

АНИЗОТРОПИЯ ЭНЕРГИИ ОТДАЧИ ПРИ БОМБАДИРОВКЕ
МОНОКРИСТАЛЛА МЕДЛЕННЫМИ ИОНАМИ
ANISOTROPY OF THE RECOIL ENERGY DURING
BOMBARDMENT OF A SINGLE CRYSTAL BY SLOW IONS

В.В. Евстифеев¹, Н.В. Костина¹
V.V. Evstifeev¹, N.V. Kostina¹

¹Кафедра физики, Пензенский государственный университет,
Красная 40, Пенза, Россия, physics@pnzgu.ru

The recoil energy has been calculated for the bombardment of the (001) surface edge of a vanadium single crystal by K^+ ions ($E_0 = 10 - 50$ eV) in the [110] and [100] crystallographic directions, and the anisotropy for transfer of the maximal energy to one atom from the group of (3 - 5) atoms, simultaneously participating in interaction, has been revealed. The energy thresholds of sputtering in the indicated directions have been also determined.

В работе [1] представлены результаты компьютерных расчетов энергии отдачи $E_{от}$, передаваемой атомам монокристалла ванадия ионами K^+ и Ar^+ с начальной энергией бомбардировки $E_0 = 10 - 100$ эВ. Расчет проводился методом молекулярной динамики в рамках модели многочастичных взаимодействий. Проведена численная томография поверхностной грани (001) и установлены места максимальной передачи энергии. Выбор ионов калия и аргона был сделан специально, чтобы убедиться, влияет ли структура их электронных оболочек при практически одинаковой массе на результаты исследований. Оказалось, что с энергетической точки зрения никакого влияния не обнаружено. Величина энергии отдачи от этих ионов совершенно одинакова в пределах ошибок численного эксперимента.

В качестве приложения полученных результатов был предложен метод определения пороговой энергии $E_{пор}$ распыления. Если предположить, что максимальная энергия отдачи $E_{от\max}$, полученная атомом мишени от иона в процессе бомбардировки, равна энергии связи $E_{св}$ металла и достаточна для его распыления, то, рассчитав $E_{от\max}$ для разных E_0 , можно найти и порог распыления для данного металла из построенной зависимости $E_{от\max}(E_0)$. Та минимальная энергия E_0 , для которой $E_{от\max} = E_{св}$ и будет являться порогом распыления.

Целью настоящей работы является изучение влияния ориентации кристалла относительно плоскости падения ионов на величину максимальной энергии отдачи и, соответственно, на величину пороговой энергии распыления.

На рис. 1, а показана геометрия падения ионов на мишень. В отличие от [1], где плоскость падения ионов на поверхностную грань (001) совпадала с направлением [100], в данном случае плоскость падения проходит вдоль направления, параллельного или совпадающего с кристаллографическим направлением [110].

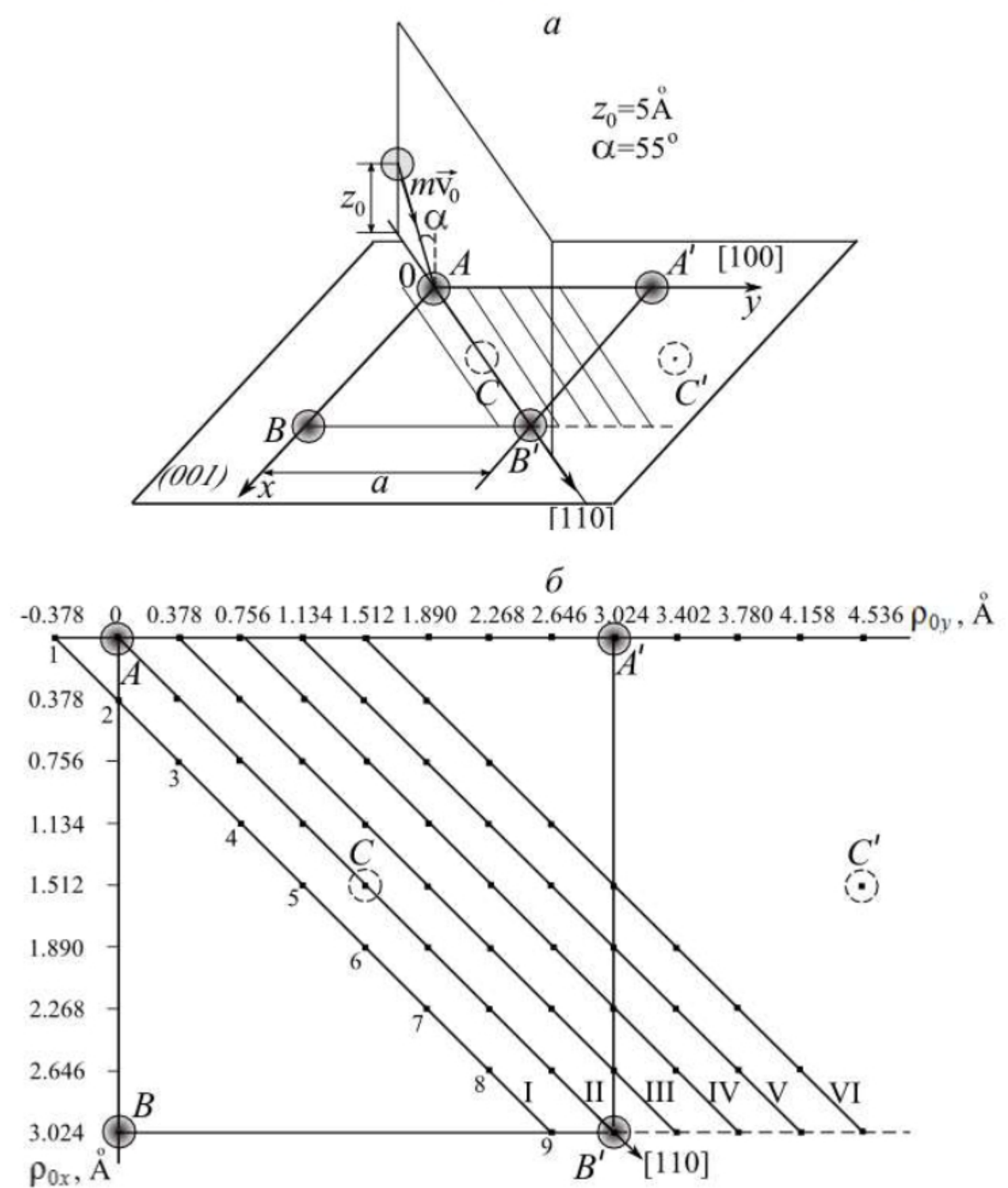


Рис. 1

Расчеты энергии отдачи проводили для разных прицельных параметров $\rho(\rho_{0x}, \rho_{0y})$, соответствующих точкам падения ионов на мишень (точки 1–9) в определенных направлениях (I–VI) (рис. 1, б). Анализ результатов показал, что наибольшую энергию отдачи атомы получают в случае, когда ион движется в плоскости, совпадающей с направлением [110] (направление II).

На рис. 2 показана для разных энергий бомбардировки E_0 зависимость максимальной энергии отдачи $E_{от\max}$, получаемой одним из группы (3–5) атомов кристалла ванадия, участвующих одновременно в столкновении с ионом K^+ , от прицельного параметра ρ^H для направления II. Из рисунка следует, что наибольшая максимальная энергия отдачи E_n приходится на точки падения 1–3.

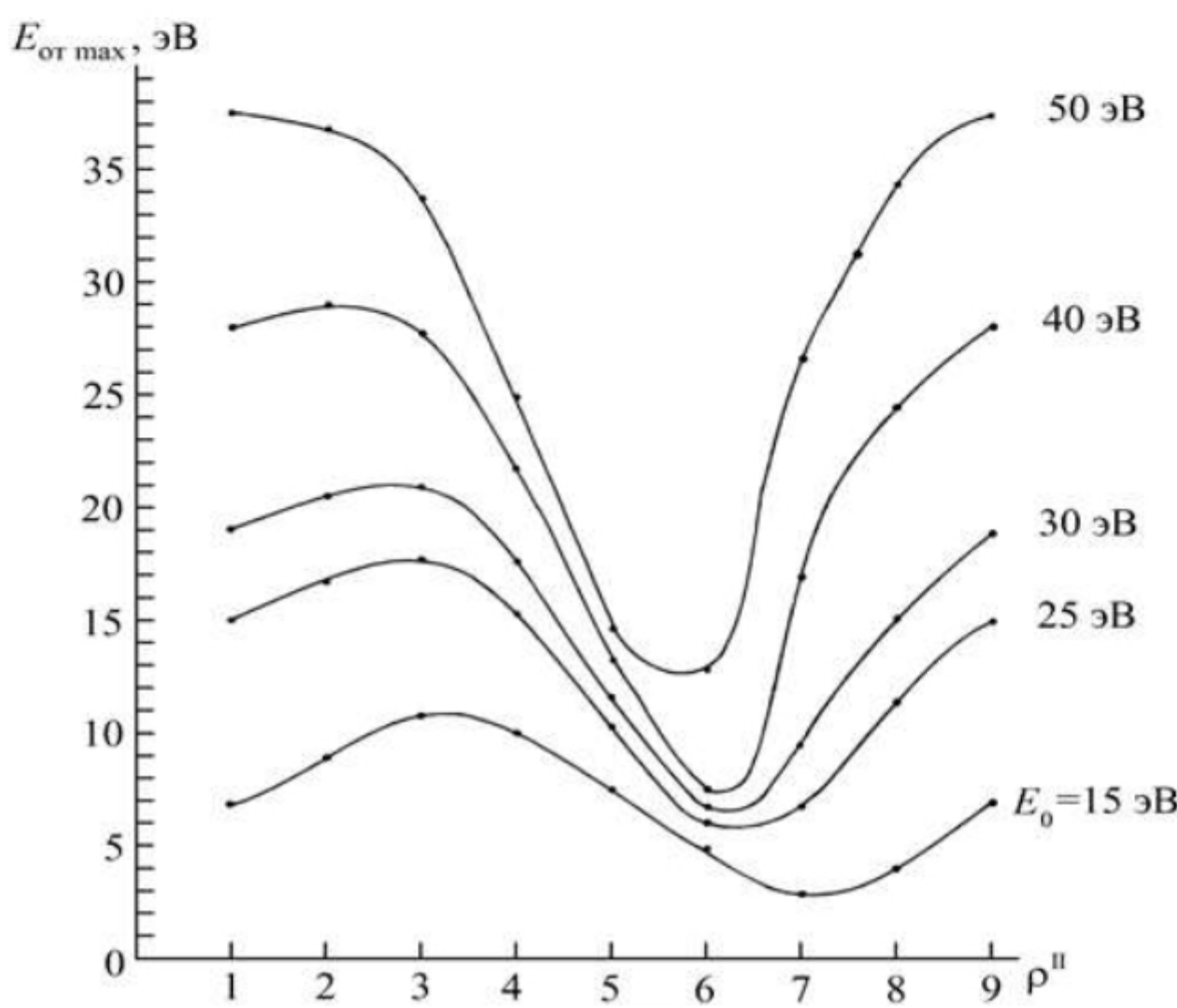


Рис. 2

На рис. 3 приведена зависимость наибольшей E_n из всех возможных максимальных значений энергии отдачи $E_{от\max}$, переданной атому, от энергии бомбардировки для кристаллографического направления [110].

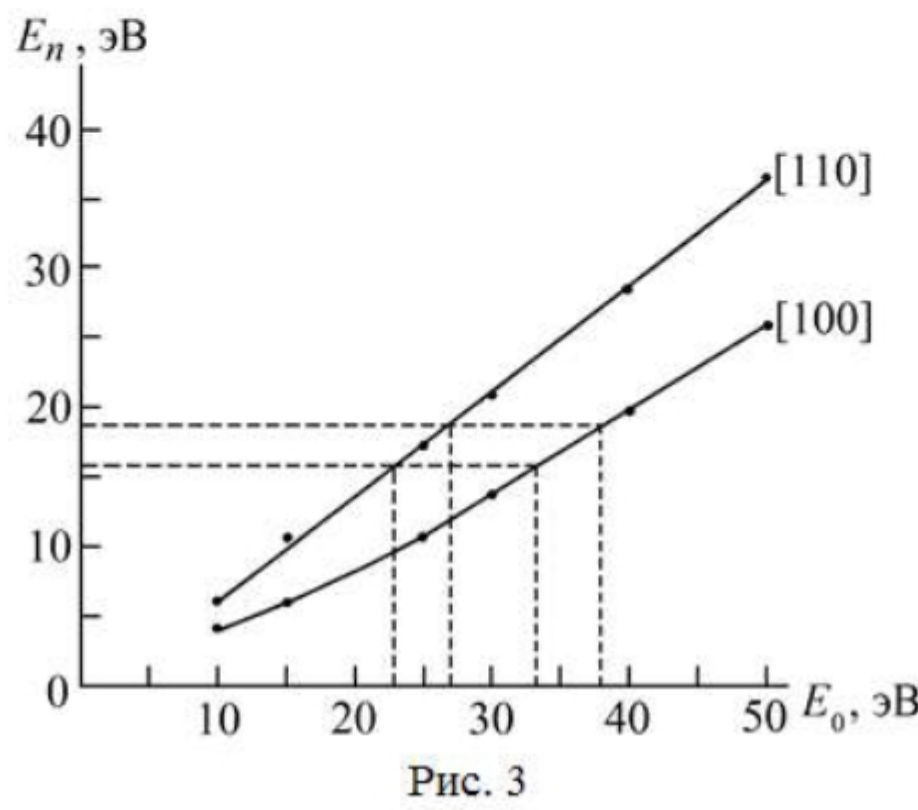


Рис. 3

На том же рисунке в качестве сравнения приведена зависимость $E_n(E_0)$ для той же грани (001), но когда движение иона происходит в плоскости, совпадающей с кристаллографическим направлением [100] [1]. Видно, что кривая зависимости $E_n(E_0)$ для направления [110] идет выше, чем для направления [100], т.е. имеет место анизотропия максимальной энергии отдачи при движении иона в плоскостях, совпадающих с разными кристаллографическими направлениями.

Предполагая, что наибольшая из максимальных энергий отдачи E_n равна энергии связи $E_{св}$, можно из рис. 3 найти пороговую энергию распыления. По Странскому [2] для металлических кристаллов энергия связи аддитивна и для ее определения учитывается взаимодействие только ближайших первых и вторых соседей. (Для низко индексных граней имеется взаимодействие только между ближайшими соседями). Полная величина энергии связи определяется числом первых и вторых ближайших соседей, которым соответствуют энергии ϵ_1 и $\epsilon_2 < 0.1 \cdot \epsilon_1$ на каждую связь соответственно. Для ОЦК-кристалла в полукристаллическом положении энергия связи атома решетки $E_{св}$ в точности равна энергии решетки (в расчете на один атом) $(3/6)$ или $E_{св} = 3 \cdot \epsilon_1 + 6 \cdot \epsilon_2$, где «тройка» и «шестерка» указывают число первых и вторых соседей соответственно. Приняв энергию ϵ_1 равной энергии сублимации металла, для ванадия $\epsilon_1 = 5.3$ эВ/ат, энергия связи будет равна $E_{св} = (15.9 + (< 3.18))$ эВ, т.е. полная величина энергии связи лежит в пределах $15.9 < E_{св} < 19.08$ эВ. Следовательно, согласно рис. 3 порог распыления грани (001) ванадия для направления [100] лежит в пределах $33.2 < E_{пор} < 38$ эВ, а для направления [110] он лежит в пределах $23 < E_{пор} < 27$ эВ.

Таким образом, анизотропия максимальной энергии отдачи приводит к анизотропии пороговой энергии распыления монокристалла металла.

[1] В.В. Евстифеев, Н.В. Костина, Известия РАН, сер. физ. 84,6 (2020) 870.
[2] О. Кнаке, И.Н. Странский, УФН. LXVIII,2 (1959) 261.