

02

Комментарий к статье А.И. Толмачева и Л. Форлано „Зависимость коэффициента распыления от угла падения ионов на поверхность мишени“ (2022, Т. 92. Вып. 5, С. 660–664)

© В.И. Шульга

Институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия
e-mail: vish008@yandex.ru

Поступило в Редакцию 10 июня 2023 г.

В окончательной редакции 10 июня 2023 г.

Принято к публикации 14 августа 2023 г.

Представлен критический анализ подхода, примененного А.И. Толмачевым и Л. Форлано в работе, опубликованной в ЖТФ, **92** (5), 660 (2022), к решению задачи о ионном распылении твердых тел.

Ключевые слова: распыление, угловая зависимость коэффициента распыления, компьютерное моделирование, программа PAOLA, программа SRIM, транспортное уравнение, парные столкновения.

DOI: 10.61011/JTF.2023.10.56276.147-23

В работе [1] исследовано распыление твердых тел в интервале углов падения ионов от 0° (нормальное падение) до 90° (предельное скользящее падение). Работа включает теоретический анализ, основанный на численном решении уравнения переноса, и компьютерное моделирование с помощью программы PAOLA, базирующейся на модели парных упругих столкновений. Результаты представлены в виде зависимостей $Y(\theta_0)/Y(0^\circ)$, где Y — коэффициент распыления и θ_0 — угол падения. Показано, что Y растет с увеличением θ_0 до некоторого максимального значения, а затем убывает до величины $Y(90^\circ)$. Полученные значения $Y(90^\circ)/Y(0^\circ)$ лежат в пределах 0.5–5. Обнаружено качественное согласие с расчетами по программе SRIM [2] и расхождение с расчетами по программе OKSANA [3], которые дали значения $Y = 0$ при скользящей бомбардировке аморфных Si и Ge, имеющих плоскую поверхность, ионами Ar и Xe с энергией 1 keV. Сделан вывод о том, что расхождение может быть связано с „неточной интерпретацией первого столкновения иона при входе в мишень“ [1].

Отсутствие распыления при скользящей бомбардировке плоских поверхностей отмечалось во многих работах. Для аморфных мишеней этот результат был получен в расчетах по программам MARLOWE [4], TRIM.SP [5], ACAT [6], TRIDYN [7], SDTrimSP [8], IMSIL [9,10] и др. Расчеты выполнены для ионов H, Ar, Ga, Xe и различных мишеней (Si, Ni, Cu, Ag, Ta) в интервале энергий ионов 1–30 keV. Отсутствие распыления при больших углах θ_0 связано с полным отражением ионов от поверхности в результате серии коррелированных столкновений с атомами верхнего слоя аналогично тому, что имеет место в случае рассеяния поверхностной цепочкой атомов [11,12]. Это иллюстрирует рисунок, где показаны траектории ионов при рассеянии цепочкой атомов и трехмерной аморфной мишенью. Разброс траекторий (b)

связан с различным положением атомов мишени для каждого нового падающего иона. Отсутствие рассеяния на большие углы, как и в случае отражения от цепочки (a), объясняется взаимным затенением атомов, расположенных вблизи поверхности, в результате чего столкновения при малых прицельных параметрах не происходят. Это затрудняет передачу энергии атомам мишени, что и дает нулевые значения Y .

В программе PAOLA [1] перед каждым столкновением генерируются случайные числа R_1 , R_2 и R_3 в диапазоне от 0 до 1. Эти числа определяют пробег частицы между столкновениями $\lambda = \lambda_0 \ln(1/R_1)$, полярный угол рассеяния ω в системе центра масс

$$\cos \omega = \frac{2(1 + \varepsilon)R_2 - 1}{1 + 2R_2\varepsilon} \quad (1)$$

и азимутальный угол рассеяния $\varphi = 2\pi R_3$, где λ_0 — средняя длина свободного пробега и ε — приведенная энергия. Как следует из (1), при $R_2 = 0$ угол рассеяния $\omega = 180^\circ$, что соответствует лобовому столкновению, при котором передача энергии атому мишени максимальна. При случайной выборке углов рассеяния такие жесткие столкновения могут иметь место и на начальном участке траектории иона, инициируя распыление даже при углах θ_0 , близких к 90° , что и наблюдалось в [1]. Этот результат является следствием того, что использованная в работе [1] модель не учитывает возможность коррелированных столкновений, связанных с взаимным затенением атомов и играющих важную роль при скользящих углах падения. Следует также отметить, что при $R_1 = 1$ значение $\lambda = 0$, что противоречит наличию ближнего порядка в расположении атомов твердого тела.

Что касается SRIM [2], то в этой программе предполагается, что стартовые точки траекторий ионов лежат непосредственно на поверхности мишени, поэтому

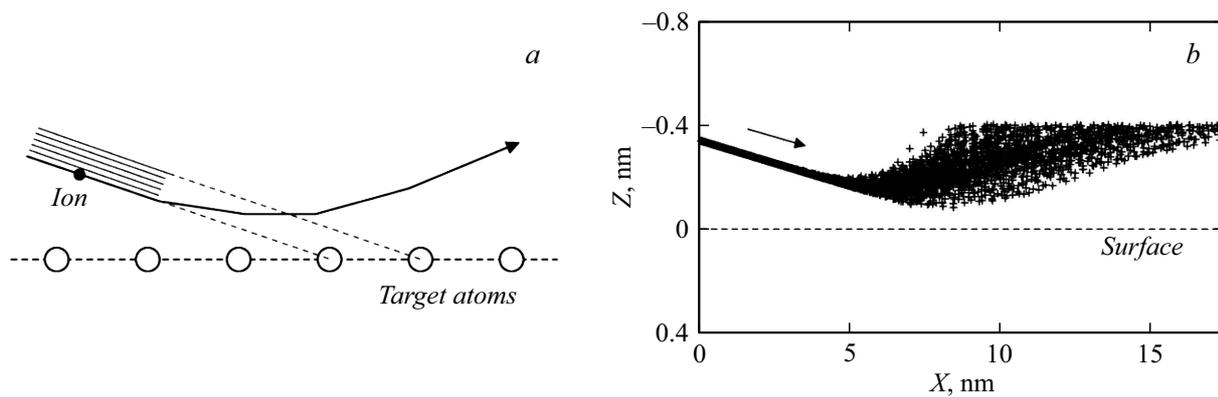


Рис. 1. *a* — схема рассеяния иона цепочкой атомов; *b* — траектории ионов Ar с энергией 1 keV, рассеянных поверхностью аморфного Ge при угле падения 88° (расчет по программе OKSANA с использованием потенциала Томаса-Ферми-Мольера с длиной экранирования Линдхарда). Траектории даны в проекции на плоскость падения.

рассеяние ионов при приближении к поверхности, как описано выше, вообще не рассматривается. Это показал проведенный в [3] анализ траекторий ионов, которые генерирует указанная программа. Игнорирование рассеяния ионов при подлете к поверхности и приводит к ненулевым значениям Y при $\theta_0 \approx 90^\circ$, т.е. когда ионы движутся почти параллельно поверхности. Этот результат расчетов по программе SRIM назван в работе [13] „clearly non-physical“ („явно нефизичным“).

Коэффициент распыления в области больших углов падения может резко возрасти при учете рельефа поверхности (например, [9,14]), а также притяжения падающих частиц поверхностью (например, в случае самораспыления [15]), однако обсуждение влияния этих факторов выходит за рамки данного комментария.

Таким образом, алгоритм расчета траекторий, использованный в программе PAOLA [1], искажает картину столкновений при приближении иона к поверхности, не учитывает эффект коррелированных столкновений частиц, связанных с взаимным затенением атомов, и, как результат, приводит к выводу о ненулевых коэффициентах распыления при углах падения, близких к 90° . Отмеченное в [1] совпадение результатов моделирования с помощью программы PAOLA и численного решения интегрального уравнения Чандрасекара свидетельствует о том, что указанные недостатки имеют место и в случае описания распыления на основе уравнения переноса.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.И. Толмачев, Л. Форлано. ЖТФ, **92** (5), 660 (2022). DOI: 10.21883/JTF.2022.05.52369.2-22 [A.I. Tolmachev, L. Forlano. Tech. Phys., **67** (5), 555 (2022). DOI: 10.21883/TP.2022.05.53670.2-22]

- [2] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, M.D. Ziegler. *SRIM — The Stopping and Ranges of Ions in Solids* (SRIM Co., Chester, 2008), <http://www.srim.org>
- [3] V.I. Shulga. *Appl. Surf. Sci.*, **439**, 456 (2018). DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.01.039
- [4] M. Hou, M.T. Robinson. *Appl. Phys.*, **18**, 381 (1979). DOI: 10.1007/BF00899692
- [5] J.P. Biersack, W. Eckstein. *Appl. Phys. A*, **34**, 73 (1984). DOI: 10.1007/BF00614759
- [6] Y. Yamamura, C. Mössner, H. Oechsner. *Radiat. Eff.*, **103**, 25 (1987). DOI: 10.1080/00337578708210060
- [7] H.-B. Kim, G. Hobler, A. Lugstein, E. Bertagnolli. *J. Micromech. Microeng.*, **17**, 1178 (2007). DOI: 10.1088/0960-1317/17/6/011
- [8] H. Hofsäss, K. Zhang, A. Mutzke. *Appl. Surf. Sci.*, **310**, 134 (2014). DOI: 10.1016/j.apsusc.2014.03.152
- [9] S. Lindsey, G. Hobler. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **303**, 142 (2013). DOI: 10.1016/j.nimb.2012.12.087
- [10] R.M. Bradley, G. Hobler. *J. Appl. Phys.*, **133**, 0653032 (2023). DOI: 10.1063/5.0137324
- [11] В.М. Кивилис, Э.С. Парилис, Н.Ю. Тураев. ДАН СССР, **173**, 805 (1967).
- [12] V.E. Yurasova, V.I. Shulga, D.S. Karpuzov. *Can. J. Phys.*, **46**, 759 (1968).
- [13] E.S. Wise, M.S. Liu, T. Miller. *Comp. Mater. Sci.*, **107**, 102 (2015). DOI: 10.1016/j.commater.2015.05.008
- [14] V.I. Shulga. *Appl. Surf. Sci.*, **458**, 18 (2018). DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.07.059
- [15] M.T. Robinson. *J. Appl. Phys.*, **54**, 2650 (1983). DOI: 10.1063/1.332267