

01;05;11;12

О перемещениях атомов в двухслойной системе Al/Ni под действием бомбардирующих ионов с близкими к порогу распыления энергиями

© Г.В. Корнич, Г. Бетц, А.И. Бажин

Запорожский технический госуниверситет, Украина
Inst. f. Allgemeine Physik, Technische Universitat Wien,
A-1040, Wien, Austria

Донецкий государственный университет, Украина

Поступило в Редакцию 19 ноября 1999 г.

Выполнено молекулярно-динамическое моделирование столкновительных каскадов атомов в монокристалле Ni и системе, состоящей из монослоя атомов Al на поверхности Ni (100) при температуре 300 К и нормальной бомбардировке ионами Ar и Xe с энергиями 25 и 50 eV. Получено, что количество перемещений атомов через границу раздела Al/Ni существенно больше, чем количество аналогичных перемещений в монокристалле Ni.

При ионной бомбардировке многокомпонентных пространственно-неоднородных систем химические взаимодействия, определяющие взаимную растворимость компонент, могут оказывать влияние на величины вызванных столкновительными процессами переноса уширений границ раздела между компонентами [1–3]. Молекулярно-динамическое (МД) моделирование позволяет учитывать влияние химических сил на перемещения атомов в каскадах на уровне потенциалов атом-атомного взаимодействия [4,5]. В настоящей работе выполнено МД моделирование каскадов столкновений, вызванных нормально падающими на поверхность мишени ионами Ar и Xe с энергиями 25 и 50 eV. Рассмотрены две мишени при 300 К: двухкомпонентная система, состоящая из одного атомного слоя Al на поверхности кристалла Ni (100) и монокристалла Ni с такой же ориентацией поверхности по отношению к ионам. Цель работы — оценка влияния химических сил на каскадные перемещения атомов в Al/Ni путем сравнения среднего количества перемещений за один каскад в Al/Ni и Ni.

В работе был использован МД алгоритм, в котором взаимодействия между атомами описывались многочастичным потенциалом [6], подсосединенным при больших энергиях к потенциалу ЗБЛ [7]. Ион-атомное взаимодействие также описывалось потенциалом ЗБЛ. Уравнения движения частиц решались методом Верлета [8]. Монокристалл Ni состоял из 4032 атомов, а двухслойный кристалл Al/Ni — из 3944 атомов. Атомы в обоих кристаллах располагались в 14 слоях. В первом слое кристалла Al/Ni по периметру поверхности отсутствовали два ряда атомов Al, исключенные с целью предотвращения нефизических искажений поверхности из-за различия постоянных решетки Al (4.05 Å) и Ni (3.52 Å) [9,10]. Первый слой атомов Al повторял решеточный порядок подложки Ni (100). Температура моделировалась путем погружения мишени в среду с заданной температурой [11]. Начальные координаты ионов, падающих в элементарную область поверхности [12], вычислялись по закону случайных чисел. Во всех случаях было выполнено по 200 каскадов. Каждый каскад отслеживался в исходном кристалле в течение 4 ps.

Как видно из табл. 1 и 2, количество перемещений атомов из первого слоя (Al) в подложку (Ni) и наоборот в Al/Ni соответственно в 2.5 и 3.2 раза больше, чем в монокристалле Ni для ионов Ag с энергией 50 eV. Перемещения в Ni и Al/Ni из первого слоя в объем, скомпенсированные цепочками замещений, приводящими к обратным перемещениям атомов из объема кристалла в первый слой, включая обменные перемещения атомов между первым и вторым слоями, составляли соответственно 74 и 95%, в том числе обменные перемещения между первым и вторым слоями — 67 и 83% от общего числа перемещений из первого слоя в объем. При бомбардировке ионами Xe с энергией 50 eV количество

Таблица 1. Адатомы, обменные перемещения атомов между 1-м и 2-м слоями, перемещения атомов между 1-м слоем и объемом кристалла в Ni

Ni		Адатомы	1-й ↔ 2-й	1-й → объем	1-й ← объем
Ag	50 eV	0.52	0.31	0.46	0.34
	25 eV	0.125	0.13	0.13	0.13
Xe	50 eV	0.48	0.32	0.56	0.33
	25 eV	0.255	0.26	0.26	0.27

Таблица 2. Адатомы, обменные перемещения атомов между 1-м и 2-м слоями, перемещения атомов между 1-м слоем и подложкой в Al/Ni

Al/Ni		Адатомы	1-й ↔ 2-й	1-й → объем	1-й ← объем
Ag	50 eV	2.195	0.955	1.145	1.085
	25 eV	0.95	0.295	0.295	0.295
Xe	50 eV	2.91	1.29	1.51	1.5
	25 eV	0.95	0.495	0.505	0.515

перемещений атомов Al в Ni подложку и наоборот в двухслойной системе Al/Ni было соответственно в 2.7 и 4.5 раза больше, чем в монокристалле Ni. При этом атомы Al в Al/Ni и атомы первого слоя в монокристалле Ni пересекали границу между первым и вторым слоями соответственно в 98 и 60% случаев в результате скомпенсированных перемещений, в том числе в 85 и 57% случаев в результате обменных перемещений.

Бомбардировка монокристалла Ni ионами Xe с энергией 25 eV приводила к образованию в два раза большего количества перемещений атомов между первым и вторым слоями, 96% которых — обменные, по сравнению с ионами Ag, для которых все перемещения атомов в кристалле Ni — обменные. В Al/Ni при такой энергии ионов Ag также наблюдались только обменные перемещения атомов между первым и вторым слоями, количество которых превышало количество аналогичных перемещений в монокристалле Ni более чем в 2 раза. Для ионов Xe помимо обменных перемещений атомов в Al/Ni между монослоем Al и Ni подложкой, которых в 2 раза больше, чем при бомбардировке монокристалла Ni ионами Xe и Al/Ni ионами Ag, наблюдалось ~ 0.05 перемещений/ион в самой подложке.

Для обоих ионов с энергией 50 eV из 3–6-го атомных слоев системы Al/Ni образовывалось в 3.7–4.0 раза больше перемещений атомов Ni в сторону бомбардируемой поверхности по сравнению с перемещениями атомов в монокристалле Ni. Такая разница в количестве обратных перемещений атомов внутри кристаллов связана с большим числом не являющихся обменными приповерхностных перемещений атомов в Al/Ni, которые влекут за собой атомные перемещения в более глубоких слоях.

При бомбардировке ионами Ag с энергией 50 eV количество атомов, перешедших на поверхность кристалла (адатомы), было больше в Al/Ni по сравнению с Ni в 4.3 раза, а при энергии 25 eV — в 7.5 раз. Для ионов Xe с энергиями 50 и 25 eV количество адатомов было больше в Al/Ni соответственно в 6.0 и 3.7 раз. Ни в одном из случаев при энергии 50 eV количество адатомов, вышедших из второго слоя, не превышало 5% от их общего числа, а при энергии 25 eV адатомы, вышедшие из второго слоя, не появлялись. Большому количеству адатомов на поверхности Al/Ni способствует в первую очередь относительно небольшая энергия связи поверхностных атомов Al. Так, при 0 K разность потенциальных энергий идеального кристалла Al/Ni и кристалла без одного поверхностного атома и без учета релаксации решетки была 3.9 eV, тогда как для кристалла Ni — 5.2 eV [6,9]. О роли поверхностных энергий связи говорит также то, что модельный коэффициент распыления Al/Ni ионами Ag с энергией 50 eV был 0.06 at/ion, тогда как распыление Ni отсутствовало. Распыление ионами Xe не было обнаружено ни в одном из моделируемых случаев.

Во всех рассмотренных случаях обратнорассеянные ионы уносили ~ 10% энергии при начальной энергии ионов 50 eV и ~ 20% при энергии 25 eV, исключая случай бомбардировки монокристалла Ni ионами Ag, при котором уносимая энергия составила ~ 20 и 40% соответственно. При этом ионы не проникали в кристаллы глубже первого атомного слоя, исключая ионы Xe с энергией 50 eV, которые оставляли во втором слое в среднем 8.5 eV. Таким образом, различия в распределениях упругих потерь энергии ионов в Ni и Al/Ni могут только незначительно, как например в случае ионов Ag на Ni, влиять на результирующую разницу в количестве перемещений. С другой стороны, моделирование системы Al/Ni при 0 K, детали которого выходят за рамки настоящего обсуждения, показало, что взаимная перестановка одной пары атомов Al и Ni местами в первом–втором слоях приводит к понижению потенциальной энергии двухслойного кристалла Al/Ni на 0.6 eV [9]. Это качественно согласуется с отрицательным значением теплоты перемешивания для системы AlNi [2]. Таким образом, активированный бомбардирующими ионами процесс обменных и взаимно скомпенсированных перемещений атомов Al и Ni между первым и вторым слоями в Al/Ni является энергетически выгодным, что способствует общему росту количества перемещений атомов из первого слоя Al в положку и наоборот. При этом обменные и скомпен-

сированные перемещения в двухслойном кристалле Al/Ni составляют более значительную часть от общего числа перемещений из первого слоя в подложку по сравнению с аналогичными перемещениями в монокристалле Ni при энергии ионов 50 eV, что качественно согласуется с результатами, полученными при моделировании двухслойной системы Ni/Au [13].

В рассмотренных условиях ионы Хе генерируют, как правило, больше адатомов и атомных перемещений в Ni и Al/Ni, чем ионы Ar. Это в значительной мере является результатом вызываемых ионами Хе на начальной стадии каскадов больших повреждений атомной решетки, приводящих к локальному на время ~ 0.5 ps понижению потенциальных барьеров на пути миграции атомов в каскадах столкновений.

Список литературы

- [1] Collins R. // Radiat. Eff. 1986. V. 98. P. 167–186.
- [2] Miotello A., Kelly R. // Surf. Sci. 1994. V. 314. P. 275–288.
- [3] Cheng Y.-T. // Mater. Sci. Rep. 1990. V. 5. P. 45–97.
- [4] Chladek J., Betz G. // Rad. Effects and Defects in Solids. 1997. V. 142. P. 51–62.
- [5] Gades H., Urbassek H.M. // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 14559–14569.
- [6] Gao F., Bacon D.J., Ackland G.J. // Phil. Mag. A. 1993. V. 67. P. 275–288.
- [7] Biersack J.P., Ziegler J.F. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1982. V. 141. P. 93–99.
- [8] Haile J.M. Molecular Dynamics Simulation — Elementary Methods. Wiley-Interscience. New York, 1992. 386 p.
- [9] Kornich G.V., Betz G. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1998. V. 143. P. 455–472.
- [10] Kornich G.V., Betz G., Bazhin A.I. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1999. V. 153. P. 383–390.
- [11] Berendsen H.J., Postma J.P.M., Gunsteren W.F.V. et al. // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 3684–3690.
- [12] Betz G., Pellin M.J., Burnett J.W., Gruen D.M. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1991. V. 58. P. 429–437.
- [13] Sprague J.A., Gilmore C.M. // Thin Solid Films. 1996. V. 272. P. 244–254.