

Зависимость энергии отдачи от кристаллографических направлений при бомбардировке монокристалла медленными ионами

© В.В. Евстифеев, Н.В. Костина

Пензенский государственный университет,
440026 Пенза, Россия
e-mail: kostina612@gmail.com

Поступило в Редакцию 11 марта 2022 г.
В окончательной редакции 18 мая 2022 г.
Принято к публикации 28 мая 2022 г.

Методом молекулярной динамики с использованием дальнедействующего потенциала взаимодействия проведены расчеты энергии отдачи при бомбардировке поверхностной грани (001) монокристалла ванадия ионами K^+ ($E_0 = 10-50$ eV) с начальными траекториями движения, лежащими в плоскостях, перпендикулярных плоскости (001) и параллельных плоскостям (100) и $(1\bar{1}0)$, проходящим вдоль кристаллографических направлений [010] и [110] соответственно. Обнаружена анизотропия передачи максимальной энергии одному из группы (3–5) атомов, одновременно участвующих во взаимодействии, в зависимости от траектории движения иона. Установлены энергетические пороги распыления для указанных направлений.

Ключевые слова: ионная бомбардировка, монокристалл, кристаллографические направления, энергия отдачи, пороги распыления.

DOI: 10.21883/JTF.2022.10.53254.51-22

Введение

В работах [1,2] по аналитическим формулам проведены расчеты энергии эффективного порога распыления твердых тел, используя модель последовательных парных упругих столкновений. Согласно М.Робинсону [3], удовлетворительной теории пороговых энергий нет. Простое соотношение между поверхностной энергией связи и пороговой энергией распыления выполняется лишь для очень легких и быстрых бомбардирующих частиц ($m \ll M$) [4]. В случае, когда масса m бомбардирующей частицы сравнима с массой M атома мишени, это соотношение большой ценности не имеет. По Экштайну [5] пороговую энергию нельзя определить напрямую. Ее можно получить, экстраполируя кривую зависимости коэффициента распыления от энергии бомбардировки на низкие энергии. В свою очередь кривые зависимости распыления получают либо экспериментально, либо теоретически расчетным путем по аналитическим формулам с применением подгоночных параметров. При этом используют короткодействующие парные потенциалы взаимодействия. В основу аналитических формул заложен коэффициент передачи энергии — продукт модели парных упругих столкновений, которая в области низких энергий неприменима [6,7].

Важной частью данной проблемы является определение поверхностной энергии связи атомов в твердом теле. Ее определяют на базе энергии сублимации (когезии) металлов [3] или на основе статистического равновесия испарения и конденсации паров металла [8].

В работе [9] сделана попытка теоретического определения пороговой энергии распыления металлического монокристалла, используя результаты численных иссле-

дований энергии отдачи при его бомбардировке низкоэнергетическими ионами ($E_0 \leq 100$ eV). Расчеты проводили методом молекулярной динамики с использованием дальнедействующего потенциала в рамках механизма многочастичного взаимодействия. Предложен способ определения пороговой энергии. Он состоит в том, что из рассчитанных зависимостей $E_{rec\ max}(E_0)$ определяется пороговая энергия E_{thr} . (Здесь $E_{rec\ max}$ — максимальные значения энергии отдачи, получаемой одним из группы поверхностных атомов, одновременно участвующих во взаимодействии с ионом.) При этом предполагается, что атом распыляется с поверхности тогда, когда поверхностная энергия связи E_{bond} равна или меньше энергии отдачи $E_{rec\ max}$ ($E_{bond} \leq E_{rec\ max}$).

Целью настоящей работы является численное исследование процесса передачи энергии от бомбардирующего иона атомам ОЦК решетки металла в зависимости от ориентации кристалла относительно ионного пучка и определение пороговых энергий распыления в зависимости от кристаллографических направлений.

1. Модель мишени и выбор потенциала взаимодействия

Модель мишени и геометрия одного из начальных движений иона относительно ее поверхности показаны на рис. 1, а. Поверхностной гранью была грань (001) монокристалла ванадия с ОЦК решеткой. В отличие от [9], где плоскость падения ионов, перпендикулярная к поверхностной грани (001), совпадала или была параллельна плоскости (100), проходящей вдоль кристаллографического направления [010], в данных расчетах

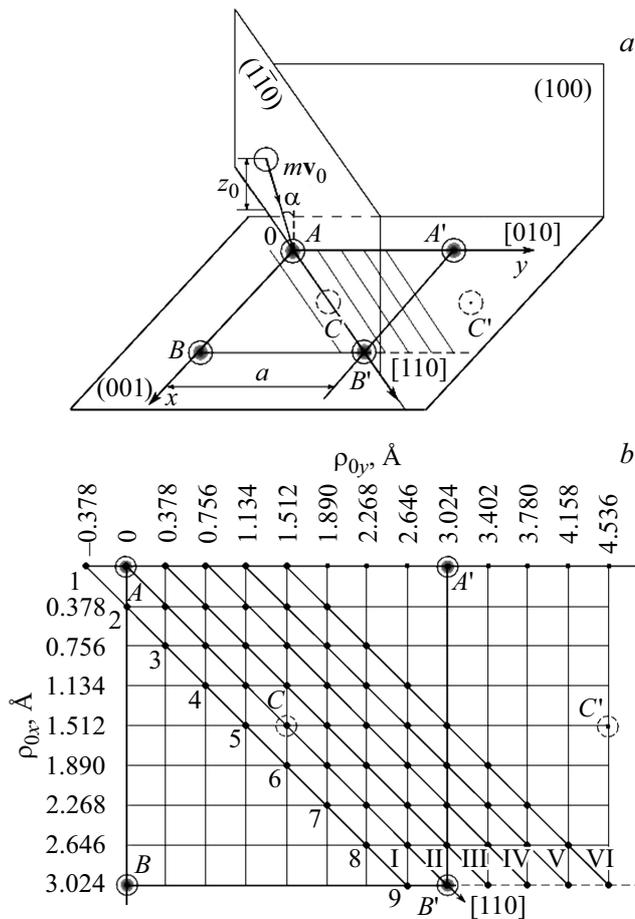


Рис. 1. Модель мишени (точки 1–9 — места попадания иона на мишень).

плоскость падения повернута по азимуту на угол 45° и совпадает или параллельна плоскости $(1\bar{1}0)$, проходящей вдоль кристаллографического направления $[110]$. Перед началом движения ион находился в одной из указанных плоскостей на расстоянии $z_0 = 5 \text{ \AA}$ от поверхности мишени. Угол падения был равен $\alpha = 55^\circ$.

Расчеты энергии отдачи проводили для разных прицельных параметров $\rho(\rho_{0x}, \rho_{0y})$, соответствующих точкам падения иона на мишень (точки 1–9). Эти точки, как и другие, являются узлами сетки с квадратными ячейками $0.378 \times 0.378 \text{ \AA}$, покрывающей поверхность мишени. Точки 1–9 лежат в плоскости падения иона на линии ее пересечения с поверхностью мишени (рис. 1, b). Каждой плоскости падения соответствует своя линия (на рис. 1, b эти линии обозначены римскими цифрами), содержащая точки 1–9 с соответствующими координатами (ρ_{0x}, ρ_{0y}) и параллельная кристаллографическому направлению $[110]$. Расчеты энергии отдачи ограничивались только точками 1–9 потому, что результаты расчетов для всех других точек — узлов сетки в силу симметрии повторяют результаты расчетов для точек 1–9.

В зависимости от величины начальной энергии E_0 точность расчетов составляла от 0.8 до 3.8%. В частности, для $E_0 \geq 30 \text{ eV}$ она была в пределах от 0.8 до 2%, а для $E_0 \leq 25 \text{ eV}$ — от 1.1 до 3.8%.

В расчетах использовался дальнедействующий потенциал взаимодействия V_S [10]:

$$V_S(r) = \frac{1}{r} [2117.2 \exp(-3.217r) + 171.2 \exp(-1.423r)],$$

где расстояние r в \AA , энергия взаимодействия V_S в eV . Радиус обрезания $r = 3 \text{ \AA}$.

Выбор потенциала и радиуса обрезания обусловлен методом расчета и спецификой модели взаимодействия. Как показали исследования в [11], использование V_S -потенциала в расчетах по рассеянию ионов K^+ ванадиевой мишенью дает лучшее согласие с экспериментом, чем в случае применения других потенциалов.

2. Результаты и обсуждение

На рис. 2 показаны кривые зависимости максимальной энергии отдачи $E_{rec \max}$, получаемой одним из группы (3–5) атомов кристалла ванадия, участвующих одновременно в столкновении с ионом K^+ , от прицельного параметра ρ для разных линий I–VI (плоскостей падения) и разных энергий бомбардировки E_0 . Из рассчитанных зависимостей $E_{rec \max}(\rho)$ следует, что максимальная энергия отдачи уменьшается по мере удаления иона от атомов, причем наибольшая максимальная энергия отдачи E_n приходится на линию II (точки 1–3) (плоскость падения $(1\bar{1}0)$), проходящую через ряд атомов кристаллографического направления $[110]$. Сдвиг максимума кривых зависимости $E_{rec \max}(\rho)$ в область действия одного, ближайшего к иону, атома с увеличением энергии E_0 обусловлен механизмом многочастичного взаимодействия, когда с ростом энергии бомбардировки (ростом скорости иона) его роль снижается, поскольку уменьшается влияние других атомов (уменьшается их вклад в энергию отдачи) из-за уменьшения времени столкновения [11]. По этой причине важен выбор дальнедействующего потенциала. В таблице для сравнения приведены значения относительных максимальных энергий отдачи $E_{rec \max}/E_0$, полученных в рамках

Максимальные относительные энергии отдачи, рассчитанные в рамках многочастичного взаимодействия и по модели парных упругих соударений

E_0 , eV	Многочастичные взаимодействия $E_{rec \max}/E_0$	Парные столкновения E_{front}/E_0
15	0.66	0.98
30	0.67	0.98
40	0.725	0.98
50	0.75	0.98

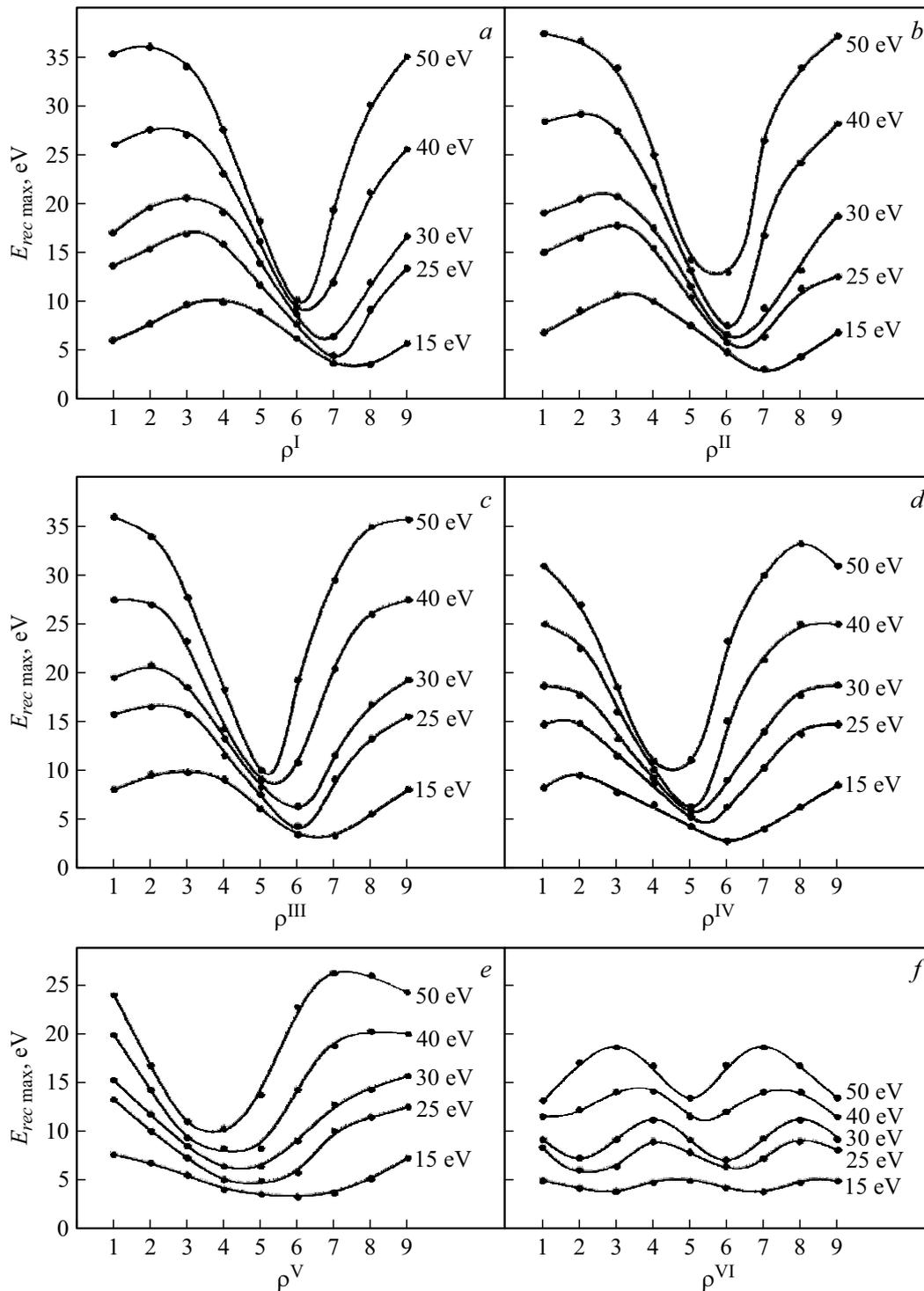


Рис. 2. Кривые зависимости максимальной энергии отдачи, получаемой одним атомом из группы атомов монокристалла ванадия, одновременно участвующих в столкновении с ионом K^+ , от прицельного параметра (точки 1–9) для разных линий I–VI и разных энергий бомбардировки.

многочастичного механизма, и E_{front}/E_0 , рассчитанных по модели парных упругих соударений при лобовом столкновении иона с атомом мишени. Видно, что с увеличением E_0 отношение $E_{rec\ max}/E_0$ возрастает, приближаясь к значению E_{front}/E_0 , где E_{front} — энергия

отдачи при центральном ударе. Это указывает на то, что с увеличением энергии бомбардировки роль многочастичных взаимодействий снижается, а парных — возрастает. Можно предположить, что при достаточно больших значениях $E_{rec\ max}/E_0$ отношение будет равно E_{front}/E_0 ,

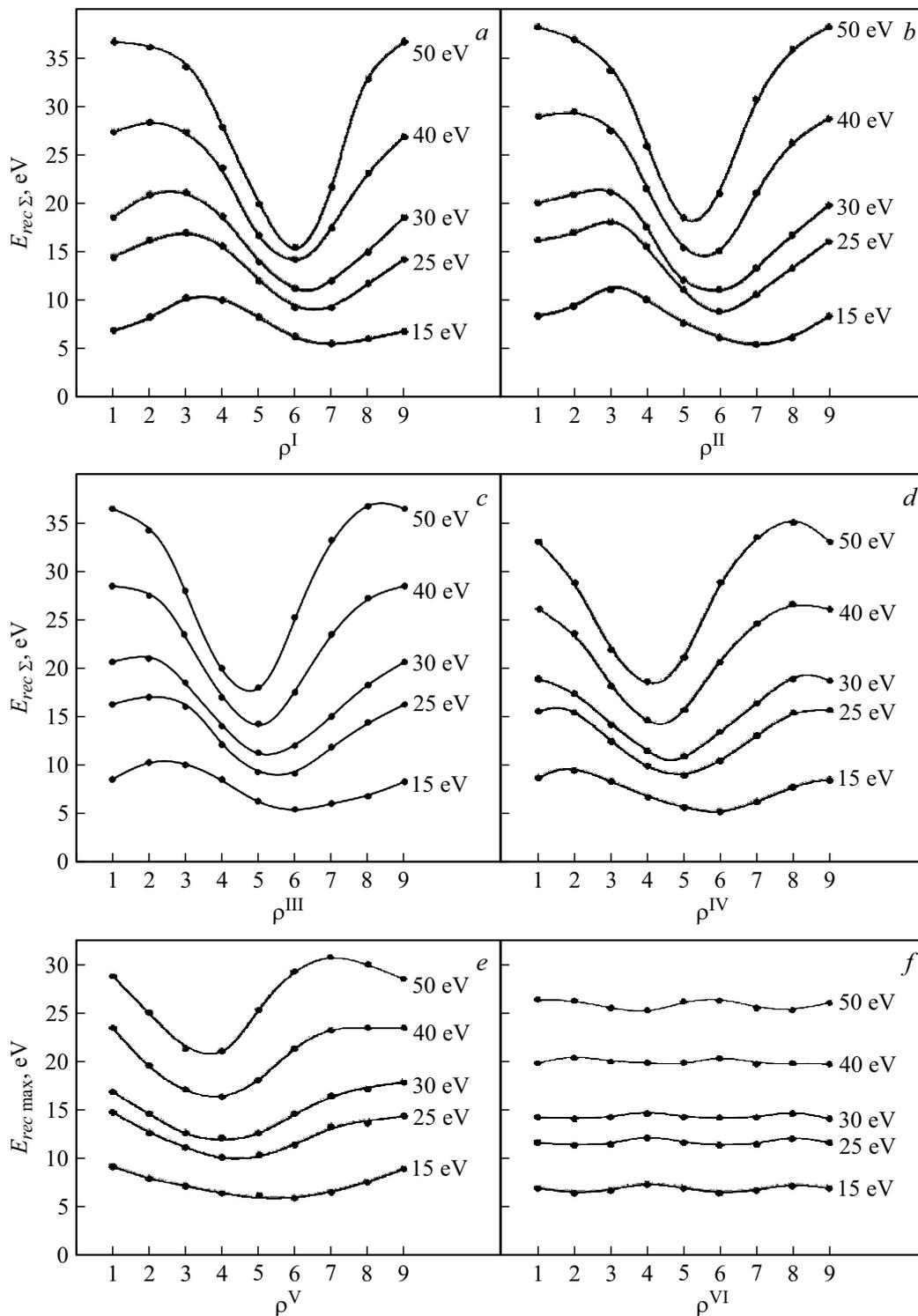


Рис. 3. Кривые зависимости суммарной энергии отдачи, получаемой всей группой атомов монокристалла ванадия, одновременно участвующих в столкновении с ионом K^+ , от прицельного параметра для разных линий I–VI и разных энергий бомбардировки.

а максимум зависимости $E_{rec \max}(\rho)$ займет положение, соответствующее положению атома в кристаллической решетке $\rho(\rho_{0x}, \rho_{0y}) = 0$.

На рис. 3 приведена зависимость суммарной энергии отдачи $E_{rec \Sigma}$, получаемой всей группой (3–5) атомов

кристалла, одновременно участвующих во взаимодействии с бомбардирующим ионом, от прицельного параметра ρ для разных линий I–VI и разных энергий E_0 . Видно, что по мере удаления плоскости падения иона от кристаллографической плоскости (110) происходит

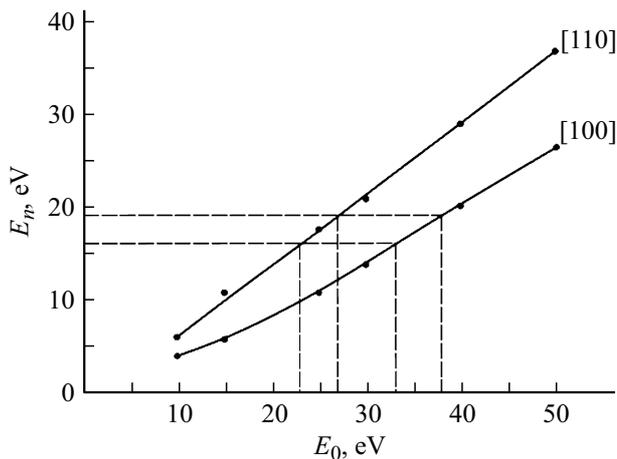


Рис. 4. Зависимость наибольшей энергии из всех возможных максимальных энергий отдачи, получаемых атомом, от энергии бомбардировки для разных кристаллографических направлений.

„сглаживание“ кривых $E_{rec \Sigma}(\rho)$, а величина энергии отдачи становится минимальной. Это обусловлено механизмом взаимодействия иона с атомами.

Таким образом, предлагаемый метод исследования позволяет определять места на поверхности мишени с максимальной и минимальной передачей энергии от иона к атому и тем самым прогнозировать „очаги“ возможного распыления, а для многокомпонентных мишеней — возможность их селективного распыления.

На рис. 4 показана зависимость наибольшей энергии E_n из всех возможных максимальных значений энергии отдачи $E_{rec \max}$, переданной атому, от энергии бомбардировки для кристаллографического направления [110]. На том же рисунке в качестве сравнения приведена зависимость $E_n(E_0)$ для той же грани (001), но когда движение иона происходит в плоскости (100), совпадающей с кристаллографическим направлением [010] [9]. Видно, что кривая зависимости $E_0(E_n)$ для направления [110] идет выше, чем для направления [010], т.е. имеет место анизотропия максимальной энергии отдачи при движении иона в плоскостях, совпадающих с разными кристаллографическими направлениями.

3. Поверхностная энергия связи

Предполагая, что распыление начинается при условии, когда $E_n \geq E_{bond}$, можно найти из кривой зависимости $E_n(E_0)$ (рис. 4) пороговую энергию распыления грани (001) монокристалла ванадия для разных кристаллографических направлений, если известна энергия E_{bond} . Для определения величины E_{bond} воспользуемся тем, что для металлических кристаллов поверхностная энергия связи аддитивна и при ее нахождении учитывается взаимодействие ближайших первых и вторых соседей [8]. (Для низко индексных граней имеется взаи-

модействие только между ближайшими соседями.) Полная величина поверхностной энергии связи определяется числом первых и вторых ближайших соседей, которым соответствуют энергии ε_1 и $\varepsilon_2 < 0.1\varepsilon_1$, приходящиеся на каждый атом соответственно. В „полукристаллическом“ положении (состоянии) поверхности для ОЦК кристалла она равна, согласно [8], $E_{bond} = 3\varepsilon_1 + 6\varepsilon_2$, где „тройка“ и „шестерка“ указывают число первых и вторых соседей соответственно. Выбранное состояние поверхности отличается от всех других тем, что оно соответствует статистическому равновесию между прямым испарением и прямой конденсацией атомов металлических монокристаллов.

Приняв энергию ε_1 равной энергии сублимации (когезии) металла, для ванадия $\varepsilon_1 = 5.3 \text{ eV/at}$, поверхностная энергия связи будет равна $E_{bond} = (15.9 + (< 3.18)) \text{ eV}$, т.е. она лежит в пределах $15.9 < E_{bond} < 19.08 \text{ eV}$. Следовательно, согласно рис. 4, порог распыления грани (001) V для направления [010] лежит в пределах $33.2 < E_{thr} < 38 \text{ eV}$, а для направления [110] он лежит в пределах $23 < E_{thr} < 27 \text{ eV}$. Таким образом, анизотропия максимальной энергии отдачи при столкновении приводит к анизотропии пороговой энергии распыления металлического монокристалла. В работе [12] рассчитанные энергии связи для отдельных граней монокристаллов некоторых металлов составляют значения от 3.8 до 12 eV/at.

Следует отметить, что проведенные численные исследования взаимодействия иона с поверхностью относятся к идеальной поверхности монокристалла. В действительности реальная поверхность не является идеальной [13]. На ней возможны различные ступеньки и атомы с оборванными связями. Поэтому для „шероховатой“ поверхности число ближайших соседей будет меньше принятых в настоящих расчетах и, следовательно, величина пороговой энергии, найденная в эксперименте, может оказаться меньше рассчитанной. По-видимому, для минимального значения пороговой энергии распыления E_{thr} в случае $K^+(Ar^+) \rightarrow V$ следует взять значение $E_{thr} = 12.5 \text{ eV}$ [9], соответствующее минимальной энергии связи $E_{bond} = 5.3 \text{ eV}$. Однако сравнение рассчитанных в настоящей работе порогов распыления ванадия ионами K^+ (или Ar^+) с экспериментальными данными $E_{thr} = 23 \text{ eV}$, приведенными в [14], свидетельствует об удовлетворительном согласии расчета и эксперимента.

Заключение

Представленные результаты компьютерных расчетов передачи энергии при бомбардировке поверхности кристалла медленными ионами и предложенный способ определения энергетических порогов распыления металлических монокристаллов позволяют давать прогнозы о свойствах поверхности и ее модификации в процессе распыления. Места поверхности с нарушенными связями атомов или отсутствие стехиометрии в случае

сплавов могут оказаться областями с малыми порогами распыления и, следовательно, — „очагами“ распыления.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Y. Yamamura, J. Bohdanský. *Vacuum*, **35** (12), 561 (1985). [https://doi.org/10.1016/0042-207X\(85\)90316-1](https://doi.org/10.1016/0042-207X(85)90316-1)
- [2] И.П. Сошников, Н.А. Берг. *ЖТФ*, **66** (6), 84 (1996).
- [3] М. Робинсон. В сб.: *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Физическое распыление одноэлементных твердых тел*, под ред. Р. Бериша (Мир, М., 1984), с. 99.
- [4] E. Hotston. *Nuclear Fusion*, **15** (3), 544 (1975).
- [5] W. Eckstein. In: *Sputtering by Particle Bombardment. Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies*, ed. by R. Behrisch, W. Eckstein (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2007), p. 33.
- [6] W.L. Gay, D.E. Harrison. *Phys. Rev.*, **135** (6A), A1780 (1964). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.135.A1780>
- [7] M.T. Robinson, L.M. Torrens. *Phys. Rev.*, **9**, 5008 (1974). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.9.5008>
- [8] О. Кнаке, И.Н. Странский. *УФН*, **68**, 261 (1959). DOI: 10.3367/UFNr.0068.195906с.0261 [О. Кнаке, I.N. Stranski. *Progress Metal Physics*, **6**, 181 (1956). [https://doi.org/10.1016/0502-8205\(56\)90007-7](https://doi.org/10.1016/0502-8205(56)90007-7)]
- [9] В.В. Евстифеев, Н.В. Костина. *Известия РАН. Серия физическая*, **84** (6), 870 (2020). DOI: 10.31857/S0367676520060113 [V.V. Evstifeev, N.V. Kostina. *Bull. Russ. Acad. Sciences: Physics*, **84** (6), 720 (2020). DOI: 10.3103/S1062873820060118]
- [10] В.В. Евстифеев, И.В. Иванов. *Письма в ЖТФ*, **18** (18), 69 (1992).
- [11] В.В. Евстифеев. *Многочастичные взаимодействия при рассеянии медленных ионов поверхностью металла* (Изд-во ПГУ, Пенза, 2009)
- [12] D.P. Jackson. *Radiat. Eff.*, **18**, 185 (1973).
- [13] M. Drechsler. *Zs. F. Phys. Chem.*, **6**, 272 (1956).
- [14] R.V. Stuart, G.K. Wehner. *J. Appl. Phys.*, **33**, 2345 (1962). <https://doi.org/10.1063/1.1728959>