

Based on the maximum recoil energies E_{reclmax} calculations, which have been carried out by the molecular dynamics method within framework of the many-particle interactions mechanism, the threshold sputtering energies E_{thr} for a number of metals with a BCC lattice upon bombardment with low-energy K⁺-ions (E_0 =10-60 eV) are determined. Dependence of the E_{thr} on the metal surface binding energy E_{bond} , on the constant a of its crystal lattice, and on the orientation of the crystal with respect to the direction of the initial motion of the ion is established.

Предложенный ранее [1] способ определения пороговых энергий E_{thr} распыления монокристалла ванадия ионами K⁺ низкой энергии позволил провести серию вычислений максимальных энергий отдачи E_{reclmax} и определить пороговые энергии E_{thr} для ряда металлов с ОЦК решеткой (Ti, Cr, α -Fe, β -Mn, δ -Zr, Mo, Nb). Модификации α -Fe, β -Zr и δ -Mn имеют устойчивую ОЦК решетку при температурах менее 910°С для железа, выше 860°С для циркония и более 1143°С для марганца [2]. Выбор бомбардирующих ионов и указанных металлов в качестве мишеней обусловлен тем, что используемый в расчетах потенциал взаимодействия V_s был восстановлен методом МОЛКАО для пары K-V и K-Ti. Хром, марганец и железо взяты потому, что отношения их масс M к массе m бомбардирующего иона K⁺ $\mu = M/m$ близки или равны отношениям m для мишеней из титана и ванадия ($\mu = 1.23$ -1.43), что исключает возможную зависимость пороговой энергии распыления E_{thr} от μ . Цирконий, ниобий и молибден выбраны из-за их большого значения энергии связи E_{bond} по сравнению с Ti, Cr, Mn и Fe (в предположении, что и для них применим потенциал V_s), чтобы была возможность установить зависимость пороговой энергии распыления от энергии связи E_{bond} поверхностных атомов металлов и от постоянной a их кристаллических решеток.

Таким образом, целью настоящей работы является определение пороговых энергий распыления ряда металлов ионами K⁺ низкой энергии (E_0 =10-60 eV) при фиксированном угле падения путем численного эксперимента, проведенного методом молекулярной динамики с использованием дальнодействующего потенциала взаимодействия.

На рис. 1 показана геометрия бомбардировки (рис. 1,а) поверхностной грани (001) монокристалла титана с ОЦК решеткой ионами K⁺, падающими под углом $\alpha = 55^\circ$, и схема их попадания на мишень (рис. 1,б). Стартовое положение иона определялось его расстоянием z_0 до поверхности мишени, равным 5 ангстрем. При этом рассматривались два случая: 1) плоскость падения иона совпадает с плоскостью (100) кристалла, которая перпендикулярна грани (001) и проходит вдоль кристаллографического направления [010]; 2) плоскость падения иона совпадает с плоскостью (1 $\bar{1}$ 0) кристалла, которая перпендикулярна грани (001) и проходит вдоль направления [110].

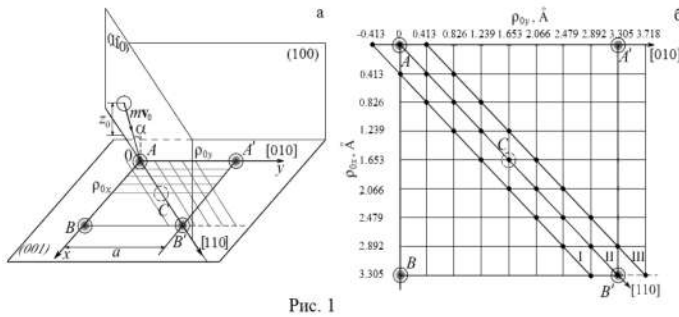


Рис. 1

Для проведения расчетов исследуемая область мишени разделена на квадраты в виде сетки, величина ячейки которой составляла десятые доли ангстрема, а ее узлы соответствовали точкам попадания иона на мишень. Координаты этих точек определялись прицельными параметрами $\rho(\rho_{0x}, \rho_{0y})$. Поскольку наибольшая энергия отдачи E_n из максимальных значений E_{reclmax} соответствует точкам попадания, лежащим на кристаллографических направлениях гребнях атомов [1], ее величина определялась именно для этих точек.

В расчетах использовался дальнодействующий потенциал взаимодействия $V_s = [2117.2 \cdot \exp(-3.217r) + 171.2 \cdot \exp(-1.423r)]/r$, где расстояние r в ангстремах, энергия взаимодействия V_s в eV. Радиус обрезания составлял 3 ангстрема.

Построив кривую зависимости E_n от E_0 (рис. 2), можно (по указанной в [1] методике) найти пороговые энергии E_{thr} распыления изучаемых металлов, для чего следует положить $E_n = E_{\text{bond}}$.

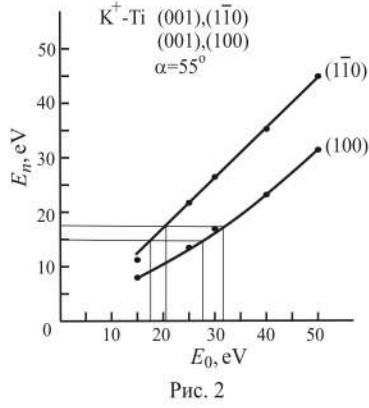


Рис. 2

В таблице 1 представлены найденные значения пороговых энергий для восьми исследованных металлов. При этом определены нижние и верхние ее значения. Нижние значения соответствуют энергии связи E_{bond} , когда учитываются только первые ближайшие соседи ($E_{\text{bond}} = 3\varepsilon_1$), а верхние когда принимаются во внимание и вторые ближайшие соседи ($E_{\text{bond}} = 3\varepsilon_1 + 6\varepsilon_2$), где $\varepsilon_2 < 0.1\varepsilon_1$; ε_1 - энергия сублимации металла, приходящаяся на один атом. «Тройка» и «шестерка» указывают число первых и вторых ближайших соседей соответственно [3].

Таблица1. Некоторые характеристики исследуемых металлических монокристаллов и найденные значения пороговой энергии E_{thr} их распыления при бомбардировке ионами K⁺ (угол падения $\alpha = 55^\circ$).

Мишень (ОЦК)	Атомный радиус r_A , ангстрем [2]	Постоянная решетки a , ангстрем [2]	Энергия сублимации ε_1 , eV/ат [4]	Поверхностная энергия связи E_{bond} , eV (нижние и верхние значения)	Найденная пороговая энергия распыления E_{thr} , eV (нижние и верхние значения)	
					(001), [110]	(001), [010]
₄₈ Ti	1.46	3.305	4.89	14.49 – 17.39	17.5 – 20.5	27.5 – 31.5
₅₁ V	1.31	3.028	5.33	15.84 – 19.00	23 – 27	33.2 – 38
₅₂ Cr	1.27	2.885	4.12	12.24 – 14.69	20 – 24	29 – 33.5
δ - ₅₅ Mn	1.30	3.090	2.92	8.91 – 10.69	12.5 – 15.5	20 – 23.5
α - ₅₆ Fe	1.26	2.866	4.34	12.96 – 15.55	23 – 27.5	31.5 – 36
β - ₉₁ Zr	1.60	3.61	6.33	18.87 – 22.64	23 – 27.5	35.5 – 40.5
₉₃ Nb	1.45	3.294	7.59	22.41 – 26.89	30.5 – 36.7	47 – 54.5
₉₆ Mo	1.40	3.14	6.83	20.43 – 24.51	32 – 38.5	48 – 55

Анализ полученных данных позволил сделать вывод о том, что для выбранной геометрии бомбардировки и ориентации кристалла относительно первоначального направления движения иона величина E_{thr} зависит от поверхностной энергии связи и постоянной a кристаллической решетки. Так у ванадия и марганца постоянная решетки примерно одинакова, но имеется различие их поверхностных энергий связи (у марганца она значительно меньше, чем у ванадия). Поэтому их пороговые энергии сильно отличаются друг от друга (у ванадия она значительно больше, чем у марганца). Если же сравнить ванадий и железо, у которых пороговые энергии распыления одинаковы, то можно заметить, что некоторое различие постоянных решетки (у α -Fe она меньше) компенсируется различием величины E_{bond} (у V она больше). Аналогично для титана и хрома пороговые энергии распыления близки из-за того, что различие постоянной решетки компенсируется различием величины E_{bond} .

Таким образом, в случае близости отношений μ металлов с одинаковой кристаллической структурой, при прочих равных условиях, величина их пороговых энергий распыления зависит от величины поверхностной энергии связи атомов этих металлов и от постоянной кристаллической решетки. Чем меньше энергия связи атомов и чем больше постоянная решетки, тем ниже энергетический порог распыления данного металла. Кроме того, пороговая энергия распыления зависит от кристаллографических направлений. При первоначальном движении иона в плоскости (100) она значительно выше, чем при движении в плоскости (1 $\bar{1}$ 0).

[1] В.В.Евстифеев, Н.В.Костина, ЖТФ, 92, 10 (2022) 1611.

[2] Краткая химическая энциклопедия, М: Советская энциклопедия, 1963.

[3] О.Кнаке, И.Н.Странский, УФН, 68 (1959) 261.

[4] W.Eckstein. In: Sputtering by Particle Bombardment. Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies, ed. by R. Behrisch, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.