

05;10;12

## **О механизмах образования дефектов в кристалле алюминия тяжелыми ионами низких энергий**

© Г.В. Корнич, Г. Бетц, А.И. Бажин

Запорожский технический государственный университет,  
69063, Запорожье, Украина  
Inst. f. Allgemeine Physik, Technische Universitaet Wien, A-1040, Wien,  
Austria

Донецкий государственный университет, 340055, Донецк, Украина

Поступило в Редакцию 17 января 2000 г.

В рамках молекулярно-динамического подхода обсуждаются механизмы образования вакансий, радиационно-адсорбированных и межузельных атомов в каскадах атомных столкновений, вызванных нормально падающими на поверхность кристалла Al (100) при температуре 300 К ионами Ar и Xe с энергиями 25, 40 и 50 eV. Числа объемных и поверхностных вакансий за время каскада образуют два максимума в случае Xe и один — в случае Ar.

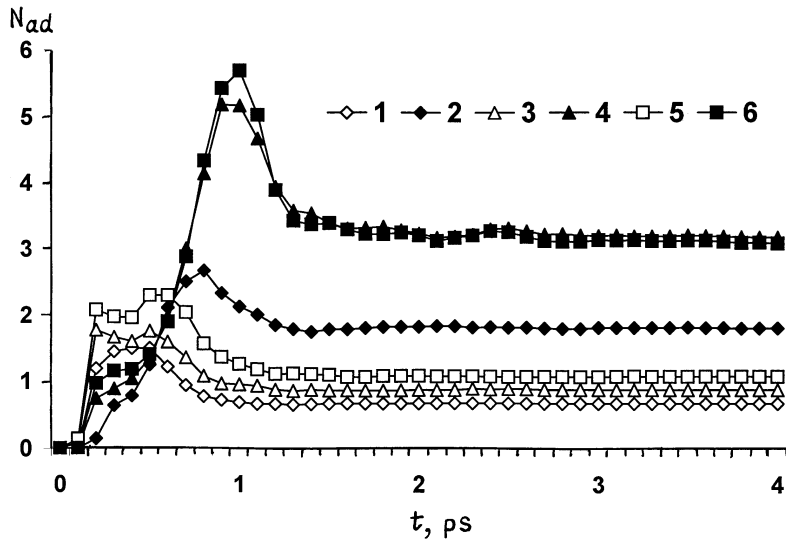
Проведено молекулярно-динамическое моделирование [1] образования поверхностных и объемных вакансий, радиационно-адсорбированных (адаомов) и межузельных атомов в каскадах атомных столкновений, вызванных нормально падающими на поверхность кристалла Al (100) при температуре 300 К ионами Ar и Xe с энергиями 25, 40 и 50 eV.

В модели использовался состоящий из 4032 атомов кристалл Al с постоянной решеткой  $4.05 \text{ \AA}$  и периодическими граничными условиями на боковых границах [1]. Атомы располагались в 14 слоях. Многочастичный потенциал атом-атомного взаимодействия подсоединялся при больших энергиях к потенциалу ZBL [2]. ZBL-потенциал описывал также ион-атомные взаимодействия. Температура моделировалась заданием на боковых границах и дне кристалла слоя с постоянной температурой [3]. Межузельные атомы и вакансии определялись согласно алгоритму, предложенному в [4]. Начальные координаты ионов, падающих в заданную область поверхности [5], вычислялись по закону случайных

чисел. Во всех случаях было проведено по 200 расчетов каскадов, каждый из которых отслеживался в исходном кристалле в течение 4 ps.

При энергиях 40 и 50 eV ионы Ag теряют  $\sim 90\%$  энергии в 1- и 2-м атомных слоях, тогда как ионы Xe, которые глубже проникают в Al, оставляют  $\sim 60\%$  начальной энергии в 3- и 4-м слоях. При этом коэффициент отражения Ag равен единице, тогда как для Xe он убывает с ростом энергии (0.96–25 eV, 0.73–40 eV, 0.44–50 eV). Изменение знака нормальной к поверхности составляющей скорости Xe в интервале 0.2–0.4 ps и Ag в интервале 0.1–0.2 ps с начала каскада происходит вследствие одновременного взаимодействия иона с 2–3 атомами отдачи и атомами слоев, лежащих глубже. Отражение иона в данном случае можно рассматривать как завершение "очистки пути" [6] легкими атомами отдачи перед тяжелым ионом.

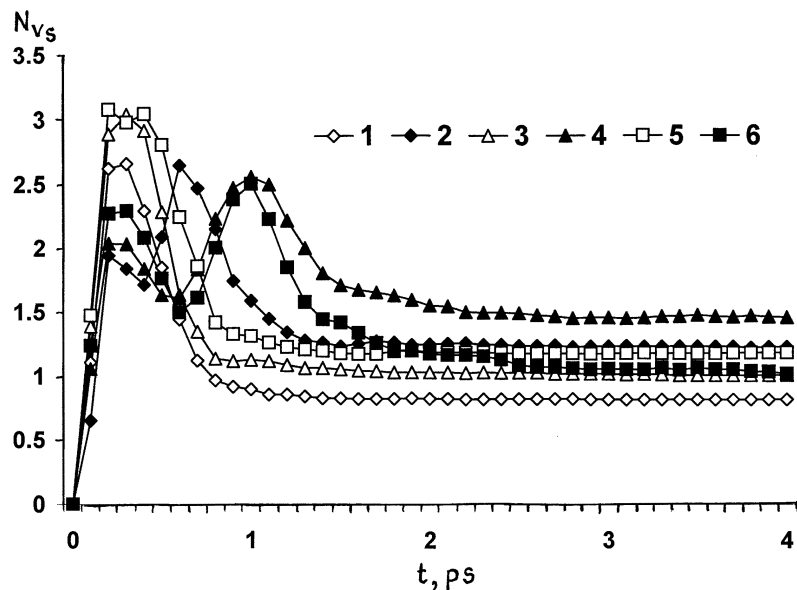
Из рис. 1 видно, что ионы Xe генерируют больше стабильных адатомов, чем ионы Ag при всех энергиях. В случае Xe максимум числа адатомов  $N_{ad}$  достигается позже ( $\sim 0.8$ – $1.0$  ps), чем в случае Ag ( $\sim 0.2$ – $0.6$  ps). В интервале 0.2–0.4 ps величина  $N_{ad}$  является результатом взаимодействия налетающего иона и первичных атомов отдачи с поверхностными атомами, а так же, возможно, следствием выхода криволинейных последовательностей столкновений атомов на поверхность [7]. Поскольку, согласно [8], пороговая энергия генерации последовательности столкновений замещения атомов (ПЗС) в направлениях  $\langle 110 \rangle$  в кристалле Al с потенциалом [2] — 6 eV, ПЗС  $\langle 110 \rangle$  могут возникать даже при энергии ионов 25 eV. Образование адатомов ионами Ag практически ограничено этими механизмами, которые в интервале 0.2–0.4 ps более эффективны в случае Ag, чем Xe, поскольку ионы Ag создают в целом первичные атомы отдачи Al с большими энергиями и большей составляющей скорости в плоскости (100) относительно ее нормальной составляющей. Не обсуждавшийся здесь подробно максимум среднеквадратичного смещения адатомов в случае Ag возникает в интервале  $\sim 0.5$ – $0.6$  ps, что подтверждает временную ограниченность образования адатомов ионами Ag столкновительной стадией каскада. В случае Xe  $N_{ad}$  достигает максимума в интервале 0.8–1.0 ps благодаря взаимодействию поверхностных атомов с отраженным ионом и атомами отдачи, образованными в глубине кристалла, что сопровождается ростом среднеквадратичного смещения адатомов и атомов внутри кристалла в интервале 0.5–1.0 ps. Передача импульса из объема поверхностным атомам возможна путем образования 2–3 шагов ПЗС в интервале 0.4–0.6 ps. В случае выхода иона из кристалла вероятность образования адатома



**Рис. 1.** Зависимость числа адатомов ( $N_{ad}$ ) от времени каскада при бомбардировке ионами Ag с энергиями: 1 — 25 eV, 3 — 40 eV, 5 — 50 eV и ионами Xe: 2 — 25 eV, 4 — 40 eV, 6 — 50 eV.

ионом Хе больше, чем Ag, поскольку ионы Хе, покидая кристалл, имеют среднюю энергию 2.5–5.5 eV, а Ag — 1.5–2.0 eV в зависимости от начальной энергии. Кроме того, ионы Ag практически не попадают в глубь кристалла. Время нахождения иона Ag в кристалле  $\sim 0.5$  ps при всех энергиях, тогда как иона Хе с энергиями 40 и 50 eV  $\sim 1.2$  ps и 25 eV  $\sim 0.7$  ps, что согласуется с временами образования максимумов  $N_{ad}$  и среднеквадратичных смещений адатомов.

На рис. 2 видно, что независимо от начальной энергии ионов Ag, единственный максимум числа поверхностных вакансий  $N_{v,s}$  (вакансий в первом атомном слое) находится в интервале 0.2–0.3 ps. Этапы проникновения иона Ag в кристалл движения из кристалла отличаются по времени менее чем на 0.1 ps, что ведет к перекрытию характерных времен работы механизмов образования дефектов (вакансий и адатомов) и появлению одного результирующего максимума  $N_{v,s}$ . В случае Хе образуются два максимума  $N_{v,s}$ . Первый максимум возникает в том же временном интервале, что и в случае Ag. Время возникновения второго



**Рис. 2.** Зависимость числа поверхностных вакансий ( $N_{v,s}$ ) от времени каскада при бомбардировке ионами Ag с энергиями: 1 — 25 eV, 3 — 40 eV, 5 — 50 eV и ионами Xe: 2 — 25 eV, 4 — 40 eV, 6 — 50 eV.

максимума  $N_{v,s}$  зависит от начальной энергии иона. Он создается, как правило, теми ионами Xe, которые относительно неглубоко (1–3 атомных слоя) проникают в кристалл и обладают достаточной энергией, чтобы, покидая мишень, образовать адатом и поверхностную вакансию. Зависимости числа объемных вакансий  $N_{v,b}$  от времени каскада аналогичны временным зависимостям  $N_{v,s}$  при всех условиях бомбардировки.

Данные об атомных перемещениях показывают, что в каскадах, вызываемых ионами Xe, наблюдаются два максимума числа атомов, покинувших свои ячейки Вигнера–Зейтца  $N_{ws}$ , тогда как в каскадах, инициированных ионами Ag — один, причем времена достижения максимальных значений  $N_{ws}$  совпадают с временами достижения максимумов  $N_{v,s}$  и  $N_{v,b}$ . Различие в количестве максимумов  $N_{ws}$  и соответственно  $N_{v,s}$  и  $N_{v,b}$  для Ag и Xe помимо разницы между характерными временами прямого и обратного движения иона в кристалле связано с тем, что

число перемещений атомов из слоя  $n$  в слой  $n-1$  или  $n-2$ , возникающих при движении отраженного иона Ag в кристалле, существенно меньше, чем число аналогичных перемещений в случае Хе. Так, при энергии 50 eV число атомных перемещений из слоя в слой в направлении [100] в глубь кристалла за один каскад  $\sim 3.2$  для обоих ионов, а число обратных перемещений в сторону поверхности 5.85 и 1.8 для Хе и Ag соответственно.

В случае Ag после 2 ps эволюции каскада в кристалле остается незначительно больше межузельных атомов, чем в случае Хе, что связано с большей вероятностью образования ПСЗ  $\langle 110 \rangle$  ионами Ag на столкновительной стадии каскада. Еще одним механизмом образования межузельных атомов в Al могут быть перемещения атомов в глубь кристалла на 1.5–2 постоянных решетки [9,10]. Для Ag и Хе с энергией 50 eV возникает  $\sim 0.35$  таких перемещений за один каскад. Время появления результирующего максимума числа межузельных атомов  $N_{in}$  ( $\sim 0.2-0.3$  ps) не зависит от энергии и типа иона и соответствует столкновительной стадии развития каскада.

Моделирование кристаллов Cu и Ni соответственно с потенциалами [11] и [2] при тех же условиях бомбардировки показало, что за время каскада наблюдается, как правило, один максимум  $N_{v,s}$  и 1–2 максимума  $N_{ad}$ .

## Список литературы

- [1] Haile M.J. / Molecular Dynamics Simulation—Elementary Methods. New York: Wiley Interscience, 1992. 386 p.
- [2] Gao F., Bacon D.J., Ackland G.J. // Phil. Mag. A. 1993. V. 67. P. 275–288.
- [3] Berendsen H.J., Postma J.P.M., Gunsteren W.F.V. et al. // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 3684–3690.
- [4] Karetta F., Urbassek H.M. // J. Appl. Phys. 1992. V. 71. P. 5410–5418.
- [5] Betz G., Pellin M.J., Burnett J.W., Gruen D.M. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1991. V. 58. P. 429–437.
- [6] Shulga V.I., Vicanek M., Sigmund P. // Phys. Rev. A. 1989. V. 39. P. 3360–3372.
- [7] Mazzone A.M. // Philos. Mag. Lett. 1994. V. 70. P. 93–101.
- [8] Bacon D.J., Deng H.F., Gao F. // J. Nucl. Mater. 1993. V. 205. P. 84–91.
- [9] Valkealahti S., Nieminen R.M. // Nucl. Instr. Meth. B. 1987. V. 18. P. 356–362.
- [10] Kornich G.V., Betz G. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1998. V. 143. P. 455–472.
- [11] Gades H., Urbassek H.M. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1992. V. 69. P. 232–241.