

УДК 539.2

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ЯВЛЕНИЙ В ПРОЦЕССЕ ПЕРФОРИРОВАНИЯ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

© 2020 г. Г. М. Филиппов^{а, *}, В. А. Александров^б, А. В. Степанов^с

^аЧебоксарский институт (филиал) “Московский политехнический университет”, Чебоксары, 428000 Россия

^бЧувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, Чебоксары, 428000 Россия

^сЧувашская государственная сельскохозяйственная академия, Чебоксары, 428000 Россия

*e-mail: filippov38-gm@yandex.ru

Поступила в редакцию 21.12.2018 г.

После доработки 18.03.2019 г.

Принята к публикации 15.04.2019 г.

Исследуется процесс перфорирования пленки нанометровой толщины при прохождении волнового пакета многозарядного иона. Показано, что значительное влияние на процесс перфорирования оказывает резонансное поведение колебаний диска, высвобождаемого из пленки. Механизм резонанса основан на процессе, известном под названием “push-pull” (по русски “тяги-толкай”). Предложена модель силы поляризационного взаимодействия пленки с волновым пакетом частицы. Модель позволяет получить оценку порогового значения силы, необходимой для образования поры при пролете многозарядного иона через пленку.

Ключевые слова: тонкие пленки, пористые структуры, волновой пакет, поляризационные поля и силы.

DOI: 10.31857/S1028096019120094

ВВЕДЕНИЕ

Одним из быстро развивающихся направлений в современной микроэлектронике и нарождающейся нанотехнологии является создание пленочных мембран различного назначения. Речь идет о мембранах столь малой толщины (иногда толщиной всего лишь в один атом), что само наблюдение явлений в столь малых структурах совсем недавно казалось практически невыполнимым. Зачастую наблюдения ведутся на молекулярном и даже на атомном уровне. Например, создавая нанопоры в графене, авторы работы [1] исследовали селективность получаемых таким образом мембран по отношению к прохождению различных молекулярных и атомных ионов. Было показано, что в таких прочных пленках, как графен, явление порообразования не наблюдается. Тем не менее, в пленках менее прочных (рыхлых) и полученных авторами работы [2] посредством специальных процедур, вышеупомянутое явление было с очевидностью продемонстрировано.

Мембраны применяются для опреснения морской воды [3]. К этому же направлению исследований относятся работы [4–15]. В недавней работе [16] группа ученых из Германии получила результаты относительно прохождения как многозарядных ионов (НСI), так и ускоренных тяжелых

ионов (SHI) через ультратонкие пленки различных соединений. Как оказалось, эффект образования пор при таком воздействии на пленку существенно зависит не только от величины заряда или энергии проходящих ионов, но также и от химического состава пленок. Авторы смогли создать микрошпицы на поверхности ВаF₂, используя НСИ гораздо более высокой потенциальной энергии ($E_p = 73.2$ кэВ), чем в предыдущих экспериментах. Эти структуры аналогичны тем, которые наблюдаются в СаF₂. Кроме того, наблюдались дополнительные пирамидальные ямки в ВаF₂ и СаF₂ после облучения НСИ с потенциальными энергиями ниже порога для создания шипов. Кинетическая энергия НСИ увеличивает повреждение решетки и, следовательно, ее способность к травлению. При постоянной кинетической энергии размер ямки увеличивается в зависимости от потенциальной энергии. При отжиге нанометрового объема, ответственного за формирование микрошпицов, для травления требуется создание агрегатов дефектов, и тем самым наблюдаются треугольные ямы травления. Сходство между НСИ и SHI в производстве сильных электронных возбуждений в области воздействия было подтверждено наблюдением одинаковых структур в обоих случаях.

Таким образом, совокупность упомянутых экспериментальных данных требует объяснения возможности образования пор при прохождении через пленки ионов с большим зарядом в одних случаях, и отсутствия такой возможности в других. Как нам удалось выяснить, особенно важное значение для порообразования имеет относительная слабость межмолекулярных сил, действующих между частями пленки. Так, например, не имеет смысла говорить о возможности данного эффекта в такой прочной структуре, которой является графен.

В статье используются атомные единицы измерения.

МОДЕЛЬ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА МНОГОЗАРЯДНОГО ИОНА НА ТОНКУЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПЛЕНКУ

Рассмотрим волновой пакет многозарядного иона Z , имеющий гауссово распределение плотности заряда $\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \exp(-r^2/2\delta^2)$, где δ – ширина пакета, одинаковая по всем трем направлениям. На расстоянии z_0 от центра пакета находится полупространство, заполненное однородным диэлектриком с диэлектрической функцией $\epsilon = 1 - \omega_0^2/(\omega^2 + \omega_0^2 - \omega_k^2)$, где ω – частота, \mathbf{k} – волновой вектор, $\omega_0 = \sqrt{4\pi n/m}$, $\omega_k = \omega_0 + 0.005 + k^2/2m$, m – эффективная масса электронов, n – их концентрация. Выбираем в атомных единицах $m = 1$, $\omega_0 = 0.7$. В работе [17] было получено выражение для силы поляризационного притяжения к пакету многозарядного иона диска радиуса R на плоской границе раздела сред. Расчет силы выполнен на основе законов классической электродинамики поляризующихся сплошных сред с учетом дисперсии диэлектрической проницаемости. В процессе перфорирования тонкой пленки сила приложена к периметру будущей поры радиуса R , где и происходит разрыв связей, удерживающих диск в пленке. Для удельной силы, отнесенной к единице длины периметра будущей поры, используем выражение ($z_0 > 0$):

$$f = -\frac{Z^2}{8\pi R_0} \int k_{\parallel} dk_{\parallel} e^{k_{\parallel}^2 \delta^2 / 2} \times \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{z_0}{\sqrt{2}\delta} - k_{\parallel} \delta / \sqrt{2}\right) \right] \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} F(K, k_{\parallel}), \quad (1)$$

где

$$F(R, k_{\parallel}) = \left\{ e^{-2k_{\parallel} z_0} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{z_0}{\sqrt{2}\delta} - k_{\parallel} \delta / \sqrt{2}\right) \right] + 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z_0}{\sqrt{2}\delta} + k_{\parallel} \delta / \sqrt{2}\right) \right\} \int_0^{R^2/2\delta^2} dy y^{-y} J_0(k_{\parallel} \delta \sqrt{2y}).$$

Здесь $\operatorname{erf}(x)$ – интеграл ошибок, $J_0(x)$ – функция Бесселя нулевого порядка. Поскольку скорость налетающего пакета в анализируемых экспериментах невелика, рассмотрим стационарную поляризационную силу для $v = 0$. В этом случае $\omega = k_{\parallel} v = 0$ и ϵ представляет собой низкочастотный предел диэлектрической функции. Отметим, что сила (1) практически не зависит от ϵ , поскольку для выбранного значения $\epsilon \approx 80$ величина $(\epsilon - 1)/(\epsilon + 1) \approx 1$. Зависимость $f(z_0)$ для пакета иона с параметрами $Z = 35$, $\delta = 50$, $R = 50$ имеет вид, показанный на рис. 1. Данная поляризационная сила имеет кулоновское поведение при больших расстояниях от центра волнового пакета до полупространства, заполненного диэлектриком, показанное на рис. 2. Точками изображена

аппроксимация $1.5 \times 10^{-4} / (z_0/\delta)^2$. Видно, что, начиная с $z_0/\delta \approx 2$, сила взаимодействия приобретает выраженный кулоновский характер. Такое поведение свойственно взаимодействию точечного заряда со своим зеркальным изображением с тем отличием, что сила составляет 38.4% от чисто кулоновской. Данное обстоятельство связано с отличием от металлоподобного поведения диэлектрика в заданной выше его модели. На рис. 3 показана зависимость максимального значения удельной силы f от δ (после оптимизации по z_0 и R). Оказалось, что практически независимо от δ , оптимальные значения расстояния от центра пакета до границы раздела сред и радиуса будущей поры, обеспечивающие максимальное значение удельной силы, составляют $z_0 = 0.54\delta$, $R = 1.31\delta$. Пороговому значению силы, необходимому для перфорации пленки, равному 3.2×10^{-5} (см. численную оценку в [18]), соответствует $\delta = 70$ ат. ед.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСА ПЕРЕДАЧИ ЭНЕРГИИ ПРИ ДВИЖЕНИИ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ТОНКУЮ ПЛЕНКУ

Методом численного моделирования найдем переданную энергию при движении волнового пакета многозарядного иона через тонкую пленку. Будем считать, что ион движется с постоянной скоростью перпендикулярно пленке. Весь диск будущей поры движется как одно целое в направлении, перпендикулярном пленке, будучи “подвешен” на пружине с жесткостью, соответствующей

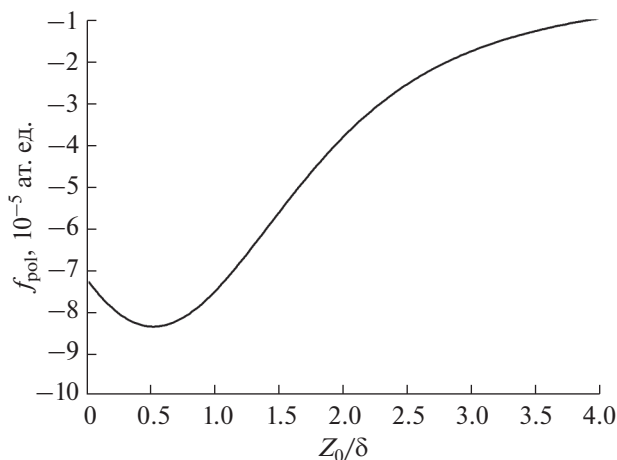


Рис. 1. Поляризационная сила, отнесенная к единице периметра будущей поры. Волновой пакет иона имеет параметры $Z = 35$, $\delta = 50$, $R = 50$.

шей суммарной жесткости связей в поперечном направлении, удерживающих диск в пленке. Поскольку ион при пролете через пленку все время притягивает диск будущей поры к себе, возможно наступление резонанса, когда ион и диск движутся согласованно и передача энергии диску будет максимальна.

Для проведения численного расчета необходимо решить ряд проблем. Во-первых, выражение для силы (1) получено в модели взаимодействия пакета иона с полупространством, заполненным диэлектриком. У нас взаимодействие происходит с тонкой пленкой. Оценки показывают, что толщина пленки достаточно велика (порядка 1 нм), поэтому силовое воздействие пакета на пленку будет практически таким же, как на полупространство. Во-вторых, желательно аппроксимировать поляризационную силу (1) каким-либо простым выражением для ускорения численного расчета. Оказалось, что хорошей аппроксимацией для максимальной (оптимизированной по радиусу будущей поры $R = 1.31\delta$) удельной силы взаимодействия диска будущей поры с пакетом иона в зависимости от расстояния от центра пакета до поверхности раздела z_0 является формула $f(x) = f(0)\exp[-x(x - 1.06)/2]$, где $x = z_0/\delta$. Значение $f(0)$ рассчитывается по формуле (1). В-третьих, поскольку пленка тонкая (по сравнению с размером волнового пакета иона), необходимо учесть, что части пакета, находящиеся по разные стороны пленки, оказывают силовое воздействие в разных направлениях. Поэтому, в частности, при прохождении центра пакета через пленку сила должна обратиться в ноль. Численный расчет показал, что итоговая аппроксимация удельной поляризационной силы взаимодействия пакета с тонкой пленкой имеет вид $f(0)(\exp[-x(x - 1.06)/2] -$

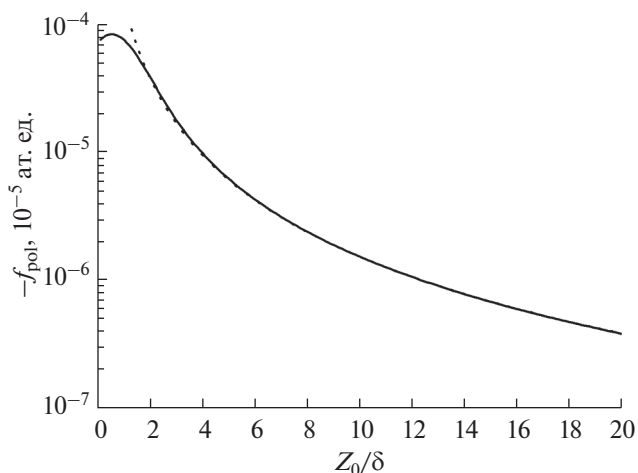


Рис. 2. Поляризационная сила, отнесенная к единице периметра будущей поры. Исследуется область больших z_0 . Волновой пакет иона имеет параметры $Z = 35$, $\delta = 50$, $R = 50$. Точками изображена аппроксимация $1.5 \times 10^{-4}/(z_0/\delta)^2$.

$-\exp[-x(x + 1.06)/2])$. Зависимость данной силы от $z_0 > 0$ показана на рис. 4. Когда центр пакета при динамике окажется по другую сторону пленки, сила поменяет знак. Видно, что полная сила поляризационного взаимодействия волнового пакета иона с тонкой пленкой (сплошная кривая) равна нулю в нуле и имеет почти в 2 раза меньшую амплитуду по сравнению с расчетом (1) (точки) для случая полупространства. Эти силы практически не отличаются друг от друга, начиная с $z_0 = 2\delta$.

Резонанс по ν при передаче энергии от движущегося иона диску будущей поры в пленке пока-

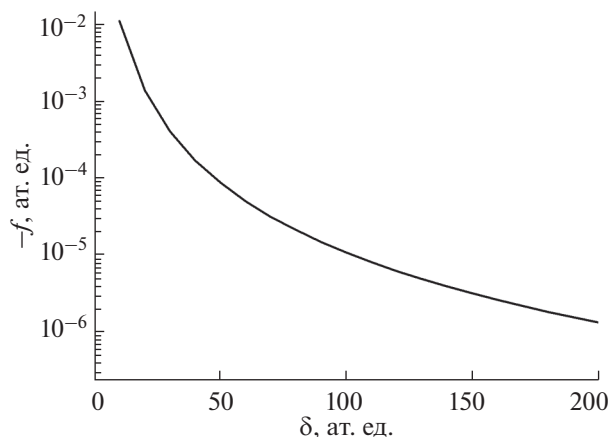


Рис. 3. Максимальная (оптимизированная по z_0 и R) поляризационная сила, отнесенная к единице периметра будущей поры. Волновой пакет иона имеет $Z = 35$.

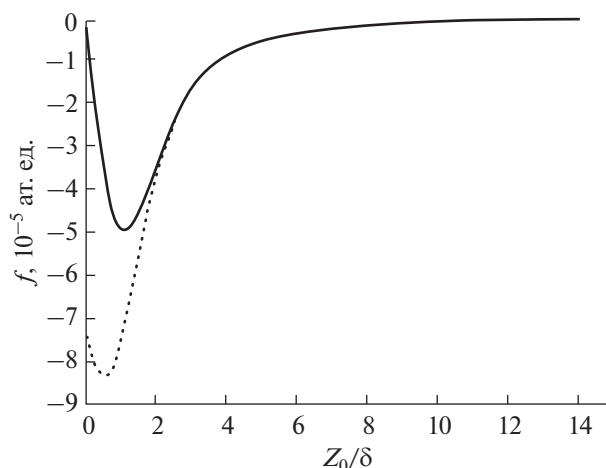


Рис. 4. Итоговая сила поляризационного взаимодействия волнового пакета иона с тонкой пленкой (сплошная кривая). Точками показан расчет по формуле (1).

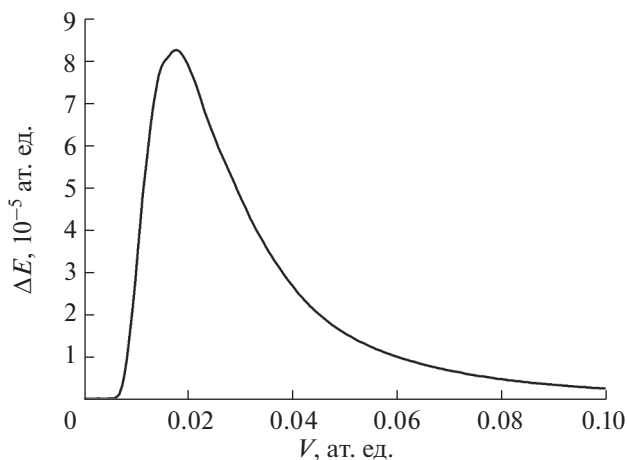


Рис. 5. Зависимость переданной энергии диску будущей поры при пролете иона $Z = 35$ через тонкую пленку. Параметры: $\delta = 50$ ат. ед., $R = \delta$.

зан на рис. 5. Пленка была взята из работы [2] — очень “рыхлая” пленка толщиной порядка 1 нм с пороговым значением силы, необходимой для перфорации, равным 3.2×10^{-5} [18]. Мы моделировали связи, удерживающие диск будущей поры, как обычные С—С-связи в графене с уменьшением их количества в 20 раз, чтобы передать “рыхлость” пленки, и вероятную слабость связей в ней. По результатам численного расчета переданная энергия оказалась равной $E_{\max} = 7.9 \times 10^{-5}$, резонансная скорость иона $v = 0.002$, резонансная амплитуда колебаний равна 0.0035. Виден четкий резонанс, но передача энергии очень невелика. Амплитуда колебаний тоже невелика, поэтому ковалентные

связи, скорее всего, не порвутся. Поэтому можно предположить, что значительная часть связей в такой “рыхлой” пленке [2] имеет Ван-дер-Ваальсовский характер и допускает разрыв при значительно меньших силовых воздействиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе показано, что электрическое поляризационное поле, производимое движущимся волновым пакетом многозарядного иона, оказывается способным создавать поры в ультратонкой углеродной пленке при прохождении волнового пакета иона через нее.

Проведенная оценка поляризационных свойств пленки приводит к выводу о том, что основная часть связей в модели пленки, использованной нами в последнем исследовании, относилась к типу Ван-дер-Ваальса.

Зафиксированные в работе [2] резонансы в явлении образования пор в ультратонкой углеродной пленке при прохождении через нее массивных атомных ионов с большими зарядами могут быть объяснены в рамках теории, основывающейся на законах квантовой механики и классической электродинамики.

Для более полного качественного и количественного объяснения всей совокупности экспериментальных данных необходимо иметь больше информации относительно структурных и поляризационных свойств углеродных нанопленок, использованных экспериментаторами в работах по прохождению ионов ксенона через пленки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Rollings R.C., Kuan A.T., Golovchenko J.A.* // Nature Communications. 2016. V. 7. P. 11408. <https://doi.org/10.1038/ncomms11408>
2. *Wilhelm R.A., Gruber E., Ritter R. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. № 15. P. 153201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.153201>
3. *Cohen-Tanugi D., Grossman J.C.* // J. Chem. Phys. 2014. V. 141. № 7. P. 074704. <https://doi.org/10.1063/1.4892638>
4. *Goban A., Choi K.S., Alton D.J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 109. № 3. P. 033603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.033603>
5. *Kimble H.J.* // Nature. 2008. V. 453. P. 1023. <https://doi.org/10.1038/nature07127>
6. *Sint K., Wang B., Král P.* // J. Am. Chem. Soc. 2008. V. 130. № 49. P. 16448. <https://doi.org/10.1021/ja804409f>
7. *Samin S., van Roij R.* // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 118. № 1. P. 014502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.014502>
8. *Malpetti D., Roscilde T.* // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 117. № 13. P. 130401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.130401>

9. *Skoulidas A.I., Ackerman D.M., Johnson J.K. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. № 18. P. 185901. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.185901>
10. *Zami-Pierre F., de Loubens R., Quintard M. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 117. № 7. P. 074502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.074502>
11. *Rubin S., Suss M.E., Biesheuvel P.M. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 117. № 23. P. 234502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.234502>
12. *Nicholl R.J.T., Lavrik N.V., Vlasiouk I. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 118. № 26. P. 266101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.266101>
13. *Kumar R.T.R., Badel X., Viktor G. et al.* // Nanotechnology. 2005. V. 16. № 9. P. 1697. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/16/9/048>
14. *Eck W., Küller A., Grunze M. et al.* // Adv. Mater. 2005. V. 17. № 21. P. 2583. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2008.08.005>
15. *Matei D.G., Muzik H., Götzhäuser A. et al.* // Langmuir. 2012. V. 28. № 39. P. 13905. <https://doi.org/10.1021/la302821w>
16. *El-Said A.S., Heller R., Wilhelm R.A. et al.* // Appl. Surf. Sci. 2014. V. 310. P. 169. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.03.083>
17. *Filippov G.M.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. P. 155. <https://doi.org/10.3103/S1062873818020090>
18. *Filippov G.M., Aleksandrov V.A., Lysova I.V. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. P. 183. <https://doi.org/10.3103/S1062873818020107>

Resonant Phenomena Investigation in the Process of Thin Film Perforation at the Passage of High Charged Ions

G. M. Filippov^{1, *}, V. A. Aleksandrov², A. V. Stepanov³

¹*Cheboksary Institute (branch) Moscow Polytechnic University, Cheboksary, 428000 Russia*

²*Chuvash state University. I. N. Ulyanova, Cheboksary, 428000 Russia*

³*Chuvash state agricultural Academy, Cheboksary, 428000 Russia*

*e-mail: filippov38-gm@yandex.ru

The process of nanometer thickness film perforation during the passage of a wave packet of a multicharged ion is investigated. It is shown that the resonance of vibrations of the disc released from the film has a significant effect on the perforation process. A model of the polarization interaction force of the film with the wave package of the particle is proposed.

Keywords: thin films, porous structures, wave packet, polarization fields and forces.