

УДК 537.534

## ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОРОГОВ РАСПЫЛЕНИЯ МЕТАЛЛОВ ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

© 2020 г. В. В. Евстифеев<sup>1</sup>, Н. В. Костина<sup>1</sup>, \*

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Пензенский государственный университет”, Пенза, Россия

\*E-mail: kostina612@gmail.com

Поступила в редакцию 09.01.2020 г.

После доработки 07.02.2020 г.

Принята к публикации 26.02.2020 г.

Методом молекулярной динамики с использованием  $V_S$ -потенциала проведены исследования передачи энергии бомбардирующим ионом  $K^+$  и  $Ag^+$  ( $E_0 = 10–100$  эВ) атомам ванадия. Предложен численный метод определения порогов распыления твердых тел. Определена пороговая энергия распыления ванадия.

DOI: 10.31857/S0367676520060113

### ВВЕДЕНИЕ

Ранее [1, 2] методом молекулярной динамики (МД) изучены закономерности передачи и накопления энергии в упругих взаимодействиях ионов  $Nb^+$  ( $E_0 = 0.1–3$  кэВ) с атомами поверхностной грани (001) монокристалла ниобия. Установлено, что накопление энергии отдачи происходит в области наиболее плотной упаковки атомов в основном в нескольких ( $N = 1–3$ ) внешних атомных слоях кристалла, что является ответственным за места зарождения “очагов” распыления, а сам метод расчета может быть использован в качестве прогноза результатов распыления различных материалов при ионной бомбардировке. В расчетах взаимодействие иона с атомами кристалла описывалось с помощью потенциала Циглера–Бирзака–Литтмарка (ЦБЛ) [3] с радиусом обрезания  $r = 2.5$  Å. При этом было показано, что центры ионов с энергией  $E_0 < 100$  эВ не доходят до границы раздела “металл–вакуум” ( $z = 0$ ), разворачиваются в сторону вакуума и уходят от поверхности. Это свидетельствует о том, что никакого проникновения ионов внутрь кристаллической решетки не происходит.

Исследование диапазона начальных энергий  $E_0 = 10–100$  эВ на предмет передачи бомбардирующим ионом части своей энергии поверхностным атомам твердого тела может пролить свет на возможность определения порогов распыления различных материалов. (За порог распыления принимается та минимальная энергия бомбардирующего иона  $E_0 = E_{пор}$ , при которой начинается

распыление вещества (коэффициент распыления  $S_p \neq 0$ .)

Если предположить, что максимальная энергия отдачи  $E_{от max}$ , полученная атомом мишени от иона в процессе бомбардировки, равна энергии связи  $E_{св}$  металла и достаточна для его распыления, то, рассчитав  $E_{от max}$  для разных  $E_0$ , можно найти и порог распыления данного металла. Для этой цели необходимо знание величины энергии  $E_{св}$  и вида зависимости  $E_{от max}(E_0)$  как функции от  $E_0$ . Та минимальная энергия  $E_0$ , для которой  $E_{от max} = E_{св}$ , и будет являться порогом распыления  $E_{пор}$ .

Целью настоящей работы являются численные исследования передачи энергии бомбардирующим ионом атомам мишени и определение порогов распыления металлов.

### ВЫБОР МИШЕНИ И ГЕОМЕТРИЯ БОМБАРДИРОВКИ

Объектом исследования был кристалл ванадия с поверхностной гранью (001) ОЦК-решетки, а бомбардирующими частицами являлись ионы  $K^+$  и  $Ag^+$  с начальной энергией  $E_0 = 10–100$  эВ. Плоскость падения ионов совпадала или была параллельна кристаллографической плоскости (100) (рис. 1).  $A$  и  $B$  – поверхностные атомы, образующие первый атомный слой.  $C$  – объемные атомы, образующие второй атомный слой.

Движение ионов рассматривалось вдоль определенных направлений, параллельных кристаллографическому направлению [010], совпадающему с осью  $y$  выбранной прямоугольной системы координат  $xuz$ . Начальная высота иона над поверхностью кристалла принималась равной  $z_0 = 5 \text{ \AA}$ . Угол падения равен  $\alpha = 55^\circ$ .

### ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

В качестве потенциала взаимодействия иона  $K^+$  и  $Ag^+$  с атомами ванадия был взят потенциал  $V_S$ , восстановленный в работе [4] для системы  $K-V$  квантово-механическим методом молекулярных орбиталей, построенных в виде линейной комбинации атомных орбиталей (метод МОЛКАО). Полученный потенциал аппроксимирован двухэкспоненциальной функцией в виде

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

Здесь расстояние  $r$  в  $\text{Å}$ , энергия взаимодействия в эВ.

Потенциал  $V_S$  выбран для решения данной задачи потому, что он оказался более дальнедействующим [5], чем потенциал Борна–Майера и ЦБЛ. В расчетах радиус обрезания потенциала был равен  $r = 3 \text{ \AA}$ .

### МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Расчеты энергии отдачи проводили для определенных начальных прицельных параметров  $\rho_{0x}$ ,  $\rho_{0y}$ . Исследовали движение иона в плоскостях, совпадающих с направлениями  $AA'$  (I ряд атомов,  $\rho_{0x} = 0$ ),  $CC'$  (II ряд атомов,  $\rho_{0x} = 0.5a$ ) и  $DD'$ , лежащий по середине между I и II рядами ( $\rho_{0x} = 0.25a$ ). Параметр  $\rho_{0y}$  изменялся в пределах от  $-0.125a$  до  $a$ , где  $a$  – постоянная кристаллической решетки (для ванадия  $a = 3.024 \text{ \AA}$ ).

Таким образом, “зондировалась” вся область пространства, заключенная между атомами  $A$  и  $A'$ ,  $C$  и  $C'$ ,  $D$  и  $D'$ . Очевидно, в силу симметрии расположения атомов в решетке другие области поверхности мишени дают одинаковые результаты расчета.

В процессе численного эксперимента для одного падающего иона с заданной энергией  $E_0$  и начальной геометрией попадания на мишень (угол падения  $\alpha$ , начальная высота иона над поверхностью  $z_0$ , параметры прицеливания  $\rho_{0x}$  и  $\rho_{0y}$ ) находили следующие величины: 1) число атомов  $N_a$ ,

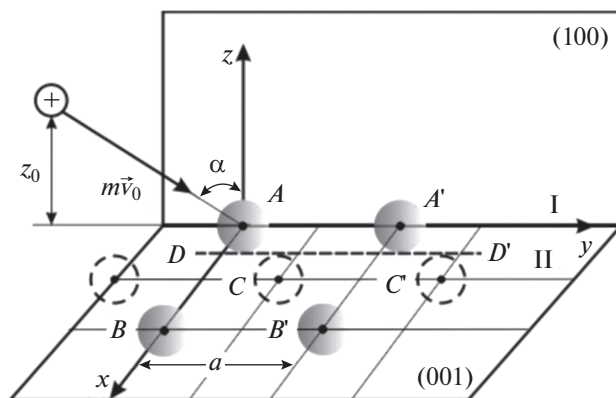


Рис. 1. Геометрия бомбардировки кристаллической мишени ОЦК-типа положительными ионами.

участвующих одновременно при столкновении с ионом; 2) суммарную энергию отдачи  $E_{от\Sigma}$ , получаемую атомами от иона; 3) максимальную энергию отдачи  $E_{отmax}$ , получаемую одним из атомов этой группы; 4) энергию рассеянного иона  $E$ ; 5) направление (угол склона  $\theta$  и азимутальный угол  $\phi$ ) и угол рассеяния  $\psi$  данного иона.

Контроль за точностью расчетов осуществлялся по закону сохранения энергии взаимодействующих частиц при абсолютно упругом столкновении:

$$E_0 = E_{от\Sigma} + E. \quad (2)$$

В зависимости от величины энергии  $E_0$  точность составляла от 0.3 до 5%. В частности, для  $E_0 \geq 30 \text{ эВ}$  она была в пределах от 0.3 до 2.8%, а для  $E_0 \leq 25 \text{ эВ}$  – от 1.1 до 4.8%.

Точность расчетов определяется спецификой решения системы дифференциальных уравнений, описывающих классическое рассеяние на нескольких первоначально неподвижных объектах. Эти системы являются “жесткими” системами. В задачах рассеяния иона на атомах твердого тела “жесткость” системы связывается с тем, что малым изменениям координат в точке поворота траектории соответствуют большие изменения импульса [5].

В наших расчетах шаг решения системы уравнений движения взаимодействующих частиц определялся соотношением вида

$$\Delta t = \frac{0.005}{v_0}, [\text{Å}/\text{Å} \cdot \text{c}^{-1}], \quad (3)$$

где  $v_0$  – начальная скорость иона.

Величина шага определена на основе анализа результатов пробных численных расчетов суммарной энергии системы взаимодействующих частиц до достижения точности выполнения закона сохранения энергии в пределах  $\sim 5\%$ .

Таблица 1.  $K^+, Ag^+ \rightarrow V. \rho_{0x} = 0$ 

$E_0, \text{эВ}$	$N_a$								
	$\rho_{0y}: 0$	0.125a	0.25a	0.375a	0.5a	0.625a	0.75a	0.875a	a
15	2	2	2	2	3	3	2	2	2
20	2	2	2	3	3	3	2	2	2
25	2	2	3	3	3	3	2	2	2
30	2	2	3	3	3	3	2	2	2
40	2	3	3	3	3	3	2	2	2
50	2	3	3	3	3	3	2	2	2

Таблица 2.  $K^+, Ag^+ \rightarrow V. \rho_{0x} = 0.5a$ 

$E_0, \text{эВ}$	$N_a$								
	$\rho_{0y}: 0$	0.125a	0.25a	0.375a	0.5a	0.625a	0.75a	0.875a	a
15	4	4	4	6	4	4	4	4	4
20	5	6	6	6	5	5	5	5	5
25	7	7	8	7	5	5	5	5	7
30	7	8	8	7	5	5	5	7	7
40	8	8	8	8	5	5	7	8	8
50	8	8	8	8	5	8	8	8	8

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

*Число атомов  $N_a$ ,  
участвующих во взаимодействии*

Для определения порогов распыления мишени бомбардирующими ионами необходимо знать максимальные энергии отдачи, получаемые атомами в процессе столкновения. Взаимодействие иона происходит одновременно с несколькими атомами решетки, количество которых в группе различно в зависимости от начальных параметров прицеливания  $\rho_{0x}, \rho_{0y}$  и от энергии  $E_0$ . В таблицах 1–3 приведено число  $N_a$  атомов ванадия, участвующих в столкновении с ионом  $K^+$  или  $Ag^+$ , для разных параметров  $\rho_{0x}$  и энергии  $E_0$  в зависимости от параметра  $\rho_{0y}$ . Из таблиц видно, что число  $N_a$  зависит от энергии бомбардирующего иона: с увеличением энергии  $E_0$  оно возрастает от  $N_a = 2$

(для  $E_0 = 15 \text{ эВ}$ ) до  $N_a = 8$  (для  $E_0 = 50 \text{ эВ}$ ) в случае, когда  $\rho_{0y} = 0$ . Аналогичная зависимость имеет место и для других значений  $\rho_{0y}$ . Причиной этому является зависимость расстояния наибольшего сближения  $z_n$  иона с поверхностью от энергии  $E_0$ . На рис. 2 эта зависимость представлена для двух случаев: 1 –  $\rho_{0x} = 0$ , когда ион движется в плоскости (100), в которой расположен I атомный ряд AA', и 2 –  $\rho_{0x} = 0.5a$ , когда он движется в плоскости, проходящей через междоузлия, в которой лежит II атомный ряд CC'. Видно, что для обоих случаев расстояние  $z_n$  уменьшается с ростом энергии  $E_0$ , причем его величина в первом случае существенно больше, чем во втором. По мере уменьшения расстояния  $z_n$  увеличивается число атомов  $N_a$ , участвующих во взаимодействии. Когда ион пересечет границу “металл–ва-

Таблица 3.  $K^+, Ag^+ \rightarrow V. \rho_{0x} = 0.25a$ 

$E_0, \text{эВ}$	$N_a$								
	$\rho_{0y}: 0$	0.125a	0.25a	0.375a	0.5a	0.625a	0.75a	0.875a	a
15	4	3	3	3	5	5	4	4	4
20	4	3	4	5	5	5	4	4	4
25	5	4	5	5	5	5	4	4	5
30	6	5	5	5	5	5	5	6	6

куум” ( $z = 0$ ), число  $N_a$  уменьшится за счет экранировки иона близлежащими атомами решетки.

Таким образом, число атомов  $N_a$  в группе взаимодействующих частиц и расстояние наибольшего сближения  $z_n$  иона с поверхностью взаимно связаны и определяются следующими факторами: энергией бомбардировки  $E_0$ , структурой поверхности кристаллической решетки и потенциалом взаимодействия.

*Суммарная энергия отдачи  $E_{от\Sigma}$*

На рис. 3 показаны рассчитанные зависимости суммарной энергии отдачи  $E_{от\Sigma}$ , получаемой группой атомов ванадия при взаимодействии с налетающим ионом  $K^+$  (темные кружки) и  $Ag^+$  (крестики) от параметра  $\rho_{0y}$ . В случае движения иона в плоскости (100) ( $\rho_{0x} = 0$ ) указанные зависимости имеют колоколообразный вид с максимумом, соответствующим области пространства  $\rho_{0y} = 0.25a$  (рис. 3а). Для энергии  $E_0 \leq 30$  эВ на участке  $\rho_{0y} = 0.75a$  наблюдается второй максимум. Эти максимумы обусловлены сильным взаимодействием иона с близлежащими атомами решетки, в процессе которого они приобретают большую энергию отдачи. При  $E_0 \geq 40$  эВ второй максимум исчезает. Следует отметить, что в случае движения иона в плоскости (100) величина суммарной энергии отдачи  $E_{от\Sigma}$  значительно больше, чем для случаев движения иона в других плоскостях, например, в плоскостях, где лежат направления  $DD'$  и  $CC'$ .

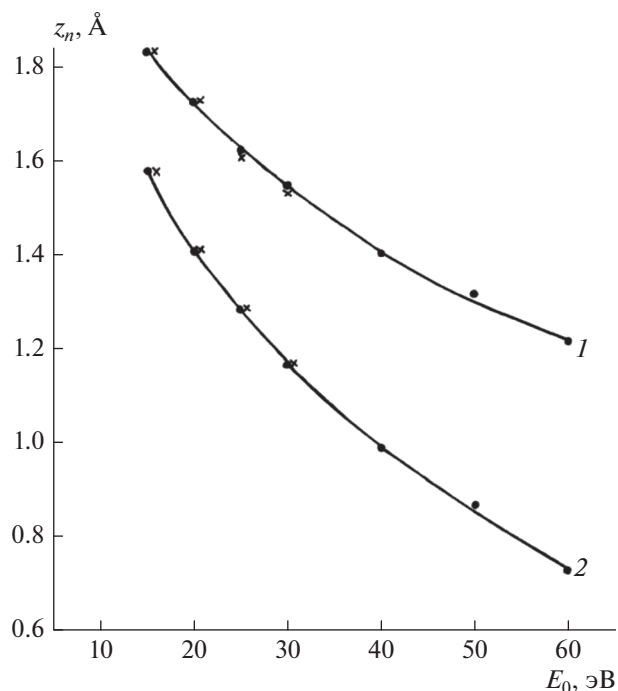
При движении иона в плоскости, проходящей через направление  $CC'$  ( $\rho_{0x} = 0.5a$ ), энергия  $E_{от\Sigma}$  наименьшая. Испытывая слабую зависимость от  $\rho_{0y}$ , она достигает наибольшего значения только на участке  $\rho_{0y} = 0.5a$  (рис. 3б). Здесь сильное взаимодействие иона происходит с объемным атомом  $C$ , который получает от него максимальную энергию отдачи.

Когда ион движется в плоскости, проходящей через направление  $DD'$  ( $\rho_{0x} = 0.25a$ ), суммарная энергия отдачи слабо зависит от параметра  $\rho_{0y}$  (рис. 3в).

Таким образом, энергия  $E_{от\Sigma}$  зависит от структуры поверхности мишени и от того, в каких плоскостях (направлениях) движется ион.

*Максимальная энергия отдачи  $E_{отmax}$*

На рис. 4 приведены рассчитанные зависимости максимальной энергии отдачи  $E_{отmax}$ , получаемой одним из группы атомов ванадия, участвующих одновременно в столкновении с ионом  $K^+$  или  $Ag^+$ , от прицельного параметра  $\rho_{0y}$  для трех

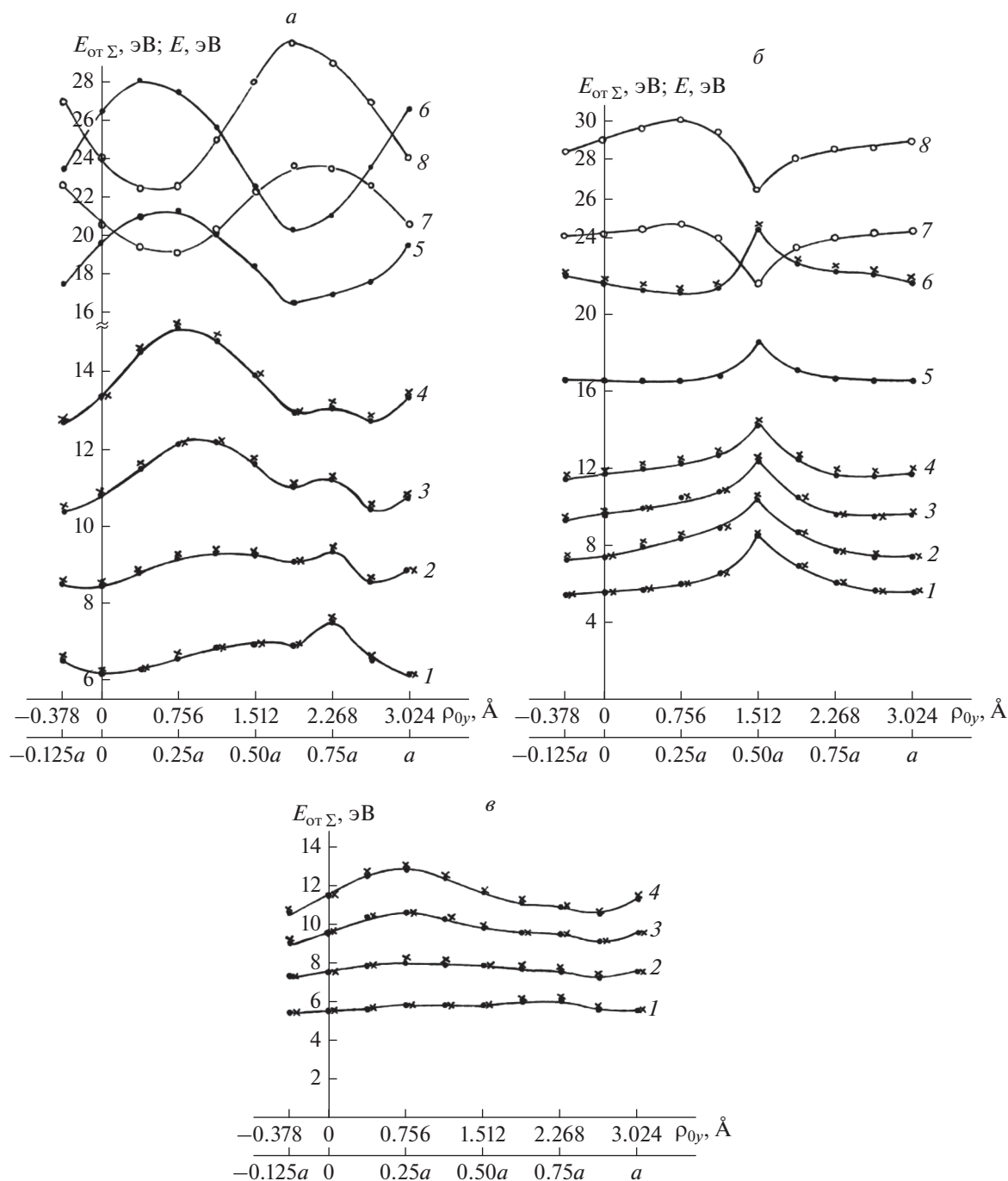


**Рис. 2.** Зависимость расстояния наибольшего сближения иона  $K^+$  и  $Ag^+$  с поверхностью кристалла ванадия от энергии бомбардировки: 1 –  $\rho_{0x} = 0$ , 2 –  $\rho_{0x} = 0.5a$ . (Темный кружок – ион  $K^+$ , крестик – ион  $Ag^+$ .)

случаев движения иона: а –  $\rho_{0x} = 0$ , б –  $\rho_{0x} = 0.5a$  и в –  $\rho_{0x} = 0.25a$ . Эти случаи практически описывают все закономерности, связанные с взаимодействием, и дают ясное представление о характере взаимодействия в областях наибольшей передачи энергии. Во-первых, из полученных данных, следует, что наибольшая энергия отдачи передается атомам I ряда (рис. 4а), а наименьшая – атомам II ряда (рис. 4б). Во-вторых, зависимость максимальной энергии отдачи от  $\rho_{0y}$  для исследованных энергий  $E_0$  имеет колоколообразный вид, максимум которой в зависимости от величины  $E_0$  соответствует прицельному параметру  $\rho_{0y}$ , лежащему в области  $0.25a \leq \rho_{0y} \leq 0.625a$  (рис. 4а, 4в).

В случае б для  $E_0 \leq 30$  эВ в зависимостях  $E_{отmax}(\rho_{0y})$  наблюдается острый пик, соответствующий области поверхности  $\rho_{0y} = 0.5a$  (рис. 4б). Здесь объемный атом  $C$  получает наибольшую максимальную энергию. При  $E_0 > 30$  эВ пик исчезает, а наибольшая энергия передается атомам в области  $\rho_{0y} = 0$  и  $\rho_{0y} = a$ .

Таким образом, изучение максимальных энергий отдачи  $E_{отmax}$  дает возможность найти те области пространства поверхности мишени, где атому передается наибольшее ее значение при данной энергии бомбардировки.



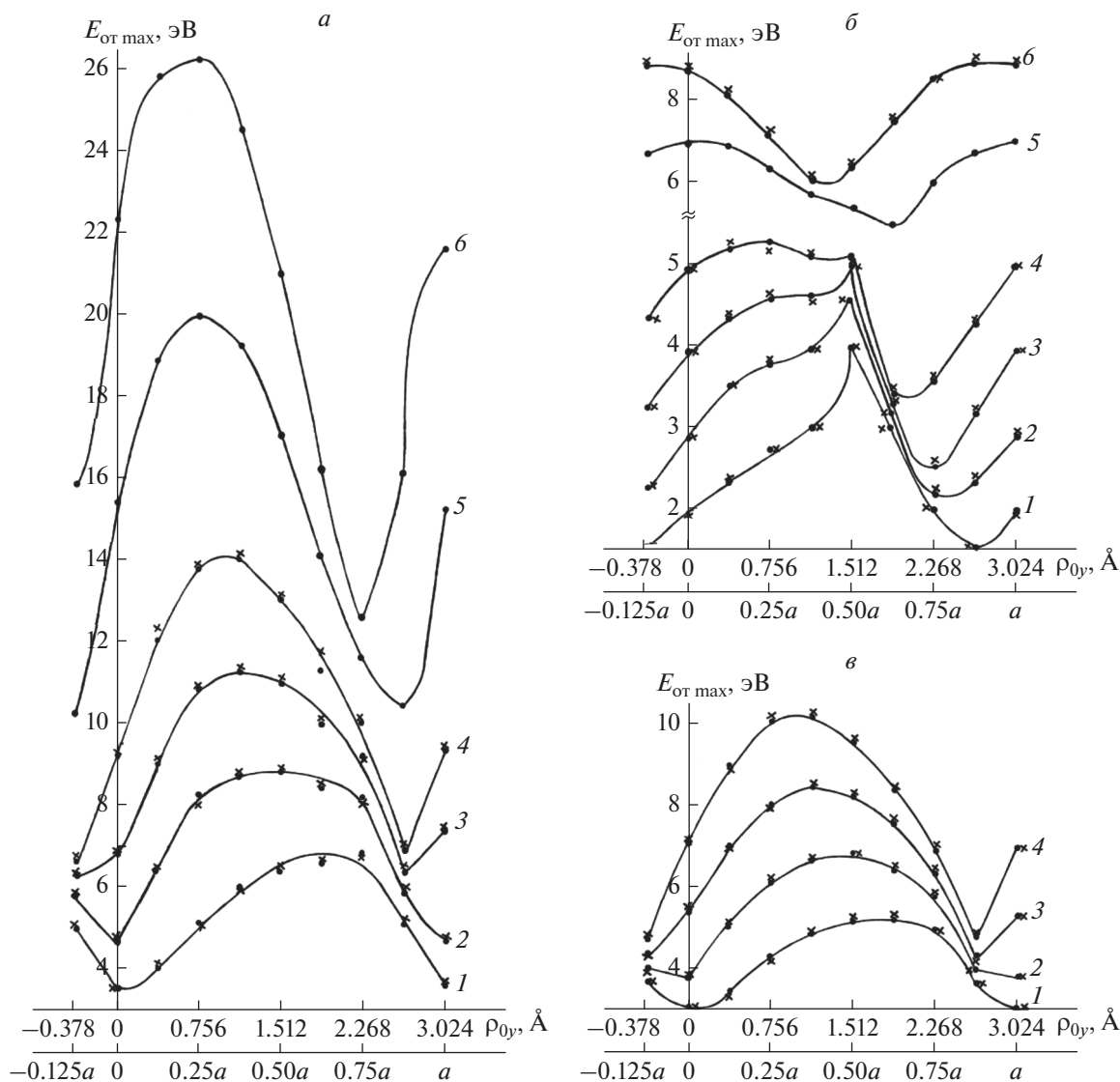
**Рис. 3.** Зависимость суммарной энергии отдачи ( $E_0$ , эВ: 1 – 15, 2 – 20, 3 – 25, 4 – 30, 5 – 40, 6 – 50) и энергии рассеянного иона ( $E_0$ , эВ: 7 – 40, 8 – 50) от параметра  $\rho_{0y}$ .  $a$  –  $\rho_{0x} = 0$ ,  $b$  –  $\rho_{0x} = 0.5a$ ,  $c$  –  $\rho_{0x} = 0.25a$ . (Темный кружок – ион  $K^+$ , крестик – ион  $Ag^+$ , светлый кружок – рассеянный ион  $K^+$ .)

#### Определение порогов распыления

Наибольшая энергия  $E_n$  из всех возможных максимальных энергий  $E_{от\ max}$ , получаемых от иона с данной энергией  $E_0$  одним атомом решетки, определяется из положения максимумов ко-

локолообразных зависимостей  $E_{от\ max}(\rho_{0x}, \rho_{0y})$ .

Как показывают расчеты, значение  $E_n$  для разных энергий  $E_0$  можно найти по положению максимума колоколообразных кривых рис. 4а, поскольку только в этом случае атому передается



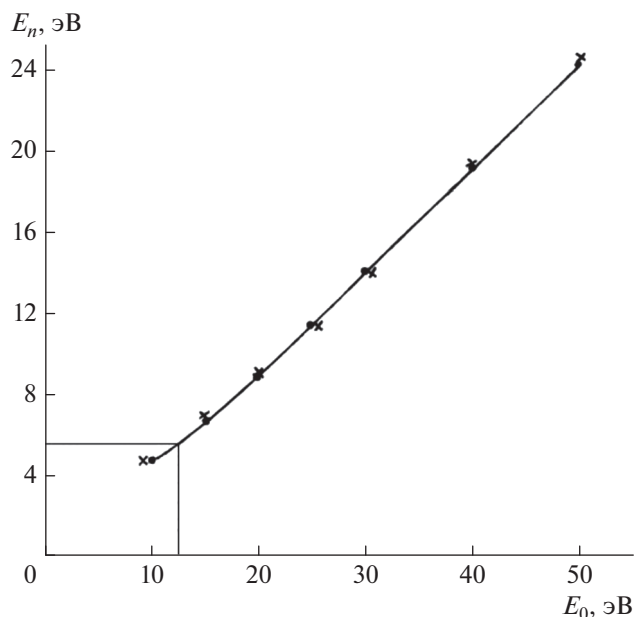
**Рис. 4.** Зависимость максимальной энергии отдачи, получаемой одним атомом, от параметра  $\rho_{0y}$  для  $E_0$ , эВ: 1 – 15, 2 – 20, 3 – 25, 4 – 30, 5 – 40, 6 – 50.  $a - \rho_{0x} = 0$ ,  $b - \rho_{0x} = 0.5a$ ,  $v - \rho_{0x} = 0.25a$ . (Темный кружок – ион  $K^+$ , крестик – ион  $Ag^+$ .)

наибольшая энергия отдачи. Построив зависимость  $E_n$  от  $E_0$  (рис. 5) и приняв, что распыление начинается, когда энергия  $E_n$  равна энергии связи (сублимации) атомов мишени, находим пороговую энергию  $E_{пор}$  распыления. Для ванадия энергия связи  $E_{св} = 5.3$  эВ/ат. Тогда из рис. 5 следует, что для  $K^+$  и  $Ag^+ \rightarrow V(001)$  в силу предложенного постулата пороговая энергия распыления равна 12.5 эВ. Это значит, что распыление ванадия ионами  $K^+$  и  $Ag^+$  невозможно, если их энергия  $E_0 < 12.5$  эВ. В действительности могут быть привнесены неучтенные в данных расчетах об-

стоятельства, которые сдвинут данный порог распыления только в сторону больших значений  $E_0$ .

Таким образом, если ион  $K^+$  или  $Ag^+$  имеет энергию  $E_0 = 12.5$  эВ, то он распылит атом только из I ряда (распыление с других мест невозможно). Чтобы распылить атом из II ряда, потребуется энергия иона  $E_0 \cong 30$  эВ. При этом распыленные атомы будут иметь кинетическую энергию, близкую к нулю.

Рассчитанное в настоящей работе значение пороговой энергии  $E_{пор} = 12.5$  эВ для системы  $Ag^+ \rightarrow V$  удовлетворительно согласуется со значением  $E_{пор} = 11.8$  эВ, теоретически полученным ра-



**Рис. 5.** Зависимость наибольшей из максимальных энергий отдачи, переданных одному атому, от энергии бомбардировки. (Темный кружок – ион  $K^+$ , крестик – ион  $Ag^+$ .)

нее для той же пары авторами [6], но не совпадает с экспериментально измеренным значением  $E_{пор} = 23$  эВ в работе [7]. Это связано, по-видимому, с тем, что расчеты проводились с монокристаллом, а эксперимент – для поликристаллического ванадия, где имеет место усреднение по всем направлениям, и, как следствие, приводящее к увеличению порога распыления. Не исключено также, что это различие обусловлено техническими возможностями (чувствительностью) экспериментальной установки или теми неучтенными в теории факторами, которые могут привести к увеличению пороговой энергии распыления.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом МД с использованием  $V_S$ -потенциала проведены исследования передачи энергии

бомбардирующим ионом  $K^+$  и  $Ag^+$  атомам ванадия и определена пороговая энергия  $E_{пор}$  распыления ванадия. Она оказалась равной 12.5 эВ.

Установлено, что при энергии  $E_0 < 100$  эВ центр иона  $K^+$  (ионный радиус  $r_i = 1.33$  Å) и иона  $Ag^+$  не пересекает границу “металл–вакуум” ( $z = 0$ ), и взаимодействие с поверхностью происходит в дальней зоне ( $z > 0$ ).

Для энергии  $E_0 = 15–60$  эВ определены расстояния наибольшего сближения  $z_n$  иона с поверхностью, и установлена связь этих расстояний с числом атомов  $N_a$ , участвующих во взаимодействии. Показано, что с уменьшением  $z_n$  (увеличением энергии  $E_0$ ) число атомов  $N_a$  увеличивается.

Рассчитаны зависимости энергии отдачи  $E_{от\Sigma}$  и  $E_{отmax}$  от прицельных параметров  $\rho_{0x}$ ,  $\rho_{0y}$ , и определены области поверхности мишени, в которых происходит наибольшая передача энергии и, следовательно, наиболее вероятное распыление мишени. Таким образом, предлагается численный метод определения порогов распыления твердых тел.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Евстифеев В.В., Костина Н.В., Карабаева Т.В. // Поверхность. Рентг., синхротр., нейтр. иссл. 2017. № 1. С. 104; *Evtstifeev V.V., Kostina N.V., Karabaeva T.V. // J. Surf. Invest. X-Ray. Synchrotr. Neutr. Tech.* 2017. V. 11. № 1. P. 155.
2. Евстифеев В.В., Костина Н.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 2. С. 195; *Evtstifeev V.V., Kostina N.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 2018. V. 82. № 2. P. 170.
3. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solid. V. 1. N.Y.: Pergamon Press, 1985. 321 p.
4. Евстифеев В.В., Иванов И.В. // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. № 18. С. 69.
5. Евстифеев В.В. Многочастичные взаимодействия при рассеянии медленных ионов поверхностью металлов. Пенза: изд-во ПГУ, 2009. 200 с.
6. Harrison D.E., Magnuson G.D. // *Phys. Rev.* 1961. V. 122. P. 1421.
7. Stuart R.V., Wehner G.K. // *J. Appl. Phys.* 1962. V. 33. P. 2345.