

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПРОФИЛЕЙ ЗАЛЕГАНИЯ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ИОНОВ $Ti^+$ В НАНОСТРУКТУРНОЙ ПЛЕНКЕ Nb В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ИОНОВ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОБЛУЧЕНИИ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПО ПРОГРАММЕ SPURT.CRIS

*В.И. Павленко, С.Н. Слепцов, Л.А. Ферлий, С.О. Чалый*  
*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,  
Харьков, Украина*  
*E-mail: pavlenko@kipt.kharkov.ua; glss@kipt.kharkov.ua; ferliy@ukr.net*

Методами математического моделирования, с использованием программного комплекса SPURT.CRIS, сгенерированы и исследованы профили залегания имплантированных ионов в зависимости от угла падения  $\alpha$  ионов при облучении поверхности модельной наноструктурной пленки Nb ионами  $Ti^+$ . Энергия падающих ионов титана варьировалась от  $E_1 = 0,5$  кэВ до  $E_4 = 2,0$  кэВ, угол падения  $\alpha$  изменялся в интервале  $0...80^\circ$ . На основании проведенных исследований получены угловые зависимости профилей первичного распределения имплантированных ионов в модельной наноструктурной пленке. Определены максимальные глубины залегания имплантированных ионов. Показано, что для различных углов падения при ионной обработке поверхности существуют оптимальные значения углов, при которых достигается максимальная концентрация ионов  $Ti^+$  в облучаемой пленке, что позволяет эффективно проводить процесс формирования поверхностных слоев материала с наперед заданными свойствами.

## ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие энергетических частиц с материалом мишени формирует основу для широкого ряда процессов, которые используются для образования наноструктур в электронике и оптоэлектронике. Яркими примерами такого взаимодействия являются электронно-лучевая литография, плазменное травление и осаждение, ионная имплантация.

В частности, ионная имплантация является одним из наиболее перспективных методов поверхностной обработки. С ее помощью можно улучшить такие характеристики исследуемых материалов, как твердость, износостойкость, предел усталостной прочности и др. Большое количество работ по ионной имплантации посвящены 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 [1-5].

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 и магнитные свойства металлов.

Методы компьютерного моделирования позволяют глубже понять и осмыслить физические процессы, происходящие в поверхностных слоях материала пленки в результате ионного облучения. Компьютерное моделирование процессов первичного дефектообразования при низкотемпературном ( $T \sim 293$  К) и низкоэнергетическом ( $E \leq 2$  кэВ)

атомно-ионном воздействии на поверхность исследуемой пленки 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. Это, в свою очередь, служит исходным материалом для радиационно-диффузионных моделей [6], моделей метода молекулярной динамики [7], моделей формирования напряжений сжатия в тонких пленках [8] и других макроскопических теорий, описывающих и моделирующих процессы кинетики структурообразования и модификации поверхности пленок при ионном облучении.

Низкотемпературное и низкоэнергетическое атомно-ионное облучение поверхности пленки позволяет избежать деградации объемных свойств, что делает это направление особенно востребованным в современных технологиях формирования и изучения свойств наноструктур. 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 материала пленки.

Целью данной работы являлось получение методом компьютерного моделирования профилей залегания имплантированных ионов и исследование их поведения в зависимости от угла падения частиц на пленку, а также определение оптимальных значений углов падения, при которых достигается макси-

мальная концентрация ионов в облучаемой модельной наноструктурной пленке.

Расчеты проведены с использованием программного комплекса SPURT.CRIS [9] на примере облучения ионами  $Ti^+$  с энергией  $E = 0,5 \dots 2,0$  кэВ модельной наноструктурной пленки Nb при углах падения пучка ионов  $\alpha = 0 \dots 80^\circ$ .

## 1. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для детального исследования процессов первичного дефектообразования, происходящих в сверхмелкозернистых материалах, в которых размеры зерен не превышают 10 нм, создан программный комплекс SPURT.CRIS (базовая версия – программа SPURT.MP [10]). В программном комплексе SPURT.CRIS объединены алгоритмы аморфности, слоистости и поликристалличности облучаемой пленки, т. е. модельная наноструктурная пленка состоит из нанокристаллитов, которые расположены в аморфной матрице и произвольно ориентированы относительно друг друга.

Общая схема моделирования основных физических процессов и явлений, положенных в основу алгоритмов программы SPURT.CRIS, детально описана в [9]. Остановимся на кратком описании основных алгоритмов моделирования программы SPURT.CRIS, связанных с введением наноструктурности модельной пленки, поиском партнера по столкновению и схемой получения профилей залегания имплантированных ионов.

### 1.1. МОДЕЛЬ НАНОСТРУКТУРНОЙ МИШЕНИ (ПЛЕНКИ)

Экспериментально получаемые наноструктурные покрытия и пленки не являются просто поликристаллическими покрытиями с уменьшенными размерами зерен, их рассматривают как двухкомпонентные структуры, даже в случае одной фазы, т. е. исследуемый материал представляет собой смесь нанокристаллитов и границ зерен (рис. 1) [11-13].

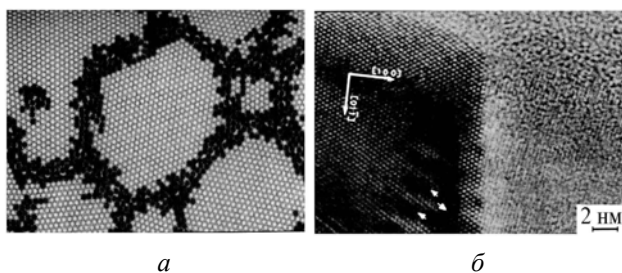


Рис. 1. Атомная модель наноструктурного материала (черным обозначены атомы зернограничной области, у которых смещение превышает 10% от межатомных расстояний) [13] (а); границы зерен в наноструктурной меди (просвечивающая электронная микроскопия) (б)

Исходя из этого, в работе (в качестве первого приближения) принята следующая модель для однокомпонентной мишени: модельная наноструктурная пленка представляет собой структуру, которая состоит из нанокристаллитов (наноблоков), расположенных в аморфной матрице, состоящей из атомов того же материала (рис. 2).

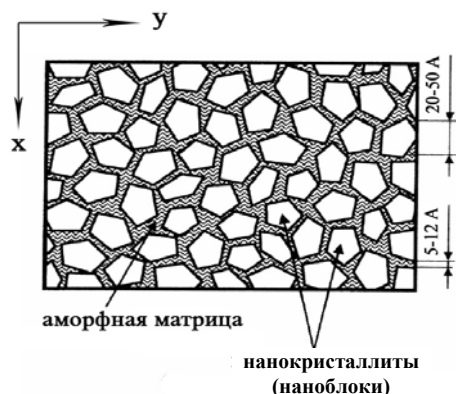


Рис. 2. Схематическое изображение принятой в работе модельной наноструктурной пленки

Принятая в работе геометрическая форма нанокристаллитов – правильные пятиугольники. При этом максимальная длина правильного пятиугольника  $d = R + r$ , где  $R = \sqrt{10} \times (\sqrt{5} + \sqrt{5}) \times a / 10$  – радиус описанной вокруг пятиугольника окружности, а  $r = \sqrt{5} \times (\sqrt{5} + 2\sqrt{5}) \times a / 10$  – радиус вписанной в пятиугольник окружности;  $a$  – сторона правильного пятиугольника. Размеры длин  $d$  лежат в интервале  $20 \dots 50 \text{ \AA}$ , а конкретное значение  $d$ , из этого интервала генерируется с помощью датчика случайных чисел из совокупности равномерно распределенных чисел в диапазоне  $(0,1)$ . Зная соотношение между  $d$  и  $a$ , задаем полные геометрические параметры рассматриваемого пятиугольника – нанокристаллита.

Нанокристаллические блоки произвольно ориентированы относительно друг друга и отделены границами зерен. Каждый нанокристаллит (наноблок) представляет собой поликристаллическую структуру, т. е. состоит из нескольких (или множества, в зависимости от размеров блока) монокристаллов. Монокристаллы, составляющие поликристаллическую структуру нанокристаллита, также произвольно ориентированы относительно друг друга. В случае однокомпонентной модели выбрана для монокристалла Nb объемно центрированная кубическая решетка с параметром  $a = 3,294 \text{ \AA}$ .

Ширина границ  $h_i$  зерен в принятой модели нанокристаллической пленки взята из работы [11] и находится в пределах  $5 \dots 12 \text{ \AA}$ . Конкретное значение ширины  $h_i$  из этого интервала разыгрывается случайным образом методом Монте-Карло.

Средняя атомная плотность аморфной матрицы ниже, чем в атомной решетке. Известно, что средняя плотность границ зерен согласно [11-12] составляет  $70 \dots 80\%$  атомной плотности кристаллической решетки материала. В настоящей модели принято следующее предположение: плотность аморфной матрицы составляет  $80\%$  плотности материала наноблоков.

### 1.2. МОДЕЛИ ПОИСКА ПАРТНЕРА ДЛЯ СТОЛКНОВЕНИЯ

При создании модели-мишени наноструктурной пленки использованы такие алгоритмы, как «поликристалличность» блоков, «аморфность» матрицы (границ зерен) и «слоистость мишени». Фактически

реализованы и объединены в 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.

1. 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 движущегося атома с учетом угла падения. Каждая движущаяся частица имеет свое направление в кристалле и свою граничную плоскость, однако взаимное положение вектора скорости движущейся частицы и нормали к поверхности сохраняются.

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 Nb, с его кубической объемно центрированной решеткой, возможных партнеров по столкновению 9.

Необходимыми условиями, определяющими выбор конкретного атома-мишени, являются следующие соотношения:

$$P < R_c, \quad (1)$$

$$(R_m - R_c) \times V > 0, \quad (2)$$

где  $P$  – прицельный параметр;  $R_c$  – радиус обрезания потенциала парного столкновения;  $R_m$  – координаты мишени;  $R_c$  – координаты налетающей частицы;  $V$  – нормированный вектор скорости налетающей частицы.

Первое из этих условий определяет принципиальную возможность или невозможность взаимодействия движущейся частицы с атомом мишени (если  $R_c > P$  – взаимодействия частиц нет). Второе – есть факт нахождения атома-мишени впереди траектории движущейся частицы (рис. 3).

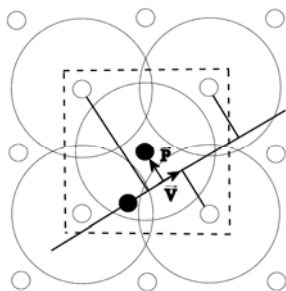


Рис. 3. Выбор атома-мишени в элементарной ячейке

После этого производится проверка на наличие атома в выбранном узле, т. е. координаты атома-мишени сравниваются с координатами вакансий, созданных прошедшими частицами, имеющими энергию больше рассматриваемой в данный момент частицы.

В случае, если исключаются из рассмотрения все возможные атомы-мишени, налетающая частица продвигается прямо по своей траектории на величину  $\Delta$ , и процесс поиска партнера по столкновению повторяется. В работе полагаем, что  $\Delta = 0,05 \cdot a$ , где  $a$  – постоянная решетки.

Выходными параметрами этой процедуры поиска партнера-мишени по столкновению являются координаты  $(x, y, z)$  мишени, прицельный параметр  $P$  и координаты точки начала парного взаимодействия.

В модели принято следующее условие: если прицельный параметр постоянной решетки  $P < 10^{-4}$ , то считается, что произошел лобовой удар. Таким образом, в терминах механики упругих шаров это эквивалентно тому, что налетающая частица занимает место атома-мишени, а этот атом-мишень продолжает движение со скоростью  $V$ .

В модели полагаем, что межузельный атом не может быть мишенью для движущейся частицы, так как он образуется значительно позднее, после остановки всех движущихся частиц, а взаимодействие двух движущихся частиц не учитывается.

В качестве критерия выхода частицы на поверхность кристаллита приняты координаты атома-мишени в идеальной кристаллической решетке: если он оказывается за пределами объема исследуемого кристаллита – налетающая частица считается подошедшей к его поверхности.

Поликристалличность задается путем случайного выбора (генерации) трех эйлеровских углов и поворота всей структуры каскадной области по отношению к кристаллографическим осям на эти углы после реализации заданного количества столкновений. Другими словами, использованная модель метода парных столкновений 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 вокруг неподвижной кристаллографической системы координат на три генерируемые случайным образом угла Эйлера.

Атомы, расположенные внутри нанокристаллитов, характеризуются своим сортом и отличаются от атомов в границах зерен, имеющих свой сорт. Алгоритм определения сорта такой же, как и в случае падающих ионов [10].

2. 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 [10].

### 1.3. АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОФИЛЕЙ ЗАЛЕГАНИЯ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ИОНОВ

Процесс моделирования профилей первичного залегания имплантированных ионов представляется следующим образом. На первом этапе с помощью

программы SPURT.CRIS получаем координаты (x, y, z) вакансий, собственных межузельных атомов мишени, имплантированных частиц, расплывенных атомов и отраженных ионов для пары  $Ti^{+} \rightarrow Nb$ . На втором этапе полученные массивы данных поступают в программу CALCMULT, которая обрабатывает координаты точечных дефектов, генерируемых программой SPURT.CRIS, и формирует соответствующие профили распределения имплантированных ионов, межузельных атомов и вакансий. Детальное описание программы CALCMULT дано в работе [14].

#### 1.4. ДРУГИЕ ОСНОВНЫЕ ПРЕДПОЛОЖЕНИЯ, ПРИНЯТЫЕ В МОДЕЛИ

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.CRIS [9]. 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 [9, 10]. Между двумя актами последовательных соударений с атомами мишени свободный пробег движущейся частицы предполагается прямолинейным, а алгоритм поиска партнера по столкновению будет определяться тем, где в данный момент находится частица: в наноблоке или в «аморфной матрице».

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 [15].

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 ниобия  $E_d = 28$  эВ.

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

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 направление 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 пленки. 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 расплывленным атомом или отраженным первичным ионом.

## 2. ОБЛУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРНОЙ ПЛЕНКИ Nb НИЗКОЭНЕРГЕТИЧНЫМИ ИОНАМИ $Ti^{+}$ . АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Программные комплексы SPURT.CRIS и CALCMULT были использованы при моделировании процессов облучения модельной наноструктурной пленки Nb ионами  $Ti^{+}$ . Энергии падающих ионов были выбраны в интервале  $E = 0,5 \dots 2,0$  кэВ при варьировании углов падения  $\alpha = 0 \dots 80^\circ$ .

На рис. 4 демонстрируются профили залегания имплантированных ионов  $Ti^{+}$  в модельной наноструктурной пленке Nb при различных углах падения ионов. Энергия пучка (E) выбиралась равной 1 кэВ.

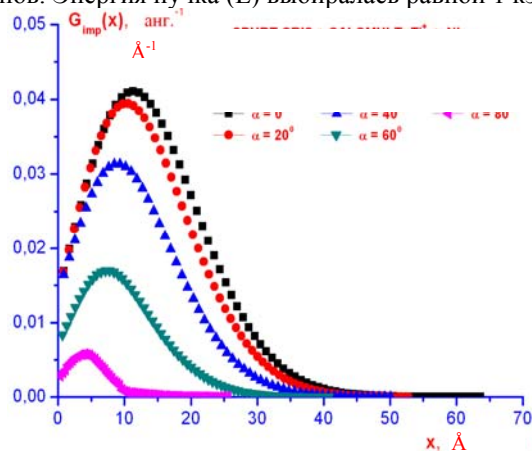


Рис. 4. Профили залегания  $G_{imp}(x)$  имплантированных ионов  $Ti^{+}$  в Nb. Энергия ионов  $E = 1$  кэВ, углы падения ионов на мишень  $\alpha = 0 \dots 80^\circ$

Из рисунка наглядно видно влияние угла падения потока падающих ионов  $Ti^{+}$ . С увеличением угла  $\alpha$  профили залегания титана «прижимаются к поверхности», а значения максимумов профилей уменьшаются и также сдвигаются к поверхности, что является прямым следствием все возрастающего (с увеличением  $\alpha$ ) потока отраженных ионов в общем потоке падающих частиц. Детализация рис. 4 позволяет получить количественную оценку этого процесса. Согласно результатам моделирования в исследуемой модельной пленке Nb при заданной энергии облучения максимальная величина модифицированного слоя пленки достигается при углах

облучения пленки  $\alpha = 0 \dots 20^\circ$  и на глубинах  $\delta \sim 11 \dots 15 \text{ \AA}$  от поверхности материала пленки.

Вместе с тем, увеличение энергии облучения от  $E_1 = 0,5 \text{ кэВ}$  до  $E_4 = 2,0 \text{ кэВ}$  приводит к значительному возрастанию (в  $\sim 2,5$  раза) глубины залегания имплантированного  $Ti^+$ , что наглядно демонстрируется рис. 5.

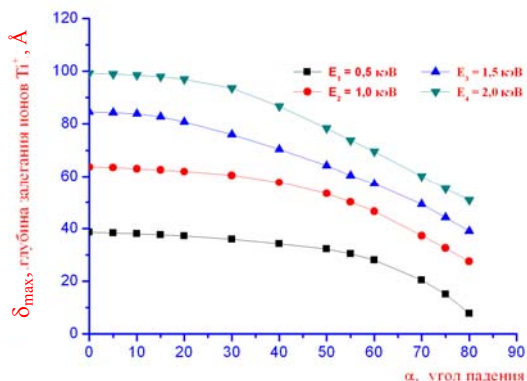


Рис. 5. Профили распределения максимальных глубин залегания имплантированных ионов  $Ti^+$  при различных энергиях облучения модельной пленки Nb

Кроме того, компьютерные расчеты показывают (см. рис. 5), что максимальная глубина модифицированного слоя  $\delta_{\max}$  слабо зависит от угла падения  $\alpha$  (в исследованном энергетическом диапазоне). Так,  $\delta_{\max}$  практически не зависит от угла падения ионов на поверхность пленки в интервале углов  $\alpha = 0 \dots 35^\circ$  для энергий  $E_1 = 0,5 \text{ кэВ}$  и  $E_2 = 1 \text{ кэВ}$ . С увеличением энергии ширина такого углового коридора уменьшается, т. е. угловой диапазон  $\alpha = 0 \dots 22^\circ$  практически не влияет на  $\delta_{\max}$  при энергиях облучения  $E_3 = 1,5 \text{ кэВ}$  и  $E_4 = 2 \text{ кэВ}$ .

На рис. 6 показаны компьютерные расчеты значений максимумов  $G_{\text{imp}}^{\max}(x)$  профилей залегания ионов  $Ti^+$  как функции угла падения ионов в пленке Nb при различных энергиях облучения ( $E_1 = 0,5 \text{ кэВ}$ ,  $E_2 = 1,0 \text{ кэВ}$ ,  $E_3 = 1,5 \text{ кэВ}$ ,  $E_4 = 2 \text{ кэВ}$ ). Видно, что энергии облучения  $E_3$ – $E_4$  приводят к возникновению широкого «плато» в интервале углов  $\alpha = 0 \dots 30^\circ$  ( $0 \dots 33^\circ$  для  $E_4$ ), где максимальные значения профилей залегания (максимальные концентрации) ионов практически не зависят от их угла падения на пленку. Облучение с энергией  $E_2$  сокращает границы «плато» до размеров  $\alpha = 0 \dots 20^\circ$ , а энергия  $E_1$  уменьшает эти границы до  $\alpha = 0 \dots 6^\circ$ .

Кроме того, небольшие энергии облучения ( $E_i \leq 0,5 \text{ кэВ}$ ) демонстрируют «всплеск» максимумов  $G_{\text{imp}}^{\max}(x)$  (концентраций) при небольших углах облучения с последующим резким «падением» кривой  $G_{\text{imp}}^{\max}(x)$  при увеличении  $\alpha > 20 \dots 30^\circ$ , что является следствием все возрастающего (с увеличением  $\alpha$ ) потока отраженных ионов в общем потоке падающих частиц (см. рис. 6). В то же самое время с увеличением энергии ( $E_i \geq 1,0 \text{ кэВ}$ ) профили демонстрируют ( $E_2$ – $E_4$ ) постепенное, незначительное и плавное изменение (в сторону уменьшения) значений концентраций вплоть до углов  $\alpha \sim 55^\circ$ , указывающее на то, что до этих углов  $\alpha$  большинство час-

тиц, упавших на мишень, участвуют в каскадных процессах внутри материала пленки. И лишь большие углы падения  $\alpha \geq 55 \dots 60^\circ$  снова «сдвигают» процесс в сторону превалирования отраженных потоков ионов.

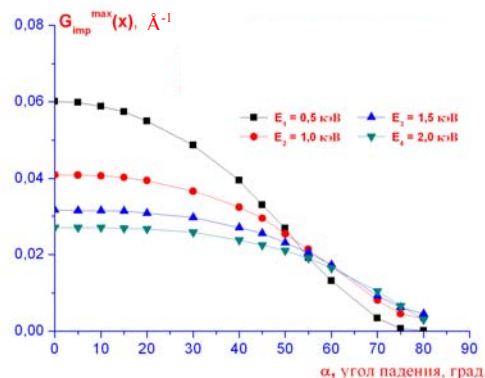


Рис. 6. Максимальные значения профилей залегания имплантированных ионов  $Ti^+$  в зависимости от угла падения ионов на модельную пленку Nb при различных энергиях облучения

При этом глубины  $x_{\max}$ , на которые приходятся максимальные концентрации имплантированных в пленку частиц, в зависимости от угла падения  $\alpha$  в низкоэнергетическом спектре облучения ( $E \leq 2 \text{ кэВ}$ ) показывают закономерности, изображенные на рис. 7.

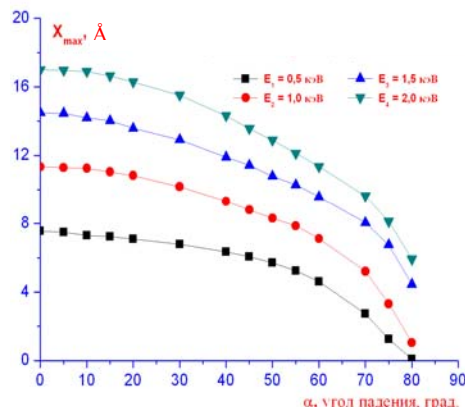


Рис. 8. Положения максимумов  $x_{\max}$  профилей залегания ионов  $Ti^+$  (относительно поверхности), на которые приходятся максимумы  $G_{\text{imp}}^{\max}(x_{\max})$  в зависимости от угла облучения модельной Nb-пленки

Увеличение энергии облучения приводит к существенному росту глубин, на которых наблюдается максимальная концентрация имплантированных ионов. Так, при нормальном падении ионов на пленку ( $\alpha = 0^\circ$ ): в случае  $E_1 = 0,5 \text{ кэВ}$   $x_{\max} \sim 7,6 \text{ \AA}$ , а при  $E_4 = 2 \text{ кэВ}$   $x_{\max} \sim 17 \text{ \AA}$  (рост в 2,2 раза); на величину этого «коридора» слабо влияет угол  $\alpha$ . Если, например,  $\alpha = 60^\circ$ , то при  $E_1 = 0,5 \text{ кэВ}$   $x_{\max} \sim 4,6 \text{ \AA}$ , а при  $E_4 = 2 \text{ кэВ}$   $x_{\max} \sim 11,4 \text{ \AA}$  (рост в 2,5 раза).

В заключение следует отметить, что проведенные первые тестовые компьютерные расчеты показали зависимость первоначальных профилей имплантированных частиц (и их эволюции в зависимости от угла  $\alpha$ ), а также коэффициентов распыления,



отражения и энергий, с которыми расплываются частицы, от размеров наноблоков и значений ширины границ  $h_i$  между наноблоками в аморфной матрице. Выявление и описание тонкостей и закономерностей этих эффектов (с учетом варьирования параметров наноструктурной пленки) требуют дополнительных тщательных компьютерных исследований, что будет представлено в результатах дальнейших публикаций.

## ВЫВОДЫ

Предложена модель мишени, которая реализует нанокристаллическое состояние вещества. С этой целью создана новая версия программы SPURT.MP – программный комплекс SPURT.CRIS, в моделях мишени которого объединены алгоритмы поликристалличности, аморфности и слоистости. Модельная наноструктурная мишень состоит из нанокристаллитов, произвольно ориентированных относительно друг друга и расположенных в аморфной матрице.

С использованием программ SPURT.CRIS и CALCMULT сгенерированы и исследованы профили залегания имплантированных ионов, создаваемых в модельной наноструктурной Nb-пленке. Облучение велось потоками ионов  $Ti^+$  (углы падения ионов варьировались в интервале  $\alpha = 0...80^\circ$ ) для различных энергий падающих ионов в интервале энергий  $E = 0,5...2,0$  кэВ.

Исследовано поведение полученных профилей в зависимости от угла падения  $\alpha$  падающих ионов на пленку для определения оптимальных значений углов падения ионов, при которых достигается максимальная концентрация имплантированных ионов в пленке.

Компьютерные расчеты демонстрируют условия и параметры, при которых можно добиться требуемой концентрации вводимого импланта на нужной глубине. И ее (концентрацию) можно целенаправленно регулировать путем варьирования угла падения ионов пучка.

В результате выполненных компьютерных исследований показано:

1. При обработке поверхности исследуемой модельной пленки Nb ионами  $Ti^+$  с заданной энергией облучения ( $E_1 = 1$  кэВ) максимальная величина модифицированного слоя пленки достигается при углах облучения пленки  $\alpha = 0...20^\circ$  и на глубинах  $\delta \sim 11...15 \text{ \AA}$  от поверхности материала пленки. Увеличение энергии облучения от  $E_1 = 0,5$  кэВ до  $E_4 = 2$  кэВ, приводит к значительному возрастанию (в  $\sim 2,5$  раза) глубины залегания имплантированного  $Ti^+$ .

2. Максимальная глубина модифицированного слоя  $\delta_{\max}$  слабо зависит от угла падения  $\alpha$  (в исследованном энергетическом диапазоне). Так,  $\delta_{\max}$  практически не зависит от угла падения ионов на поверхность пленки в интервале  $\alpha = 0...35^\circ$  для энергий  $E_1 = 0,5$  кэВ и  $E_2 = 1$  кэВ. С увеличением энергии ширина такого углового коридора уменьшается, т. е. угловой диапазон  $\alpha = 0...22^\circ$  практически не влияет на  $\delta_{\max}$  при энергиях облучения  $E_3 = 1,5$  кэВ и  $E_4 = 2$  кэВ.

3. Максимальные значения концентраций имплантированных ионов  $Ti^+$  практически не зависят от их углов падения на Nb-пленку при следующих значениях таких внешних параметров облучения, как энергия ( $E_i$ ) и угол ( $\alpha$ ):

- а) при  $E_i = 0,5$  кэВ и  $\alpha = 0...6^\circ$ ,
- б) при  $E_i = 1,0$  кэВ и  $\alpha = 0...20^\circ$ ,
- в) при  $E_i = 1,5$  кэВ и  $\alpha = 0...30^\circ$ ,
- г) при  $E_i = 2,0$  кэВ и  $\alpha = 0...33^\circ$ .

Все эти факторы могут являться причиной (в некоторых задачах) 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.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

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. Э.В. Козлов, И.В. Терешко, Н.А. Попова. Физическая картина модификации поверхностных слоев и объема металлов и сплавов при воздействии низкоэнергетической плазмы // *Известия высших учебных заведений. Серия «Физика»*. 1994, №5, с. 127-140.
3. В.А. Грибков, Ф.И. Григорьев, Б.А. Калинин, В.Л. Якушин. *Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки материалов* / Под ред. Б.А. Калина. М.: «Круглый год», 2001, 528 с.
4. Н.А. Азаренков, В.М. Береснев, А.Д. Погребняк и др. *Наноматериалы, нанопокртия, нанотехнологии*. Харьков: ХНУ им. В.Н. Каразина, 2009, 209 с.
5. А.А. Андреев, Л.П. Саблев, С.Н. Григорьев. *Вакуумно-дуговые покрытия*. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2010, 317 с.
6. 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.
7. И.Г. Марченко, А.В. Чижикала, И.М. Неклюдов. Математическое моделирование ионного уплотнения пленок ниобия // *Вестник Харьковского университета*. 2004, №642, с. 53-58
8. А.И. Калиниченко, С.С. Перепелкин, В.Е. Стрельницкий. Формирование напряженных сжатия в тонких пленках при ионном облучении // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2007, №6, с. 116-119.
9. 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.
10. 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.
11. Е. Шейман. Сверхтвердые покрытия из нанокмпозитов. Обзор зарубежной литературы //

*Металловедение и термическая обработка металлов.* 2008, №12(642), с. 41-47.

12. 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.

13. T. Mutschele, R. Kirchheim. Hydrogen as probe for the average thickness of a grain boundary // *Scripta Metal.* 1987, v. 21, p. 1101.

14. 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:* Препринт ХФТИ 2008-1. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2008, 21 с.

15. Y. Yamamura, Y. Mizuno. *Low-energy sputtering with the Monte Carlo program ACAT:* Preprint IPPJ-AM-40. Institute of plasma physics, Nagoya: Japan, 1985, 49 p.

*Статья поступила в редакцию 12.06.2013 г.*

## **ДОСЛІДЖЕННЯ ПОВЕДІНКИ ПРОФІЛЕЙ ЗАЛЯГАННЯ ІМПЛАНТОВАНИХ ІОНІВ $Ti^+$ В НАНОСТРУКТУРНІЙ ПЛІВЦІ $Nb$ ЗАЛЕЖНО ВІД КУТА ПАДІННЯ ІОНІВ ПРИ НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНОМУ ОПРОМІНЕННІ. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗА ПРОГРАМОЮ SPURT.CRIS**

*В.І. Павленко, С.М. Слепцов, Л.О. Ферлій, С.О. Чалий*

Методами математичного моделювання, з використанням програмного комплексу SPURT.CRIS, згенеровано та досліджено профілі залягання імпантованих іонів залежно від кута падіння  $\alpha$  іонів при опроміненні поверхні модельної наноструктурної плівки  $Nb$  іонами  $Ti^+$ . Енергія падаючих іонів титану варіювалася від  $E_1 = 0,5$  кеВ до  $E_4 = 2,0$  кеВ, кут падіння  $\alpha$  змінювався в інтервалі  $0 \dots 80^\circ$ . На підставі проведених досліджень отримані кутові залежності профілів первинного розподілу імпантованих іонів у модельній наноструктурній плівці. Визначено максимальні глибини залягання імпантованих іонів. Показано, що для різних кутів падіння при іонній обробці поверхні існують оптимальні значення кутів, при яких досягається максимальна концентрація іонів  $Ti^+$  в плівці, що опромінюється, це дозволяє ефективно проводити процес формування поверхневих шарів матеріалу з наперед заданими властивостями.

## **DISTRIBUTIONS OF $Ti^+$ IMPLANTED IONS IN $Nb$ NANOSTRUCTURED FILM DEPENDING ON IRRADIATION ANGLE AT LOW TEMPERATURES. COMPUTER SIMULATION BY SPURT.CRIS CODE**

*V.I. Pavlenko, S.N. Sleptsov, L.A. Ferliy, S.O. Chalyy*

The SPURT.CRIS code has been used for computer simulation of the  $Ti$  ions implantation in the  $Nb$  nanostructured film at low temperatures. The distributions of  $Ti^+$  implanted ions were generated and analyzed depending on both the ion energy ( $E_{ion}$ ) and irradiation angle ( $\alpha$ ). The ion energy and irradiation angle were varied in the range from 0.5 to 2.0 keV and from  $0^\circ$  to  $80^\circ$ , respectively. The maximal depths of the  $Ti^+$  implanted ions were evaluated using the generated distributions. It was shown that the maximal depth of  $Ti$  implanted ions in the  $Nb$  film is realized at the definite range of irradiation angles. This effect allows optimizing the process of film layers formation with the predetermined properties.