

# ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАВИСИМОСТИ ПРОФИЛЕЙ ПЕРВИЧНОГО ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ИОНОВ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОБЛУЧЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ ИОНАМИ $Al^+$

*В.И. Павленко, С.Н. Слепцов, В.И. Сафонов*

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

*E-mail: pavlenko@kipt.kharkov.ua; v\_safonov@kipt.kharkov.ua; glss@kipt.kharkov.ua*

Методом математического моделирования, с использованием программных комплексов SPURT.MP и CALCMULT, исследована эволюция пространственного распределения имплантированных ионов и радиационных точечных дефектов по глубине Cu-мишени при облучении последней ионами  $Al^+$  с различными углами падения. Энергия ионов  $Al^+$  выбрана равной величине 1 кэВ, угол падения изменялся в интервале от 0 до 80°. Проведено сравнение расчетных профилей с результатами моделирования по программе SRIM2006 и с экспериментальными данными. Установлена корреляция изменения профилей распределения точечных дефектов и имплантированных частиц по глубине мишени в зависимости от угла падения ионов. В зависимости от угла падения ионов определены максимальные глубины и максимумы профилей залегания имплантированных ионов, межузельных атомов и вакансий. Даны качественный и количественный анализы приповерхностных обедненных зон, образующихся в результате развития каскадов смещений в мишени. Показано, что для различных углов падения ионов на поверхность мишени существуют определенные значения углов, при которых достигается максимальная концентрация имплантированных ионов и других точечных дефектов в облучаемом материале, что позволяет эффективно проводить процесс формирования поверхностных слоев материала с наперед заданными свойствами.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Получение поверхностных слоев материалов с наперед заданными физико-химическими, электрофизическими, физико-механическими и магнитными свойствами является проблемой исключительной практической значимости. В настоящее время для решения этой задачи интенсивно используются радиационные технологии, в которых поверхность исходного материала подвергается облучению потоками частиц [1].

Низкотемпературное и низкоэнергетичное атомно-ионное облучение поверхности позволяет избежать деградации объемных свойств материалов, что делает это направление особенно востребованным в современных технологиях. Наличие внешних параметров, таких как температура осаждения на подложку, энергия падающих атомов и ионов, их угол падения на поверхность, степень ионизации, ионный и химический составы потока частиц, позволяет эффективно управлять изменением и формированием поверхностных свойств материалов.

При бомбардировке атомно-ионных потоков поверхности (в диапазоне кинетических энергий от десятков электронвольт до десятков и сотен килоэлектронвольт) в материале мишени и на его поверхности происходит сложная и длинная цепочка взаимосвязанных физических процессов. В первую очередь, это процессы поверхностной атомной аккомодации, имплантации падающих ионов или их отражение от поверхности, распыление поверхности материала, развитие каскадов атом-атомных столкновений, создание точечных дефектов и их скоплений, формирование дислокационных петель, вакан-

сионных пор и т.д., объемная и поверхностная диффузия, макроскопические процессы набухания, охрупчивания и т.п.

Экспериментальное изучение каждого отдельно взятого из этой цепочки процесса наталкивается на значительные трудности в связи с их быстротечностью и маскировкой другими процессами, которые являются их ближайшим или отдаленным следствием. В этой ситуации мощным направлением в исследовании таких сложных процессов является метод математического моделирования как отдельно взятых вышеперечисленных процессов, так и в целом всего явления взаимодействия потоков частиц с твердым телом.

В настоящее время утвердилась определенная классификация работ по компьютерному моделированию, отражающая иерархию физических процессов радиационного повреждения: от первого уровня моделирования – первичного процесса взаимодействия ионов с поверхностью мишени и процессов образования первично выбитых атомов, до верхних уровней – моделирование и исследование макроскопических эффектов.

Создание взаимосвязанных программных комплексов многоуровневого моделирования процессов, происходящих в поверхностных слоях облучаемой мишени, позволяет обнаружить новые физические закономерности в сложных неравновесных системах, что, в свою очередь, закладывает предпосылки для научного прогнозирования изменения свойств поверхности под воздействием атомно-ионных потоков с помощью компьютерных моделей. Решение этой задачи позволило бы перейти к

методам предварительного компьютерного моделирования с выдачей практических рекомендаций в виде возможных значений (или их интервалов) оптимальных параметров и характеристик для нужд практической технологии изготовления изделий и покрытий с теми или иными свойствами. К тому же компьютерное моделирование позволяет экономить время и средства реального физического эксперимента.

Компьютерное моделирование процессов первичного дефектообразования при низкотемпературном ( $T \sim 293 \text{ K}$ ) и низкоэнергетичном ( $E < 3 \text{ кэВ}$ ) атомно-ионном воздействии на поверхность исследуемого материала является базовой основой для создания программных комплексов многоуровневого моделирования процессов, происходящих в поверхностных слоях материалов мишени. Это обусловлено тем, что моделирование процессов первичного дефектообразования дает обширную информацию о первоначальных профилях распределения точечных дефектов и их концентрациях на разных глубинах мишени, которая, в свою очередь, служит исходным материалом для радиационно-диффузионных моделей [2], моделей формирования напряжений сжатия в тонких пленках [3] и других макроскопических теорий, описывающих и моделирующих процессы кинетики структурообразования и модификации поверхности при ионном облучении.

Целью данной работы являлось получение методом математического моделирования профилей пространственного распределения вакансий, собственных межузельных атомов мишени и имплантированных ионов, и исследование их поведения в зависимости от угла падения ионов на мишень, а также определение оптимальных значений углов падения, при которых достигается максимальная концентрация первичных дефектов в облучаемом материале.

Расчеты проведены с использованием программных комплексов SPURT.MP [4] и CALCMULT [5] на примере облучения ионами  $\text{Al}^+$  с энергией  $E=1 \text{ кэВ}$  мишени из  $\text{Cu}$  при углах падения пучка ионов  $\alpha=0 \dots 80^\circ$ .

## 2. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ И ТЕСТОВЫЕ ПРИМЕРЫ

Процесс получения профилей первичного дефектообразования можно представить следующим образом. На первом этапе, с помощью программы математического моделирования методом Монте-Карло SPURT.MP, получаем координаты ( $x, y, z$ ) вакансий, собственных межузельных атомов мишени, имплантированных частиц, распыленных атомов и отраженных ионов для пары  $\text{Al}^+ \rightarrow \text{Cu}$ . На втором этапе полученные массивы данных поступают в программу CALCMULT, которая обрабатывает координаты точечных дефектов, генерируемых программой SPURT.MP и формирует соответствующие профили распределения имплантированных ионов, межузельных атомов и вакансий.

Детальное описание программы SPURT.MP представлено в работе [4], а программы CALCMULT – в работе [5].

Кратко опишем основные физические положения программ и основные физические параметры, использованные в данных вычислениях.

Программа SPURT.MP основана на парном столкновении иона с первоначально покоящимся атомом мишени. При проведении расчетов облучаемый образец толщиной  $x=500 \text{ \AA}$  аппроксимируется однородной аморфной мишенью с плотностью  $\rho_0$ , при этом атомы мишени распределены в пространстве подобно изотропному распределению ядер атомов «замороженного» атомарного газа. 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  $\theta$ , интеграла времени  $\tau$  предварительно рассчитываются и запоминаются программой CLASIC, являющейся статической частью комплекса SPURT.MP [4]. Величины  $r_{\min}$ ,  $\theta$ ,  $\tau$  табулируются в виде соответствующих унифицированных двумерных таблиц классического рассеяния в зависимости от энергии налетающей частицы и прицельного параметра. Атомное взаимодействие описывается универсальным потенциалом [4]. Между двумя актами последовательных соударений с атомами мишени свободный пробег  $L$  движущейся частицы предполагается прямолинейным и определяется как  $L = \sqrt[3]{V}$ , где  $V$  – средний объем, приходящийся на один атом мишени. Движущаяся частица сталкивается с атомами с прицельным параметром  $P$ , который разыгрывается случайным образом в диапазоне значений  $[0, 0.5 \times L]$ . Соотношение между поперечным сечением и длиной свободного пробега  $L$  задается соотношением вида

$$\pi \times P_{\max}^2 \times L = V, \quad (1)$$

где  $P_{\max}$  – максимальный прицельный параметр.

Электронные потери энергии движущейся частицы сбрасываются по нелокальному механизму потерь энергии [4]. Неупругие потери энергии между двумя соударениями рассчитываются по формуле:

$$\Delta E_e = L \times N \times S_e(E), \quad (2)$$

где  $N$  – атомная плотность мишени в атомах на сантиметр кубический, а  $S_e(E)$  – сечение электронных потерь, рассчитываемое по процедуре, описанной в работе [6].

Частица считается остановившейся, если ее энергия станет 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  $E_m$ . В данных расчетах при моделировании считалось, что объемная энергия связи атома  $E_b$  равна нулю, а минимальная энергия начала движения частицы  $E_m$  полагалась равной энергии

сублимации  $U_s$ . 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 мишени либо отраженные падающие ионы, собирающиеся покинуть поверхность мишени, рассматриваются как кандидаты на распыление или отражение соответственно. Для вылета из мишени частица должна преодолеть параллельный потенциальный барьер, расположенный параллельно поверхности мишени на высоте  $h=2 \times R_{max}$ , с поверхностной энергией  $E_{bar}=U_s$ .

Если вылетающая частица подходит к потенциальному барьеру с энергией  $E_0$  под углом  $\beta$ , отсчитываемым от нормали к поверхности мишени, то после прохождения барьера ее энергия и направленные движения становятся

$$E = E_0 - E_s, \quad (3)$$

$$\beta = \arccos \sqrt{\frac{E_0 \cos^2 \beta - E_s}{E}}. \quad (4)$$

Частицы с энергиями  $E_0 < E_s (\cos \beta)^{-2}$ , преломляясь на барьере, отражаются обратно на поверхность мишени. Такие частицы осаждаются в поверхностном слое и эффективно рекомбинируют с вакансиями. При  $E_0 > E_s (\cos \beta_0)^{-2}$  вылетающая частица покидает поверхность мишени и считается распыленным атомом или отраженным первичным ионом.

При моделировании не принимаются в расчет случаи, вызванные «нелинейными» каскадными эффектами, т.е. во время облучения мишени считаем, что перекрытие каскадных областей, инициированных первично выбитыми атомами, не происходит, а реализуется так называемый «режим линейных каскадов» [7].

Основные численные значения указанных выше физических соотношений, величин и параметров, используемых в программе SPURT.MP, приведены в табл. 1.

Таблица 1  
Значения параметров, используемых при моделировании по программе SPURT.MP при облучении Cu ионами  $Al^+$

Параметры	Программа моделирования SPURT.MP
Толщина мишени, $x$	500 Å
Энергия сублимации, $U_s$	3,52 эВ
Объемная энергия связи, $E_b$	0,00 эВ
Энергия остановки, $E_s$	4,00 эВ
Энергия потенциального барьера, $E_{bar}$	3,52 эВ
Пороговая энергия движения, $E_d$	25,0 эВ
Плотность мишени, $\rho_0$	8,92 г/см <sup>3</sup>
Угол падения ионов на мишень, $\alpha$	0...80°
Длина свободного пробега частицы между столкновениями, $L$	2,28 Å
Максимальный прицельный параметр, $R_{max}$	1,29 Å

Компьютерное моделирование является методом теоретического исследования, а соответствующие прикладные программы есть функциональное изложение представлений исследователя об изучаемом процессе. Следовательно, возникает вопрос - насколько эти представления соответствуют действительности. Ответ дает тестирование программы-модели. Ее цель – установление непротиворечивости модели существующим представлениям об описываемом явлении или процессе.

Если результаты тестирования удовлетворительны, то появляется возможность:

— непосредственно осуществлять компьютерный эксперимент (основываясь на заложенных физических моделях) и отслеживать те или иные физические процессы и явления в целом или по частям, происходящие на поверхности и в объеме материала в процессе облучения, оперативно сравнивая результаты с реальным экспериментом;

— выполнять исследования там, где экспериментальных данных еще нет, тем самым способствуя дальнейшему развитию и углублению наших пониманий сути изучаемых процессов.

Были проведены многочисленные тестовые расчеты с целью сравнения результатов моделирования по программам SPURT.MP и CALCMULT с результатами аналогичных расчетов, выполненных с использованием программного кода SRIM2006 [8] и экспериментальными данными, полученными авторами работы [9].

В качестве примера на рис. 1-2 приведены результаты тестирования на примере облучения ионами  $Al^+$  с энергией  $E=2,7$  кэВ мишени из меди падения пучка ионов  $\alpha=0^0$ . Показаны первоначальные (в отсутствие процессов диффузии) распределения имплантированных ионов алюминия  $G_{imp}(x)$  и вакансий  $G_v(x)$ , полученных по программам SPURT.MP, CALCMULT и SRIM2006.

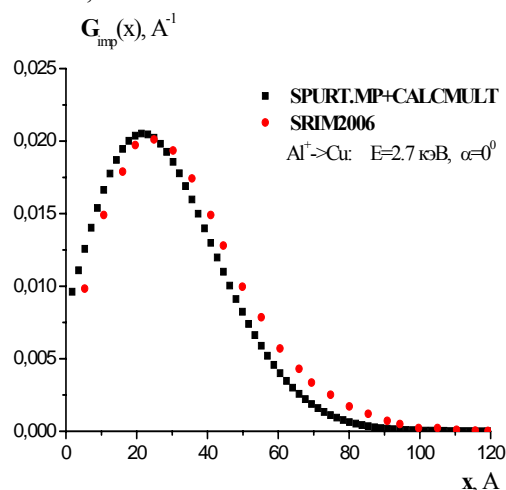


Рис. 1. Первоначальные распределения имплантированных ионов  $G_{imp}(x)$  при облучении мишени из меди ионами  $Al^+$  с энергией  $E=2,7$  кэВ и углом падения ионов  $\alpha=0^0$ , полученные по программам SPURT.MP, CALCMULT и SRIM2006

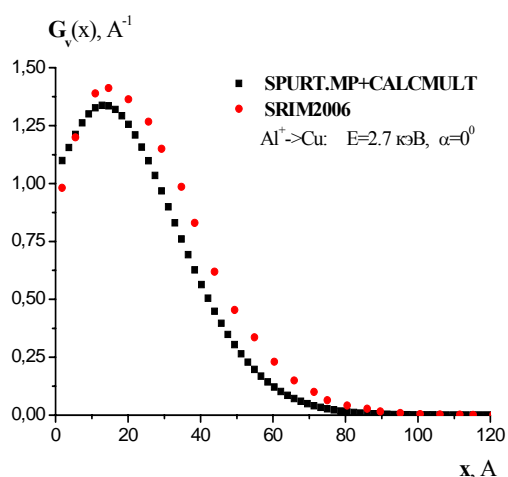


Рис. 2. Первоначальные распределения вакансий  $G_v(x)$  при облучении меди ионами  $Al^+$  с энергией  $E=2,7$  кэВ и углом падения ионов  $\alpha=0^\circ$ , полученные по программам SPURT.MP, CALCMULT и SRIM2006

В табл. 2 приведены результаты расчетов концентраций  $Al^+$ , имплантированного в медь, выполненных по программам SPURT.MP и CALCMULT на заданной глубине мишени, в диапазоне кинетических энергий падающего потока ионов  $1...2,7$  кэВ при угле падения  $\alpha=0^\circ$ , в сравнении с экспериментальными значениями, полученными авторами работы [9]. Концентрация алюминия во всех выбранных примерах соответствует глубине  $\sim 42...45$  Å от поверхности мишени.

Таблица 2

Концентрации  $Al^+$  на глубине  $\sim 42...45$  Å, полученные с помощью компьютерного моделирования в сравнении с экспериментальными результатами [9]

Энергия облучения, кэВ	SPURT.MP+CALCMULT: концентрация Al, ат. %	Эксперимент: концентрация Al, ат. %
1,0	10,14	9,3
1,2	12,31	9,8
1,5	17,37	11,5
2,7	13,45	10,0

Сравнительный анализ представленных выше концентраций имплантированного алюминия на заданной глубине, полученных из эксперимента [9] и рассчитанных по программам SPURT.MP и CALCMULT, демонстрирует качественное согласие. Расхождение экспериментальных и расчетных значений концентраций в основном может быть объяснено отсутствием учета диффузионных процессов при моделировании.

Кратко оценивая результаты тестовых расчетов (см. рис. 1,2 и табл. 2), можно констатировать факт – предложенные алгоритмы и модели получения первоначальных (мгновенных) распределений точечных радиационных дефектов по программам SPURT.MP и CALCMULT приводят к результатам, которые согласуются с современными представлениями о данном процессе и вполне могут быть использованы для дальнейших исследований.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

#### 3.1. ПРОФИЛИ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

Детальная информация о распределении имплантированных в металлы частиц призвана скорректировать некоторые положения и параметры теории, например, такие как средний проективный пробег частиц в металлах, характер разброса этой величины во взаимосвязи с составом металла, типом и концентрацией присутствующих в нем примесей и т.п.

С другой стороны, с точки зрения экспериментальной науки, ионная имплантация является одним из наиболее перспективных методов поверхностной обработки материалов [1]. С ее помощью можно улучшить такие характеристики металлов, как твердость, износостойкость, предел усталостной прочности и др. 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.

Методы компьютерного моделирования позволяют глубже понять и осмыслить физические процессы, происходящие в поверхностных слоях материала под воздействием ионного облучения.

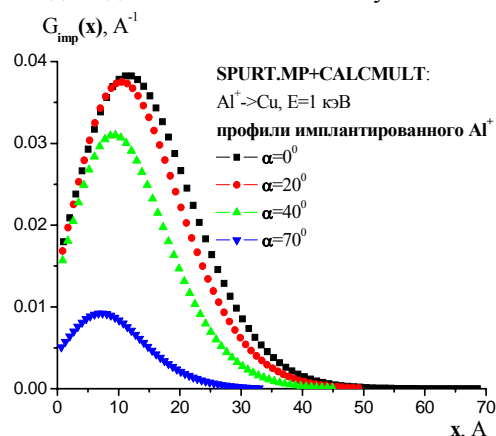


Рис. 3. Профили распределения имплантированных ионов алюминия  $G_{imp}(x)$  при облучении медной мишени ионами  $Al^+$  с энергией  $E=1,0$  кэВ при различных углах падения ионов  $\alpha=0...70^\circ$ , полученные по программам SPURT.MP и CALCMULT

Комплекс программ SPURT.MP и CALCMULT позволяет непосредственно в результате моделирования получать профили имплантированных ионов, давать им количественную оценку, определять толщину модифицированного слоя и др. На рис. 3 пока-

заны профили распределения имплантированных ионов  $Al^+$  в меди при различных углах падения  $\alpha$ .

Этот рисунок наглядно демонстрирует влияние угла падения потока падающих на мишень частиц. Видно, что с увеличением угла  $\alpha$  профили «прижимаются к поверхности», а значения максимумов профилей уменьшаются (рис. 4) и также сдвигаются к поверхности (рис. 5), что является прямым следствием все возрастающего (с увеличением  $\alpha$ ) потока отраженных ионов (рис. 6) в общем потоке падающих частиц. Кроме того, из рис. 4-5 следует, что максимальная концентрация имплантированных ионов  $Al^+$  достигается при угле облучения  $\alpha=10^\circ$  на глубине 11,01 Å от поверхности материала мишени.

Таким образом, при ионной обработке поверхности для пары  $Al^+ \rightarrow Cu$  оптимальное значение угла облучения мишени, при котором достигается максимальная концентрация имплантированных ионов, соответствует  $\alpha=10^\circ$ .

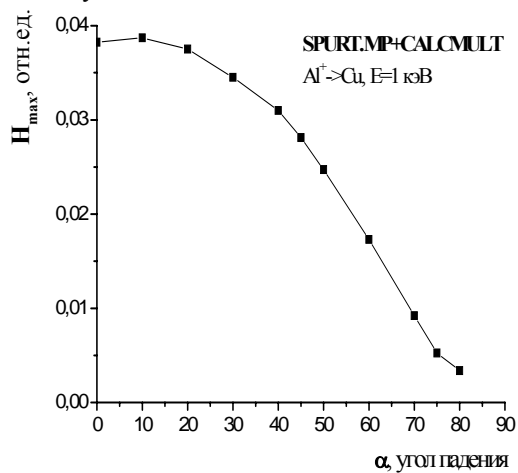


Рис. 4. Зависимость значений максимумов (в относительных единицах) профилей ионов алюминия от их угла падения на мишень при моделировании облучения меди ионами  $Al^+$  с энергией  $E=1,0$  кэВ, полученная по программам SPURT.MP и CALCMULT

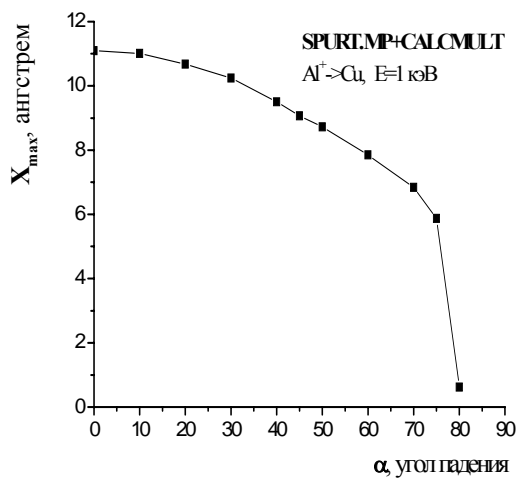


Рис. 5. Зависимость положений максимумов профилей ионов алюминия (относительно поверхности) от их угла падения на мишень, полученная по программам SPURT.MP и CALCMULT

На рис. 7 показаны максимальные глубины внедрения  $\delta_{max}$  имплантированного  $Al^+$  в зависимости от угла падения ионов на мишень.

Наблюдается относительно небольшое (~ в 1,6 раза) уменьшение проникающей способности имплантированного  $Al^+$  при увеличении угла падения  $\alpha$  от 69,59 (при  $\alpha=0^\circ$ ) и до 43,34 Å (при  $\alpha=80^\circ$ ). Это может являться причиной 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.

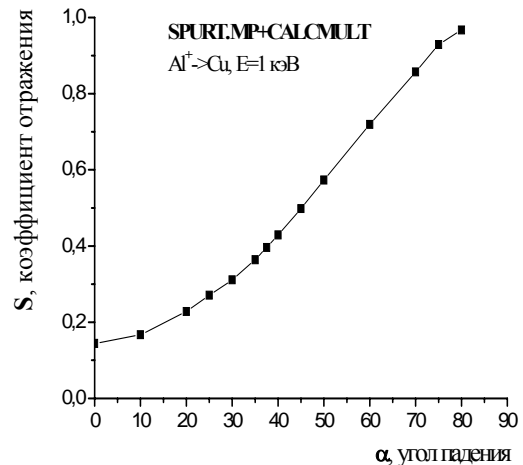


Рис. 6. Зависимость коэффициента отражения  $S$  ионов алюминия от их угла падения на медь, полученная по программам SPURT.MP и CALCMULT

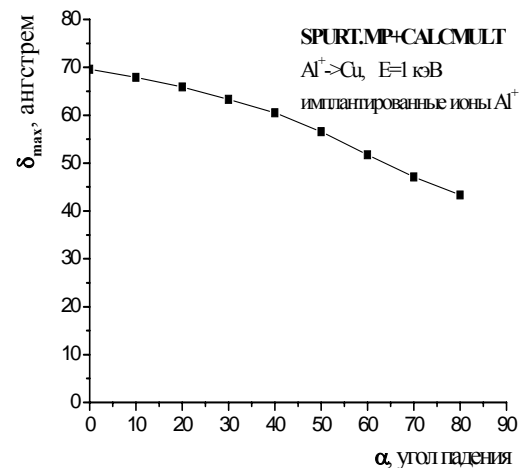


Рис. 7. Зависимость максимальной глубины проникновения ионов алюминия от угла их падения на мишень при моделировании облучения мишени из меди ионами  $Al^+$  с энергией  $E=1,0$  кэВ, полученная по программам SPURT.MP и CALCMULT

Таким образом, компьютерные расчеты по исследованию зависимости распределений имплантированного в медь  $Al^+$  от их угла падения на мишень, демонстрируют условия и параметры, при которых можно добиться требуемой концентрации вводимой

го имплантата на нужной глубине. И ее (концентрацию) можно целенаправленно регулировать путем варьирования угла падения ионов пучка.

### 3.2. ПРОФИЛИ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ И ВАКАНСИЙ

Предложенная в данной статье физическая модель и методика моделирования, включающая совместное использование программных комплексов SPURT.MP и CALCMULT, позволяет получать и детально исследовать (в зависимости от угла падения  $\alpha$  ионов на мишень) следующие важные следствия ионного облучения:

- профили распределения собственных межузельных атомов мишени и вакансий;
- разностный спектр профилей распределения собственных межузельных атомов и вакансий;
- количественные характеристики обедненных зон, образующихся в результате развития каскадов ионно-атомных и атом-атомных столкновений.

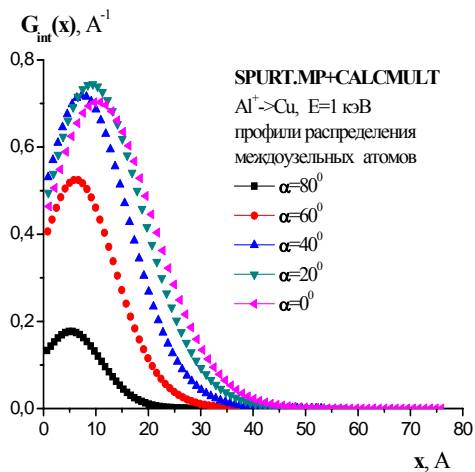


Рис. 8. Профили распределения собственных межузельных атомов меди  $G_{int}(x)$  при облучении медной мишени ионами  $Al^+$  с энергией  $E=1,0$  кэВ при различных углах падения ионов ( $\alpha=0...80^\circ$ ), полученные по программам SPURT.MP и CALCMULT

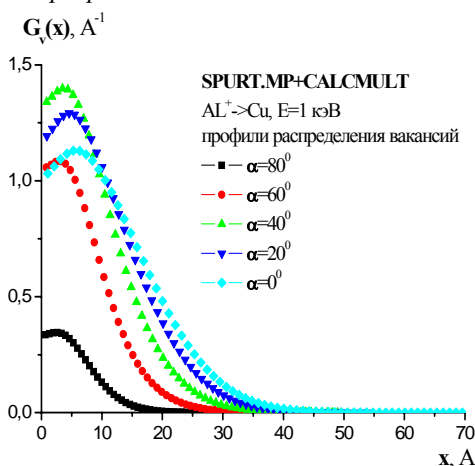


Рис. 9. Профили распределения вакансий  $G_v(x)$  при облучении медной мишени ионами  $Al^+$  с энергией  $E=1,0$  кэВ при различных углах падения ионов ( $\alpha=0...80^\circ$ ), полученные по программам SPURT.MP и CALCMULT

На рис. 8 показаны профили распределения собственных межузельных атомов Cu, а на рис. 9 – профили распределения вакансий при различных углах падения  $\alpha$  ионов  $Al^+$ , бомбардирующих мишень из меди с энергией 1,0 кэВ.

Видно, что с увеличением угла облучения  $\alpha$  мишени в целом наблюдается тенденция к уменьшению значений профилей распределения как по концентрации дефектов на заданной глубине, так и по глубине проникновения точечных дефектов в глубь мишени. Следует лишь отметить, что максимальное значение концентрации собственных межузельных атомов, при исследованных углах падения,  $G_{int}^{max}(x)=0,744$  отн.ед. достигается при  $\alpha=20^\circ$  на глубине  $\sim 9,4$  Å. В то же время максимальные значения концентраций вакансий в исследованном диапазоне углов достигаются при двух углах облучения мишени:  $G_v^{max}(x)=1,29$  отн.ед. при  $\alpha=20^\circ$  (на глубине  $\sim 4,57$  Å) и  $G_v^{max}(x)=1,4$  отн.ед. при  $\alpha=40^\circ$  (на глубине  $\sim 3,5$  Å). Максимальная глубина  $\delta_{max}$ , где еще можно «наблюдать» вакансии и собственные межузельные атомы, т.е. глубина модифицированного слоя, достигается при нормальном ( $\alpha=0^\circ$ ) падении ионов на мишень. В рамках данных исследований, в случае  $\alpha=0^\circ$ , величина  $\delta_{max}$  составляет 74,85 Å – для собственных межузельных атомов и 72,74 Å – для вакансий (рис. 10).

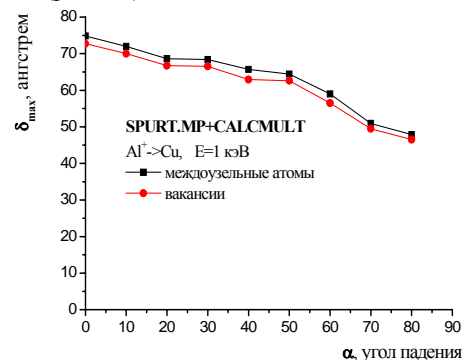


Рис. 10. Зависимость максимальных глубин залегания собственных межузельных атомов Cu и вакансий от угла падения ионов  $Al^+$  на мишень, полученная по программам SPURT.MP и CALCMULT

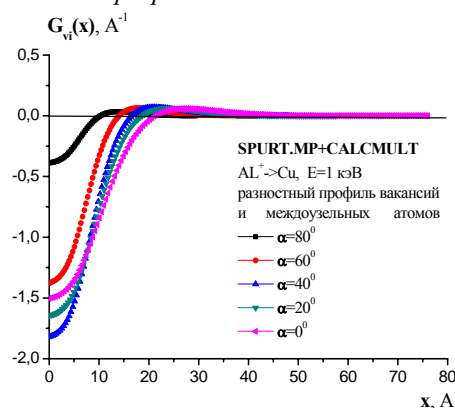


Рис. 11. Распределение разностного профиля  $G_{vl}(x)$  вакансий и межузельных атомов при облучении меди ионами  $Al^+$  с энергией  $E=1,0$  кэВ при различных углах падения ионов ( $\alpha=0...80^\circ$ )

Рис. 11 демонстрирует разностные профили (при различных углах облучения мишени  $\alpha$ ) распределения вакансий и собственных межузельных атомов  $G_{vi}(x)=G_v(x)-G_i(x)$  в случае прохождения ионов  $Al^+$  с энергией 1 кэВ внутри медной мишени.

Детальный анализ последнего графика позволяет увидеть, а также качественно и количественно описать следующую закономерность: распределение точечных дефектов  $G_{vi}(x)$  по глубине мишени имеет две ярко выраженные различные области повреждения (см. увеличенный масштаб на рис. 12): вблизи поверхности мишени  $G_{vi}<0$ , что связано с обогащением поверхностных слоев вакансиями за счет активно идущих процессов распыления, а также прямого выбивания атомов в более глубокие слои мишени; в более глубоких слоях мишени (начиная с  $x=10,39 \text{ \AA}$  для  $\alpha=80^\circ$  и заканчивая  $x=21,53 \text{ \AA}$  для  $\alpha=0^\circ$ )  $G_{vi}>0$ , что указывает на преимущественное залегание в этой области собственных межузельных атомов меди.

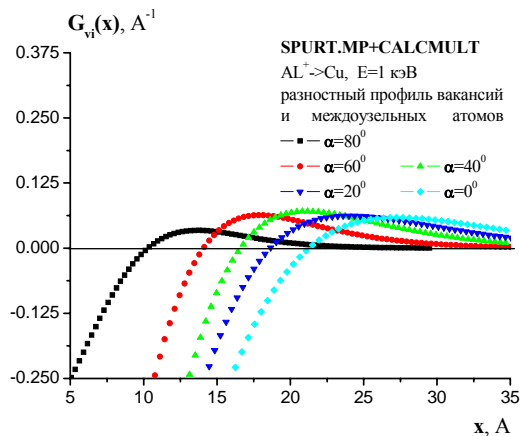


Рис. 12. Фрагмент из распределения разностного профиля  $G_{vi}(x)$  вакансий и собственных межузельных атомов

Из рис. 12 видно, что с уменьшением угла  $\alpha$  (от  $\alpha_1=80^\circ$  до  $\alpha_5=0^\circ$ ) увеличивается величина обедненной зоны  $\lambda_{max}$ .  $\lambda_{max}$  соответствует глубине от поверхности мишени, после прохождения которой в поврежденной области преобладают собственные межузельные атомы меди в сравнении с вакансиями (табл. 3).

Таблица 3

Зависимость  $\lambda_{max}$  от угла падения ионов  $Al^+$  на мишень Cu

$\alpha$	$80^\circ$	$60^\circ$	$40^\circ$	$20^\circ$	$0^\circ$
$\lambda_{max}, \text{ \AA}$	10,39	14,13	16,79	18,66	21,53

#### 4. ВЫВОДЫ

С использованием программ SPURT.MP и CALCMULT сгенерированы и исследованы профили распределения имплантированных ионов и профили распределения вакансий и собственных межузельных атомов, создаваемых в Cu при облучении ионами  $Al^+$  с энергией 1 кэВ, в зависимости от угла падения падающих ионов в интервале углов  $0 \dots 80^\circ$ .

Результаты расчетов для имплантированных ионов сопоставлены с экспериментальными данными при угле падения ионов алюминия на мишень  $\alpha=0^\circ$ . Показано качественное совпадение рассчитанных по программам SPURT.MP и CALCMULT данных с результатами эксперимента.

Результаты моделирования по расчету первоначальных (в отсутствие процессов диффузии) распределений имплантированных ионов алюминия  $G_{imp}(x)$  и вакансий  $G_v(x)$ , полученных по программам SPURT.MP, CALCMULT, хорошо коррелируют с аналогичными профилями, полученными с использованием программного кода SRIM2006.

Показано, что при ионной обработке поверхности меди (при заданной энергии ионов  $E=1 \text{ кэВ}$ ) оптимальное значение угла облучения мишени, при котором достигается максимальная концентрация имплантированных ионов алюминия, соответствует  $\alpha=10^\circ$ , и эта концентрация находится на глубине  $11,01 \text{ \AA}$  от поверхности. Кроме того, в рассмотренном угловом диапазоне наблюдается относительно небольшое ( $\sim$  в 1,6 раза) изменение проникающей способности имплантированного  $Al^+$  при изменении угла падения  $\alpha$ . Это снижает требования к угловой расходимости потока ионов и является важным фактором при обработке поверхности изделий со сложной геометрией.

Установлено, что максимальное значение концентрации собственных межузельных атомов при исследованных углах падения достигается в случае  $\alpha=20^\circ$  на глубине  $\sim 9,4 \text{ \AA}$ . В то же время максимальные значения концентраций вакансий достигаются при двух углах облучения мишени: 1)  $\alpha=20^\circ$  (на глубине  $\sim 4,57 \text{ \AA}$ ) и 2) при  $\alpha=40^\circ$  (на глубине  $\sim 3,5 \text{ \AA}$ ). Максимальная глубина  $\delta_{max}$  модифицированного слоя достигается при нормальном ( $\alpha=0^\circ$ ) падении ионов на мишень и составляет  $\sim 75 \text{ \AA}$ .

Установлено, что начальные разностные профили распределения вакансий и собственных межузельных атомов  $G_{vi}(x)$  обнаруживают две выраженные области: вблизи поверхности мишени  $G_{vi}(x)<0$ , что связано с обогащением приповерхностного слоя радиационными вакансиями, возникающими за счет процессов распыления и прямого выбивания атомов в глубь мишени; в объеме мишени  $G_{vi}(x)>0$ , что указывает на преимущественное залегание в этой области межузельных атомов мишени.

Показано, что с увеличением угла  $\alpha$  от 0 до  $80^\circ$  уменьшается величина обедненной зоны  $\lambda_{max}$ : от  $\lambda_{max}=21,53 \text{ \AA}$  для  $\alpha=0^\circ$  и до  $\lambda_{max}=10,39 \text{ \AA}$  для  $\alpha=80^\circ$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А.Н. Диденко, А.Е. Лигачев, И.Б. Куракин. *Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов*. М: «Энергоатомиздат», 1987, 184 с.
2. A.S. Bakai, A.I. Zhukov, S.N. Sleptsov. Densification of growing coatings by ion beams // *J.Phys.: Condens.Matter*. 1999, v.11, p. 5681–5689.
3. А.И. Калиниченко, С.С. Перепелкин, В.Е. Стрельницкий. Формирование напряжений сжатия в тонких пленках при ионном облучении //

*Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 2007, №6, с. 116–119.*

4. 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.

5. В.И. Павленко, С.Н. Слепцов, В.И. Сафонов. *Компьютерное моделирование и экспериментальные исследования процессов первичного дефектообразования материалов мишени при низкотемпературном ионном воздействии на поверхность*: Пре-

принт ХФТИ 2008-1. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2008, 21 с.

6. W. Eckstein, J.P. Biersack. Sputtering studies with the Monte Carlo program TRIM.SP // *Appl. Physics*. 1984, v. A 34, p. 73–94.

7. *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой*. / Под ред. Бериша Р. М.: «Мир», 1986, в. II, 484 с.

8. <http://www.srim.org/>

9. V.I. Safonov, I.G. Marchenko, G.N. Kartmazov, et al. High dose low temperature Ti and Al implantation in metals // *Surf. and Coatings Technology*. 2003, v. 173-174, p. 1260–1263.

*Статья поступила в редакцию 10.09.2008 г.*

## **ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ЗАЛЕЖНОСТІ ПРОФІЛІВ ПЕРВИННОГО ДЕФЕКТОУТВОРЮВАННЯ ВІД КУТА ПАДІННЯ ІОНІВ ПРИ НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНОМУ ОПРОМІНЕННІ ПОВЕРХНІ МІДІ ІОНАМИ $Al^+$**

*В.І. Павленко, С.М. Слепцов, В.І. Сафонов*

Методом математичного моделювання, з використанням програмних комплексів SPURT.MP й CALCMULT, досліджена еволюція просторового розподілу імпантованих іонів і радіаційних крапкових дефектів по глибині Cu-мішені при опроміненні останньої іонами  $Al^+$  з різними кутами падіння. Енергія іонів  $Al^+$  обрана рівній величині 1 кэВ, кут падіння змінювався в інтервалі від 0 до  $80^\circ$ . Проведено порівняння розрахункових профілів з результатами моделювання по програмі SRIM2006 і з експериментальними даними. Установлено кореляцію зміни профілів розподілу крапкових дефектів й імпантованих часток по глибині мішені залежно від кута падіння іонів. Залежно від кута падіння іонів визначені максимальні глибини й максимуми профілів залягання імпантованих іонів, міжвузельних атомів і вакансій. Дано якісний і кількісний аналізи приповерхніх збіднених зон, що утворюються в результаті розвитку каскадів зсувів у мішені. Показано, що для різних кутів падіння іонів на поверхню мішені існують певні значення кутів, при яких досягається максимальна концентрація імпантованих іонів й інших крапкових дефектів в опромінюючому матеріалі, що дозволяє ефективно проводити процес формування поверхневих шарів матеріалу з наперед заданими властивостями.

## **EFFECT OF ION BOMBARDMENT ANGLE ON EVOLUTION OF POINT DEFECTS DISTRIBUTION IN COPPER AT LOW TEMPERATURE IRRADIATION BY $Al^+$ IONS. COMPUTER SIMULATION**

*V.I. Pavlenko, S.N. Slyeptsov, V.I. Safonov*

An evolution of the implanted ions and radiation point defects distributions in the Cu target, which is maintained at low temperature and irradiated by the  $Al^+$  ions at the various bombardment angles, was investigated by computer simulation using the SPURT.MP and CALCMULT codes. The energy of  $Al^+$  ions was 1 keV and the ion bombardment angle was varied in the range from 0 to  $80^\circ$ . The correlation of the implanted ions and point defects depending profiles modification on the ion bombardment angle was established. The maximum depth and distribution peak of the implanted ions, vacancies and interstitials in the copper target were determined for the different angles. Good agreements were found between the simulated data and both experimental data and computer results, which were obtained by the SRIM2006 code. It is shown that there is an optimal range of the ion bombardment angles, which provides the maximum concentration of the implanted ions and radiation point defects near the irradiated target surface. It is expected that the obtained results allow optimizing the ion bombardment parameters to obtain the modified target layers with the given properties.