

Молекулярно-динамическое моделирование образования дефектов в кристалле алюминия при бомбардировке ионами низких энергий

© Г.В. Корнич, Г. Бетц*, А.И. Бажин**

Запорожский государственный технический университет,
690063 Запорожье, Украина

* Institut für Allgemeine Physik, Technische Universität Wien,
A-1040, Wien, Austria

** Донецкий государственный университет,
340055 Донецк, Украина

E-mail: gkornich@zstu.zaporizhzhе.ua

(Поступила в окончательном виде 19 июня 2000 г.)

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование атомных каскадов столкновений, инициируемых нормально падающими на поверхность кристалла Al(100) ионами Ag и Xe с энергиями 25, 40 и 50 eV при температуре кристалла 300 K. Обсуждается образование вакансий, радиационно-адсорбированных и межузельных атомов в каскаде. Показано, что при бомбардировке Al ионами Xe числа образуемых в каскадах поверхностных и объемных вакансий имеют два максимума в интервалах 0.2–0.3 и 0.7–1.0 ps с начала каскада, тогда как в случае Ag генерации вакансий имеют один максимум в интервале 0.2–0.3 ps.

Работа поддержана грантом GZ 41002/8-19/91 Венского технического университета. Один из авторов (Г.В.К.) считает своим приятным долгом выразить признательность Австрийскому фонду научных исследований за предоставление финансовой поддержки во время его работы в Institut für Allgemeine Physik, Technische Universität Wien, Австрия.

Метод молекулярной динамики (МД) [1,2] на основе многочастичных потенциалов атом-атомного взаимодействия [3] позволяет корректно описывать все стадии образования дефектов кристаллической решетки, включая рекомбинацию нестабильных дефектов в низкоэнергетическом столкновительном каскаде атомов при ионной бомбардировке. Значительный интерес представляет рассмотрение механизмов образования дефектов в приповерхностной области легких кристаллических мишеней при их бомбардировке тяжелыми ионами, когда нелинейные столкновительные эффекты, например эффект "очистки пути" [4], моделирование которых возможно только МД методом, дополняются влиянием поверхности, выражающемся в образовании радиационно-адсорбированных атомов (ад-атомов) и поверхностных вакансий [5–9]. В настоящей работе обсуждаются распределение упругих энергетических потерь бомбардирующих ионов по глубине мишени, образование поверхностных и объемных вакансий, радиационно-адсорбированных и межузельных атомов, а также изменение среднеквадратичного смещения атомов (СКС) за время эволюции каскада при нормальной бомбардировке поверхности кристалла Al(100) ионами Ag и Xe с энергиями 25, 40 и 50 eV и температуре кристалла 300 K.

1. Молекулярно-динамическая модель

В работе использовался состоящий из 4032 атомов модельный кристалл Al с постоянной решетки 4.05 Å и периодическими граничными условиями на боковых границах [2]. Атомы располагались в 14 слоях. Атом-атомные взаимодействия описывались многочастичным

потенциалом, подсоединенным при больших энергиях к потенциалу Зиглера–Бирсака–Литмарка (ЗБЛ) [10]. ЗБЛ потенциал описывал также и ион-атомные взаимодействия. Уравнения движения частиц решались методом Верлета [2]. При этом шаг интегрирования по времени не превышал 4.5 fs. Температура моделировалась путем задания на боковых границах и дне кристалла слоя с постоянной температурой, который поглощал также привносимую ионом в кристалл энергию [11]. Амплитуда колебаний температуры в стабилизированном без взаимодействия с ионом кристалле не превышала 4% от средней температуры. Для регистрации межузельных атомов и вакансий был использован предложенный в [6] алгоритм. Закон сохранения вещества при регистрации дефектов кристаллической решетки после 1 ps эволюции каскада выполнялся с точностью не хуже 94%. Начальные координаты ионов, падающих в заданную область поверхности [12], 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.

2. Результаты и обсуждения

2.1. Упругие потери энергии ионов. На рис. 1 приведены распределения упругих потерь энергии иона по глубине кристалла Al. Здесь и далее на рисунках представлены усредненные по числу испытаний величины. Отраженными ионами Ag и Xe из кристалла уносится в среднем 1–3 eV в расчете на один бомбардирующий ион. Коэффициент отражения ионов Ag оставался равен единице, тогда как для Xe он убывал с ростом

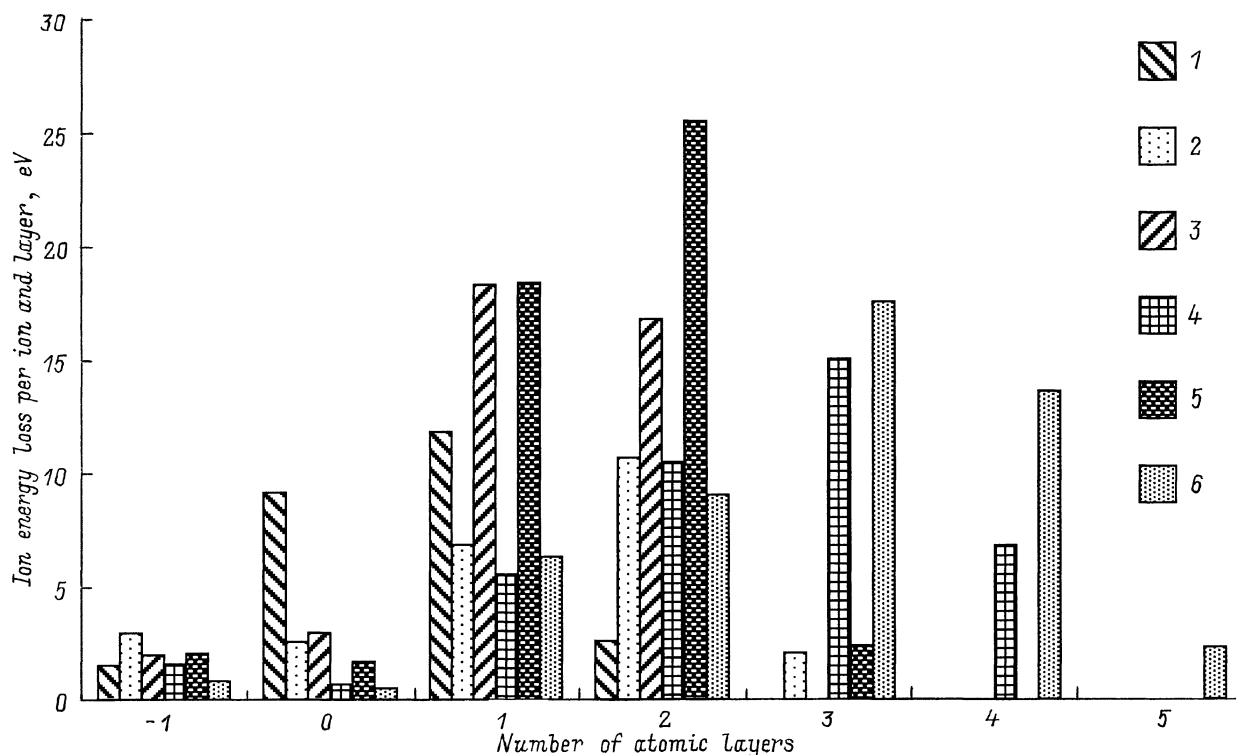


Рис. 1. Распределение упругих потерь энергии ионов Ag (1,3,5) и Xe (2,4,6) по глубине кристалла при различных энергиях. E , eV: 1, 2 — 25, 3, 4 — 40, 5, 6 — 50. Слои: -1 — энергия, уносимая отраженными ионами, 0 — слой ад-атомов, 1 — поверхностный слой кристалла.

начальной энергии (0.96–25, 0.73–40 и 0.44–50 eV), чем объясняется незначительное возрастание уносимой отраженными ионами Ag энергии и обратная тенденция для Xe. Одновременно снижаются потери энергии обоих ионов в слое ад-атомов над поверхностью кристалла. Как видно из рис. 1, ионы Xe проникают в кристалл глубже, чем ионы Ag, которые при начальных энергиях 40 и 50 eV теряют ~ 90% энергии в первом и втором атомных слоях, включая слой ад-атомов, тогда как ионы Xe с теми же энергиями оставляют ~ 60% начальной энергии в третьем и четвертом слоях.

Изменение знака нормальной к поверхности составляющей скорости иона Xe в интервале 0.2–0.4 ps с начала каскада происходит в результате одновременного взаимодействия иона с 2–3 выбитыми им из положений равновесия атомами, которые взаимодействуют также с более глубоко расположенными слоями атомов. Коллективное торможение с последующим отражением тяжелого иона одновременно большим количеством легких атомов решетки можно рассматривать как завершение процессов "очистки пути" легкими атомами мишени перед движущимся тяжелым ионом, который моделировался в [4] для более высоких энергий. В случае Ag имеет место аналогичный механизм отражения иона, хотя он проявляется несколько раньше в интервале 0.1–0.2 ps и ближе к поверхности.

2.2. Радиационно-адсорбированные и меж-узельные атомы. На рис. 2, *a* видно, что ионы Xe (здесь и далее — кривые с темными метками) генерируют больше стабильных ад-атомов, чем ионы Ag (кривые со светлыми метками) во всех случаях. В случае Xe максимум числа ад-атомов N_{ad} достигается позже (~ 0.8–1.0 ps), чем в случае Ag (~ 0.2–0.6 ps). С ростом начальной энергии обоих ионов максимум смещается на 0.1–0.2 ps в сторону больших времен. Для Ag число стабильных ад-атомов незначительно возрастает с ростом энергии ионов, тогда как в случае Xe происходит скачок их числа между 25 и 40 eV. Стабилизация N_{ad} достигается после 1.1 и 1.5 ps эволюции каскада, индуцированного ионами Ag и Xe соответственно.

Величина N_{ad} в случае Xe при всех начальных энергиях имеет область возрастания с меньшим наклоном в интервале 0.2–0.4 ps, которая является результатом взаимодействий налетающего иона и первичных атомов отдачи с поверхностными атомами, а также, возможно, следствием выхода образующихся на поверхности криволинейных последовательностей столкновений атомов на эту же поверхность кристалла [13]. При этом последовательности столкновений замещения атомов (ПСЗ) в направлениях $\langle 110 \rangle$ могут быть образованы в кристалле Al даже при энергии ионов 25 eV, поскольку, согласно [14], пороговая энергия генерации ПСЗ $\langle 110 \rangle$

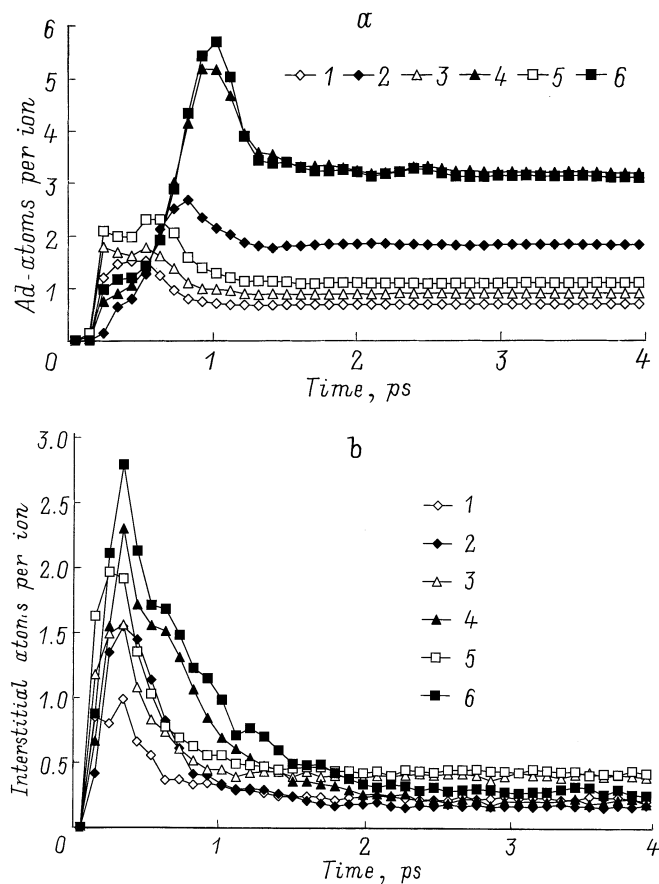


Рис. 2. Зависимость числа образуемых ад-атомов (*a*) и межузельных атомов (*b*) от времени каскада при бомбардировке ионами Ag (1,3,5) и ионами Хе (2,4,6) с различными энергиями. E , eV: 1, 2 — 25, 3, 4 — 40, 5, 6 — 50.

в кристалле Al с потенциалом взаимодействия [10] — 6 eV. Эти механизмы ад-атомов в том же временном интервале эффективны, как видно из рис. 2, *a*, в случае Ag, поскольку ионы Ag создают в целом первичные атомы отдачи Al с большими энергиями и большими составляющими скоростей в плоскости (100) относительно их нормальных составляющих. Так, после 0.1 ps развития каскадов с начальной энергией ионов Ag и Хе 25 eV отношение нормальной и параллельной плоскостей (100), составляющих СКС, было 2.9 и 8.45 соответственно. Из рис. 2, *a* видно, что образование ад-атомов ионами Ag практически ограничено этими механизмами.

В случае Хе N_{ad} достигает максимума в интервале 0.8–1.0 ps в результате взаимодействия поверхностных атомов с отраженными от более глубоко лежащих атомных слоев ионами и атомами отдачи. При этом импульс может передаваться поверхностным атомам путем образования 2–3 шагов ПСЗ в интервале 0.4–0.6 ps, направленных из объема к поверхности и заканчивающихся созданием ад-атомов. Ион Хе при этом может оставаться в кристалле. В свою очередь ионы Хе, покидающие кристалл, имеют среднюю энергию 2.5–5.5 eV, тогда

как ионы Ag — 1.5–2.0 eV в зависимости от начальной энергии. Поэтому вероятность образования ад-атома ионом Хе при выходе из кристалла больше, чем ионом Ag. Среднее время нахождения ионов Ag в кристалле ~ 0.5 ps вне зависимости от их начальной энергии, тогда как ионов Хе с энергиями 40 и 50 eV ~ 1.2 ps, а с энергией 25 eV ~ 0.7 ps, что согласуется с временами достижения максимумов N_{ad} .

Как видно из рис. 2, *b*, стабилизация межузельных атомов в случае Ag наступает после 1.0–1.6 ps развития каскада, тогда как в случае Хе — после 1.7–2.5 ps. Ионы Хе генерируют больше межузельных атомов в интервале ~ 0.2 –1.5 ps. В случае Ag после 2 ps эволюции каскада в кристалле остается незначительно больше межузельных атомов, чем в случае Хе, что очевидно, связано с большей вероятностью образования ПСЗ(110) ионами Ag на столкновительной стадии каскада. Еще одним механизмом образования межузельных атомов в Al могут служить перемещения атомов отдачи Al в глубь кристалла на 1.5–2 постоянных решетках [15–17]. В случае ионов Ag и Хе с энергией 50 eV таких перемещений возникает ~ 0.35 relocations/ion. Время появления максимума числа межузельных атомов N_{in} (~ 0.2 –0.3 ps) не зависит от энергии и типа иона и совпадает с характерным временем образования ад-атомов на столкновительной стадии каскада, что указывает на однотипность механизмов образования этих дефектов в интервале 0.2–0.5 ps.

2.3. Поверхностные и объемные вакансии. Как показано на рис. 3, *a*, максимум числа поверхностных вакансий $N_{v,s}$ (вакансий в первом атомном слое) независимо от начальной энергии ионов Ag находится в интервале 0.2–0.3 ps. Стабилизация $N_{v,s}$ наступает спустя 1.2–1.6 ps с начала каскада. В случае Хе имеют место два максимум величины $N_{v,s}$. Первый максимум возникает в том же временном интервале, что и в случае Ag, при всех начальных энергиях иона. Время возникновения второго максимума зависит от начальной энергии иона, поскольку при энергии 25 eV он появляется в интервале 0.6–0.7 ps, а при энергиях 40 и 50 eV — 1.0–1.1 ps. Вторым максимум $N_{v,s}$ создается, как правило, теми ионами Хе, которые относительно неглубоко (1–3 атомных слоя) проникают в кристалл и обладают достаточной энергией, чтобы, покидая мишень, образовать ад-атом и поверхностную вакансию. Стабилизация поверхностных вакансий в случае Хе наступает после 1.7–2.5 ps с начала каскада. Число стабильных поверхностных вакансий при энергиях 25 и 40 eV больше в случае Хе, тогда как при энергии 50 eV после 2.3 ps оно незначительно больше в случае Ag.

Из рис. 3, *b* видно, что максимумы числа объемных вакансий $N_{v,b}$ (вакансий, расположенных глубже первого атомного слоя) при различных энергиях ионов Ag и Хе возникают в тех же временных интервалах, что и максимумы $N_{v,s}$, вследствие однотипности их механизмов генерации. Ионы Хе генерируют заметно больше стабильных объемных вакансий, что связано с более

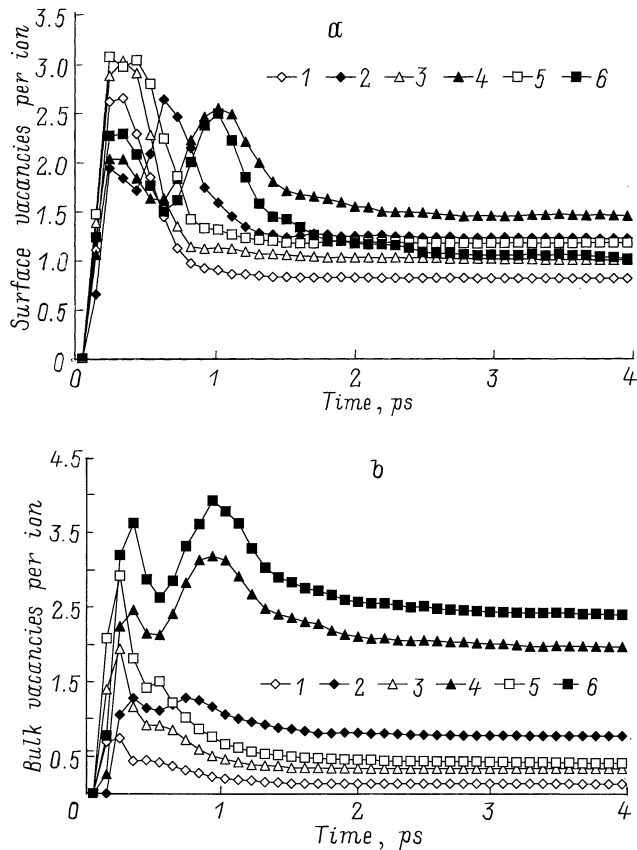


Рис. 3. Зависимость числа поверхностных (а) и объемных вакансий (b) от времени каскада при бомбардировке ионами Ag (1,3,5) и ионами Хе (2,4,6) с различными энергиями. E , eV: 1, 2 — 25, 3, 4 — 40, 5, 6 — 50.

глубоким проникновением тяжелых ионов в кристалл и соответствующими перемещениями атомов из объема к поверхности. Как и для поверхностных вакансий, существует скачок числа стабильных объемных вакансий между 25 и 40 eV энергии ионов Хе. При начальной энергии 25 eV после 4 ps развития каскада имеет место пространственное разделение вакансий и межузельных атомов, находящихся соответственно в первом–третьем и четвертом–двенадцатом атомных слоях, тогда как при энергиях 40 и 50 eV происходит перекрытие их профилей в четвертом–шестом слоях.

2.4. Каскадные перемещения атомов. На рис. 4 представлены количества атомов N_{ws} , оставивших свои ячейки Вигнера–Зейтца за время каскада. Число перемещений атомов на стадии релаксации каскада больше в случае Хе при всех энергиях бомбардировки. Для Ag стабилизация N_{ws} наступает через 0.9–1.3 ps, тогда как в случае Хе — через 1.5–2.0 ps. В каскадах, инициированных ионами Хе, наблюдаются два максимума N_{ws} , тогда как в каскадах, инициированных ионами Ag, — один, причем времена достижения максимальных значений N_{ws} совпадают с временами достижения максимумов $N_{v,s}$ и $N_{v,b}$ на рис. 3. Первый максимум N_{ws} определяется пере-

мещениями атомов на столкновительной стадии каскада, когда ион внедряется в кристалл, а второй — обратным движением иона Хе и связанным с ним коллективным перемещением атомов к поверхности. В случае Ag оба этапа движения иона в кристалле отличаются по времени на ~ 0.1 ps, что приводит к появлению одного максимума величины N_{ws} . При этом вероятность перемещений атомов, связанных с движением иона Ag из кристалла, меньше по сравнению с вероятностью аналогичного процесса в случае Хе по энергетическим соображениям, приведенным в п. 2.2, а также благодаря тому, что ионы Ag практически не проникают в глубь кристалла. Так, при энергии 50 eV количество атомных перемещений из слоя в слой в направлении [100] в глубь кристалла Al ~ 3.2 relocations/ion для обоих ионов, тогда как число перемещений к поверхности 5.85 и 1.82 relocations/ion для Хе и Ag соответственно.

СКС атомов за один каскад R^2 определялось из выражения

$$R^2 = \sum_{i=1}^{N_{ws}} [(x_i - x_{0i})^2 + (y_i - y_{0i})^2 + (z_i - z_{0i})^2],$$

где x_{0i}, y_{0i}, z_{0i} и x_i, y_i, z_i — соответственно начальные и текущие координаты атомов $i = 1-N_{ws}$, покинувших свои ячейки Вигнера–Зейтца. Зависимости компонент СКС от времени каскада при бомбардировке ионами Ag и Хе с энергией 50 eV (рис. 5, a, b) иллюстрируют сделанные выше заключения об атомных перемещениях. В случае Ag в первые 0.2 ps происходит резкое увеличение компонент СКС в направлении [100] (начальное направление ионов) R_x^2 и в плоскости (100) R_{yz}^2 внутри кристалла. Смещения ад-атомов $R_{yz,ad}^2$ на поверхности (100) возрастают после 0.1 ps с начала каскада и достигают максимального значения за время ~ 0.5 ps, тогда как нормальные к поверхности смещения ад-атомов $R_{x,ad}^2$ не оказывают заметного влияния на R^2 . На рис. 2, b слабо

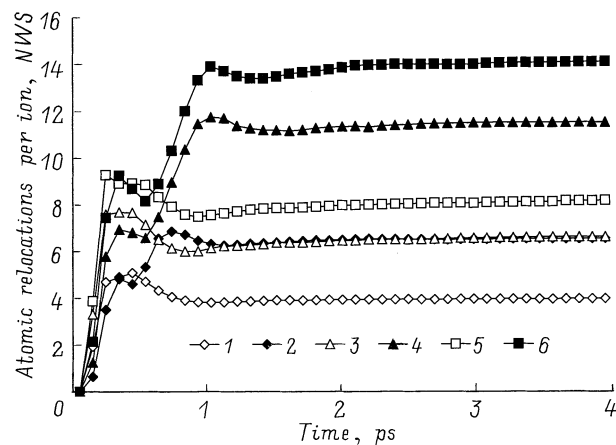


Рис. 4. Зависимость числа атомов, покинувших свои ячейки Вигнера–Зейтца (N_{ws}), от времени каскада при бомбардировке ионами Ag (1,3,5) и ионами Хе (2,4,6) с различными энергиями. E , eV: 1, 2 — 25, 3, 4 — 40, 5, 6 — 50.

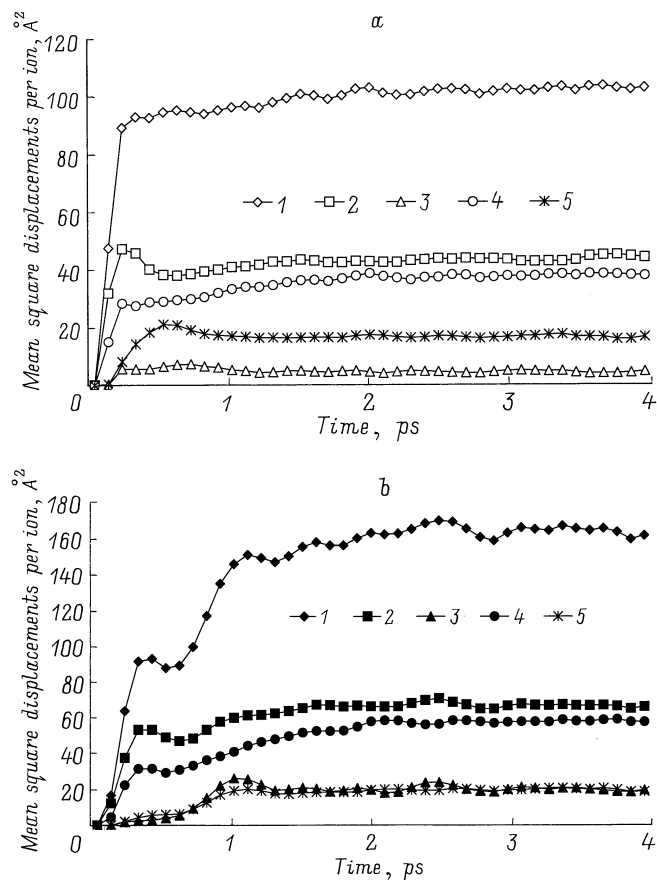


Рис. 5. Зависимость компонент ККС от времени каскада при бомбардировке ионами Ag (*a*) и Xe (*b*) с энергией 50 eV: 1 — R^2 , 2 — R_x^2 , 3 — $R_{x,ad}^2$, 4 — R_y^2 , 5 — $R_{y,ad}^2$.

выраженные максимумы R_x^2 и R_{yz}^2 в интервале 0.3–0.4 ps в случае Xe соответствуют по времени первым максимумам $N_{v,s}$ и $N_{v,b}$ (рис. 3, *a, b*) и максимуму N_{in} (рис. 2, *b*). Вклад ад-атомов в R^2 за первые 0.5 ps развития каскада незначителен, хотя и возрастает, начиная с 0.1 ps. Второе резкое возрастание R^2 (рис. 5, *b*) происходит в интервале 0.5–1.0 ps, благодаря, в первую очередь, росту $R_{x,ad}^2$ и $R_{yz,ad}^2$, хотя R_x^2 и R_{yz}^2 также возрастают в этом интервале.

При бомбардировке ионами Xe с энергией 25 eV, основной вклад в возрастание R^2 за первые 0.3 ps вносят R_x^2 и R_{yz}^2 , тогда как вклад ад-атомов мал. В интервале 0.5–1.0 ps доминирующий вклад в рост R^2 вносят ад-атомы ($R_{x,ad}^2 + R_{yz,ad}^2 \sim 17 \text{ \AA}^2$), тогда как R_x^2 и R_{yz}^2 составляют 2 и 4 \AA^2 соответственно. ККС в случае Ag с энергией 25 eV достигает своего единственного максимума за ~ 0.5 ps. При энергии ионов Ag и Xe 40 eV изменение компонент ККС качественно повторяет результаты, полученные при начальной энергии 50 eV.

Таким образом, при бомбардировке кристалла Al ионами Xe с энергиями 25, 40 и 50 eV временные зависимости $N_{v,s}$ и $N_{v,b}$ имеют два максимума в интервалах 0.2–0.3 и 0.8–1.0 ps. Показано, что первый максимум, возникающий при внедрении иона Xe в кристалл, определяется

атом-атомными и ион-атомными взаимодействиями, приводящими также к образованию ад-атомов и межузельных атомов, тогда как второй максимум — движением отраженного иона и сопутствующих атомов из объема кристалла в сторону поверхности, которое также сопровождается образованием ад-атомов, хотя максимум N_{ad} не разделяется во времени на два отдельных пика. В случае Ag возникает один максимум $N_{v,s}$ и $N_{v,b}$ в интервале 0.2–0.3 ps независимо от энергии ионов. При моделировании каскадов столкновений в кристаллах Cu и Ni при тех же условиях бомбардировки с потенциалами [18] и [10] соответственно наблюдается, как правило, один максимум величины $N_{v,s}$ и 1–2 максимума N_{ad} за время развития каскада.

Список литературы

- [1] D.E. Harrison, jr. Rad. Eff. **70**, 1 (1983).
- [2] M.J. Haile. Molecular Dynamics Simulation — Elementary Methods. Wiley Interscience, N.Y. (1992). 386 p.
- [3] S. Erkos. Physics Reports **278**, 79 (1997).
- [4] V.I. Shulga, M. Vicanek, P. Sigmund. Phys. Rev. **A39**, 3360 (1989).
- [5] R.P. Webb, D.E. Harrison. Rad. Eff. Lett. **86**, 15 (1983).
- [6] F. Karetta, H.M. Urbassek. J. Appl. Phys. **71**, 5410 (1992).
- [7] H. Gades, H.M. Urbassek. Phys. Rev. **B50**, 11 167 (1994).
- [8] G.V. Kornich, G. Betz, B.V. King. Nucl. Instr. Meth. **B115**, 461 (1996).
- [9] G.V. Kornich, G. Betz. Nucl. Instr. Meth. **B117**, 81 (1996).
- [10] F. Gao, D.J. Bacon, G.J. Ackland. Phil. Mag. **A67**, 275 (1993).
- [11] H.J. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F.V. Gunsteren, A. Di-Nola, J.R. Haak. J. Chem. Phys. **81**, 3684 (1984).
- [12] G. Betz, M.J. Pellin, J.W. Burnett, D.M. Gruen. Nucl. Instr. Meth. **B58**, 429 (1991).
- [13] A.M. Mazzone. Philos. Mag. Lett. **70**, 93 (1994).
- [14] D.J. Bacon, H.F. Deng, F. Gao. J. Nucl. Mater. **205**, 84 (1993).
- [15] S. Valkealahti, R.M. Nieminen. Nucl. Instr. Meth. **B18**, 356 (1987).
- [16] G.V. Kornich, G. Betz. Nucl. Instr. Meth. **B143**, 455 (1998).
- [17] G.V. Kornich, G. Betz, A.I. Bazhin. Nucl. Instr. Meth. **B153**, 383 (1999).
- [18] H. Gades, H.M. Urbassek. Nucl. Instr. Meth. **B69**, 232 (1992).