

**Ананьева Нина Геннадьевна**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ НА ОСНОВЕ  
ПРИБЛИЖЕНИЙ СТАЦИОНАРНОГО ПОВЕРХНОСТНОГО ПОЛЯ И  
МНОГОЧАСТИЧНОГО ДИНАМИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

**Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук**

Москва 2004

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского Государственного Университета им.М.В. Ломоносова

Научные руководители: доктор физико-математических наук  
Эльтеков В.А.  
кандидат физико-математических наук  
доцент Самойлов В.Н.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Чуличков А.И.  
кандидат физико-математических наук  
Кадменский А.Г.

Ведущая организация: Московский Энергетический Институт  
(Технический Университет)

Защита состоится « 27 » декабря 2004 года в 16 часов на заседании Диссертационного Совета К 501.001.17 при Московском Государственном Университете им. М.В. Ломоносова по адресу: Москва, Воробьевы Горы, МГУ, Физический факультет , аудитория \_\_\_\_\_.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ.

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2004 года.

Ученый секретарь  
Диссертационного Совета К 501.001.17  
Доктор физико-математических наук

П.А. Поляков

## Общая характеристика работы

**Актуальность.** Моделирование различных процессов, в том числе, физических, лежит в основе понимания этих процессов, их практического использования. Исследуя какое-либо явление мы создаем модель, которая должна быть достаточно простой для реализации, но, в то же время, должна обеспечивать требуемую точность для описания реального явления.

Распыление твердых тел под действием ионной бомбардировки можно рассматривать как классическую задачу взаимодействия многих тел. Теоретические модели, основанные на различных приближениях, применимы только для очень ограниченного круга вопросов. Многие формулы, используемые на практике, получены из эмпирических закономерностей. В настоящее время известно свыше 20 параметров и условий проведения процесса взаимодействия бомбардирующих ионов с твердым телом, от которых зависит значение коэффициента распыления (заряд, масса, энергия, угол падения и доза бомбардирующих ионов, масса и энергия связи атомов мишени, ее температура и т.д.). Естественно, что не существует математических моделей, дающих количественное согласие результатов моделирования с результатами эксперимента по всем параметрам. Как правило, создаются модели, в которых изменяются 2-3 основных параметра, а остальными пренебрегают (ввиду их малости) или фиксируют. Причем изменять некоторые параметры в большом диапазоне значений и независимо друг от друга экспериментально невозможно. Отличительной особенностью численного моделирования по сравнению с экспериментом является то, что численную модель можно создать и исследовать в такой среде, которую совершенно невозможно создать средствами эксперимента. Варьируя условиями проведения численного эксперимента, мы можем проследить детали явления и понять его природу. Критерием качества таких моделей на современном этапе развития является соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных на качественном уровне.

### Цель работы.

- Разработать методику проверки адекватности моделей на качественном уровне. Проанализировать существующие модели формирования пространственного распределения атомов, распыленных с поверхности твердого тела
- Создать математическую модель эмиссии атомов в приповерхностном поле твердых тел. Исследовать движения эмитированных атомов в поверхностном поле твердых тел по различным моделям: статической многочастичной, статического поля, динамической многочастичной.
- Для исследования распыления многокомпонентных мишеней (на примере  $VSi_2$ ) подобрать модель многочастичного динамического взаимодействия, позволяющую разделить вклад различных параметров мишени на процесс селективного распыления.

**Научная новизна.** В данной работе методы компьютерного моделирования использованы для исследования пространственной структуры поверхностного поля. Впервые проведено сравнение изменения поля при магнитном фазовом переходе для монокристалла Ni. Обнаружено, что незначительное изменение поля приводит к существенному отклонению направления движения эмитированной частицы. Проведено сравнение движения эмитированных частиц по разным моделям.

Предложена одномерная модель поверхностного потенциального поля, позволяющая аналитически решить уравнение Шредингера и рассчитать коэффициент прохождения частицами подобного поля. Рассчитаны коэффициенты прохождения и отражения частиц при их движении в поверхностном поле (через потенциальный барьер). Получены осцилляции коэффициента прохождения от характеристик барьера (его ширины и высоты).

С помощью модели многочастичного динамического взаимодействия исследован эффект преимущественного распыления тыльной поверхности мишени из определенных узлов кристаллической решетки при ионной бомбардировке двухкомпонентного монокристалла.

**Практическая ценность.** Полученные результаты имеют существенное значение для развития методов анализа поверхности твердых тел, основанных на распылении поверхности ионными пучками. Полученные результаты численных расчетов интегральных и дифференциальных характеристик распыления бомбардируемой поверхности монокристаллического и квазиаморфного  $\text{VSi}_2$  могут быть полезными для решения проблем направленного изменения свойств материалов, при систематизации пока еще разрозненных данных по взаимодействию ионов с монокристаллическими и аморфными двухкомпонентными мишенями. Знание количественных характеристик воздействия ионного пучка на материалы позволит решать задачи выбора требуемых условий облучения, поиска новых технологических решений в микроэлектронике и других приложениях.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались и обсуждались:

- на 5-м Всесоюзном совещании-семинаре «Диагностика поверхности ионными пучками» (Донецк, 12-16 сентября 1988 г.);
- на 28-м семинаре «Моделирование на ЭВМ радиационных и других дефектов в кристаллах» (Ташкент, 11-13 октября 1988 г.);
- на XI конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью» (Москва, 7-12 сентября 1993 г.);
- на XXX Международной конференции «Физика взаимодействия заряженных частиц с кристаллами» (Москва 29-31 мая 2000 г.).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 11 печатных работах. Список публикаций приведен в конце автореферата.

**Структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 97 страниц. Список литературы включает 92 наименования.

### Содержание работы

**Во введении** обоснована актуальность и новизна представленной работы, сформулированы цели исследований, дается краткое изложение содержания по главам.

**В первой главе** дан обзор моделей формирования максимумов эмиссии на пространственных распределениях атомов, распыленных с поверхности монокристаллов под действием ионной бомбардировки. Эти модели можно разделить на две группы: 1 – формирование максимумов эмиссии за счет каскадов столкновений атомов внутри твердого тела, 2 – в поверхностном поле. Безусловно, и столкновения атомов в твердом теле, и поверхностное поле влияют на направление эмиссии атомов. Но так же очевидно, что завершающий этап – движение атома в поверхностном поле, дает именно тот результат, который мы наблюдаем экспериментально. Вопрос в том, можно ли, ограничиваясь только последней стадией распыления (движением в поверхностном поле) получить какую-либо информацию.

В качестве примера исследовано изменение потенциального поля на поверхности грани (001) монокристалла Ni при магнитном фазовом переходе. В качестве модели выбрана простейшая модель твердого тела – статическая. Атомы кристалла считаются неподвижными, силы взаимодействия между атомами – парными, центральными, потенциальными. В качестве межатомного потенциала был взят потенциал Морзе для Ni в парамагнитном состоянии. Для Ni в ферромагнитном состоянии взят тот же потенциал, но с ферромагнитной добавкой (отрицательной). Методами компьютерного моделирования рассчитана конфигурация потенциального поверхностного поля монокристалла Ni (рис. 1). Потенциал взаимодействия в каждой точке пространства рассчитывается как сумма потенциалов от каждого атома кристалла. Показано на качественном уровне, что это поле должно обеспечивать фокусировку даже изотропного потока эмитируемых атомов в направлениях, близких к направлениям, в которых экспериментально наблюдаются максимумы эмиссии распыленных частиц (пятна Венеры). При магнитном фазовом переходе из ферро- в парамагнитное состояние максимум эмиссии смещается в сторону от нормали к поверхности, что и наблюдается в экспериментах.

В приближении статического поля рассчитаны траектории атомов, эмитированных из узла на поверхности грани (001) монокристалла Ni в направлениях, близких к нормали к поверхности. Исследованы изменения траекторий эмитированных атомов при магнитном фазовом переходе. Обнаружено, что не-

большое изменение потенциального поля на поверхности при f-p переходе приводит к значительному изменению отклонения конечного полярного угла вылета от первоначального направления эмиссии. Существующие в настоящее время аналитические модели распыления не описывают существенных особенностей траекторий атомов, например, фокусировки траекторий в направлении к

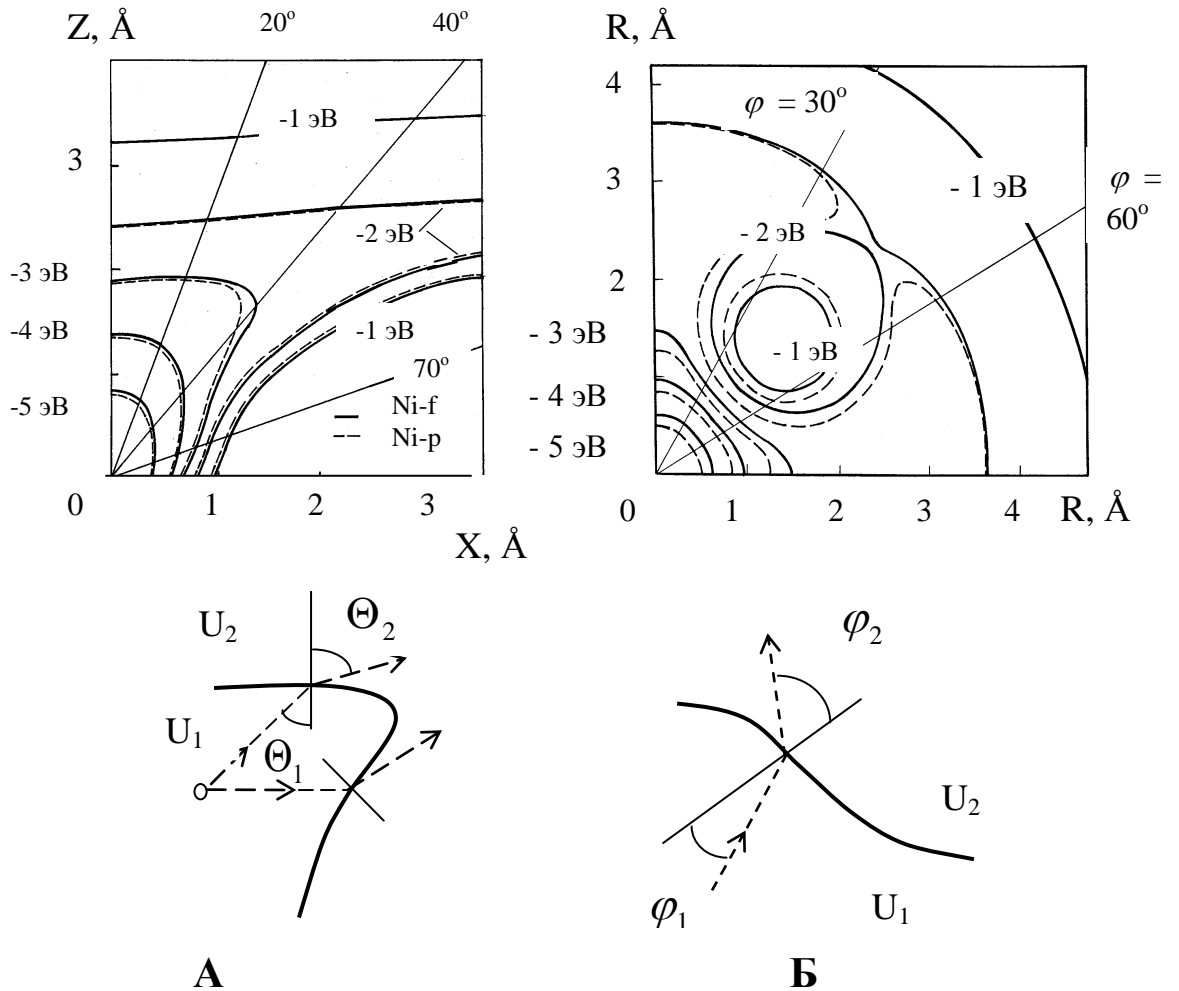


Рис. 1. Конфигурация эквипотенциалей для поверхности (001) монокристалла Ni, и преломление траекторий эмитируемых атомов на потенциальном барьере подобной формы.  $U_1 < U_2$ .

А). Для фиксированного азимутального угла  $\varphi = 0^\circ$ .

Б). Для фиксированного полярного угла  $\Theta = 45^\circ$ .

нормали к поверхности на начальном этапе вылета (в частности, в силу того, что в этих моделях не учитывается многочастичный характер взаимодействия вылетающей частицы с кристаллом).

Проведено сравнение эмиссии атомов в поверхностном поле в статическом и квазидинамическом приближениях. Сравнение результатов, полученных по статической и квазидинамической моделям эмиссии атомов из узла кристаллической решетки показало, что возможно специальным образом выбрать значения энергии  $E_0$  (от 25 до 50 эВ), для которых разница положения максимума

углового распределения, оказывается несущественной (около  $2^\circ$ ). Таким образом, применяя для этого диапазона  $E_0$  статическую модель, можно достаточно точно оценить положение максимума эмиссии, интегрируя уравнения движения лишь одной частицы, а не всех  $N$  атомов блока.

**Вторая глава** посвящена аналитическому исследованию движения частиц в поверхностном потенциальном поле. Предложена модель потенциального поля на основе компьютерных расчетов структуры поля в статическом приближении, проведенных в первой главе. Предлагается рассчитывать потенциал поля в виде функции, гладко сопряженной на поверхности твердого тела (при  $X = 0$ ) из двух частей (рис.2):

$$U(x) = -\frac{U_d}{ch^2(\alpha_1 x)} - U_c, \quad x \leq 0$$

$$U(x) = -\frac{U_d + U_c}{ch^2(\alpha_2 x)}, \quad x \geq 0$$

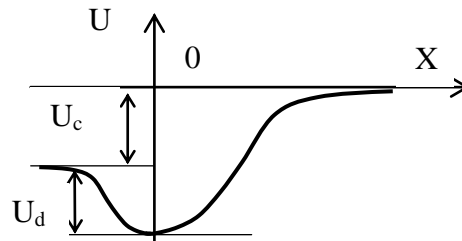


Рис. 2. Модель поверхностного поля. Распределение потенциала поля в направлении по нормали к поверхности.  $\alpha_i$  характеризуют ширину барьера.

Аналитически решено одномерное стационарное уравнение Шредингера. Коэффициенты для частного решения находим из условия непрерывности волновых функций и их производных при  $X = 0$ . Представляя волновые функции на бесконечности как  $\psi_2 = a e^{ik_2 x}$ ,  $\psi_1 = e^{ik_1 x} + b e^{-ik_1 x}$ , находим коэффициент прохождения через барьер  $D = 1 - bb^*$ . Коэффициент отражения  $R = bb^* = 1 - D$ . Коэффициент прохождения  $D$  – функция шести переменных:  $D(m, E, \alpha_1, \alpha_2, U_d, U_c)$ , где  $m, E$  – характеристики частицы,  $\alpha_1, \alpha_2, U_d, U_c$  – характеристики поля. Если ввести безразмерные переменные

$$A = \frac{\alpha_2}{\alpha_1}, \quad K = \frac{\sqrt{2mE}}{\alpha_2 \hbar}, \quad E_c = \frac{U_c}{E}, \quad E_d = \frac{U_d}{E}.$$

$$D = 1 - \left| \frac{\sin(\pi K_2 A \sqrt{1 + E_c}) \frac{G_1 - AG_2}{G_1 + AG_2} + \cos(\pi \sqrt{0.25 + A^2 K_2^2 E_d})}{1} \right|^2 \cdot \frac{1}{sh^2(\pi K_2 A \sqrt{1 + E_c}) + \cos^2(\pi \sqrt{0.25 + A^2 K_2^2 E_d})}$$

Решение проанализировано асимптотически и численно. Получены осцилляции коэффициента отражения от характеристик барьера (его ширины и высоты). Ширина потенциального барьера изменяется при изменении угла наблюдения (в экспериментах при изучении углового распределения распыленных частиц). Высота барьера будет изменяться, например, при магнитном фазовом переходе. Проведена оценка возможности экспериментального наблюдения осцилляций выхода эмитированных частиц (коэффициента прохождения). Для атомов (и ионов) наблюдать осцилляции подобной природы весьма сложно. Для электронов с энергиями порядка единиц эВ, эти осцилляции должны наблюдаться экспериментально.

**В третьей главе** диссертации методом компьютерного моделирования с использованием модели многочастичного динамического взаимодействия исследуется распыление тонких пленок двухкомпонентного кристалла  $VSi_2$ .

В основе метода многочастичного динамического взаимодействия лежит численное решение системы дифференциальных уравнений движения  $N$  материальных точек с массами  $m_i$ , то есть  $6N$  дифференциальных уравнений первого порядка с заданными начальными условиями. Численное интегрирование проводится методом Рунге-Кутты второго порядка, используется процедура временных ассоциаций для более быстрого расчета сил взаимодействия. Силы взаимодействия считаем потенциальными, парными, центральными. Комплекс программ на основе этих моделей был разработан В.А. Эльтековым. В.Н. Самойловым было предложено исследовать распыление виртуальных кристаллов ванадия  $V-V'_2$  и кремния  $Si'-Si_2$  с кристаллической структурой дисилицида ванадия  $VSi_2$  (C40).

В качестве потенциала межчастичного взаимодействия использовался потенциал Борна-Майера, гладко сопряженный с обратноквадратичным потенциалом. Использование потенциала отталкивания вместо отталкивания – притяжения, (притяжение учитывается использованием потенциального барьера для эмитированных частиц) дает возможность разделить вклад каскадов столкновения и энергии связи в характеристики распыления. Используя одинаковый потенциальный барьер для ванадия и кремния, мы исключаем влияние энергии связи на преимущественное распыление в нашей модели.

Ионы криптона  $Kr^+$  бомбардировали три монокристаллические пленки, толщиной три атомных слоя каждая (47 атомов):  $VSi_2$ , и виртуальные  $V-V'_2$  и  $Si'-Si_2$  с такой же кристаллической структурой, что и  $VSi_2$ . Рассчитывались



следующие характеристики распыления: прохождение на прострел ионов криптона, распыление тыльной поверхности атомов мишени, причем отдельно из ванадиевых и кремниевых узлов решетки, энергетические спектры прошедших через пленку частиц. Ионы  $Kr^+$  падали перпендикулярно поверхности, их энергия менялась от 50 эВ до 100 кэВ. На каждый кристаллит падало по 1051 иону.

Анализ характеристик прошедших через пленку ионов криптона показал, что используемая модель многочастичного динамического взаимодействия адекватно описывает процесс распыления (при энергиях бомбардирующих ионов выше 100 эВ). Прозрачность кристалла уменьшается с увеличением плотности мишени, различия в энергетических спектрах ионов, прошедших через различные пленки, можно объяснить разницей коэффициентов передачи энергии атом-ион и эффективных сечений взаимодействия.

Проведено сравнение характеристик распыления тыльной поверхности тонкой монокристаллической пленки  $VSi_2$  и виртуальных кристаллов  $V-V'_2$  и  $Si'-Si_2$ . Получено, что для всех трех образцов наблюдается, в диапазоне энергий бомбардирующих ионов от 200 эВ до 10 кэВ, преимущественное распыление атомов через тыльную поверхность из ванадиевых узлов кристаллической решетки (рис. 3). Из анализа полученных результатов был сделан вывод о том, что сложная пространственная структура мишени может играть ре-

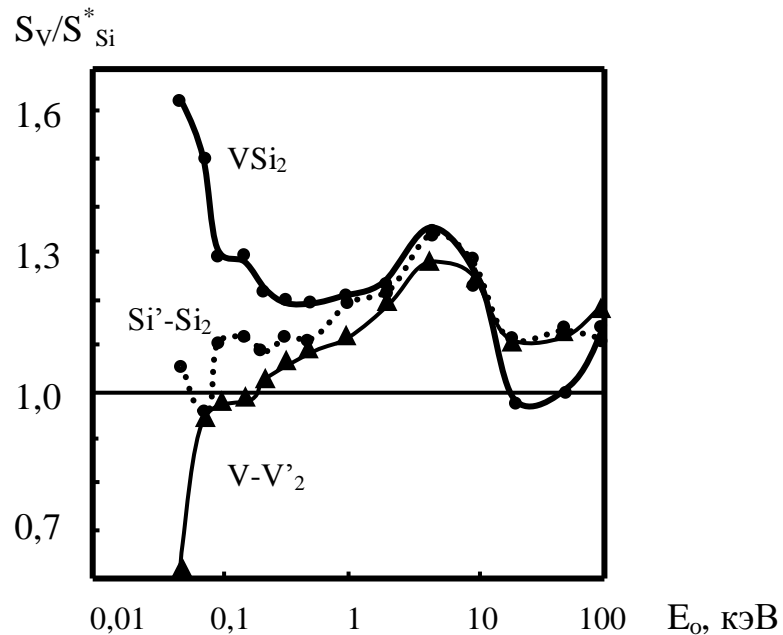


Рис. 3. Зависимость отношения коэффициентов распыления атомов тыльной поверхности тонких пленок, эмитированных из V и Si узлов, от начальной энергии ионов  $Kr^+$ . Отношение коэффициентов распыления нормировано на стехиометрическое отношение для необлученного образца.

шающую роль в преимущественном распылении атомов (по сравнению с

разницей масс атомов компонент), так как дает разное распыление компонент с равными массами и энергиями связи из различных узлов решетки, приведенными к равной концентрации. Тип кристаллической решетки зависит от вида взаимодействия атомов в кристалле. Поэтому, видимо, целесообразно искать зависимость коэффициента преимущественного распыления от потенциала взаимодействия атомов между собой (энергия связи атомов, которая входит в теоретические формулы оценки преимущественного распыления, тоже зависит от потенциала взаимодействия атомов).

Проведены расчеты распыления квазиаморфной и монокристаллической мишеней в рамках одной модели. Для обоих типов мишени рассчитаны коэффициенты распыления и энергетические спектры атомов компонент, распыленных назад и на прострел.

Кристаллит состоял из 397 атомов, расположенных в пяти слоях идеальной решетки монокристалла  $\text{VSi}_2$  (структура типа C40), параллельных плоскости (0001). Ионы  $\text{Ne}^+$  ( $m_{\text{Ne}^+} < m_{\text{Si}} < m_{\text{V}}$ ) с энергией 10 кэВ падали по нормали к бомбардируемой грани (0001). Взаимодействие ион-атом и атом-атом описывалось потенциалом, состоящим из двух частей: обратно квадратичного потенциала и потенциала Борна - Майера.

При моделировании распыления монокристалла  $\text{VSi}_2$  тепловые смещения атомов кристалла не учитывались. В качестве модели аморфной среды было предложено использовать модель аномального увеличения «тепловых» смещений атомов из узлов решетки, соответствующих температуре плавления. В настоящей работе амплитуды смещений атомов V и Si из узла считались одинаковыми и равными  $x_{\text{max}} = 0,337 \text{ \AA}$ . Смещения атомов по любой координате не зависели от смещений по другим координатам и от смещений остальных атомов кристалла и были распределены равномерно в интервале  $(-x_{\text{max}}, x_{\text{max}})$ . Каждый следующий ион падал на новую реализацию такой квазиаморфной среды.

Расчеты распыления квазиаморфной и монокристаллической мишеней в рамках одной модели позволили выявить особенности взаимодействия ионов с твердым телом при изменении степени упорядоченности в расположении его атомов и определить тенденцию изменений в распылении атомов компонент назад и на прострел. Установлено, что при разупорядочении структуры тонкой пленки  $\text{VSi}_2$ , меняется характер преимущественного распыления компонент на прострел. Из монокристаллической пленки наблюдаем преимущественное распыление легкой компоненты мишени (Si), из аморфной – тяжелой (V).

В заключении кратко сформулированы **основные результаты и выводы** диссертации.

## Основные результаты и выводы

Создана информационная технология получения знаний о процессе распыления твердых тел на основе моделей, обладающих качественным согласием с экспериментальными данными:

1. Статическая многочастичная модель поверхностного поля монокристалла может использоваться для объяснения угловых распределений распыленных атомов.
  - Атомы, эмитируемые изотропно из узла на поверхности грани (001) монокристалла Ni, движущиеся в поверхностном потенциальном поле, будут фокусироваться в определенных направлениях, соответствующих тем направлениям, в которых экспериментально наблюдаются максимумы эмиссии распыленных атомов, то есть пятна Венеры. Небольшое изменение потенциального поля у поверхности грани (001) монокристалла при f–p переходе приводит к значительному изменению отклонения конечного угла вылета от первоначального направления эмиссии.
2. На основе компьютерных расчетов конфигурации поверхностного потенциального поля предложена модель поверхностного барьера.
  - При изменении параметров этого барьера (его высоты и ширины) появляются осцилляции вероятности прохождения и отражения от барьера движущихся частиц.
  - Осцилляции заметны для электронов с энергией до 10 эВ. При распылении атомов (ионов) квантовые эффекты проявляются при энергиях не выше  $10^{-2}$  эВ, поэтому наблюдать их весьма сложно.
3. На основе приближения многочастичного динамического модели взаимодействия атомов в монокристалле использовалась модель, позволяющая разделить вклад основных характеристик мишени – массы и энергии связи атомов, в селективное распыление. В качестве примера рассмотрено распыление через тыльную поверхность ультратонкой пленки VSi<sub>2</sub>. Получены следующие результаты:
  - Определена тенденция изменений в распылении атомов компонент назад и на прострел при изменении степени упорядоченности в расположении атомов мишени кристалла VSi<sub>2</sub>. При разупорядочении структуры тонкой пленки VSi<sub>2</sub>, меняется характер преимущественного распыления компонент тыльной поверхности мишени. При моделировании бомбардировки монокристаллической пленки ионами Ne<sup>+</sup> с энергией 10 кэВ, наблюдалось преимущественное распыление атомов легкой компоненты, из квазиаморфной мишени – атомов тяжелой компоненты.
  - Проведено детальное сравнение характеристик распыления тыльной поверхности ультратонких монокристаллических пленок дилицида ванадия VSi<sub>2</sub> и виртуальных кристаллов чистых ванадия и

кремния (с кристаллической структурой  $VSi_2$ ). Для всех трех образцов наблюдается, как правило, преимущественное распыление атомов тыльной поверхности из ванадиевых узлов кристаллической решетки.

## Публикации

- В.Н. Самойлов, В.А. Эльтеков, Б. Фритч, Н.Г. Ананьева. Моделирование распыления атомов компонент назад и на прострел при ионной бомбардировке монокристаллической и квазиаморфной мишени. // Вестн. Моск. Ун-та. Сер.3. Физ., астр. 1987. Т. 28. № 6. С. 65-69.
- Н.Г. Ананьева, А.Н. Матвеев, В.Н. Самойлов. Об изменении эмиссии атомов с поверхности монокристалла никеля при магнитном фазовом переходе. // Вестн. Моск. Ун-та. Сер.3. Физ., астр. 1989. Т. 30. № 6. С. 63-68.
- Н.Г. Ананьева, В.А. Эльтеков. Осцилляции коэффициента отражения ионных и электронных потоков за счет поверхностного потенциального поля. // Поверхность. 2001. № 5. С. 33-35.
- V.N. Samoylov, N.G. Ananieva, V.A. Eltekov. On the shape of potential barrier at the surface of single crystal. // Abstracts of 12th Int. Conf. on Atomic Collisions in Solids. Okayama, Japan, 1987. P.13.
- Н.Г. Ананьева, А.Н. Матвеев, В.Н. Самойлов. Изменении эмиссии атомов с поверхности монокристалла никеля при магнитном фазовом переходе. // Тезисы докл. Всесоюз. совещания-семинара “Диагностика поверхности ионными пучками”. Донецк, 1988. С. 102-103.
- В.Н. Самойлов, Н.Г. Ананьева. Размерные эффекты при бомбардировке тонких двухкомпонентных монокристаллических пленок. // Тезисы докл. 28-го семинара “Моделирование на ЭВМ процессов радиационных и других дефектов в кристалле”. Ташкент. 1988. С. 16-17.
- О.С. Корсакова, Н.Г. Ананьева, В.Н. Самойлов. Исследование эмиссии атомов в реальном поле отталкивания-притяжения у поверхности кристалла. // Материалы 11-й конф. “Взаимодействие ионов с поверхностью”. Москва, 1993. Т. 1. С. 128-130.
- Н.Г. Ананьева, О.С. Корсакова. Формирование пятен Венера в поверхностном поле монокристаллов f-Ni и p-Ni. // Материалы 11-й конф. “Взаимодействие ионов с поверхностью”. Москва, 1993. Т. 1. С. 131-133.
- V.N. Samoylov, N.G. Ananieva. The single-crystallinity effect in preferential sputtering of two-component ultrathin films under ion beam processing: molecular dynamics computer simulation study. // Ab-

stracts of Materials Research Society 1995 Spring Meeting. San Francisco, Ca., USA, 1995. P. P7.22.

- Н.Г. Ананьева, В.А. Эльтеков. Осцилляции коэффициента отражения ионных и электронных потоков за счет поверхностного потенциального поля. // Тезисы докл. 30-й Межд. конф. "Физика взаимодействий заряженных частиц с кристаллами". Москва, 2000. С. 39.
- Н.Г. Ананьева, В.Н. Самойлов. Моделирование распыления на прострел ультратонких двухкомпонентных монокристаллических пленок. Препринт. М.: физ. ф-т МГУ. 2004. № 17 /2004. 15 с.