

О ФОРМООБРАЗОВАНИИ КРАТЕРОВ ПРИ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКЕ

А.И. Калиниченко, С.С. Перепёлкин, В.Е. Стрельницкий

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

E-mail: strelnitskij@kipt.kharkov.ua

Теоретически исследуется влияние пластичности и поверхностного натяжения металла на форму и величину кратера, образуемого тяжелым низкоэнергетическим ионом. Кратер аппроксимируется аксиально-симметричной впадиной, характеризующейся известным объемом и двумя радиусами, задающими кривизну донной и периферийной частей кратера. Радиусы кривизны определяются из равенства сил поверхностного натяжения и упругой реакции металла. Получены уравнения для диаметра и глубины кратера, а также показателя прироста свободной поверхности β за счет образования капли и кратера. Проанализированы зависимости формы и размеров кратера от предела текучести и коэффициента поверхностного натяжения металла. Продемонстрировано влияние указанных характеристик на возможность капельного распыления и образования кратеров нанометрового размера при ионной бомбардировке металлов.

ВВЕДЕНИЕ

Поверхностное или внутриобъемное воздействие низкоэнергетических ионов, осколков деления и кластеров на твердые материалы интересно как с научной, так и с практической точек зрения. В физической литературе неоднократно обсуждались последствия бомбардировки ионами (ядрами отдачи) ядерного топлива, элементов расщепляющих и термоядерных установок, нейтронных источников и ускорителей [1-3]. Пристальное внимание исследователей вызвали эффекты поверхностной эрозии и кратерообразования при ионной бомбардировке, обнаруженные экспериментально [4] и обещающие стать эффективными инструментами для нанометрового сглаживания (полировки) и сухого травления поверхностей [5]. В [6] теоретически исследовалась возможность капельного распыления и сопровождающего его кратерообразования при облучении поверхности металлов тяжелыми ионами низких энергий ($E < 50$ кэВ). Анализ проводился в рамках модели приповерхностного нелокального термоупругого пика (НТП) низкоэнергетического иона – нанометровой области повышенных температуры и давления, возникающей вокруг траектории иона и примыкающей к свободной поверхности мишени. Было показано, что при достаточно высокой плотности тепловой энергии в НТП может происходить плавление материала и выброс расплавленной массы с образованием кратера на поверхности мишени. Ключевым для оценки возможности кратерообразования в предложенной модели является определение прироста свободной поверхности, требующего затрат энергии. Для объектов нанометрового масштаба, каковыми являются кратер и вылетающая капля, затраты энергии на образование дополнительной поверхности являются основным лимитирующим фактором процесса кратерообразования. В предыдущих работах, посвященных капельному распылению, отсутствовали соображения, каким образом можно

оценить величину показателя прироста свободной поверхности β . В силу этого, β использовался как свободный параметр модели, о котором было известно только, что его величина находится в пределах от 1 до 2. При этом возможность капельного распыления предсказывалась лишь в исключительных случаях (кристаллического золота при бомбардировке ионами Xe^+). Также не представлялось возможным сделать какие-либо предсказания формы образующихся кратеров, что было бы полезным для развития нанотехнологии обработки материалов.

В настоящей работе предпринята попытка определить размеры кратера, его форму и величину β , исходя из предположения, что форма кратера, возникающая в сложном процессе отделения капли, определяется в результате действия двух противоборствующих сил – поверхностного натяжения и упругости/жесткости твердого материала мишени.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Температура и фазовое состояние вещества в НТП определяются средней плотностью тепловой энергии $\varepsilon(E, d)$:

$$\varepsilon(E, d) = \frac{E_{ph}(E)}{V(E, d)}. \quad (1)$$

Здесь $V(E, d)$ – объем НТП, зависящий от энергии иона и эффективного размера кристаллита мишени d ; $E_{ph}(E)$ – фононные потери иона [6, 7]. Напряжение σ_p в НТП иона с энергией $E > 100$ эВ определяется в основном суммой термоупругой компоненты σ_T , обусловленной тепловым расширением материала мишени в пике, и внутреннего напряжения сжатия σ_i в материале мишени [3]:

$$\sigma_p(E, d) = \sigma_T(E, d) + \sigma_i. \quad (2)$$

При определении термоупругого давления в пике σ_T следует учитывать изменение объема материала за счет: 1) нагрева до точки плавления; 2) плавления

материала; 3) нагрева расплава до температуры, соответствующей плотности выделившейся энергии в НТП. Оценка вклада давления паров в случае частичного испарения материала мишени показала, что для рассматриваемых случаев этим вкладом можно пренебречь по сравнению с давлением за счет теплового расширения твердой фазы, изменения объема при плавлении и теплового расширения жидкой фазы.

Отрыв и выброс расплавленного материала возможен только при условии, если энергия упругонапряженного состояния расплава W_{el} с учетом вклада термоупругих и внутренних напряжений превосходит энергию W_s , необходимую для формирования поверхности отрыва капли:

$$W_{el}(E, d) \geq W_s(E, d). \quad (3)$$

Энергия упругонапряженного состояния в НТП оценивалась по формуле

$$W_{el}(E, d) = \frac{[\sigma_T(E, d) + \sigma_i]^2}{2K} V_{NTP}(E, d), \quad (4)$$

где K – средний модуль всестороннего сжатия материала мишени для реализующегося диапазона температур.

Энергия W_s определялась исходя из того, что энергетически выгодно выбрасывать расплавленный материал в виде одной сферической капли:

$$W_s(E, d) = \beta \delta (6\sqrt{\pi} V_{NTP}(E, d))^{2/3}, \quad (5)$$

где δ – коэффициент поверхностного натяжения жидкого материала мишени; β – показатель прироста свободной поверхности, равный отношению площади дополнительно образуемой поверхности к площади поверхности сферической капли объемом $V_{NTP}(E, d)$. Значение β лежит в интервале от 1 (вылет капли из жидкого либо пластичного ($\mu \ll K$) материала без образования кратера, где μ – средний модуль сдвига материала мишени) до ~ 2 (вылет капли с образованием на месте вылетевшего вещества каверны, повторяющей форму НТП). Последний случай соответствует капельному распылению материала с высоким пределом текучести и требует для своей реализации значительно более высоких значений энергии упругонапряженного состояния. Из сказанного следует, что для установления возможности капельного распыления в том или ином случае важно знать величину показателя прироста свободной поверхности кратера β , что, в свою очередь, требует определения площади поверхности кратера в зависимости от характеристик материала мишени.

В настоящей работе используется модель, согласно которой кратер представляет собой впадину, ее поверхность образуется при вращении вдоль вертикальной оси только двух сопряженных дуг окружностей радиусами R_1 и R_2 (рис. 1). Даже столь простая модель позволяет проследить динамику формирования кратера и определить его характерные размеры.

Силы поверхностного натяжения заставляют отделяющуюся жидкую каплю принять форму шара, т. е. тела с минимальной поверхностью. Аналогичные силы, действующие в твердом материале мишени, стремятся выровнять поверхность каверны, образовавшейся в месте отделения капли. Вследствие этого первоначальная форма каверны изменяется в сторону уменьшения кривизны, если и до тех пор, пока лапласовское давление превосходит предел текучести материала мишени σ_Y . Главные радиусы кривизны в каждой точке поверхности кратера определяются как величиной σ_Y , зависящей от технологии обработки мишени, так и коэффициентом поверхностного натяжения δ материала мишени. Так, оба главных радиуса сферической поверхности, образующей ложе кратера, определяются из равенства лапласовского давления и предела текучести материала мишени:

$$\delta \left(\frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_1} \right) = \sigma_Y. \quad (6)$$

Следует, однако, отметить, что если радиус кривизны R_{NTP} каверны, образованной от выброса капли, превышает радиус кривизны, определяемый выражением (6), то радиус кривизны ложа кратера задается радиусом R_{NTP} . Таким образом, имеем:

$$R_2 = \begin{cases} R_{NTP}, & \frac{2\delta}{\sigma_Y} < R_{NTP}; \\ \frac{2\delta}{\sigma_Y}, & \frac{2\delta}{\sigma_Y} \geq R_{NTP}. \end{cases} \quad (7)$$

Периферию кратера в предлагаемой модели образует тороидальная поверхность, радиусы кривизны которой R_1 и $R(y)$ имеют разные знаки (см. рис. 1). В силу этого баланс лапласовских и упругих сил под поверхностью на периферии кратера представим в виде:

$$\delta \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R(y)} \right) = \sigma_Y, \quad y < Y_m. \quad (8)$$

Последующие вычисления величины β проводятся в предположении

$$R_1 \ll R(y). \quad (9)$$

Ниже мы вернемся к обсуждению оправданности такого приближения. Пренебрегая в (8) малым слагаемым, получаем:

$$R_1 = \frac{\delta}{\sigma_Y}. \quad (10)$$

Обратим внимание на то, что вся информация о характеристиках материала мишени и пике иона содержится в R_1 и V_{NTP} . При дальнейших вычислениях полезно перейти к безразмерным приведенным размерам кратера, получающимся из реальных путем деления на радиус капли $R_d = (3V_{NTP}/4\pi)^{1/3}$.

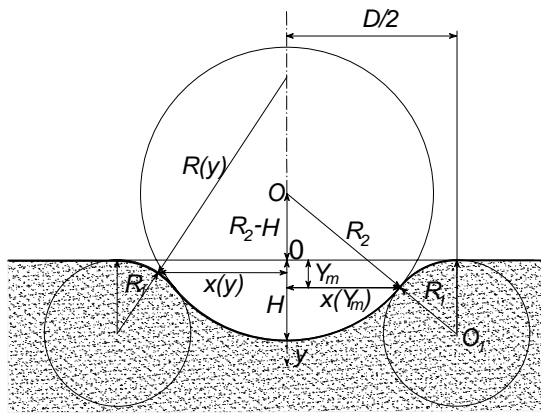


Рис. 1. Схема модельного кратера (вид в разрезе). Секущая плоскость проходит через ось симметрии кратера (ось y). Начало координат $y = 0$ лежит на пересечении оси симметрии кратера и плоскости поверхности мишени

Обозначим приведенные величины строчными латинскими буквами, в отличие от исходных величин R_1, R_2, D, H, Y_m . В приведенных величинах прирост свободной поверхности за счет образования кратера с глубиной h задается выражением

$$s(r_1, h) = \pi r_1 \left[d(r_1, h) \arcsin \sqrt{\frac{y_m(r_1, h) \left(2 - \frac{y_m(r_1, h)}{r_1} \right)}{r_1}} - \right]$$

Вычисление интеграла (16) приводит к выражению:

$$v(r_1, h) = \pi \left\{ \left[\frac{d^2(r_1, h)}{4} + r_1^2 \right] y_m(r_1, h) - \left[\frac{r_1^3}{3} - \frac{(r_1 - y_m(r_1, h))^3}{3} \right] - \right. \\ \left. - d(r_1, h) \frac{r_1^2}{2} \left[\arcsin \sqrt{\frac{y_m(r_1, h) \left(2 - \frac{y_m(r_1, h)}{r_1} \right)}{r_1}} - \left(1 - \frac{y_m(r_1, h)}{r_1} \right) \sqrt{\frac{y_m(r_1, h) \left(2 - \frac{y_m(r_1, h)}{r_1} \right)}{r_1}} \right] \right\} + \\ + \pi \left[r_2(r_1) (h - y_m(r_1, h))^2 - \frac{(h - y_m(r_1, h))^3}{3} \right]. \quad (17)$$

Приравняв приведенные объем кратера $v(r_1, h)$ и объем выбрасываемой капли $V_{\text{НТР}}/R_d^3 = 4\pi/3$, получаем уравнение для определения неизвестной функции $h(r_1)$:

$$v(r_1, h) = \frac{4\pi}{3}. \quad (18)$$

Подставляя решение уравнения (18) в (11), получаем прирост площади, как функцию единственной переменной r_1 . Учитывая, что приведенная площадь $s(r_1)$ связана с реальным приростом площади $S(R_1)$ соотношением $s(r_1) = S(R_1)/R_d^2$, имеем следующее выражение для показателя прироста свободной поверхности β :

$$\beta(r_1) = \frac{s(r_1, h(r_1))}{4\pi} + 1. \quad (19)$$

$$- 2y_m(r_1, h) \frac{2phr_2(r_1)^2}{r_1 + r_2(r_1)} - ph(2r_1 + 2r_2(r_1) - h), \quad (11)$$

где использованы обозначения:

$$r_1 = R_1/R_d = \frac{\delta}{\sigma_Y} \left(\frac{4\pi}{3V_{\text{НТР}}} \right)^{1/3}, \quad (12)$$

$$r_2(r_1) = R_2(R_1)/R_d = \begin{cases} 1, & 0 \leq r_1 \leq 1/2 \\ 2r_1, & 1/2 < r_1 \end{cases}, \quad (13)$$

$$d(r_1, h) = D(R_1, H)/R_d = 2\sqrt{h(2r_1 + 2r_2(r_1) - h)}, \quad (14)$$

$$y_m(r_1, h) = Y_m(R_1, H)/R_d = \frac{hr_1}{r_1 + r_2(r_1)}. \quad (15)$$

В (13) мы воспользовались тем, что для пиков ионов с энергией $E \geq 10$ кэВ с точностью до $\sim 5\%$ можно принять $R_{\text{НТР}}/R_d = 1$.

Учтем, что глубина кратера h и радиус кривизны r_1 не являются независимыми. Связь между ними осуществляется через условие постоянства объема кратера, равного $V_{\text{НТР}}$. В приведенных величинах объем кратера v задается интегралом

$$v = V/R_d^3 = \frac{\pi}{R_d^3} \int_0^H x^2(y) dy. \quad (16)$$

Совокупность уравнений (3)–(5) и (11)–(19) позволяет проанализировать возможность капельного распыления и установить геометрические параметры образуемых кратеров для произвольной комбинации «ион-мишень».

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Трансцендентное уравнение (18) решалось численно относительно неизвестной функции $h(r_1)$. В свою очередь, знание $h(r_1)$ позволило определить зависимость $d(r_1)$ с помощью соотношения (14).

На рис. 2 представлены зависимости приведенных диаметра d и глубины h кратера от безразмерного параметра $r_1 = \delta/(\sigma_Y R_d)$, определяемого характеристиками материала мишени.

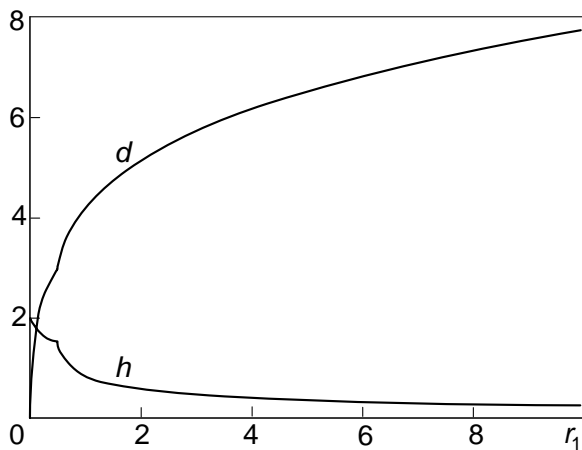


Рис. 2. Зависимости приведенного диаметра $d = D/R_d$ и глубины $h = H/R_d$ кратера, образующегося при выбросе капли с объемом $v_{НТП} = 4\pi/3$, от параметра $r_1 = \delta/(\sigma_Y R_d)$

Как видно из рис. 2, при увеличении r_1 (при возрастании пластичности материала) глубина кратера уменьшается и, соответственно, растет диаметр кратера, причем, начиная уже с $r_1 \geq 1$, с хорошей точностью выполняется закон $h \sim 1/d^2$. Это согласуется с постоянством объема кратера v , поскольку приближенно $v \sim hd^2$. Так, уменьшение предела текучести материала мишени (например, при увеличении толщины пленки) должно приводить к изменению формы и размеров образуемых кратеров.

На рис. 3 показана зависимость показателя прироста свободной поверхности β от безразмерного параметра r_1 .

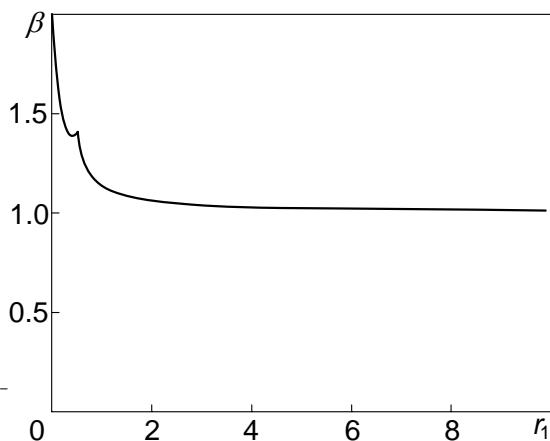


Рис. 3. Зависимость показателя прироста свободной поверхности β от параметра $r_1 = \delta/(\sigma_Y R_d)$

Из рисунка видно, что наиболее существенное изменение площади кратера происходит в интервале $0 < r_1 < 1$, тогда как при $r_1 > 1$ прирост свободной поверхности за счет кратерообразования незначителен ($\beta \approx 1$).

Рис. 4 иллюстрирует изменение формы и приведенных размеров кратера при изменении параметра r_1 . Сравнивая полученные величины для $r(y)$ и r_1 , приходим к выводу, что неравенство (9) выполняется тем лучше, чем меньше величина r_1 . Так, для случаев кратеров, изображенных на эпюрах а–в, можно считать, что принятая модель адекватно отображает форму кратера. Для случаев больших диаметров кратера (см. эпюры г–е) условие (9) выполняется хуже. Это приводит к некоторому завышению величины r_1 . Однако завышение r_1 в расчетах слабо сказывается на оценке величины β при больших диаметрах кратера. Так, при $d > 5$ имеем $1 < \beta < 1,1$.

Уменьшение величины β при снижении предела текучести материала мишени снижает требования к величине энергии упругонапряженного состояния материала в НТП иона, облегчая отрыв капли. Так, анализ, аналогичный проведенному в [6], показывает, что при бомбардировке ионами Au^+ с энергией $E = 8$ кэВ тонкой пленки золота ($\delta = 0,114$ Н/м) не происходит капельного распыления и кратерообразования. Это связано с довольно высоким пределом текучести $\sigma_Y = 0,65$ ГПа для золотой пленки с толщиной менее 100 нм, которому соответствует показатель прироста свободной поверхности $\beta = 1,29$. Напротив, при облучении теми же ионами массивного золотого образца ($\sigma_Y = 0,04$ ГПа, $\beta = 1,013$) распыление возможно с образованием неглубоких ($D = 22$ нм, $H = 0,75$ нм) кратеров.

Уместно отметить, что для кратеров макроскопических размеров, оставляемых метеоритами и снарядами, параметр r_1 практически равен нулю. Это означает, что рассматриваемые в настоящей работе процессы несущественны при формообразовании макроскопических кратеров. В противоположность этому, для типичных значений коэффициента поверхностного натяжения δ , предела текучести металлов σ_Y и объемов НТП $V_{НТП}$, образуемых тяжелыми низкоэнергетическими ионами и кластерами, безразмерный параметр r_1 , задаваемый выражением (12), по порядку величины сравним с единицей или превышает ее. Это свидетельствует о существенности всех трех характеристик, входящих в r_1 , при исследовании формообразования нанометровых кратеров, возникающих при ионной бомбардировке.

В заключение отметим, что в рамках предлагаемой модели нет возможности исследовать образование периферийного вала и/или центральной горки, наблюдающихся как у кратеров метеоритного происхождения, так и у наноразмерных кратеров при бомбардировке твердого тела ионами или кластерами. Модернизация предлагаемой модели с тем, чтобы она описывала указанную «тонкую структуру» кратеров, представляется возможной и является задачей дальнейших исследований. Такая модернизация предусматривает введение большего числа сопряженных поверхностей, кривизна каждой из которых определяется балансом сил поверхностного натяжения и упругости твердотельной мишени.

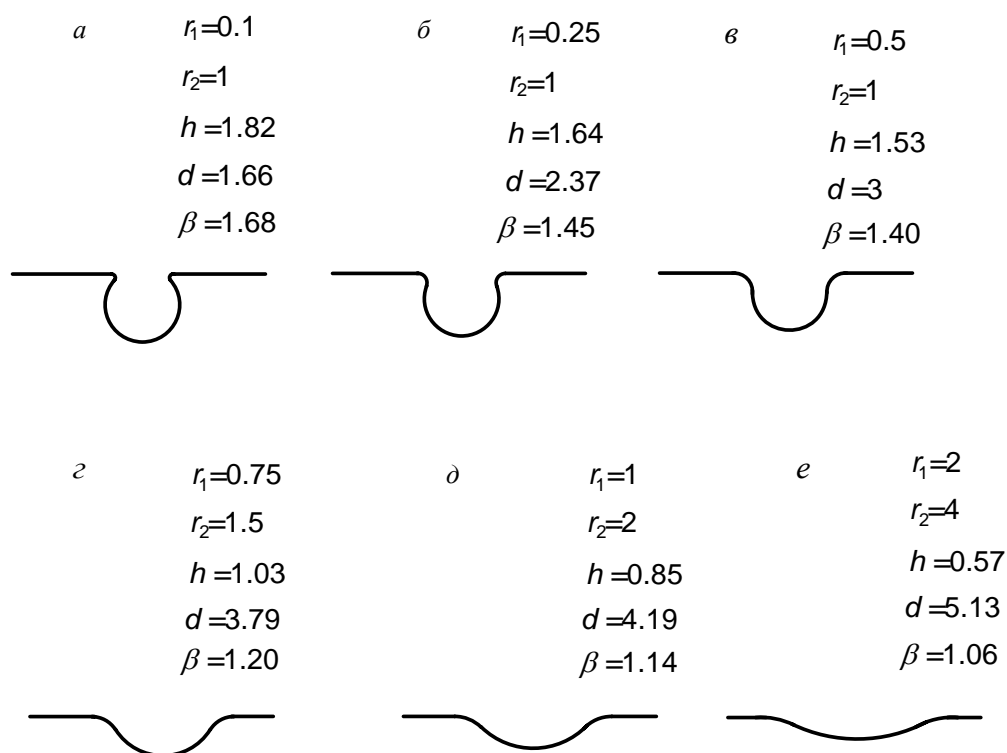


Рис. 4. Изменение формы кратера при уменьшении предела текучести материала мишени (эпюры а–е)

ВЫВОДЫ

1. Предложена модель формообразования кратера, возникающего при падении низкоэнергетического иона на поверхность металла. Согласно модели поверхность кратера формируется в процессе отрыва жидкой капли под действием сил поверхностного натяжения, которым противодействуют силы упругости твердого тела.

2. Показано, что геометрические параметры кратера – форма и площадь поверхности, диаметр и глубина – однозначно определяются объемом выброшенного вещества (радиусом капли), коэффициентом поверхностного натяжения и пределом текучести материала мишени.

3. На примере бомбардировки золотых мишеней ионами Au^+ показано, что необходимо учитывать величину показателя прироста свободной поверхности β при оценке возможности капельного распыления и кратерообразования при облучении металла низкоэнергетическими ионами.

4. Возможна модернизация предлагаемой модели с тем, чтобы она описывала возникновение периферийного вала и центральной горки кратера, что является задачей дальнейших исследований.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. D.R. Olander. *Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements*. VA: Springfield: "NTIS, US Department of Commerce", 1976, 614 p.
2. L.K. Mansur, A.F. Rowcliffe, R.K. Nanstad, S.J. Zinkle, W.R. Corwin, R.E. Stoller. Materials needs for fusion. Generation IV fission reactors and spallation neutron sources – similarities and differences // *J. Nucl. Mater.* 2004, v. 329-333, p. 166-172.
3. J. Norem, Z. Insepov, I. Konkashbaev. Triggers for RF breakdown // *J. Nucl. Instr. Meth. A*. 2005, v. 537, p. 510-520.
4. S.E. Donnelly and R.C. Birtcher. Heavy ion cratering of gold // *Phys. Rev. B*. 1997, v. 56, №21, p. 13599-13602.
5. V.N. Popok, E.E.B. Campbell. Beams of atomic cludters: effects on impact with solids // *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2006, v. 11, p. 19-45.
6. А.И. Калиниченко, С.С. Перепёлкин, В.Е. Стрельницкий. Модель капельного распыления при бомбардировке твёрдого тела низкоэнергетическими ионами // *Известия вузов. Физика*. 2011, №1/2, с. 324-328.
7. А.И. Kalinichenko, S.S. Perepelkin, V.E. Strel'nitskij. Thermodynamic conditions of ta-C formation at implantation of noble-gas ions in carbon // *Diamond and Related Materials*. 2006, v. 15, №2-3, p. 365-370.

Статья поступила в редакцию 08.11.2012 г.

ПРО ФОРМОУТВОРЕННЯ КРАТЕРІВ ПРИ ІОННОМУ БОМБАРДУВАННІ

О.І. Калініченко, С.С. Перепелкін, В.Є. Стрельницький

Теоретично досліджується вплив пластичності й поверхневого натягу металу на форму й величину кратера, утвореного важким низькоенергетичним іоном. Кратер апроксимується аксіально-симетричною западиною, що характеризується відомим об'ємом і двома радіусами, що задають кривину донної й периферійної частин кратера. Радіуси кривин визначаються з рівності сил поверхневого натягу й пружної реакції металу. Отримано рівняння для діаметра й глибини кратера, а також показника приросту вільної поверхні β за рахунок утворення краплі й кратера. Проаналізовано залежності форми й розмірів кратера від границі текучості й коефіцієнта поверхневого натягу металу. Продемонстровано вплив зазначених характеристик на можливість краплинного розпилення й утворення кратерів нанометрового розміру при іонному бомбардуванні металів.

ON SHAPING OF CRATERS AT ION BOMBARDMENT

A.I. Kalinichenko, S.S. Perepelkin, V.E. Strel'nitskij

Effect of plasticity and surface tension of metal on form and size of crater produced by heavy low-energy ion is theoretically investigated. Crater is approximated by an axially-symmetrical hollow. The hollow is characterized by known volume and two radii which specify curvatures of both bottom and peripheral parts of crater. Radii of curvature are determined by equality of surface tension forces and elastic reaction of metal. Equations for crater depth and diameter as well as for coefficient of increase of free surface β due to crater and droplet formation are derived. Dependences of crater form and size on yield strength and surface tension coefficient of metal are analyzed. Influence of specified characteristics on possibility of droplet sputtering and nanometer-sized craters formation at ion bombardment of metals is shown.