D/kT$ — подвижность горячих атомов, t — время пребывания атомов в „горячем“ состоянии, $D = \frac{1}{3} \nu^2 \tau$ — коэффициент диффузии горячих атомов, ν — их скорость, τ — время между актами рассеяния горячих атомов, сопровождающихся выбиванием атомов из регулярных позиций.

Запишем выражение для Y_0 в виде $Y_0 = \frac{1}{6}(6Y_0)$, суть которого отражает то обстоятельство, что к поверхности летит лишь 1/6 часть от числа всех смещенных атомов $6Y_0$. В присутствии же смещающей силы от границы раздела имеем

$$Y = \left(\frac{1}{6} \pm \delta \right) (6Y_0). \quad (1)$$

Здесь знак „+“ соответствует сжатию наночастицы матрицей, знак „–“ — ее растяжению.

Для δ можно записать выражение

$$\delta = \frac{\mu Ft}{2R_{cas}} = \frac{\mu a^3 \bar{\sigma}_{el} t}{2R_{cas} R_0}, \quad (2)$$

где R_{cas} — радиус каскада, $\bar{\sigma}_{el}$ — среднее упругое напряжение внутри наночастицы, вызванное границей раздела.

Если учесть, что время жизни „горячего“ состояния атомов $t = n\tau$, то легко получить

$$\delta = \frac{a^3\sigma_{el}}{2R_{cas}R_0} \left\langle \frac{1}{3} v^2 \tau^2 n \right\rangle_E \approx \frac{1}{3} \frac{a^3\sigma_{el}}{kT} \frac{\langle n(E) \rangle_E}{\sigma_r^2 R_{cas} R_0 N^2}. \quad (3)$$

Здесь учтено, что $\tau = 1/N\sigma_r v$, причем N — число атомов в единице объема наночастицы, σ_r — сечение рассеяния рекойлов на атомах наночастицы.

При $n(E) = \ln(E/E_d)$, где E_d — энергия смещения атома, и усреднении по сечению твердых шаров [4,10] получим окончательно для δ

$$\delta = \frac{1}{60} \frac{a^3\sigma_{el}}{kT} \frac{1}{N^2 R_{cas} R_0 \rho_0^4} \frac{\ln(E_{\max}/E_d)}{(1 - E_d/E_{\max})^2}. \quad (4)$$

Здесь ρ_0 — радиус сталкивающихся атомов, E_{\max} — максимальная энергия атома в каскаде.

Сделаем оценку величины δ . При $a^3\sigma_{el} \approx 1 \text{ eV}$, $kT \approx 0.025 \text{ eV}$, $N = 10^{28} \text{ m}^{-3}$, $\rho_0 \approx 1 \text{ \AA}$, $R_{cas} \approx 5 \cdot 10^{-9} \text{ m}$, $R_0 \approx 10^{-8} \text{ m}$, $E_{\max}/E_d \approx e^5$ получаем $\delta \approx 0.02$, что составляет около 12% от 1/6. Отметим, что ситуацию с минусом при δ можно обозначить как радиационную стойкость поверхности к ионной бомбардировке.

Хорошо известно [11–13], что значительная часть эмитированных частиц при ионной бомбардировке вылетает в виде многоатомных кластеров. Возникла идея [14–17], что причиной такого выброса материала с приповерхностной области являются ударные волны, генерируемые тормозящимися в веществе ионами. Физическая основа такого коллективного выноса материала состоит в том, что при этом тратится только энергия образования двух поверхностей, тогда как при индивидуальном выносе атомов должны разрушиться все химические связи. При этом, однако, проблема состоит в необходимости передать единовременный импульс всему коллективу вылетающих атомов. Именно эту роль и играет ударная волна. Теоретически этот механизм был изучен в работах [17–19], но только для гомогенных материалов, тогда как приповерхностная область, состоящая из матрицы с вкрапленной в нее нанообластью, гетерогенна. Учет последнего обстоятельства требует определенной модификации теоретической схемы.

Рассмотрим необходимую модификацию исходя из рис. 2. На рис. 2,а [17] показано, что возбуждение от части выделившейся

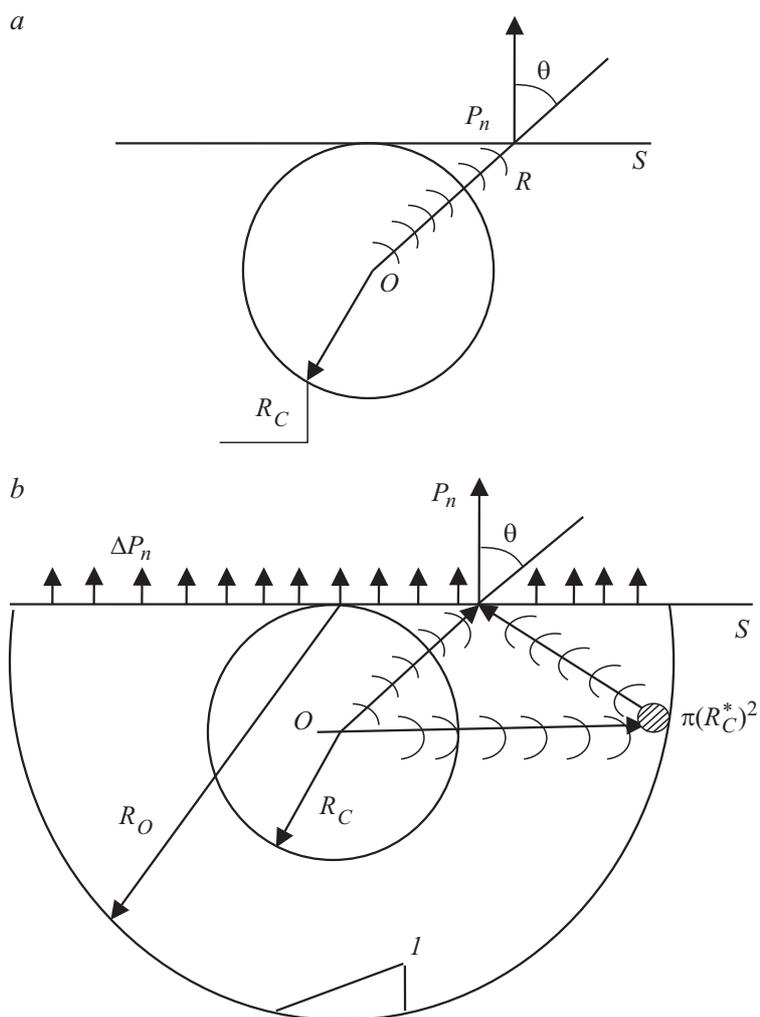


Рис. 2. Выброс вещества из приповерхностной области ударной волной: *a* — явление атомной эмиссии в гомогенной среде; *b* — явление атомной эмиссии в гетерогенной среде.

при торможении энергии иона, распространяясь во все стороны (гипотеза сферической симметрии источника ударных волн), достигает поверхности и срывает часть приповерхностной области при условии превышения нормальной составляющей ударной волны над скалывающим напряжением P_{sp} , являющимся константой материала:

$$P_n(R) \geq P_{sp}. \quad (5)$$

Величина $P_n(R)$ определяется выражением [15,16]

$$P_n(R) = P(R) \cos \Theta = P_c \left(\frac{R_c}{R} \right)^2 \frac{R_c}{R}, \quad (6)$$

где R_c — радиус области начального (при $t = 0$) выделения энергии, где генерируется ударная волна, определяемая выражением

$$R_c = \left[\frac{3(dE/dx)_n}{2\pi N \varepsilon_c} \right]^{1/2}. \quad (7)$$

Здесь ε_c — средняя критическая кинетическая энергия атома на фронте ударной волны, являющаяся параметром теории. Величина P_c зависит от выбора гипотезы рождения ударных волн в первичной области; в довольно общем случае [18]

$$P_c = \frac{\frac{2}{3} \left[\frac{2\varepsilon_c}{KN} - 1 \right]}{K} \equiv \frac{\delta_c}{K}, \quad (8)$$

где K — сжимаемость вещества.

Если учесть, что объем вылетающего конуса вещества равен $V = \frac{1}{3} R_c (R^2 - R_c^2)$, то число атомов в конусе, т.е. выход атомной эмиссии [18]:

$$Y = \frac{\pi}{3} N R_c^3 \left[\left(\frac{P_c}{P_{sp}} \right)^{2/3} - 1 \right]. \quad (9)$$

Очевидно из (9) и (7):

$$Y \sim \left[\left(\frac{dE}{dx} \right)_n \right]^{3/2}. \quad (10)$$

Что изменится в описанной теоретической схеме при переходе к гетерогенной приповерхностной области — наночастице, внедренной в

инородную матрицу? Из Рис. 2, *b* следует, что здесь мы сталкиваемся с новым элементом — наличием вогнутой границы раздела между наночастицей и матрицей, которая отражает внутрь наночастицы налетающие на нее из центра энерговыведения ударные волны. Учтем теперь важное обстоятельство: если волновые сопротивления $\rho_i v_i$ (где ρ_i — плотность, v_i — скорость волны в двух контактирующих средах, $i = 1, 2$) отличаются, то коэффициент отражения волны от границы будет [19]

$$\gamma = \frac{(\rho_1 v_1 - \rho_2 v_2)^2}{(\rho_1 v_1 + \rho_2 v_2)^2}. \quad (11)$$

Отсюда следует, что давление отраженной волны в точке R от ее центра равно:

$$P^{(rep)}(R) = P_c \left(\frac{R_c^{(rep)}}{R} \right)^2. \quad (12)$$

Здесь величины $P^{(rep)}(R)$ и $R_c^{(rep)}$ следует отличать от величин $P(R)$ и R_c , относящихся к первичной падающей волне (см. (6) и (7)) на границу раздела. Теперь можно записать выражение для дополнительного (от отраженных волн) суммарного давления, которое испытывает поверхность от вторичных волн из всех точек границы раздела:

$$\Delta P_n \approx \gamma \sum_j P_c \left(\frac{R_c^{(rep)}}{\langle R_j \rangle} \right)^2 \equiv P_c \frac{\gamma}{\chi^2}. \quad (13)$$

Здесь учтено, что число членов в сумме равно $\frac{1}{2} \frac{4\pi R_0^2}{\pi(R_c^*)^2}$, $\chi \geq 1$, $\langle R_j \rangle$ — средний размер хорд, соединяющих точку поверхности с точками границы раздела матрица–наночастица, $\pi(R_c^*)^2$ — элементарная площадь источника вторичной ударной волны, расположенная на границе раздела „наночастица–матрица“ (рис. 2, *b*). Добавочное давление (13) можно рассмотреть как величину, уменьшающую энергию скола до величины P_{sp}^* :

$$P_{sp}^* = P_{sp} - \Delta P_n < P_{sp}. \quad (14)$$

Это очевидно показывает, что величина выхода эмиссии атомов из наночастицы возрастает по сравнению с гомогенным случаем (см. (9)):

$$Y^* \approx \frac{\pi}{3} N(R_c)^3 \left\{ \left(\frac{P_c}{P_{sp}} \right)^{2/3} - 1 + \frac{2\gamma}{3\chi^2} \right\} = Y + \frac{2}{3\chi^2} \frac{\gamma}{\left(\frac{P_c}{P_{sp}} \right)^{2/3} - 1} > Y. \quad (15)$$

Отметим два важных обстоятельства:

1) $Y^* \sim \left[\left(\frac{dE}{dx} \right)_n \right]^{3/2}$, т.е. выход пропорционален удельным упругим потерям в степени 3/2, как и для случая бомбардировки гомогенного объекта;

2) в приближении отсутствия затухания ударных волн при их движении по наночастице увеличение выхода эмиссии не зависит от размера наночастицы; учет затухания уменьшит приращение $\Delta Y = Y^* - Y$, т.е. $d(\Delta Y)/dR_0 < 0$.

Таким образом, в работе рассмотрены особенности процесса распыления из нанокристаллов одного типа, внедренных в приповерхностную область кристалла другого типа (матрицу). Рассмотренная геометрия объекта, обеспечивающая перепад плотности материала наночастицы, позволяет выявить роль 2 факторов радиационного воздействия — упругого рассеяния и ударных волн, развиваемых в наночастице при ионной бомбардировке. Показано, что в сжимающей и растягивающей матрицах выход распыленных частиц для механизма упругого рассеяния увеличивается и уменьшается соответственно, тогда как для распыления по механизму ударных волн распыление в наночастицах облегчается всегда, причем сохраняется критерий реализуемости именно механизма ударных волн $Y^* \sim \left[\left(\frac{dE}{dx} \right)_n \right]^{3/2}$, характерного и для объемных гомогенных образцов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета по координации развития науки и технологий при Кабинете министров Республики Узбекистан (контракты № Ф2-ФА-Ф157 и Ф3-ФА-Ф158).

Список литературы

- [1] Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Максимов С.Е., Джурабекова Ф.Г. // ЖЭТФ. 2010. Т. 138. № 3. С. 469–474.

- [2] Андреевский Р.А. // Труды XXI Международной конференции „Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2013“. Ярославль, Россия, 22–26 августа 2013. Т. 2. С. 105–108.
- [3] Krasheninnikov A.V., Nordlund K. // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. P. 1–70.
- [4] Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред Р. Бериша. М.: Мир, 1984. Т. I. 336 с.; 1986. Т. II. 484 с.
- [5] Djurabekova F.G., Ashurov Kh.B., Maksimov S.E., Turaeva N.N., Oksengendler B.L. // Phys. Stat. Solid. C. 2013. V. 10. N 4. P. 685–688.
- [6] Oksengendler B.L., Djurabekova F.G., Maksimov S.E., Turaev N.Yu., Turaeva N.N. // Vacuum. 2014. V. 106. P. 70–73.
- [7] Sigmund P. // Phys. Rev. 1969. V. 184. N 2. P. 383–416.
- [8] Фальконе Д. // УФН. 1992. Т. 163. № 1. С. 7–117.
- [9] Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наук. думка, 1981. 328 с.
- [10] Динс Дж., Виньярд Дж. Радиационные явления в твердых телах. М.: ИЛ. 1960.
- [11] Джемилев Н.Х., Курбанов Р.Т. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1979. Т. 43. № 1. С. 606–611.
- [12] Urbassek H.M., Hofer W.O. // Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. Matematisk-fysiske Meddelelser. 1993. V. 43. P. 97–125.
- [13] Wucher A. // Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. Matematisk-fysiske Meddelelser. 2006. V. 52. P. 405–432.
- [14] Carter G. // Radiation Effects Letters. 1979. V. 43. P. 193–199.
- [15] Kitazoe Y., Yamamura Y. // Radiation Effects Letters. 1980. V. 50. P. 39–44.
- [16] Kitazoe Y., Hiroaka N., Yamamura Y. // Surface Science. 1981. V. 111. P. 381–394.
- [17] Bitensky I.S., Parilis E.S. // Nucl. Instr. Meth. B. 1987. V. 21. P. 26–36.
- [18] Parilis E.S., Turaev N.Yu. et al. Atomic Collisions on Solid Surfaces. Amsterdam–London–New York–Tokyo: North-Holland, 1993. 664 p.
- [19] Яворский Б.Н., Пинский А.А. Основы физики. Т. II. М.: Наука, 1981. 448 с.