

01;05;06;11

Об образовании дефектов в двухслойном кристалле Al/Ni под действием бомбардирующих ионов с близкими к порогу распыления энергиями

© Г.В. Корнич, Г. Бетц, А.И. Бажин

Запорожский технический госуниверситет, Украина
Inst. f. Allgemeine Physik, Technische Universitat Wien,
A-1040, Wien, Austria
Донецкий госуниверситет, Украина

Поступило в Редакцию 17 декабря 1999 г.

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование атомных каскадов столкновений в кристалле Al/Ni, состоящем из монослоя Al на поверхности Ni (100), при нормальной бомбардировке ионами Ar и Xe с энергиями 25 и 50 eV. Показано, что атомы Al совершают гораздо больше перемещений в 1-м слое Al/Ni по сравнению с числом перемещений атомов в монокристалле Ni благодаря отличию числа вакансий в 1-м слое и постоянных решетки Al и Ni.

В настоящей работе проведен сравнительный анализ результатов молекулярно-динамического (МД) моделирования образования точечных дефектов в двухслойном кристалле Al/Ni, состоящем из монослоя Al на поверхности Ni (100), и монокристалле Ni при температуре 300 K под действием нормально падающих на кристаллическую поверхность (100) ионов Ar и Xe с энергиями 25 и 50 eV. Использовались модельные кристаллы Ni и Al/Ni с периодическими граничными условиями на боковых границах [1], состоящие из 4032 и 3944 атомов соответственно. В обоих образцах атомы располагались в 14 слоях. В двухслойном кристалле Al/Ni по периметру поверхности были исключены два ряда атомов Al, подчиненных периодическим граничным условиям, с целью предотвращения нефизической структурной перестройки монослоя атомов Al [2]. При таком строении двухслойного кристалла монослой атомов Al повторял решеточный порядок подложки Ni (100) в отсутствие взаимодействия с падающим ионом. Атом-атомные взаимодействия описывались многочастичным потенциалом [3], подсоединенным при

Таблица 1. Среднее количество точечных дефектов, образующихся в двухслойном кристалле Al/Ni за один каскад

Al/Ni		N_{ws}	$N_{v,s}$	$N_{v,v}$	N_{in}	N_{ad}
Ar	25 eV	2.15/0.34	1.02	0.0	0.0	0.95/0.0
	50 eV	8.59/3.14	2.57	0.02	0.025/0.06	2.19/0.01
Xe	25 eV	2.47/0.6	1.06	0.01	0.0	0.95/0.0
	50 eV	10.6/3.37	3.04	0.06	0.005/0.015	2.89/0.025

Таблица 2. Среднее количество точечных дефектов, образующихся в монокристалле Ni за один каскад

Ni		N_{ws}	$N_{v,s}$	$N_{v,v}$	N_{in}	N_{ad}
Ar	25 eV	0.39	0.13	0.0	0.0	0.13
	50 eV	2.88	0.63	0.05	0.12	0.52
Xe	25 eV	0.81	0.25	0.01	0.0	0.26
	50 eV	3.32	0.71	0.0	0.21	0.48

больших энергиях к потенциалу ZBL [4], который описывал также и ион-атомные взаимодействия. Температура моделировалась путем задания на боковых границах и дне кристаллов слоя с постоянной температурой, который поглощал также привносимую ионом энергию [5]. В работе был использован предложенный в [6] алгоритм определения междоузельных атомов и вакансий. Начальные координаты ионов, падающих в заданную область поверхности [7], вычислялись по закону случайных чисел. Во всех случаях было проведено по 200 расчетов столкновительных каскадов, каждый из которых отслеживался в исходном кристалле в течение 4 ps.

В табл. 1 и 2 приведены данные об усредненных по числу испытаний количествах поверхностных $N_{v,s}$ и объемных $N_{v,v}$ вакансий, междоузельных N_{in} и радиационно-адсорбированных N_{ad} (адатомов) атомов, а также атомов, покинувших свои ячейки Вигнера–Зейтца N_{ws} , соответственно в кристаллах Al/Ni и Ni после 4 ps эволюции каскада. Данные в числителе ячеек табл. 1 относятся к слою атомов Al, а в знаменателе — к никелевой подложке кристалла Al/Ni. Из таблиц видно, что количества перемещений атомов N_{ws} в никелевой подложке

кристалла Al/Ni и в монокристалле Ni отличаются незначительно, тогда как количество перемещений атомов Al в кристалле Al/Ni при тех же условиях бомбардировки в 2–6 раз больше в зависимости от энергии и типа иона. Исходя из значений N_{ad} и N_{ws} , приведенных в табл. 1, а также учитывая не приведенные в работе модельные расчеты переходов атомов Al в глубь кристалла Al/Ni, количество перемещений атомов Al за пределы своих ячеек Вигнера–Зейтца вдоль поверхностного слоя без перехода в подложку или адслой составляло 0.91 и 5.25 перемещений/ион для ионов Ag и 1.02 и 6.2 перемещений/ион для ионов Xe при энергиях 25 и 50 eV соответственно. Данные табл. 2 показывают, что в монокристалле Ni количество таких перемещений атомов в несколько раз меньше, поскольку общее число перемещений атомов N_{ws} мало.

Тип иона незначительно влияет на число перемещений атомов Al в первом слое кристалла Al/Ni, так как работа механизма этих перемещений определяется, в первую очередь, слабо зависящим от типа иона, как видно из табл. 1, количеством поверхностных вакансий. Изучение поверхности модельного кристалла Al/Ni после затухания каскада показало, что в первом слое в области падения иона происходит влекущая за собой значительное число перемещений атомов Al локальная перестройка атомной структуры, вызванная различием постоянных решетки Al (4.05 Å) и Ni (3.52 Å) и возможная благодаря свободному пространству 1–3 поверхностных вакансий, образующихся за один каскад. При этом краевые ряды атомов Al по периметру первого слоя не изменялись. В кристалле Ni такой эффект не наблюдался, что подтверждается малыми значениями N_{ws} и $N_{v,s}$ в табл. 2.

Модельный расчет среднеквадратичного смещения (СКС) атомов из своих ячеек Вигнера–Зейтца также говорит о значительных перемещениях атомов Al в пределах первого слоя. В случае бомбардировки Al/Ni ионами Ag и Xe с энергией 25 eV, СКС атомов Al в первом слое составило 5.3 и 5.4 Å², тогда как боковые смещения атомов в плоскости (100) во всем монокристалле Ni без учета адатомов при той же энергии ионов были 0.93 и 1.8 Å² соответственно. Боковые смещения, как и соответствующие N_{ws} , в монокристалле Ni и в Ni подложке кристалла Al/Ni отличались незначительно. При энергии ионов Ag и Xe 50 eV СКС атомов Al в пределах первого слоя были 28.7 и 34.2 Å², тогда как в монокристалле Ni боковые смещения атомов в каскаде без учета адатомов 7.9 и 9.0 Å².

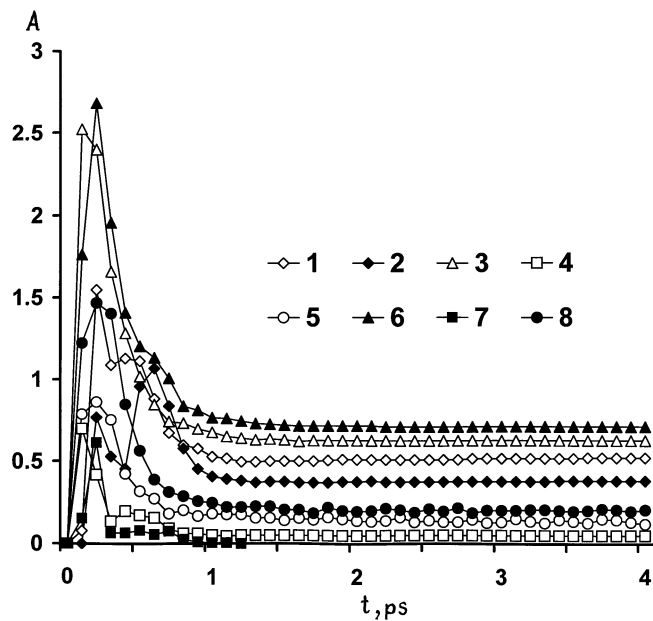


Рис. 1. Количества радиационно-адсорбированных атомов (1, 2), поверхностных (3, 6) и объемных (4, 7) вакансий, а также междуузельных атомов (5, 8) в монокристалле Ni в зависимости от времени развития усредненного по количеству испытаний каскада, вызываемого ионами Ag (со светлыми метками) и Xe (с темными метками) с энергией 50 eV.

На рис. 1 и 2 представлены усредненные по числу испытаний зависимости количества дефектов от времени развития каскада в кристаллах Ni и Al/Ni при энергии ионов 50 eV. Видно, что количества точечных дефектов разных типов в монокристалле Ni и в подложке кристалла Al/Ni уменьшаются в два и более раза после 0.5–07 ps эволюции каскада. Количества же поверхностных вакансий и Al адатомов в кристалле Al/Ni, как видно из рис. 2, достигая максимальных значений в течение первой пикосекунды, только незначительно уменьшаются за время релаксации каскада. При этом поверхностные вакансии в Al/Ni независимо от типа иона показывают волнообразную нестабильность после 1 ps, что свидетельствует о низкоэнергетическом процессе прохождения атомов

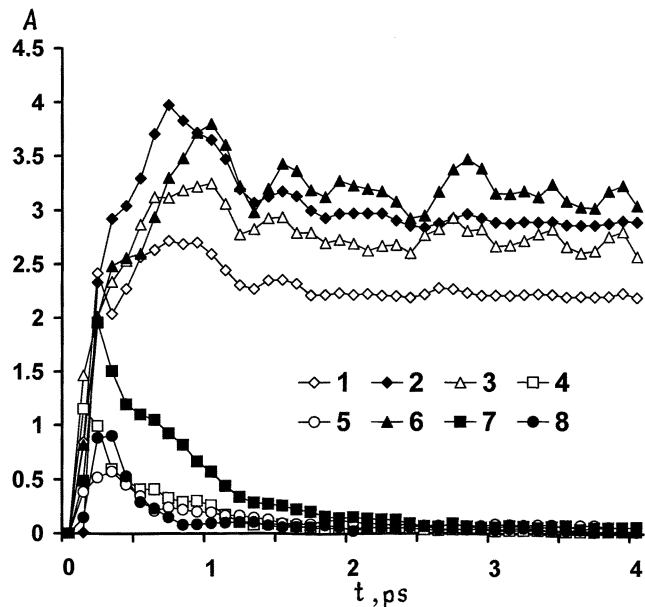


Рис. 2. Количества радиационно-адсорбированных атомов Al (1, 2), поверхностных (в монослое Al, 3, 6) и объемных (в подложке Ni, 4, 7) вакансий, а также междуузельных атомов Ni (5, 8) в двухслойном кристалле Al/Ni в зависимости от времени развития усредненного по количеству испытаний каскада, вызываемого ионами Ar (со светлыми метками) и Xe (с темными метками) с энергией 50 eV.

Al вблизи точек узлов первоначальной решетки. Качественно такие же временные зависимости образования Al адатомов и поверхностных вакансий в Al/Ni наблюдались и при энергии ионов 25 eV. Различный характер зависимостей количества поверхностных дефектов от времени развития каскада в Al/Ni, с одной стороны, и объемных дефектов в подложке Al/Ni, а также дефектов в монокристалле Ni, с другой стороны, также связан с локальными изменениями атомной структуры слоя Al в Al/Ni. Этот процесс не сопровождается появлением межатомных сил, возвращающих систему к прежней атомной структуре поверхности, и не приводит к эффективной рекомбинации поверхностных вакансий и адатомов в Al/Ni.

Моделирование также показало, что в кристалле Al/Ni образуется в 4–10 раз меньше междоузельных атомов по сравнению с монокристаллом Ni при энергии ионов 50 eV. Очевидно, слой атомов Al на никелевой подложке, затрудняя передачу энергии в глубь образца вследствие различия атомных масс компонент, снижает вероятность возникновения последовательностей столкновений замещения атомов, являющихся основным механизмом образования стабильных междоузельных атомов, и приводит в основном к возникновению скомпенсированных атомных перемещений. В тех случаях, когда после 4 ps эволюции каскадов в Ni и Al/Ni оставались объемные вакансии и междоузельные атомы Ni, наблюдалось их разделение по глубине, так как они располагались во 2–3 и 5–10-м слоях соответственно. Междоузельные атомы Al после 4 ps наблюдались только в 1–2-м слоях.

Список литературы

- [1] *Haile J.M.* / Molecular Dynamics Simulation — Elementary Methods. New York: Wiley-Interscience, 1992. 386 p.
- [2] *Kornich G.V., Betz G., Bazhin A.I.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 1999. V. 153. P. 383–390.
- [3] *Gao F., Bacon D.J., Ackland G.J.* // Phil. Mag. A. V. 67. P. 275–288.
- [4] *Biersack J.P., Ziegler J.F.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 1982. V. 141. P. 93–99.
- [5] *Berendsen H.J., Postma J.P.M., Gunsteren W.F.V.* et al. // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 3684–3690.
- [6] *Gades H., Urbassek H.M.* // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 14 559–14 569.
- [7] *Betz G., Pellin M.J., Burnett J.W., Gruen D.M.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 1991. V. 58. P. 429–437.