

УДК 537:534

КОММЕНТАРИЙ К ПРОГРАММЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ SRIM

© 2019 г. 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*

Поступила в редакцию 12.06.2018 г.

После доработки 22.07.2018 г.

Принята к публикации 22.07.2018 г.

Программа компьютерного моделирования SRIM, в отличие от других известных программ (MARLOWE, TRIM.SP и др.), предсказывает ненулевые значения коэффициента распыления при скользких углах падения ионов на гладкую аморфную мишень. Чтобы понять причину этого и других расхождений, в данной работе проведено моделирование распыления аморфного германия различными ионами с использованием программы OKSANA. Показано, что SRIM не вполне корректно моделирует начальную стадию распылительного процесса, а именно вход ионов в мишень.

Ключевые слова: ионная бомбардировка, распыление, коэффициент распыления, аморфная мишень, компьютерное моделирование, программа SRIM.

DOI: 10.1134/S0207352819060131

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, при изучении взаимодействия ионов с твердым телом, в частности распыления поверхности твердых тел, широко используется метод компьютерного моделирования. Метод позволяет проводить расчеты каскадов атомных столкновений с учетом реалистичных межатомных потенциалов, изменения состава мишени и рельефа ее поверхности в процессе облучения и др. [1].

Одной из программ компьютерного моделирования распыления является программа SRIM [2], находящаяся в свободном доступе и удобная для практического использования. Программа основана на приближении парных столкновений и, используя эту программу, можно рассчитывать различные характеристики взаимодействия ионов с аморфными материалами, в том числе коэффициент распыления Y . Однако было замечено, что в случае наклонного падения ионов, особенно при скользкой бомбардировке, программа SRIM существенно завышает значения Y , а также искажает вид углового распределения распыленных атомов [3–5]. Серьезные артефакты в расчетах SRIM отмечены и в случае падения частиц по нормали к поверхности [4, 6]. Авторы работ [5, 6] причину расхождений связывают с недостатками алгоритма расчета траекторий при приближении частиц к поверхности. В работе [4] высказано

предположение, что расхождения могут быть связаны с неточностью использованного межатомного потенциала.

С нашей точки зрения, отмеченные расхождения можно объяснить более просто. Длина свободного пробега частиц в мишени в модели SRIM определяется средним межатомным расстоянием $\lambda = N^{-1/3}$, где N – атомная плотность мишени [2]. При этом первое столкновение падающего иона с атомом мишени происходит на расстоянии λ от точки пересечения поверхности, тогда как рассеяние на атомах, расположенных ближе к поверхности, не учитывается. Очевидно, что недооценка поверхностного рассеяния может привести к сильному искажению каскадов столкновений и, соответственно, коэффициента распыления, особенно при больших углах падения ионов на мишень, когда роль поверхности особенно велика.

Цель данной работы состоит в том, чтобы проверить это предположение. Расчеты выполнены с помощью программы OKSANA в том варианте, который описан в работе [7] и предназначен для моделирования распыления аморфных мишеней. Полученные результаты сравниваются с расчетами по программе SRIM-2013 [2]. Большинство расчетов проведено для германия, бомбардируемого ионами Хе с энергией 1 кэВ. Угол падения ионов α изменяется от 0 (падение по нормали) до почти 90°.

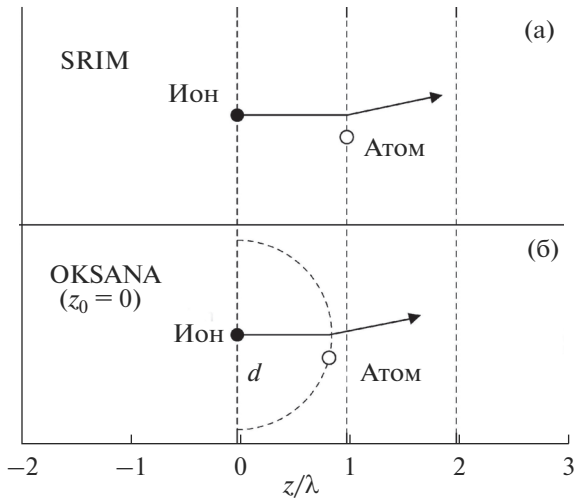


Рис. 1. Схема моделирования траекторий ионов в программе SRIM (а) и OKSANA (б) для случая нормального падения. Значение $z = 0$ соответствует поверхности мишени. λ – среднее межатомное расстояние, d – радиус первой координационной сферы (для германия $\lambda = 2.8 \text{ \AA}$ и $d = 2.4 \text{ \AA}$).

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Рассмотрим основные характеристики программы OKSANA, первый вариант которой разработан в середине 1980-х годов [8]. Программа предназначена для расчета распыления кристаллических и аморфных мишеней при ионной бомбардировке. Аморфная мишень моделируется вращением кристаллического атомного блока; процедура вращения повторяется для каждого нового столкновения аналогично тому, как это делается в программе MARLOWE [9]. Классическое рассеяние в столкновениях ион–атом и атом–атом описывается экранированным кулоновским потенциалом. Как и в программе SRIM, в качестве межатомного потенциала использован потенциал Циглера–Бирсака–Литтмарка (ZBL) [10]. Неупругие энергетические потери в столкновениях частиц рассчитываются по формуле Фирсова [11]. Остальные параметры модели отвечают стандартному варианту программы, описанному в работе [12]. Атом считается распыленным, если преодолевает плоский поверхностный барьер высотой E_S , равной энергии сублимации материала мишени (3.88 эВ для Ge). Коэффициент распыления Y определяется по результатам моделирования большого числа каскадов столкновений. Одновременно рассчитывается коэффициент отражения частиц от поверхности R_N . Для корректного сравнения с программой SRIM, поверхность мишени считается гладкой.

Направление бомбардировки задается в прямоугольной системе координат, оси X' и Y' которой лежат в поверхностной плоскости мишени, а

ось Z' направлена внутрь мишени. Начальная точка траектории падающего иона имеет координату $Z' = z_0$, где z_0 может варьироваться ($z_0 = 0$ соответствует поверхности мишени). В стандартном варианте программы $z_0 = -2\lambda$, уменьшение z_0 не влияет на результаты. Партнер по столкновению выбирается из атомов первой координационной сферы кристаллической решетки. Если атом имеет координату $Z' < 0$, то рассеяние на нем не происходит и начинается поиск следующего партнера, расположенного впереди по направлению движения. Эта процедура позволяет учесть вклад слабых столкновений при подлете частиц к поверхности; последнее особенно важно для скользящего падения, когда столкновения с малыми прицельными параметрами подавлены в результате взаимного экранирования атомов [1].

В программе SRIM партнеры по столкновению выбираются из атомов, которые лежат в плоскости, расположенной на расстоянии λ от рассеивающего центра (для германия $\lambda = 2.8 \text{ \AA}$). Радиус первой координационной сферы d в решетке германия связан со средним межатомным расстоянием λ соотношением $d = 3^{1/2}\lambda/2 = 2.4 \text{ \AA}$. Поскольку $d < \lambda$, то в модели, лежащей в основе программы OKSANA, атомы первой координационной сферы могут оказаться на расстоянии λ от поверхности (как в SRIM) лишь при положительном значении z_0 . На рис. 1 это проиллюстрировано для случая нормального падения. В модели SRIM стартовая точка траектории иона лежит в плоскости $z = 0$ и при наклонном падении частиц. В этом случае первое столкновение иона с атомом мишени происходит на расстоянии $\lambda \cos \alpha$ от поверхности. Ниже будет показано, что достаточно хорошее соответствие результатов моделирования по указанным программам удается получить при $z_0 \sim (\lambda/3) \cos \alpha$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 представлены зависимости коэффициентов распыления и отражения от угла падения пучка на мишень при распылении германия ионами Xe с энергией 1 кэВ. Во всех случаях форма зависимостей типична для аморфных мишеней: коэффициент распыления растет с увеличением α , проходит через максимум, а затем резко уменьшается до нуля (OKSANA, кривая 1) или до некоторого ненулевого значения (SRIM, кривая 3). Расчеты по программе OKSANA, показанные на рисунке, выполнены при значениях $z_0 = -2\lambda$ и $(\lambda/3) \cos \alpha$ (кривые 1 и 2 соответственно). Видно, что увеличение z_0 приводит к уменьшению коэффициента распыления при $\alpha < 65^\circ$ и увеличению при больших углах. Первое связано со смещением каскада соударений вглубь мишени с ростом z_0 , а второе – с более слабым отражением частиц от

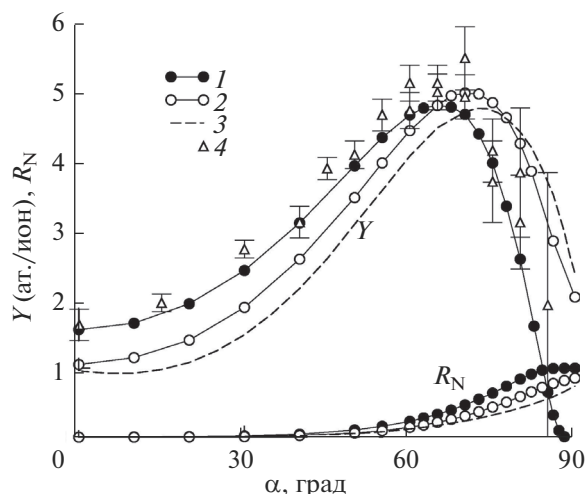


Рис. 2. Угловые зависимости коэффициентов распыления Y и отражения R_N при бомбардировке германия ионами Хе с энергией 1 кэВ. 1 и 2 – OKSANA при $z_0 = -2\lambda$ и $(\lambda/3)\cos\alpha$ соответственно, 3 – SRIM-2013, 4 – эксперимент [4].

поверхности, что увеличивает энергию, передаваемую атомам мишени, и таким образом способствует ее распылению. Видно также, что расчет по программам SRIM и OKSANA, выполненный при $z_0 = (\lambda/3)\cos\alpha$, дает достаточно близкие значения коэффициентов распыления и отражения. Полного совпадения результатов добиться нельзя в принципе, учитывая существенную разницу алгоритмов расчета траекторий частиц в указанных программах (см. выше).

Из рис. 2 следует, что с экспериментом [4] лучше согласуется расчет по программе OKSANA, выполненный при $z_0 = -2\lambda$ (кривая 1). В эксперименте облучение проводили при комнатной температуре, коэффициент распыления определяли из данных по глубине эрозии поверхности, полученных с помощью профилометра. Зависимость, рассчитанная по программе SRIM (кривая 3), занижает коэффициент распыления при малых значениях α и значительно завышает его при углах падения, близких к 90° . Данный факт был отмечен в литературе, в том числе в отношении программы SRIM-2013 [4]. При $\alpha < 30^\circ$ отражение практически отсутствует из-за большой разницы масс ионов и атомов мишени. Поведение коэффициента распыления в этой области углов определяется в основном положением каскада соударений относительно поверхности, зависящим от z_0 , как отмечено выше.

На рис. 3 представлены результаты расчета, выполненного для случая нормального падения ионов Хе с энергиями от 100 эВ до 10 кэВ. Видно, что значение $z_0 = \lambda/3$ позволяет хорошо аппроксимировать результаты SRIM во всей области

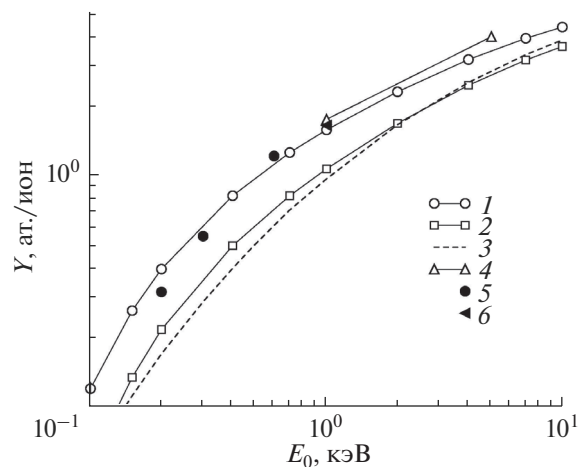


Рис. 3. Энергетические зависимости коэффициента распыления германия ионами Хе при нормальном падении. 1 и 2 – OKSANA при $z_0 = -2\lambda$ и $\lambda/3$ соответственно, 3 – SRIM-2013, 4 – расчет по программе SDTrimSP [4], 5 – эксперимент [13], 6 – эксперимент [4].

энергий (кривые 2 и 3). Отметим хорошее согласие результатов расчета по программе OKSANA ($z_0 = -2\lambda$, кривая 1) с расчетом по программе SDTrimSP [4], а также с экспериментальными данными работ [13, 4].

Из приведенных выше результатов следует, что существенным недостатком программы SRIM является то, что она моделирует распыление ионами, источник которых находится непосредственно на поверхности мишени. Это ведет к

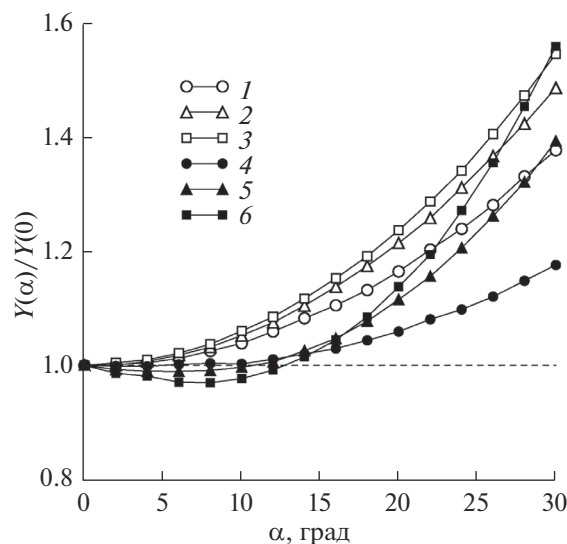


Рис. 4. Угловые зависимости нормированного коэффициента распыления германия ионами Ar (1, 4), Kr (2, 5) и Хе (3, 6) с энергией 1 кэВ. 1–3 – OKSANA ($z_0 = -2\lambda$), 4–6 – SRIM-2013.

недооценке рассеяния падающих частиц атомами поверхностного слоя и (как результат) к тем особенностям в угловых и энергетических зависимостях коэффициента распыления, что отмечены выше.

Следует обратить внимание на еще один серьезный артефакт программы SRIM: предсказание немонотонного поведения коэффициента распыления при углах падения $\alpha < 15^\circ$ (рис. 4). Такое поведение противоречит общепризнанной теории распыления Зигмунда [14] и не согласуется с экспериментальными данными для аморфных и поликристаллических материалов в отсутствие текстуры (например, [15]). Напомним, что теория Зигмунда предсказывает зависимость $Y \sim 1/(\cos\alpha)^f$, где показатель степени f лежит в пределах от 1 до 5 для разных комбинаций ион–мишень и различных энергий ионов.

Немонотонное поведение коэффициента распыления (рис. 4), вероятно, связано с особенностями формирования положений атомов мишени при углах падения, близких к 0. Об этом свидетельствуют траектории частиц, выдаваемые программой SRIM. Легко убедиться, что при $\alpha = 0$ траектории атомов мишени в проекции на плоскость, проходящую через ось пучка (плоскость X – Y в терминах SRIM), имеют не вполне симметричный вид, чего при нормальном падении пучка на гладкую аморфную мишень не должно быть в принципе. Это свидетельствует об ошибке в программе. Определить ошибку сложно, поскольку текст SRIM не опубликован. Вероятно, устранение этой ошибки позволит существенно улучшить результаты моделирования, которые в настоящее время трудно назвать адекватными как при нормальном (рис. 2, 3), так и наклонном падении пучка (рис. 2, 4). Строго говоря, сказанное относится лишь к случаю распыления германия, рассмотренного в данной работе, однако заметим, что недавние расчеты распыления кремния различными ионами (от He до U) приводят к аналогичным выводам [16].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Программа SRIM моделирует ситуацию, когда источник падающих ионов находится непосред-

ственно на поверхности мишени. Как результат, в случае скользящего падения программа значительно занижает коэффициент отражения частиц от поверхности и, соответственно, завышает коэффициент распыления. Серьезным артефактом программы является немонотонное поведение коэффициента распыления при малых углах падения, что противоречит имеющимся теоретическим и экспериментальным данным. Программа SRIM нуждается в доработке и в своем настоящем виде вряд ли может служить надежной основой для анализа экспериментальных данных по распылению твердых тел ионной бомбардировкой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Экитайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 319 с.
2. *Ziegler J.F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 136–138. P. 141. <http://www.srim.org>
3. *Lindsey S., Hobler G.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2013. V. 303. P. 142.
4. *Hofsäas H., Zhang K., Mutzke A.* // Appl. Surf. Sci. 2014. V. 310. P. 134.
5. *Hobler G., Bradley R.M., Urbassek H.M.* // Phys. Rev. B. 2016. V. 93. P. 205443.
6. *Wittmaack K.* // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. P. 2632.
7. *Shulga V.I., Eckstein W.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 145. P. 492.
8. *Shulga V.I.* // Radiat. Eff. 1984. V. 82. P. 169.
9. *Robinson M.T., Torrens I.M.* // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. P. 5008.
10. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids. Vol. I. / Ed. Ziegler J.F. New York: Pergamon, 1985. 321 p.
11. *Фурсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517.
12. *Shulga V.I., Sigmund P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1996. V. 119. P. 359.
13. *Rosenberg D., Wehner G.K.* // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. P. 1842.
14. *Sigmund P.* // Phys. Rev. 1969. V. 184. P. 383.
15. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Вып. 1. Физическое распыление одноэлементных твердых тел / Ред. Бериш П.М.: Мир, 1984. 336 с.
16. *Shulga V.I.* // Appl. Surf. Sci. 2018. V. 439. P. 457.

A Comment to the Computer Simulation Program SRIM

V. I. Shulga

The computer simulation program SRIM, unlike other well-known programs (MARLOWE, TRIM.SP, etc.), predicts non-zero values of the sputter yield at glancing ion bombardment of smooth amorphous targets. To understand the reason for this and other differences, simulation of sputtering of a germanium target bombarded with 0.1–10 keV ions was carried out using the OKSANA program. It has been shown that SRIM insufficiently correctly simulates the initial stage of the sputtering process.

Keywords: ion bombardment, sputtering, sputter yield, amorphous target, computer simulation, program SRIM.