

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОФИЛЕЙ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ИОНОВ Al^+ В НАНОСТРУКТУРНУЮ ПЛЕНКУ Cu

В.И. Павленко, И.Г. Марченко

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина*

E-mail: pavlenko@kipt.kharkov.ua

Методами математического моделирования исследованы зависимости профилей пространственного распределения имплантированных ионов от их угла падения на наноструктурные пленки. Построена компьютерная модель взаимодействия ионов с наноструктурными пленками и проведены расчеты имплантации ионов Al^+ в медную пленку. Энергия падающих ионов была равна 1 кэВ, а угол падения α изменялся в интервале $0...80^{\circ}$. Показано, что при ионной обработке поверхности наноструктурных материалов существует интервал значения углов, при которых достигается максимальная концентрация ионов в облучаемой пленке.

ВВЕДЕНИЕ

Для модификации поверхностных металлов многие годы активно применяется ионно-плазменная обработка. Толщина легируемого слоя металла играет важную роль в технологическом использовании полученных деталей машин, инструмента и других изделий. Так в работах [1–2] было показано, что бомбардировка поверхности медных подложек ионами металлов меняет структурно-фазовые состояния подложек и может приводить к заметному улучшению механических свойств покрытий. Отмечается, что перспективным направлением повышения адгезионной прочности покрытий (или пленок) является их предварительное наноструктурирование [2]. Регулируя параметры осаждения, можно получать наноструктурные пленки [3–7]. В этих пленках высокая плотность границ зерен трансформирует микрокристаллическую структуру в наноструктуру. Как отмечается в работе [7], количество атомов, расположенных на границах зерен в наноструктурах, может достигать 30...50%.

В связи с развитием технологий получения наноструктурных пленок особую актуальность приобретает компьютерное моделирование процессов, происходящих в них под облучением. Моделирование дает конкретные количественные оценки процессов или явлений, которые протекают в материале при его облучении, позволяет прогнозировать новые свойства, помогает существенно уменьшить затраты на физические эксперименты и способно давать рекомендации по выбору оптимальных условий или параметров того или иного опытного исследования конкретного материала.

Целью данной работы являлось создание компьютерной модели взаимодействия ионов с наноструктурными пленками и исследование поведения профилей имплантации ионов в зависимости от их угла падения.

1. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование проводилось с помощью компьютерного комплекса SPURT.CRIS [8]. Основой для создания SPURT.CRIS послужила программа SPURT.MP [9]. Программы SPURT.CRIS и SPURT.MP – это программы, реализующие методы Монте-Карло и основанные на приближении метода парных столкновений [10]. В методе Монте-Карло взаимодействие движущейся частицы с атомами материала пленки представляют как случайную последовательность парных столкновений.

Отличие программы SPURT.CRIS от SPURT.MP заключается в том, что в программе SPURT.CRIS объединены алгоритмы аморфности, слоистости и поликристалличности мишени, т. е. реализована следующая модель наноструктурной пленки: пленка состоит из нанокристаллитов, произвольно ориентированных относительно друг друга и расположенных в аморфной матрице.

При проведении расчетов в рамках данного исследования в низкоэнергетическом диапазоне энергий полагали, что толщина пленки $d = 500 \text{ \AA}$.

Общая схема моделирования физических процессов в программе SPURT.CRIS детально описана в [8], поэтому здесь лишь кратко остановимся на алгоритме моделирования профилей пространственного распределения имплантированных ионов.

Получаемые в эксперименте наноструктурные покрытия и пленки не являются просто поликристаллическими покрытиями с уменьшенными размерами зерен – их рассматривают как двухкомпонентные структуры (даже в случае одной фазы) и как смесь нанокристаллитов и границ зерен (рис. 1) [6–7].

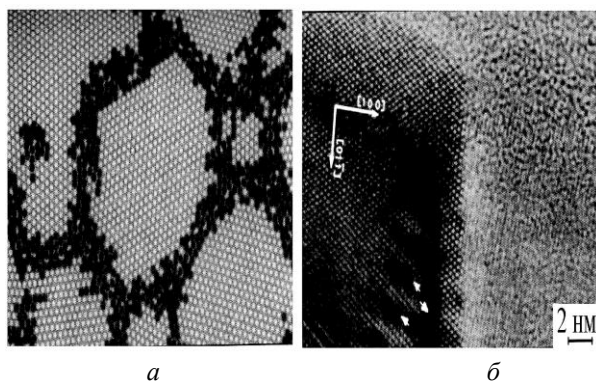


Рис. 1. Атомная модель наноструктурного материала (черным обозначены атомы зернограничной области, у которых смещение превышает 10% от межатомных расстояний) [11] (а); границы зерна в наноструктурной меди (просвечивающая электронная микроскопия) (б)

Исходя из этого, в работе для однокомпонентной мишени принята следующая модель. Наноструктурная пленка представляет собой структуру из нанокристаллитов, расположенных в аморфной матрице, состоящей из атомов того же материала (рис. 2).

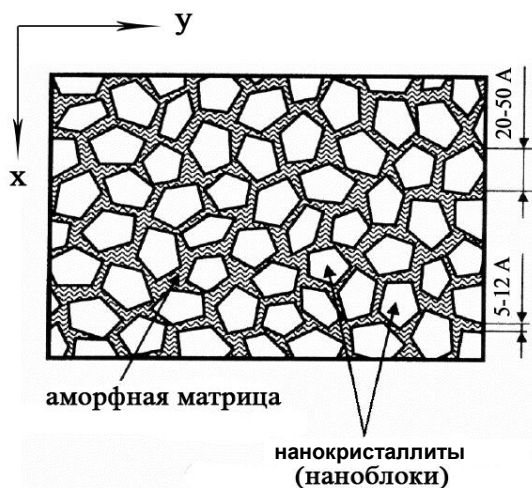


Рис. 2. Схематическое изображение принятой в работе модельной наноструктурной пленки

Геометрическая форма нанокристаллитов – правильные пятигранники. При этом максимальная длина рассматриваемого i -го пятиугольника $L_{\max}^i = R^i + r^i$, где $R^i = \sqrt{10} \times (\sqrt{5} + \sqrt{5}) \times a^i / 10$ – радиус описанной вокруг пятиугольника окружности, а $r^i = \sqrt{5} \times (\sqrt{5} + 2\sqrt{5}) \times a^i / 10$ – радиус вписанной в пятиугольник окружности; a^i – сторона i -го правильного пятиугольника. Размеры длин L^i лежат в интервале 20...50 Å, а конкретное значение L^i из этого интервала генерируется с помощью датчика случайных чисел. Зная соотношение между L^i и a^i , задаем полные геометрические параметры рассматриваемого пятигранника – нанокристаллита.

Нанокристаллические блоки произвольно ориентированы относительно друг друга. Блоки

отделены друг от друга границами зерен. Каждый наноблок представляет собой поликристаллическую структуру, т. е. состоит из множества монокристаллов. Монокристаллы, составляющие поликристаллическую структуру нанокристаллита, также произвольно ориентированы относительно друг друга. В работе для однокомпонентной модели Си-пленки для монокристалла Си принята кубическая гранецентрированная решетка с параметром решетки $a = 3,615 \text{ \AA}$.

При создании модели наноструктурной пленки использовались алгоритмы «поликристалличности» блоков и «аморфности» матрицы (границ зерен). Фактически объединены в единое целое два различных способа поиска партнера по столкновению для движущейся частицы внутри материала пленки. В зависимости от того, где в данный момент пребывает рассматриваемая частица (в наноблоке или аморфной матрице) реализуется один из двух способов поиска партнера по столкновению. Если частица движется внутри наноблока, то направление движущейся частицы по отношению к кристаллографическим осям выбирается случайным образом, т. е. изотропно в пространстве блока. Положение граничной плоскости кристалла фиксируется по отношению к направлению движущейся частицы с учетом угла падения. Каждый движущийся атом имеет свое направление в кристалле и свою граничную плоскость, однако взаимное положение вектора скорости движущего атома и нормали поверхности сохраняются.

Поликристалличность задается генерацией методом Монте-Карло трех эйлеровских углов (φ, ψ, θ) и поворота всей структуры каскадной области по отношению к кристаллографическим осям на эти углы после реализации заданного количества столкновений. Иными словами, предложенная модель метода парных столкновений в наноблоке в каждый данный момент времени «работает» с решеткой монокристалла, а для моделирования поликристалличности после некоторого отрезка траектории движущегося атома (реализуемое как заданное число столкновений) производится разворот всей каскадной области системы координат на три генерируемые случайным образом угла Эйлера.

Точно по такому же алгоритму происходит и переход от одного нанокристаллического блока к другому.

Неподвижный атом начинает свое движение, если получает энергию E , больше пороговой энергии движения E_m . Чтобы атом мог вылететь из пленки, его кинетическая энергия, угол падения на барьер должны быть таковы, чтобы преодолеть поверхностный потенциальный барьер высотой, равной поверхностной энергии связи T_s этого атома. Межъядерное пространство пленки $X > 0$ равномерно заполнено электронной средой, которая тормозит движение частиц. Движущаяся частица, теряя энергию в столкновениях с атомами и из-за торможения электронной средой, считается

остановившейся, если ее энергия станет меньше пороговой энергии остановки E_s . При моделировании процессов распыления объемная энергия связи атома E_b полагается равной нулю, а минимальная энергия начала движения атома E_m принимается равной энергии сублимации U_s . При исследовании распределения радиационных дефектов (пар Френкеля) энергия E_m выбирается равной пороговой энергии дефектообразования E_d . Если в одной задаче моделирования необходимо учитывать эти два процесса одновременно, то возникающие технические сложности, в связи с требованием использования двух различных значений для E_m , устраняются путем соответствующего выбора радиуса рекомбинации точечных дефектов R_{iv} , отвечающего значению E_d .

Считается, что мишенью для движущейся частицы может быть атом, расположенный в узле кристаллической решетки. В качестве кандидатов в возможные партнеры по столкновению рассматриваются атомы, принадлежащие той элементарной ячейке, внутри которой в данный момент находится движущаяся частица. В работе для Cu с ее кубической гранцентрированной решеткой возможных партнеров по столкновению – 12 атомов.

Если же частица в процессе своего движения в модельной наноструктурной пленке проходит область «аморфной матрицы», то очередной партнер по столкновению определяется согласно другому механизму. Для этой области используется модель пленки со стохастическим расположением атомов, подробно описанная в [12].

Ширина границ h_i зерен в принятой модели нанокристаллической пленки взяты из работы [6] и находятся в пределах 5...12 Å. Конкретное значение ширины h_i из этого интервала разыгрывается случайным образом методом Монте-Карло.

Известно, что именно высокая плотность межзеренных и межфазных границ трансформирует микрокристаллическую структуру в наноструктуру [6–7]. Исследования показали, что средняя атомная плотность границ ниже атомной плотности кристаллической решетки и составляет 70...80% последней. В настоящей работе в модели наноструктурной пленки при моделировании принято следующее соотношение: плотность аморфной матрицы составляет 80% плотности материала наноблоков.

Упругое рассеяние налетающей частицы на атомах мишени рассматривается в классическом приближении парных столкновений. Для расчета акта парного столкновения частиц используются заранее насчитанные таблицы унифицированных характеристик классического рассеяния. Значения минимального расстояния между сталкивающимися частицами r_{min} , угла рассеяния θ , интеграла времени τ предварительно рассчитываются и запоминаются программой CLASIC, являющейся статической частью комплекса SPURT.CRIS [8]. Величины r_{min} , θ , τ табулируются в виде соответствующих унифицированных двумерных таблиц классического рассеяния в зависимости от энергии налетающей

частицы и прицельного параметра. Атомное взаимодействие описывается универсальным потенциалом [8]. Между двумя актами последовательных соударений с атомами мишени свободный пробег l движущейся частицы предполагается прямолинейным, а алгоритм поиска партнера по столкновению будет определяться тем, где в данный момент находится частица: в наноблоке или «аморфной матрице» [8].

Частицы, движущиеся в наноструктурной пленке, теряют энергию при взаимодействии с электронами. В работе программы SPURT.CRIS используется смешанная модель электронных потерь энергии, основанная на процедуре, описанной в работе [13].

Частица считается остановившейся, если ее энергия становится ниже пороговой энергии остановки E_s . Неподвижный атом мишени после взаимодействия с налетающей частицей может начать свое движение, если он получит энергию больше пороговой энергии движения E_m . При исследовании распределения радиационных дефектов энергия E_m выбиралась равной пороговой энергии дефектообразования E_d . Для меди $E_d = 25$ эВ.

Выбитые из узлов атомы пленки либо отраженные падающие ионы, собирающиеся покинуть поверхность пленки, рассматриваются как кандидаты на распыление или отражение соответственно. Для вылета из пленки частица должна преодолеть плоский потенциальный барьер, расположенный параллельно поверхности пленки на высоте $H = 2 \times P_{max}$, с поверхностной энергией $E_{bar} = U_s$.

Общая схема алгоритма моделирования профилей пространственного распределения имплантированных ионов выглядит следующим образом. С помощью программы SPURT.CRIS моделируем координаты (x, y, z) имплантированных ионов Al^+ , распыленных и отраженных ионов для пары $Al^+ \rightarrow Cu$. Далее полученные массивы частиц поступают в программу CALCMULT [8], которая обрабатывает координаты (x, y, z) дефектов, распыленных и отраженных ионов, сгенерированных программой SPURT.CRIS, и формирует соответствующие профили.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

2.1. РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАСПЫЛЕНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ

В работе [1] экспериментально исследовано влияние длительности предварительной обработки поверхностных слоев медной подложки ионами титана на его микроструктуру и фазовый состав меди после облучения. Методом рентгеноструктурного анализа было установлено, что время обработки металлическими ионами (Ti^+ , Al^+ и др.) существенно влияет на изменение структурно-фазового состояния поверхности медной подложки. Наблюдаемый в эксперименте эффект образования в поверхностных слоях медной

подложки микропористой структуры при обработке металлическими ионами может быть причиной повышения адгезии и термоциклической стойкости теплозащитных покрытий. Таким образом, исследование имплантации ионов Ti^{+} , Al^{+} в медь является актуальной научно-технической задачей. В настоящей работе проведены расчеты имплантации и распыления ионов Al^{+} в медь и сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

Мы ограничились рассмотрением диапазона энергии налетающих ионов, который применяется в современных технологиях очистки поверхности материалов, т. е. используем низкоэнергетическое облучение ($0,1 \text{ кэВ} < E < 2,0 \text{ кэВ}$).

2.2. КОЭФФИЦИЕНТЫ РАСПЫЛЕНИЯ

Ионное распыление (чаще всего пучком ионов аргона с энергией $1...2 \text{ кэВ}$) позволяет проводить очистку на атомном уровне. Распыление поверхности вызывает протравливание границ зерен и выходов дислокаций на поверхность, что помогает изучению структуры материала. В этой связи знание правильного значения такого макропараметра, как коэффициент распыления S , представляется весьма важным. Кроме того, для решения задач кинетики структурообразования знание коэффициента распыления дает нужный ключ для корректного описания процессов развития в динамике каскадных процессов, протекающих в поверхностных и объемных слоях пленки или покрытия при их формировании в процессе осаждения атомно-ионных потоков.

Были выполнены компьютерные расчеты по определению значений S :

а) для пары $Ag^{+} \rightarrow Cu$ в энергетическом диапазоне $0,1...2,0 \text{ кэВ}$ при нормальном падении ионов пучка Ag^{+} ;

б) для пары $Ag^{+} \rightarrow Cu$ при фиксированной энергии падающих ионов $E = 1,05 \text{ кэВ}$, но при варьировании угла падения ионов на мишень в угловом интервале $\alpha = 0...80^{\circ}$, с целью установления угловых зависимостей коэффициентов распыления;

в) для пары $Cu^{+} \rightarrow Cu$ для определения коэффициентов самораспыления наноструктурной модельной пленки Cu в энергетическом диапазоне $0,1...1,0 \text{ кэВ}$.

Полученные результаты сравнивались с экспериментальными литературными данными по коэффициентам распыления [14–18].

Результаты моделирования в сравнении с литературными экспериментальными данными для пары $Ag^{+} \rightarrow Cu$ демонстрируются в табл. 1; для случая самораспыления Cu – табл. 2; а угловая зависимость коэффициента распыления S показана на рис. 1.

Таблица 1

Результаты моделирования по программе SPURT.CRIS и экспериментальные данные [14–15, 17–18] по коэффициентам распыления для случая облучения пленки Cu ионами Ag^{+} при нормальном падении пучка ионов в энергетическом диапазоне $0,1...2,0 \text{ кэВ}$

Энергия облучения E , кэВ	Экспериментальные данные	Результаты моделирования
0,1	0,35...0,39	0,337
0,3	1,02...1,27	1,86
0,5	1,84...2,47	3,02
0,8	2,73...3,85	4,31
1,0	3,91...4,76	4,94
1,5	4,85...5,37	6,08
2,0	5,02...6,13	6,82

Таблица 2

Результаты моделирования по программе SPURT.CRIS и экспериментальные данные [14–16] по коэффициентам самораспыления пленки Cu при нормальном падении частиц пучка на мишень в энергетическом диапазоне $0,1...1,0 \text{ кэВ}$

Энергия облучения E , кэВ	Экспериментальные данные	Результаты моделирования
0,1	0,32...0,41	0,25
0,2	0,93...1,23	1,00
0,3	1,39...1,52	1,73
0,5	2,57...2,86	3,02
0,8	3,96...4,21	4,55
1,0	4,60...4,83	5,38

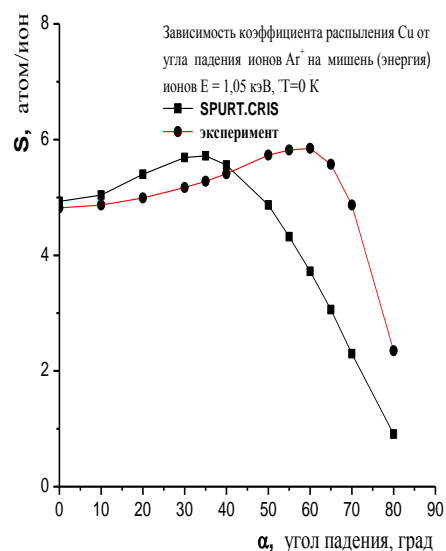


Рис. 1. Зависимости коэффициента распыления $S(\alpha)$ (при $T = 0 \text{ K}$) Cu от угла падения ионов Ag^{+} на мишень, полученные моделированием по программе SPURT.CRIS в сравнении с экспериментальными результатами из работы [17]. Энергия ионов $E = 1,05 \text{ кэВ}$

Следует лишь заметить, что в экспериментах [17] в качестве мишени была использована мелкодисперсная поликристаллическая медь.

Резюмируя приведенные выше результаты, можно сделать вывод о качественном согласии результатов моделирования с экспериментальными данными.

2.3. ПРОФИЛИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ИОНОВ Al^+ В НАНОСТРУКТУРНОЙ МЕДИ

Большое количество работ по ионной имплантации посвящено исследованию возможности повышения коррозионной стойкости металлов, так как процесс коррозии – поверхностное явление, а ионная имплантация представляет собой уникальный способ модификации поверхности без изменения объемных свойств металлов. В результате имплантации в поверхностных слоях может быть получена высокая концентрация вводимых атомов. Но при этом в этих же слоях образуется большое число вакансий и межузельных атомов. Эти два накладывающихся друг на друга процесса оказывают существенное влияние на электрофизические, физико-химические, физико-механические, магнитные свойства металлов.

Компьютерное моделирование с использованием комплекса SPURT.CRIS позволяет получать профили пространственного распределения имплантированных ионов, давать им количественную оценку, определять толщину модифицированного слоя и др. На рис. 2 показаны начальные профили распределения имплантированных ионов Al^+ в Cu при различных углах падения α .

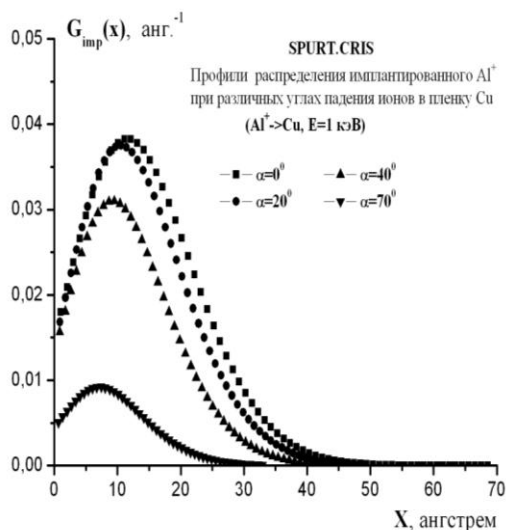


Рис. 2. Профили распределения $G_{imp}(x)$ имплантированных ионов Al^+ в Cu, полученные моделированием по программе SPURT.CRIS. Энергия ионов $E = 1$ кэВ, углы падения ионов на мишень $\alpha = 0...70^\circ$

Рис. 2 демонстрирует влияние угла падения потока падающих на модельную пленку Cu ионов Al^+ . С увеличением угла α профили «прижимаются к поверхности», а значения максимумов профилей

уменьшаются и также сдвигаются к поверхности, что является прямым следствием все возрастающего (с увеличением α) потока отраженных ионов (рис. 3) в общем потоке падающих частиц.

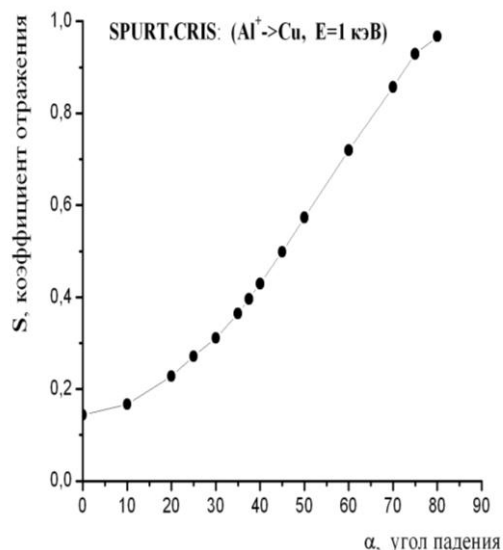


Рис. 3. Зависимость коэффициентов отражения ионов Al^+ от их угла падения на пленку Cu. Моделирование по программе SPURT.CRIS. Энергия ионов $E = 1$ кэВ

Детализация рис. 2 показывает, что начальная максимальная концентрация имплантированных ионов Al^+ достигается при углах облучения $\alpha = 0...15^\circ$ и на глубине $\delta_{max} \sim 10...20 \text{ \AA}$ от поверхности материала пленки.

На рис. 4 показана начальная максимальная глубина обнаружения (залегания) δ_{max} имплантированного Al^+ в зависимости от угла падения ионов на пленку Cu.

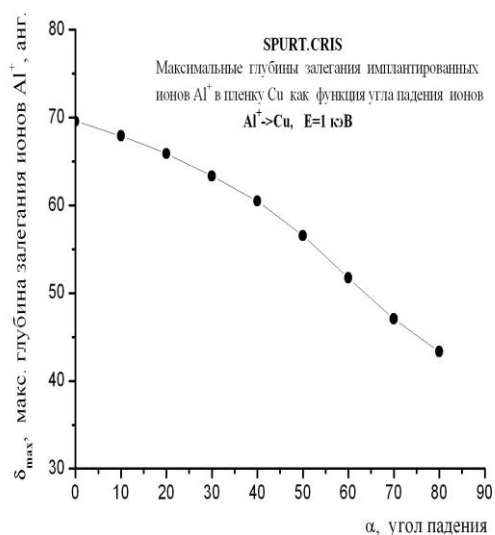


Рис. 4. Максимальная глубина δ_{max} залегания ионов Al^+ в пленку Cu в зависимости от угла падения ионов. Моделирование по программе SPURT.CRIS. Энергия ионов $E = 1$ кэВ, углы падения $\alpha = 0...80^\circ$

Наблюдается относительно небольшое (примерно 1,6 раза) уменьшение проникающей способности имплантированного Al^+ при

увеличении угла падения α : от $\sim 70^\circ$ (при $\alpha = 0^\circ$) и до $\sim 45^\circ$ (при $\alpha = 80^\circ$). Это может являться причиной (в некоторых задачах) относительного снижения требований в реальном эксперименте к угловой расходимости потока ионов, падающих на поверхность изделия, что является важным фактором при обработке поверхности изделий с достаточно сложной геометрией.

ВЫВОДЫ

В работе создана компьютерная программа взаимодействия ионов с наноструктурными пленками. Проведены компьютерные расчеты по исследованию зависимости начальных пространственных распределений имплантированного Al^+ в наноструктурную пленку меди от их угла падения на пленку. Показано что, концентрацию можно целенаправленно регулировать путем варьирования угла падения ионов пучка.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. М.П. Калашников, В.В. Нейфельд, В.П. Сергеев, М.В. Федорищева. Изменение структурно-фазового состояния поверхностного слоя медной подложки при бомбардировке ионами титана // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2014, т. 78, №8, с. 937-939.
2. А.В. Панин, А.Р. Шугуров, М.С. Казаченок, В.П. Сергеев. Влияние наноструктурирования подложки Cu на разрушение теплозащитных покрытий Si-Al-N при одноосном растяжении // *Журнал технической физики*. 2012, т. 82, в. 6, с. 44-47.
3. А.Д. Погребняк, А.П. Шпак, Н.А. Азаренков, В.М. Береснев. Структура и свойства твердых и сверхтвердых нанокompозитных покрытий // *Успехи физических наук*. 2009, т. 179, №1, с. 1-29.
4. Н.А. Азаренков, В.Н. Воеводин, В.Г. Кириченко, Г.П. Ковтун. Наноструктурные материалы в ядерной энергетике // *Вісник Харківського університету. Серія «Ядра, частинки, поля»*. 2010, №887, в. 1(45), с. 4-24.
5. А.А. Андреев, Л.П. Саблев, С.Н. Григорьев. *Вакуумно-дуговые покрытия*. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2010, 317 с.
6. Е. Шейман. Сверхтвердые покрытия из нанокompозитов. Обзор зарубежной литературы // *Материаловедение и термическая обработка металлов*. 2008, №12(642), с. 41-47.
7. Е.Н. Решетняк, В.Е. Стрельницкий. Синтез упрочняющих наноструктурных покрытий // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2008, №2, с. 119-130.
8. В.И. Павленко, С.Н. Слепцов, Л.А. Ферлий. *Программа SPURT.CRIS: Модель наноструктурной пленки. Математическое моделирование: Препринт ХФТИ 2013-3*. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2013, 39 с.
9. И.Г. Марченко, В.И. Павленко. *Программа SPURT.MP: моделирование процессов взаимодействия ионов с многокомпонентной мишенью: Препринт ХФТИ 2006-3*. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2006, 36 с.
10. I. Beeler, M. Beeler. *Computer experiment studies on mechanisms for irradiation induced defect production and annealing processes*. North Carolina State University, Raleigh (USA), ORO-3912-101-112. 1979, p. 588.
11. T. Mutschele, R. Kirchheim. Hydrogen as probe for the average thickness of a grain boundary // *Scripta Metal*. 1987, v. 21, p. 1101.
12. *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой*. В. I / Под ред. Бериша Р. М.: «Мир», 1984, 336 с.
13. O. Oen, M. Robinson. Computer studies of the reflection of light ions from solid // *Nucl. Instr. and Meth*. 1976. v. 132. p. 647-653.
14. I. Baranov, S. Della-Negra, V. Domaratsky, A. Chemesov, N. Kirillov, A. Novikov, V. Obnorsky, M. Pautrat, H. Urbassek, K. Wien, S. Yarmiychuk, E. Zhurkin. Ejection of nanoclusters from gold nanoisland layers by 38 keV Au ions in the elastic stopping mode // *Proc. of the International Meeting on Developments in Materials, Processes and Applications of Nanotechnology. 2007. "MPA 2007"*. University of Ulster. Belfast. UK, 2007, p. 2042.
15. Е.Е. Журкин. Исследование распыления нанокластеров золота при бомбардировке ионами Au с энергией 38 кэВ методом классической молекулярной динамики. // *Тезисы докладов XXXVII Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами* (Москва, 29–31 мая 2007 г.) / Под ред. проф. А.Ф. Тулинова. М.: Изд-во МГУ, 2007, с. 88.
16. P. Hucks, G. Stocklin, E. Vietzke, K. Vogelbruch. Energy and angular distribution of gold and copper atoms sputtered with H+, He+ and Ar+ // *J. of Nucl. Mat*. 1978. v. 76-77, p. 136-149.
17. И. Амиров, М. Изюмов, В. Наумов. Селективное низкоэнергетическое распыление пленок металлов в плотной аргоновой плазме // *Труды XX Международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью»*. (Звенигород, Россия, 25–29 августа 2011).
18. В. Авилкова, Н. Андрианова, Е. Машкова. Методы и результаты расчетов радиационных нарушений в учетов распыления на поверхности // *Труды XX Международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью»*. (Звенигород, Россия, 25–29 августа 2011).

Статья поступила в редакцию 19.07.2017 г.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОФІЛЕЙ ІМПЛАНТОВАНИХ ІОНОВ Al^+ В НАНОСТРУКТУРНУ ПЛІВКУ Cu

V.I. Pavlenko, I.G. Marchenko

Методами математичного моделювання досліджені залежності профілів просторового розподілу імплантованих іонів від їх кута падіння на наноструктурні плівки. Побудована комп'ютерна модель взаємодії іонів з наноструктурними плівками і проведені розрахунки імплантації іонів Al^+ в мідну плівку. Енергія падаючих іонів дорівнювала 1 кеВ, а кут падіння α змінювався в інтервалі $0 \dots 80^\circ$. Показано, що при іонній обробці поверхні наноструктурних матеріалів існує інтервал значення кутів, при яких досягається максимальна концентрація іонів в опромінюваній плівці.

COMPUTER SIMULATION OF PROFILES OF IMPLANTED IONS OF Al^+ INTO NANOSTRUCTURED FILM Cu

V.I. Pavlenko, I.G. Marchenko

In the work by methods of mathematical modeling, the dependences of the profiles of the spatial distribution of implanted ions on their angle of incidence on nanostructured films were studied. A computer model for the interaction of ions with nanostructured films was constructed and calculations were made for the implantation of Al^+ ions into a copper film. The energy of the incident ions was 1 keV and the angle of incidence α varied in the range from 0 to 80° . It is shown that when ion surface treatment of nanostructured materials there is an interval of angles at which the maximum ion concentration in the irradiated film is reached.