

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ЗАПОРІЗЬКА ПОЛІТЕХНІКА»**

Г.В. КОРНІЧ

**ПОВЕРХНЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
ПРИ БОМБАРДУВАННІ
НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНИМИ ІОНАМИ:
МОДЕЛЮВАННЯ І АНАЛІЗ АТОМНОЇ СИСТЕМИ**

Монографія

Запоріжжя
2019

УДК 538.971

*Рекомендовано до друку Вченою радою
Національного університету «Запорізька політехніка»
(Протокол № 5 від 30.01.2019 р.)*

Рецензенти:

В. В. Бобков, к.ф.-м.н., доцент, завідувач Проблемної науково-дослідної лабораторії іонних процесів ім. Я.М. Фогеля Харківського національного університету ім. В.Н. Каразіна, м. Харків.

В. В. Гіржон, д.ф.-м.н., професор, завідувач кафедри фізики твердого тіла Запорізького національного університету, м.°Запоріжжя.

Корніч Г.В.

К 68 Поверхня твердого тіла при бомбардуванні низькоенергетичними іонами: моделювання і аналіз атомної системи. Для студентів старших курсів, аспірантів та фахівців відповідних фізико-математичних і технічних спеціальностей : Монографія / Г.В. Корніч – Запоріжжя : НУ «Запорізька політехніка», 2019. – 302 с.

ISBN 978-617-529-240-2

Монографія присвячена розгляду переміщень атомів, утворенню вакансій, радіаційно-адсорбованих та міжвузлових атомів у каскадах зіткнень, що ініціюються в одно- та двокомпонентному кристалічному тілі при взаємодії поверхні з низькоенергетичними (~100 eV) іонами інертних газів при різних температурах. Атомні каскади моделювалися методом класичної молекулярної динаміки. Статистики переміщень атомів і розподіли точкових дефектів по глибині кристала після загасання каскадів частково використовувалися, відповідно, для розв'язання рівнянь іонного перемішування і радіаційно-прискореної дифузії. Монографія може бути цікавою фахівцям з відповідних системних досліджень приповерхневого масоперенесення, ініційованого прискореними іонами.

УДК 538.971

ISBN 978-617-529-240-2

© Корніч Г.В.

© Національний університет
(Запорізька політехніка), 2019

ЗМІСТ

ВСТУП	7
--------------------	---

ГЛАВА 1

ВЗАЄМОДІЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ІОНІВ З ТВЕРДИМ ТІЛОМ ТА СУПУТНІ ПРОЦЕСИ МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ	10
1.1. Вступ до глави 1	10
1.2. Теоретичний опис каскаду зіткнень	11
1.2.1. Енергетичні втрати іона	11
1.2.2. Режими розвитку каскадів зіткнень	11
1.2.3. Лінійна каскадна теорія зіткнень	12
1.3. Теорія розпилення	13
1.3.1. Лінійна теорія розпилення	13
1.3.2. Переважне розпилення	15
1.3.3. Оцінки поверхневої енергії зв'язку	16
1.4. Метод молекулярної динаміки	17
1.4.1. Загальний опис методу молекулярної динаміки	17
1.4.2. Парні потенціали взаємодії	21
1.4.3. Багаточастинкові потенціали взаємодії	24
1.5. Іонне перемішування	27
1.5.1. Перемішування первинними атомами віддачі	27
1.5.2. Каскадне перемішування: транспортне рівняння	28
1.5.3. Каскадна релаксація мішені	30
1.5.4. Дифузійне наближення	31
1.5.5. Однокрокові динамічні алгоритми	34
1.5.6. Термічна стадія каскаду на межі розподілу компонентів	35
1.6. Радіаційно-прискорена дифузія	40
1.6.1. Критична температура радіаційно-прискореної дифузії	41
1.6.2. Область радіаційно-прискореної дифузії	43
1.6.3. Теоретичний опис радіаційно-прискореної дифузії	43
1.6.4. Врахування комплексів дефектів	47
1.7. Особливості приповерхневого масоперенесення	48
Висновки до глави 1	50

ГЛАВА 2

КВАЗІСТАБІЛЬНІ МОДЕЛІ ІОННОГО ПЕРЕМІШУВАННЯ	51
2.1. Вступ до глави 2	51
2.1.1. Кількісна достовірність і двоетапні моделі	51
2.1.2. Проблема верифікації модельних результатів	52
2.2. Опис моделі	54
2.2.1. Моделювання двовимірного каскаду зіткнень	54

2.2.2. Транспортне рівняння.....	56
2.3. Результати розрахунків	57
2.3.1. Проникнення бомбардуючих іонів у кристал.....	57
2.3.2. Переміщення атомів у каскадах зіткнень.....	59
2.3.3. Пошаровий аналіз і розпилення.....	60
2.3.4. Дифузійне наближення.....	62
2.3.5. Переміщення атомів, ініційовані важкими іонами	64
2.3.6. Випадок $E_{th} = 0$ з врахуванням усіх атомів віддачі	65
2.3.7. Інтерпретація двовимірних результатів	67
2.3.8. Внесок стадії зіткнень атомних каскадів у перемішування ...	72
2.3.9. Міжатомне притягання на стадії зіткнень каскаду	76
2.4. Підвищення точності оцінки поширення пошарового профілю.....	81
Висновки до глави 2	86

ГЛАВА 3

ГЕНЕРАЦІЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛАХ Cu, Ni, Al ТА ДВОШАРОВИХ СИСТЕМАХ Al/Ni I Ni/Al	88
3.1. Вступ до глави 3.....	88
3.2. Генерація точкових дефектів у кристалі Cu при 0 К	89
3.2.1. Особливості теоретичної моделі.....	89
3.2.2. Енергетичні втрати бомбардуючих іонів	90
3.2.3. Радіаційні вакансії.....	92
3.2.4. Міжвузлові та радіаційно-адсорбовані атоми	96
3.2.5. Дисипація енергії в модельному кристалі.....	102
3.3. Генерація точкових дефектів у кристалах Ni та Al при 0 К.....	105
3.3.1. Особливості моделі.....	105
3.3.2. Розпилення кристалів Ni та Al іонами Ag	107
3.3.3. Пружні втрати енергії іона в Ni та Al.....	107
3.3.4. Дефекти: ад-атоми, вакансії та міжвузлові атоми	109
3.4. Дефекти в двошарових кристалах Al/Ni та Ni/Al при 0 К.....	114
3.4.1. Особливості молекулярно-динамічного алгоритму.....	114
3.4.2. Розпилення і енергетичні пружні втрати іонів в Al/Ni і Ni/Al	115
3.4.3. Радіаційні дефекти у двошарових системах Al/Ni та Ni/Al.....	117
3.5. Генерація дефектів іонами Ag в Cu при підвищених температурах	122
3.5.1. Моделювання кристала при ненульовій температурі.....	122
3.5.2. Енергетичні пружні втрати іона Ag і розпилення Cu	123
3.5.3. Генерація дефектів в Cu(100) іонами 100 eV Ag.....	124
3.5.4. Вплив типу і енергії іона на генерацію дефектів в Cu (100)	128

3.6. Генерація дефектів у кристалі Ni при підвищених температурах	134
3.6.1. Бомбардування іонами Ag з енергією 100 eV і 300 K	134
3.6.2. Бомбардування іонами Ag з енергією 100 eV і 750 K.....	135
3.7. Генерація точкових дефектів у кристалі Al при 300 K.....	139
3.7.1. Взаємодія Al (100) з іонами Ag з енергією 100 eV	139
3.7.2. Взаємодія Al з іонами Ag і Хе з енергіями 25, 40, 50 eV.....	142
3.7.2.1. Пружні втрати енергії іонів.....	142
3.7.2.2. Радіаційно-адсорбовані і міжвузлові атоми	143
3.7.2.3. Поверхневі і об'ємні вакансії	146
3.8. Генерація точкових дефектів у кристалі Al/Ni при 300 K.....	148
3.8.1. Взаємодія Al/Ni з іонами Ag з енергією 100 eV.....	148
3.8.2. Порівняння генерації дефектів у кристалах Al/Ni, Al і Ni при бомбардуванні іонами Ag з енергією 100 eV.....	150
3.8.3. Генерація дефектів у Al/Ni іонами Ag і Хе з енергіями 25-50 eV	154
Висновки до глави 3	158

ГЛАВА 4

ПЕРЕМІЩЕННЯ АТОМІВ У КАСКАДАХ ЗІТКНЕНЬ

ТА ІОННЕ ПЕРЕМІШУВАННЯ	161
4.1. Вступ до глави 4.....	161
4.2. Атомні каскадні переміщення в кристалі Cu	162
4.2.1. Переміщення атомів віддачі при температурі 0 K	162
4.2.2. Коефіцієнт перемішування, середня швидкість дрейфу атомів віддачі та релокаційна функція при бомбардуванні Cu (1 0 0) іонами Ag і Хе з енергією 100 eV і температурі кристала 0 K	166
4.2.3. Моделювання пошарового іонного профілювання.....	168
4.2.4. Каскадні переміщення атомів при підвищених температурах	169
4.2.5. Поширення псевдомаркера в Cu при перемішуванні	172
4.2.6. Каскадні переміщення в Cu біля порогу розпилення	177
4.2.6.1. Переміщення при температурі кристала 0 K.....	177
4.2.6.2. Переміщення в кристалі Cu при температурі 300 K.....	180
4.3. Атомні каскадні переміщення в Ni і Al при температурі 0 K.....	184
4.4. Каскадні переміщення атомів в Ni/Al і Al/Ni при температурі 0 K.....	189
4.4.1. Двошарова система Al/Ni.....	189
4.4.2. Двошарова система Ni/Al.....	191
4.4.3. Атомні переміщення у кристалах Al/Ni і Ni/Al.....	192

4.4.4. Особливості охолодження каскадів.....	195
4.5. Каскадні переміщення атомів в Al, Ni і Al/Ni при 300 К	196
4.5.1. Переміщення атомів віддачі при 0 К і 300 К	196
4.5.2. Каскади в Ni і Al/Ni при 300 К для іонів Ar і Xe 25 і 50 eV.....	198
4.5.3. Переміщення атомів при бомбардуванні Al іонами Xe	200
4.5.4. Переміщення атомів в Al на стадії зіткнень каскаду при температурах від 0 К до 500 К.....	203
4.5.5. Атоми віддачі в Ni при енергії іонів Ar 100 eV і температурі 750 К.....	205
4.5.6. Перемішування в кристалі Ni при енергії іонів Ar 100 eV і температурі 750 К.....	207
Висновки до глави 4	210

ГЛАВА 5

КОМБІНОВАНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РАДІАЦІЙНО-ПРИСКОРЕНОЇ ДИФУЗІЇ	213
5.1. Вступ до глави 5.....	213
5.2. Модель радіаційно-прискореної дифузії і перемішування	214
5.3. Концентраційні профілі дефектів	219
5.4. Пошарове профілювання з врахуванням РПД при 500 К в Cu	222
5.5. Пошарове профілювання з врахуванням РПД при 750 К в Ni.....	226
5.5.1. Особливості моделі у випадку кристала Ni	226
5.5.2. Основні результати для кристала Ni	226
Висновки до глави 5	230

ГЛАВА 6

ПЕРЕМІШУВАННЯ І ГЕНЕРАЦІЯ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛІ Ni З НИЗЬКОЮ КОНЦЕНТРАЦІЄЮ ДОМІШКИ Al	231
6.1. Вступ до глави 6.....	231
6.2. Особливості молекулярно-динамічної моделі.....	232
6.3. Дифузійне наближення в двокомпонентному випадку	233
6.4. Коефіцієнти розпилення і енергетичні втрати іонів	235
6.5. Генерація дефектів у кристалі Ni з одним атомом Al.....	238
6.6. Переміщення атомів Ni і Al у кристалі Ni з одним атомом Al	241
6.7. Коефіцієнти перемішування і середні швидкості дрейфу.....	247
6.8. Конвективний потік атомів у каскаді	250
6.9. Профілювання домішкового маркера Al в матриці Ni	253
Висновки до глави 6	257
ЗАКЛЮЧЕННЯ	259
ЛІТЕРАТУРА	263
ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ	300

*Присвячується пам'яті моїх батьків
Корніча Володимира Григоровича і
Корніч Людмили Павлівни, які працювали
в Запорізькому машинобудівному інституті
ім. В. Я. Чубаря (зараз НУ "Запорізька
політехніка") з 1961 р.*

ВСТУП

Низькоенергетичні пучки іонів є складовою частиною засобів мікро- і нанотехнологій виробництва та контролю елементної бази електронних пристроїв – модифікації фізико-хімічних властивостей поверхні, осадження багат шарових систем з газової фази у супроводі іонного бомбардування, різних видів компонентного та структурного аналізу поверхні. Розрахунковою базою іонних мікро- і нанотехнологій є аналітичні методи обчислення елементарних актів взаємодії іонів з поверхнею твердого тіла, дефектоутворення і приповерхневого масоперенесення: розпилення, радіаційно-стимульованих дифузійних процесів, іонного перемішування (ІП) та моделювання цих процесів.

Монографія присвячена ретроспективному модельному розгляду переміщень атомів, утворення вакансій, радіаційно-адсорбованих (ад-атомів) та міжвузлових атомів у каскадах зіткнень, що ініціюються в одно- та двокомпонентному кристалічному тілі в результаті взаємодії поверхні з низькоенергетичними (~ 100 еВ) іонами інертних газів при різних температурах кристалів. У роботі, атомні каскади моделювалися методом молекулярної динаміки [1] (МД), який базується на розв'язанні класичних рівнянь руху атомів з обчисленням сил взаємодії, що відповідають атомним потенціалам. Статистика переміщень атомів і розподіли точкових дефектів по глибині кристала після загасання каскадів частково використовувалися, відповідно, для розв'язання рівнянь ІП і радіаційно-прискореної дифузії (РІД). Таким чином, зокрема модель ІП отримує більш *елементарні* зовнішні параметри – параметри атомних потенціалів замість величин, що характеризують ІП (коефіцієнт ІП, швидкість дрейфу атомів віддачі, розмір області перемішування, швидкість розпилення), що зменшує можливість для довільної підгонки зовнішніх параметрів моделі та результатів моделювання в цілому.

Існуюча теорія ІП, в якій функції атомних переміщень в каскадах обчислюються в наближенні парних зіткнень без урахування в атомному потенціалі складової притягання, не дозволяє коректно описувати зміни концентрації атомів при енергіях менше 100 еВ. Дифузійні моделі ІП тільки оціночно враховують вплив температури

каскаду та теплоти перемішування на поширення межі розподілу компонентів двошарових систем при таких енергіях іонів. При цьому, недоліки наближення парних взаємодій проявляються також у занижених значеннях коефіцієнта відбиття іонів.

Наведені проблеми можуть вирішуватися в межах МД моделювання каскадних процесів з багаточастинковими атомними потенціалами і шляхом розрахунку параметрів континуальних моделей масоперенесення на цій основі. Вищезгадана модель масоперенесення має більш *елементарний рівень параметризації*, що підвищує достовірність результатів. Поєднання можливостей МД методу в розрахунках каскадів у межах часу $\sim 10^{-11}$ – 10^{-9} с з перевагами рівнянь ІІІ на інтервалах часу більше 1,0 с, призводить до якісно нового двоетапного методу обчислення ІІІ, який враховує термічну стадію каскаду. Модельні розподіли генерації стабільних вакансій та міжвузлових атомів по глибині кристала дають можливість отримувати реалістичні розв'язання рівнянь РПД при низьких енергіях бомбардуючих іонів.

Отже, МД метод у поєднанні з елементами аналітичних підходів є основою кількісного опису перенесення маси і мікроскопічних процесів модифікації приповерхневої області кристалів низькоенергетичними іонами.

Ідеї, результати та їх обговорення, що наведені у монографії, були здобуті автором у різні часи у співпраці з А.І.°Бажиним, С. В.°Тепловим, В.П.°Пінчуком, Г.°Бетцем (Gerhard Betz), В. І.°Запорожченко (Vladimir Zarogjtchenko) та ін., що відображено у відповідних літературних посиланнях в тексті монографії. Представлені матеріали загалом охоплюють час роботи автора у Запорізькому національному технічному університеті (зараз Національний університет “Запорізька політехніка”), роботи і навчання у докторантурі на Фізичному факультеті Донецького національного університету, а також протягом багаторазових тривалих стажувань в Institut für Allgemeine Physik Віденського технологічного університету в період з 1990 по 2001 рік. Важливо, що наведені у цій монографії моделі, результати і висновки є основою для розуміння наступної монографії, що буде присвячена сучасному стану дослідження взаємодії енергетичних атомних частинок з просторово-обмеженими нанооб'єктами, а саме, поверхневими та вільними кластерами атомів.

Представлені в роботі матеріали розраховані, в першу чергу, на дослідників-початківців на рівні студентів старших курсів та аспірантів, хоч можуть бути цікавими і для досвідчених фахівців в області природничих і технічних наук, а також відповідних системних

досліджень, пов'язаних з приповерхневими ефектами масоперенесення, ініційованими пучками прискорених іонів.

Монографія складається з вступу, шести глав, присвячених загальному огляду масоперенесення під дією енергетичних іонів (Глава 1), моделей без врахування потенціалу міжатомного притягання (Глава 2), генерації точкових дефектів у кристалах (Глава 3), каскадів зіткнень і перемішуванню (Глава 4), радіаційно-прискореній дифузії (Глава 5), перемішуванню у реально двокомпонентній системі (Глава 6) та заключення.

ГЛАВА 1. ВЗАЄМОДІЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ІОНІВ З ТВЕРДИМ ТІЛОМ ТА СУПУТНІ ПРОЦЕСИ МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ

1.1. Вступ до глави 1

Вперше на взаємодію прискорених іонів з твердими поверхнями звернули увагу в середині XIX століття, коли виявилася ерозія поверхні катода у газовому розряді [2]. Завдяки значному розвитку експериментальної техніки та теорії каскадів зіткнень [3–17] на протязі останніх 40 років XX століття відбувалося інтенсивне вивчення цього явища, обумовлене потребами виробництва та контролю елементної бази мікроелектронних пристроїв та матеріалів першої стінки ядерних реакторів. Достовірні експериментальні результати вимірювання коефіцієнтів розпилення монокристалів, даними яких користуються і зараз, були отримані в кінці 50-х років XX століття Венером (початкові його роботи припадають на період 40-х років [18]) із співробітниками [19–26]. Венером були виявлені також максимуми інтенсивності розпилення атомів з монокристалів у напрямках з низькими індексами кристалічної ґратки, які пізніше отримали назву «плями Венера» [21]. Одночасно з роботами Венера з'явилися піонерські роботи по вимірюванню пробігів атомів віддачі та радіаційних змін в кристалічних ґратках, що бомбардуються прискореними іонами [27, 28]. Перші експериментальні роботи на межі 50–60-х років виконали Тельковський [29], Фогель [30], Тулінов [31], Молчанов [32], Машкова [33], Коллігон (Colligon) [34], Плешивцев [35, 36], Юрасова [37] та інші дослідники по вивченню фізики розсіювання бомбардуючих частинок твердими поверхнями та їх розпилення. У цьому ж проміжку часу надрукована монографія Арифова по взаємодії атомних частинок з металевими поверхнями [38]. В цілому встановлено, що ерозія твердої поверхні спостерігається при енергії іонів від десятків електронвольт до 100 MeV. Було показано, що явище іонного розпилення має характерний мінімальний енергетичний поріг, нижче якого, воно не спостерігається, а також характерну для кожного матеріалу і типу іона енергію, при якій має місце максимум розпилення [2]. Таким чином, коефіцієнт розпилення плоскої поверхні змінюється у більшості випадків нелінійно і кількісно залежить від матеріалу мішені, стану поверхні та умов експерименту, а саме від типу іона, його енергії та кута бомбардування. Типові значення коефіцієнтів розпилення знаходяться в інтервалі 0,01–10,0 атомів/іон. Більш пізні експериментальні дослідження іонного розпилення, супутніх процесів та відповідні технічні застосування на той період часу обговорюються в [2, 39–44].

1.2. Теоретичний опис каскаду зіткнень

1.2.1. *Енергетичні втрати іона.* Одночасно з технікою експерименту розвивалася аналітична теорія взаємодії прискорених іонів з твердими поверхнями. У 1950 році вийшла в перекладі монографія Бора [45], наслідуючи яку, у найпростішому випадку вважається, що пружні та непружні втрати енергії бомбардуючого іона є взаємно незалежними. Під непружними втратами енергії розуміються втрати за рахунок збудження електронної підсистеми, іонізації та перезарядки атомів і іонів. Пружні втрати виникають за рахунок взаємодії іонних остовів між собою. На початку 60-х років Ліндхардом (Lindhard) із співробітниками [2, 46–48] була розроблена модель енергетичних втрат бомбардуючого іона на одиницю довжини мішені, припускаючи, що електронний газ твердого тіла впливає на іон, як в'язке середовище. Схожі результати отримали Фірсов, а також Теплова із співробітниками, які розглядали перенесення імпульсу в процесі переміщення атомів за припущенням, що час зіткнення атомів є достатнім для того, щоб їх електрони змішалися між собою [49, 50]. У обох розглядах непружні втрати енергії були пропорційні швидкості частинки, хоч існують й інші наближення, наприклад, пропорційність втрат енергії швидкості в ступені 0,75 [7]. Пізніше, Буренков, Комаров, Кумахов і Тьомкін розробили теорію просторового розподілу втрат енергії іонів у інтервалі початкових енергій 1 кеВ–1 МеВ і розрахували таблиці відповідних параметрів для найбільш важливих матеріалів [51, 52]. Зіглером (Zigler), Бірзаком (Biersack) і Літмарком (Littmark) була отримана емпірична формула енергетичних втрат та проведена її табуляція для різних матеріалів та бомбардуючих частинок [53]. У цілому ж, різке зростання кількості друкованих досліджень, які використовували термін «енергетичні втрати», почалося в 70-х роках [54]. Було встановлено, що при низьких енергіях іонів (≤ 100 еВ) можна знехтувати непружними енергетичними втратами іонів з похибкою не більше 10%, що досить часто використовується в молекулярно-динамічних моделях при низьких енергіях первинних атомів віддачі.

1.2.2. *Режими розвитку каскадів зіткнень.* Атоми віддачі, які виникають при взаємодії атомів мішені з енергетичним іоном у випадку достатньої енергії, породжують нові атоми віддачі, які в свою чергу теж можуть породжувати атоми віддачі. Така послідовність призводить до виникнення, так званого, каскаду зіткнень атомів. Атоми віддачі, які досягли поверхні мішені та здолали сили притягання на поверхні, залишають мішень, призводячи до її розпилення. Умовно, каскади зіткнень можуть бути розподілені на три категорії згідно режимів їх

розвитку: а) режим прямого вибивання; б) режим лінійних каскадів; в) режим теплових піків [2].

Режим прямого вибивання відбувається, коли атоми, що були вибиті у випадку іон-атомних взаємодій, мають енергію, яка достатня для розпилення, але недостатня для розвитку значного каскаду зіткнень в мішені. У цьому випадку виникає тільки декілька атомів віддачі. Такий режим розвивається при бомбардуванні іонами низьких енергій і/або легкими іонами (H, D, He) з енергіями декілька кілоелектронвольт. Реалістичні розрахунки такого режиму можуть бути проведені шляхом комп'ютерного моделювання методом Монте-Карло у наближенні парних взаємодій або методом молекулярної динаміки [55].

Режим лінійних каскадів має місце, коли густина вибитих з початкових положень у ґратці атомів незначна і каскадні атоми взаємодіють переважно з нерухомими атомами, а зіткненнями атомів, що рухаються, можна знехтувати. Такі каскади виникають при енергіях іона від одного кеВ до декількох сотень кеВ, виключаючи важкі іони (Xe, Kr і т. і.). Цей режим описується методами транспортної теорії атомних зіткнень [2].

У режимі теплових піків густина атомів, що рухаються в каскаді, настільки велика, що практично усі атоми у деякому об'ємі переміщуються. У такому каскаді переважають взаємодії атомів, які рухаються. Це призводить до нелінійних ефектів. Якщо суперпозиція лінійних каскадів теж буде лінійною, то в разі термічних піків, суперпозиція двох каскадів дає нелінійні ефекти. Наприклад, нелінійні ефекти у розпиленні найбільш відчутно проявляються в разі взаємодії поверхні з важкими молекулярними іонами, оскільки при цьому вони миттєво розпадаються і утворюють суперпозицію кількох каскадів зіткнень, які розвиваються у вигляді термічних піків [56, 57].

1.2.3. *Лінійна каскадна теорія зіткнень.* У другій половині 60-х років, завдяки, в першу чергу, працям Зіґмунда (Sigmund), розроблена лінійна транспортна каскадна теорія, яка дозволила досить добре описувати каскади зіткнень та явище іонного розпилення в металах та напівпровідниках у області енергій 1–100 кеВ [1, 58–62]. Головне положення теорії – низька густина каскадів зіткнень: атоми віддачі повинні зіштовхуватися тільки з нерухомими атомами, надаючи можливість лінеаризувати транспортні рівняння. Теорія розвинулася для аморфних середовищ (середовищ з випадковим просторовим розподілом атомів) на базі розв'язання рівняння Больцмана з відповідним перерізом взаємодії для пружних зіткнень. Було отримано, що енергетичний розподіл атомів віддачі в каскаді відповідає

залежності E^n , де $n \approx 2$. Включення непружних енергетичних втрат проводилося шляхом неперервної дисипації енергії частинок. Добре узгодження експериментальних даних для полікристалів та теоретичних розрахунків коефіцієнта розпилення з аморфного середовища згідно транспортної теорії свідчило про реалістичність, у багатьох випадках, лінійного наближення для каскадів зіткнень і про незначний вплив атомного порядку мікрокристалитів на інтегральне значення коефіцієнта розпилення для середніх енергій іонів. Теорія, однак, дає великі розбіжності з експериментом при низьких енергіях бомбардуючих іонів (< 500 eВ) [57], що зумовлено, певною мірою, врахуванням тільки парних відштовхуючих атом-атомних взаємодій в каскадах зіткнень Зігмунда.

1.3. Теорія розпилення

1.3.1. *Лінійна теорія розпилення.* Класична теорія розпилення [63–69] базується на лінійній каскадній теорії зіткнень Зігмунда. Теорія Зігмунда передбачає косинусоїдальний закон кутового розподілу розпилених частинок:

$$\frac{d\Phi}{d\Omega} \propto \cos^n \Theta, \quad (1.1)$$

де $1 \leq n \leq 2$;

Θ – полярний кут між напрямком розпилення частинки та нормаллю до поверхні;

Φ – потік розпилених частинок;

Ω – просторовий кут.

Такий розподіл виглядає незалежним від кута падіння іона, виключаючи напрямки, що близькі до дотичних, оскільки у цих випадках починає відігравати значну роль структура поверхні.

Покладаючи $n = 1$, диференціальний вихід розпилених частинок, який включає енергетичний та кутовий розподіли, називається розподілом Зігмунда-Томпсона (Thompson):

$$\frac{d^3\Phi}{dEd^2\Omega} \propto \frac{E}{(E + U_b)^{3-2m}} \cos \Theta, \quad (1.2)$$

де E – енергія розпилених частинок;

U_b – поверхнева енергія зв'язку.

Поверхнева енергія зв'язку в багатьох випадках приймається еквівалентною теплоті сублімації [2], хоч для ідеальної поверхні ця енергія більша на 30–40%, ніж енергія сублімації [57]. Форма кривої енергетичного розподілу розпилених частинок також не залежить від початкової енергії та кута падіння іонів. Розподіл енергії має максимум при енергії:

$$E_{\max} = \frac{U_b}{2(1-m)}. \quad (1.3)$$

Параметр m , що з'являється у диференціальному перерізі розсіювання, яке використовує екранований потенціал Кулона, змінюється від $m = 0.5$ при середніх енергіях ~ 100 кеВ до $m = 0$ при низьких енергіях. Наближення $m = 0$ добре відповідає енергіям іонів у декілька кеВ. Високоенергетичний хвіст розподілу розпилених частинок по енергіям $\sim E^2$, а максимум розпилених частинок має енергію $U_b/2$. Обидва ці результати знаходяться у непоганій відповідності з експериментальними результатами [57]. Зігмунд отримав також вираз для інтегрального коефіцієнта розпилення у розрахунку на один бомбардуєчий іон:

$$Y = \frac{1}{8} \Gamma F(x=0, E, \theta) / (NC_0 U_b), \quad (1.4)$$

де $\Gamma = 0,608$;

N – густина атомів мішені;

$C_0 = 0,0181 \text{ нм}^2$, що відповідає низькоенергетичному бомбардуванню;

$F(x=0, E, \theta)$ – енергія, виділена іоном з початковою енергією E і кутом падіння θ поблизу поверхні ($x=0$).

Неодноразово робилися спроби покращити формулу (1.4), як, наприклад, спроба врахувати розмір атома та глибину виходу розпилених частинок [69], що однак важко зробити послідовно коректно в межах континуальної теорії.

Слід зазначити, що крім теорії Зігмунда існують інші підходи до отримання аналітичного виразу коефіцієнта розпилення, як наприклад, теорія Плетньова – Семенова – Тельковського [70–72], в якій, кінцева формула позбавлена деяких вільних параметрів, що існують у теорії Зігмунда. У кінці 80-х років з'явилося декілька праць присвячених можливості впровадження ідей фрактальної геометрії у опис високоенергетичних каскадів зіткнень. Однак цей напрямок не дав поки що значних результатів і не набув широкого розповсюдження [16, 73].

Інтерес до подальшого розвитку аналітичної теорії розпилення зберігався і надалі [74]. Більш детально існуючі теорії розпилення обговорюються, наприклад, у монографії Плешивцева та Бажина [75].

1.3.2. *Переважає розпилення.* Експериментальні результати дають підставу говорити про можливість сильної зміни коефіцієнтів розпилення компонентів у багатокомпонентних матеріалах порівняно з коефіцієнтами розпилення відповідних однокомпонентних матеріалів [2, 39–41, 43, 76]. При цьому, парціальні коефіцієнти розпилення багатокомпонентної мішені можуть значно відрізнятися один від одного, що і призводить до переважного розпилення одного компонента порівняно з іншим. Головними причинами цього є різниці поверхневих енергій зв'язку та атомних мас компонентів [77, 78]. У випадках, коли неможливо знехтувати параметром m (при енергіях декілька кеВ параметр перерізу ядерного розсіювання $m = 0 \div 0.2$), а також за припущенням існування тільки поверхневих енергій зв'язку, тоді як об'ємні енергії зв'язку ігноруються, транспортна теорія розпилення Зігмунда призводить до наступного виразу відношення коефіцієнтів розпилення компонентів мішені:

$$\frac{Y_1}{Y_2} = \frac{N_1(0)}{N_2(0)} \cdot \left(\frac{M_2}{M_1} \right)^{2m} \cdot \left(\frac{U_2}{U_1} \right)^{1-2m}, \quad (1.5)$$

де $U_{1,2}$ – поверхневі потенціальні бар'єри;

$M_{1,2}$ – маси атомів;

$N_{1,2}(0)$ – поверхневі рівноважні концентрації атомів, відповідно, сорту 1 і 2 в сплаві [79–81].

Формула (1.5), однак, дає значні похибки при низьких енергіях бомбардуючих іонів [79].

З формули (1.5) видно, що поверхневі енергії повинні відігравати більш значну роль у переважному розпиленні порівняно з атомними масами компонентів. Отже, якщо маси атомів компонентів мало відрізняються одна від одної, то інтенсивніше буде розпилюватися компонент з меншою поверхневою енергією, а якщо поверхневі енергії зв'язку не відрізняються (ізотопна система), то інтенсивніше буде розпилюватися компонент з меншою масою атомів. Такий висновок на початку 80-х років був підтверджений експериментальними даними, отриманими за допомогою ЕОС для сплавів: Au–Pd, Cu–Ni, Pd–In, Ag–Ni, Gd–Co, Pb–Sn, Pd–Ni, Gd–Fe, Au–Ni, In–Ga [77, 79].

У [82, 83] для оцінки $U_{1,2}$ у (1.5) використовувалися поверхневі енергії зв'язку для однокомпонентних матеріалів. Для металевих сплавів, поверхнева енергія може бути записана як лінійна комбінація енергій парної взаємодії:

$$U_i = \sum_{k=1}^{Z_s} U_{ik}, \quad (1.6)$$

де U_{ik} – енергії парної взаємодії атома сорту i з найближчими сусідами k , кількість яких є Z_s [78, 81, 84–86].

Достовірність (1.6) підтверджується експериментально для деяких сплавів, наприклад, Cu–Ni [87], Cu–Zn [88]. Вираз (1.6) базується на залежності енергії зв'язку від концентрації компонентів у випадку багатокомпонентних металевих сплавів, коли поверхневу енергію атома можна записати у вигляді $U_i = C_k \cdot U_{ik}$, де C_k – відносна концентрація компонента k на поверхні [41, 81]. Залежність поверхневої енергії зв'язку від концентрації компонентів була продемонстрована Хусинським, Бетцем та ін. [89] на прикладах великої кількості сплавів і компаундів на основі Cr. Було отримано, практично, такий самий вихід розпилених атомів Cr, як і в однокомпонентному Cr, однак енергетичний розподіл розпиленних частинок, положення максимуму якого залежить від поверхневих енергій зв'язку (див. (1.2) і (1.3)), змінювався в залежності від концентрації компонентів мішені. Крім того, в роботі показана сильна залежність виходу розпилення від стану поверхні та поверхневих домішок у вигляді різних адсорбатів.

1.3.3. *Оцінки поверхневої енергії зв'язку.* У наближенні парних взаємодій оцінка енергії взаємодії U_{12} між двома різними атомами засновується на використанні поняття теплоти перемішування ΔH_m [16, 17]. Для рівних концентрацій компонентів 1 і 2, а також виходячи з (1.6) маємо:

$$U_{12} = \frac{1}{2Z_v} [8\Delta H_m + U_{01} + U_{02}], \quad (1.7)$$

де Z_v – об'ємне координаційне число;

$U_{01,02}$ – об'ємні енергії зв'язку для однокомпонентних матеріалів 1 і 2.

У такому наближенні вважається, що $Z_{s,v}$ не залежать від концентрацій компонентів [79].

Існує точка зору, що поверхневі енергії можуть бути ототоженені з енергіями атомізації [2, 41]. У роботі [63] Келлі запропонував оцінювати поверхневі енергії атомів на ідеальній поверхні через теплоту атомізації. Оцінюється, що в залежності від швидкості релаксації ґратки у місті акту розпилення атома, $U_s = 1,3 \div 1,4 \cdot \Delta H^a$. Завдяки переходу частини атомів на поверхню у становище ад-атомів, а також завдяки виникненню радіаційних поверхневих вакансій, поверхневі енергії зв'язку можуть зменшуватися [90–92]. У напівпровідниках взаємодія з енергетичними іонами може призводити до збільшення поверхневих енергій за рахунок аморфізації кристала, як наприклад у Ge і Si [93].

Розглянутий опис поверхневих енергій, однак, не враховує багаточастинкові взаємодії. Для більш детального та адекватного дійсності обчислення поверхневих енергій зв'язку потрібно використання методу молекулярної динаміки з багаточастинковими атомними потенціалами. Урбасек і Гадес [94], використовуючи МД метод, обчислювали поверхневу енергію, як різницю потенціальних енергій кристалів при 0 К: ідеального релаксованого кристала та кристала з однією нерелаксованою поверхневою вакансією. При цьому, згідно [94] багаточастинковий потенціал дає систематично менше значення поверхневої енергії зв'язку порівняно зі значенням, яке дає парний потенціал у випадку, коли обидва потенціали моделюють однакове значення об'ємної енергії когезії. У [94] наведено числові значення поверхневих енергій для кристала Cu, згідно відповідних потенціалів: 4,07 eV (tight-binding) і 4,6 eV (Морзе).

1.4. Метод молекулярної динаміки

1.4.1. *Загальний опис методу молекулярної динаміки.* Рух атомів у каскаді, що виникає в твердому тілі, визначається силами взаємодії з усіма сусідніми атомами мішені. Рівнодійна сила, що діє на окремих атом, є сумою цих сил взаємодії. Розгляд каскадів зіткнень у межах класичної механіки потребує використання рівнянь руху Ньютона для покрокового обчислення траєкторій руху атомів:

$$\vec{F}_i(\vec{x}_i(t)) = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij} = M_i \frac{d^2 \vec{x}_i(t)}{dt^2}, \quad (1.8)$$

де N – число атомів модельного кристала;

$\vec{x}_i(t)$ – радіус-вектор атома i в кристалі;

M_i – маси атомів;

F_{ij} – сила взаємодії між атомами i та j .

Сили обчислюються за допомогою потенціалу $V(r_{ij})$, де вектор r_{ij} – відстань між атомами i і j . Проекція сили, прикладеної до атома j , на вісь k дорівнює:

$$F_j^k(t) = F^k(\vec{r}_{1j}, \vec{r}_{2j}, \dots, \vec{r}_{Nj}) = - \sum_i \alpha_i^k \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, \quad (1.9)$$

де α_i^k – косинус кута між вектором r_{ij} і віссю k .

Сума за i включає атоми, сусідні з j -м атомом, і залежить від області дії потенціалу $V(r)$. Обрізання потенціалу повинно відповідати тим константам, на основі яких будуються значення потенціалу. Збільшення радіусу обрізання призводить до підвищення точності обчислень, але зменшує швидкість роботи програми. Частіше за все беруть до уваги 2–3 сфери найближчих сусідніх атомів. Вибір потенціалу являє собою чи не найголовнішу проблему МД методу, яка буде обговорюватися нижче.

Ще одна проблема МД методу – збереження стабільності кристала. Для того, щоб кристал залишався стабільним на протязі усього розрахунку, необхідно введення додаткових пружних сил, які підпорядковуються закону Гука, на межах кристала [7] або введення періодичних межових умов на бічних сторонах кристала. Періодичні межові умови повинні працювати так, щоб атоми протилежних сторін взаємодіяли між собою. При цьому закінчення кристала з одного боку є його продовженням з іншого [1, 95], що може мати наступний вигляд на мові комп'ютерного алгоритму (1.10):

$$\begin{aligned} \text{SSR2} &= \text{SAY(I)} - \text{SAY(K)} \\ \text{SSR3} &= \text{SAZ(I)} - \text{SAZ(K)} \\ \text{SSR2} &= \text{SSR2} - (\text{BGY} + \text{DDY} * 0.5) * \text{INT}(\text{SSR2} / (\text{BGY} - 2.5 * \text{DDY})) \\ \text{SSR3} &= \text{SSR3} - (\text{BGZ} + \text{DDZ} * 0.5) * \text{INT}(\text{SSR3} / (\text{BGZ} - 2.5 * \text{DDZ})) \end{aligned} \quad (1.10)$$

де SAY(I) , SAZ(K) – координати y та z атомів i , k ;
 DDY , DDZ – сталі ґратки в латеральних напрямках y , z ;
 BGY , BGZ – ефективні розміри кристала в напрямках y , z ;
 INT – функція виділення цілої частини від аргументу.

Таким чином, атом, що залишає кристал з одного боку, зразу ж опиняється на вході з іншого. Однак, хоч більш детальні дослідження показали, що вплив періодичних крайових умов на кінетичні коефіцієнти є незначним [96], у деяких випадках нехтування крайовими умовами може призвести до отримання нефізичних результатів. З цієї

точки зору найбільш ефективно працює комплекс умов, який включає періодичні умови та дисипативні сили на межі кристала, які не дозволяють атому, що має значну енергію і спроможний залишити кристал, входити у нього з протилежного боку на значну глибину [7, 97].

У випадку використання пружних сил на межах кристала в комплексі з дисипативними складовими, рівняння руху має вигляд:

$$M \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = k \vec{x} - \Psi \frac{d \vec{x}}{dt}, \quad (1.11)$$

де $\Psi = (4Mk)^{1/2}$ у разі ефективною дисипації енергії осцилятора, а складова kx відповідає за пружну реакцію матриці.

Таким чином, у відповідності до (1.11), межові атоми у модельному кристалі можуть розглядатися як загасаючі осцилятори. У цілому, МД моделі із стабільними кристалами, які використовують складову притягання атомного потенціалу, називаються стабільними МД моделями, а моделі, у яких радіус обрізання потенціалу (використовуються тільки відштовхуючі потенціали) менше радіуса першої сфери найближчих сусідніх атомів, називаються квазістабільними моделями [7].

Важливим моментом у виборі часового кроку інтегрування рівнянь руху (1.9), (1.11) є компроміс між точністю обчислення і загальним часом розрахунку. Часовий крок вибирають таким чином, щоб за один крок інтегрування рівняння руху, каскадний атом, який має найбільшу кінетичну енергію у кристалі, зміщувався не більше, як на 5% від розміру сталої ґратки. З часом розвитку каскаду, максимальна кінетична енергія атома зменшується, що призводить до збільшення кроку інтегрування. При цьому, крок чисельного інтегрування не повинен перевищувати $10^{-15} \div 5 \cdot 10^{-15}$ с, щоб розрахунок не вийшов за межі необхідної точності [7, 98].

У багатьох випадках, важливим елементом моделювання є температура кристала. Взагалі існують декілька способів моделювання температури у межах формалізму молекулярно-динамічного методу [99]. Розглянемо детально підхід Берендсена (Berendsen) та ін. [100], який широко використовується і коротко формулюється як «занурення системи в зовнішню термічну ванну». Рівняння руху атомів, розташованих на бокових межах та дні кристала вище останнього нерухомого прошарку атомів у методі [100] мають наступний вигляд:

$$M_i \cdot \frac{d\vec{V}_i}{dt} = \vec{F}_i + M_i \cdot \gamma \cdot \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) \cdot \vec{V}_i, \quad (1.12)$$

де T_0 – середня температура системи, яка задається зовні;

$T = 2 \cdot E_k / (3 \cdot N \cdot k)$ – миттєва температура системи;

E_k – сумарна кінетична енергія атомів кристала;

V_i – швидкість частинки;

N – кількість атомів кристала;

K – стала Больцмана;

γ – демпінгова константа, яка показує наскільки сильним є зв'язок між кристалом та «ванною», що охоплює його.

Взагалі, вибір числового значення константи γ становить значну проблему, оскільки, наприклад, в металевих кристалах крім теплопровідності ґратки, необхідно враховувати електронну теплопровідність. Стан проблеми врахування електронної теплопровідності в молекулярно-динамічному моделюванні буде обговорюватися в пп. 1.5.6. Згідно [101], γ вибирається рівною середній частоті фононів $\gamma = 3/4\omega_D$, де ω_D – частота Дебая, з метою критичного пригнічення небажаних осциляцій атомів на межах кристала. Рівняння (1.12) показує, що випадкова флуктуація температури кристала вище або нижче T_0 призводить до вмикання дисипативних сил або сил «розігріву» кристала на його межах за рахунок зміни знака виразу в дужках з правого боку рівняння (1.12). Таким чином, у кристалі постійно підтримується наближена до T_0 температура.

Актуальним є використання методики прискорення молекулярно-динамічних розрахунків шляхом побудови так званого «списку найближчих сусідів» («neighbour list») [1, 7]. Список найближчих сусідів – це перелік атомів, які розміщуються на відстані не більше ніж r_m від атома, з яким розраховується взаємодія. При цьому r_m повинен бути відчутно більшим (вибирається в ~ 1.5 – 2 рази більшим, точне значення відношення вибирається шляхом спеціальних випробувань) за радіус обрізання потенціалу, щоб у процесі деякої кількості кроків алгоритму, нові атоми із зовні не потрапляли в зону прямої взаємодії з обраним атомом. Після розрахунку заданої кількості кроків алгоритму (або заданої довжини переміщень), будується новий список найближчих сусідніх атомів і все починається з початку. Виграш часу відбувається завдяки тому, що при розрахунку сил взаємодії з кожним атомом кристала, перебираються тільки атоми, які знаходяться всередині сфери r_m навкруги обраного атома, а не усі атоми кристала. У цілому, час

розрахунку МД програми із списком найближчих сусідів, у разі вдало обраного співвідношення між радіусом обрізання потенціалу і параметром r_m , скорочується в $\sim 2,5\text{--}3,5$ рази.

Необхідно також обґрунтувати придатність рівнянь класичної механіки для опису атомних каскадів зіткнень. Нижня межа застосування класичної механіки – коли довжина хвилі атома, що рухається, є меншою порівняно зі сталою кристалічної ґратки. У каскаді довжина хвилі λ атома віддачі масою M , який має швидкість V , обчислюється згідно виразу [7, 102]:

$$\lambda = \frac{h}{M \cdot V}, \quad (1.13)$$

де h – стала Планка.

Видно, що, наприклад, довжина хвилі атома Cu , що має кінетичну енергію 0,1 еВ, більше як на порядок менше сталої ґратки Cu – 0,361 нм, що виправдовує використання класичних рівнянь руху в МД методі для моделювання каскадів зіткнень навіть на стадії їх охолодження та релаксації ґратки. Класичне наближення не виглядає переконливим для легких атомних систем: H_2 , He . Слід обережно ставитися до молекулярно-динамічних результатів, отриманих при енергіях атомів менше 0,1 еВ. Квантові ефекти починають сильно проявлятися при низьких температурах та в деяких фізичних величинах, як, наприклад, у коефіцієнтах теплопровідності нижче температури Дебая [103]. Тому слід особливо критично ставитися до результатів МД моделювання каскадів у кристалах з початковою температурою 0 К.

1.4.2. *Парні потенціали взаємодії.* Розвиток класичного МД методу почався з моделі Віньярда та ін. [104], яка була розроблена для моделювання механізмів генерації дефектів кристалічної ґратки. Для опису атом-атомних взаємодій використовувалися парні потенціали відштовхування. Стабільність кристала підтримувалася додатковими пружними силами на його межах. Пізніше Харісон та ін. [105] застосували МД метод для моделювання процесу розпилення монокристалів з врахуванням одночасності та багаточастинковості взаємодії, зробивши значний внесок у розробку сучасних МД алгоритмів. У 70–80-х роках МД моделювання використовувалося в більшості випадків для розрахунків енергетичного та кутового розподілу розпилених бомбардуючими іонами частинок [96, 105–120]. Кирсанов і Агранович [108] шляхом МД моделювання, використовуючи тільки парні потенціали, встановили, що підвищення температури

кристала призводить до збільшення інтенсивності розсіювання енергії в послідовностях атомних зіткнень заміщення і скорочує їх довжину. Вони прийшли до висновку, що при високих температурах краудіонний механізм генерації стабільних дефектів має низьку ефективність. Однак, напрямок моделювання процесу розпилення був на той час домінуючим. Він зберіг свою актуальність і надалі [57, 121–126]. Значно менше робіт було присвячено модифікації твердих тіл при іонному бомбардуванні [127]. Широке використання МД методу і, в першу чергу, стабільних моделей стримувалося низькою продуктивністю комп'ютерної техніки, оскільки МД метод вимагає значних витрат комп'ютерного часу порівняно з програмами, заснованими на наближенні парних зіткнень, як наприклад TRIM.SP [128] та MARLOWE [129–131], які використовують тільки відштовхуючі потенціали і дають реалістичні результати при енергіях атомів віддачі не менше 10 еВ [7, 8, 10, 132]. Таким чином, ці програми не можуть коректно враховувати термічну стадію каскаду [133]. У відомій праці, Робінсон (Robinson) однак показав, як слід впроваджувати складову притягання потенціалу в програму MARLOWE не відмовляючись від наближення парних зіткнень [134]. Слід зазначити, що значні розбіжності між МД моделюванням з врахуванням багаточастинковості і одночасності зіткнень та наближенням парних зіткнень при обчисленні кількості атомних каскадних переміщень у Si було зафіксовано і для високих енергій важких бомбардуючих іонів, де вони відрізняються майже у два рази [135]. Це може бути пов'язано з виникненням значної нелінійності при розвитку каскадів у вигляді термічних піків у випадку важких бомбардуючих іонів. Більш сучасною виглядає програма TRIRS [136, 137], у якій зроблені деякі удосконалення при низьких енергіях взаємодії порівняно з програмою TRIM.SP, хоч остання і залишається найбільш популярною у своєму сегменті. Іншою причиною, яка стримувала впровадження стабільних молекулярно-динамічних моделей, була відсутність реалістичних потенціалів притягання.

Найбільш популярними на той час були двочастинкові потенціали взаємодії зі складовою притягання, як наприклад, потенціал Морзе (1.14) [98] або потенціал Леннарда – Джонса (1.15) [7], які мали досить простий математичний вигляд:

$$V(r) = D \cdot \exp[-2 \cdot \alpha \cdot (r - r_0)] - 2 \cdot D \cdot \exp[-\alpha \cdot (r - r_0)] , \quad (1.14)$$

$$V(r) = \lambda_{12} \cdot r^{-12} - \lambda_6 \cdot r^{-6} . \quad (1.15)$$

Перші доданки цих потенціалів виконують роль відштовхуючих складових, а другі – складових притягання потенціалу. При цьому в

потенціалі Морзе константа D відповідає за глибину потенціальної ями, r_0 – відстань між атомами, α – частота коливань атомів у диполі. Параметри λ_6 і λ_{12} не мають такого чіткого фізичного змісту. У межах МД методу, ці та інші парні потенціали давали великі розбіжності з експериментом у разі обчислення енергій когезії та виникнення вакансії, температури плавлення, пружних констант та відстані між атомами у малих кластерах металів та напівпровідників [97, 103], хоч вони і використовувалися навіть у 90-х роках, наприклад для моделювання напилювання тонких плівок [138, 139]. Так, наприклад, відношення E_c/kT_m енергії когезії до температури плавлення є близько 30 у металах, тоді як двочастинкові потенціали дають відношення ~ 10 . Інший приклад: відношення енергії формування вакансії та енергії когезії дорівнює $1/4 \div 1/3$ в металах, тоді як двочастинкові потенціали дають ~ 1 [103]. Парні потенціали не дозволяли побудувати стабільну діамантову ґратку, стабільність якої є важливим елементом моделювання напівпровідників [10]. Це було пов'язано з неврахуванням багаточастинкових взаємодій між атомами у каскадах та в початкових недеформованих кристалах. Було розроблено також відштовхуючий потенціал Зіглера – Бірзака – Літмарка (Ziegler – Biersack – Littmark), який відноситься до групи екранованих кулонівських потенціалів:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1.16)$$

де екрануюча функція Φ апроксимується виразом:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n c_i \exp\left(-d_i \frac{r}{a}\right), \quad (1.17)$$

$$\sum_{i=1}^n c_i = \Phi(0) = 1, \quad (1.18)$$

а довжина екранування a може обчислюватися різними способами, наприклад, екранування по Фірсову:

$$a = 0.88534 a_b \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3}, \quad (1.19)$$

або по Зіглеру – Бірзаку – Літмарку:

$$a = 0.88534 a_b \left(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23} \right)^{-1}, \quad (1.20)$$

де $Z_{1,2}$ – заряди взаємодіючих частинок;

a_b – радіус Бора;

e – елементарний заряд;

d_i, c_i – константи потенціалу;

$n = 4$ для потенціалу Зіглера – Бірзака – Літмарка (ЗБЛ) [7].

ЗБЛ потенціал є оптимальним потенціалом серед інших відштовхуючих потенціалів атом-атомної взаємодії, які приєднуються до складової притягання потенціалу (наприклад, ((1.14) або (1.15)) на малих відстанях та при великих енергіях (більше ніж декілька еВ) атом-атомної і іон-атомної взаємодії [7, 140]. Приєднання проводиться при виконанні двох умов: неперервності функцій та їх перших похідних за умови мінімізації розбіжностей для других похідних від функцій потенціалів у точках з'єднання.

При енергіях взаємодії менше 500 еВ значною популярністю користується також відштовхуючий потенціал Борна-Майера [98], параметри якого A_{bm} і a_{bm} розраховані, практично, для всіх елементів [7]:

$$V(r) = A_{bm} \cdot \exp(-r/a_{bm}). \quad (1.21)$$

Слід зазначити, що вибір експоненціальної залежності у виразах (1.17) та (1.21) зумовлений тим, що електронна густина навкруги атомів затухає експоненціально з віддаленням від атомних ядер [141].

1.4.3. *Багаточастинкові потенціали взаємодії.* Кінець 80-х років відзначився появою відносно дешевих персональних комп'ютерів, які мали значну продуктивність та широкі можливості для відтворення графічних зображень, зокрема, каскадів зіткнень атомів [142], а також розвитком методів побудови багаточастинкових напівемпіричних потенціалів металів та їх сплавів у межах моделі «зануреного атома» Фіннісом (Finnis) та Синклером (Sinclair) [143] з одного боку, та Доу (Daw), Баскесом (Baskes) і Фойлесом (Foiles) [144–146] з іншого. Обидва підходи дозволяли реалістично описувати радіаційні дефекти, малі кластери, пружні константи з врахуванням їх симетричності та інше. Основна ідея була закладена у рівнянні загальної енергії металевої системи, де підсумовування проводиться по всіх атомах кристала:

$$E = \frac{1}{2} \sum_j \sum_{i \neq j} V_R(r_{ij}) - \sum_i f(n_i), \quad (1.22)$$

де $V_R(r_{ij})$ – відштовхуючий парний потенціал для атомів i і j , які знаходяться на відстані r_{ij} ;

$f(n_i)$ – функція «занурення» атома i в фонову електронну систему з густиною, що прямо пропорційно пов'язана з величиною n_i .

У схемі Фінніса – Синклера $f(n_i) = c \cdot (n_i)^{1/2}$, тоді як у схемі Доу – Баскеса для моделювання залежності $f(n_i)$ використовується кубічний сплайн. У деяких інтерпретаціях схеми Фінніса-Синклера розмірна стала c чисельно дорівнює одиниці (див. п. 3.3.1). Величина n_i , i , відповідно, густина електронної системи поблизу атома i , приблизно залежить від суперпозиції електронних густин сусідніх атомів j :

$$n_i = \sum_{j, j \neq i} \rho_j(r_{ij}). \quad (1.23)$$

Електронні густини, що пропорційно пов'язані з ρ_i , знаходяться методом Хартрі – Фока [101, 147]. Вираз (1.22) є інваріантним для перетворень:

$$V_R'(r_{ij}) = V_R(r_{ij}) + 2\lambda\rho(r_{ij}), \quad (1.24)$$

$$f'(n_i) = f(n_i) - \lambda n_i, \quad (1.25)$$

де λ – вільний параметр [100].

Взагалі, багаточастинкові потенціали у інтерпретації Фінніса – Синклера або Доу – Баскеса не є повністю адитивними, що докорінно відрізняє їх від парних потенціалів атом – атомної взаємодії.

У галузі напівпровідників та інших ковалентних матеріалів аналогічні потенціали були розроблені Терсофом (Tersoff) для кремнію [148–150] та вуглецю [151], а також їх сполучень [152], Бреннером (Brenner) для сполучень вуглецю з воднем [153], Смітом (Smith) для арсеніду галію [154]. Одночасно Стілінджером (Stillinger) і Вебером (Weber) був також розроблений спрощений тричастинковий потенціал для кремнію, який, однак, також мав досить складну математичну структуру [155].

Ідея Терсофа виходила з представлення загальної енергії ковалентної системи у вигляді суми:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left(V_R(r_{ij}) + B_{ij} V_A(r_{ij}) \right), \quad (1.26)$$

де $V_A(r_{ij})$ – частина притягання потенціалу;
 $B_{ij} = B(G_{ij})$ – багаточастинковий співмножник.

Параметр B_{ij} зв'язаний з напрямком взаємодії та положенням атомів i і j по відношенню до інших найближчих сусідніх атомів. При цьому, функція G_{ij} визначається згідно з виразом:

$$G_{ij} = \sum_k f_c(r_{ik}) g(\theta_{jik}) f(r_{ij} - r_{ik}), \quad (1.27)$$

де $f_c(r)$, $g(\theta)$, $f(r)$ – спеціально підібрані функції, які дозволяють відтворити діамантову ґратку.

Основний зміст складався з того, що зв'язок i - j може слабнути залежно від присутності та розташування інших зв'язків i - k , які включають атом i . При цьому, функція θ_{jik} – описує кут між напрямками атом – атомних зв'язків i - j та i - k [146–148]. Бренером було показано [153], що підхід Терсофа до напівпровідників та метод «зануреного атома» для металів, незважаючи на різні посилки, математично еквівалентні.

Поява багаточастинкових атомних потенціалів призвела до прискореного розвитку як самого методу молекулярної динаміки, так і різних його практичних застосувань. Поряд з традиційним моделюванням іонного розпилення [116, 118, 156] почалося інтенсивне дослідження розпилення кластерів [157–159], включаючи органічні матеріали [160], що супроводжувалося відповідними досягненнями у теорії та експерименті [161–163]. Це також торкнулося матеріалознавства, моделювання нових матеріалів, наприклад, напилювання тонких плівок окремими атомними частинками та кластерами [164–181], включаючи органічні матеріали [182, 183], у тому числі фулерени [184–187], опису поверхневих процесів, як, наприклад, поверхневої дифузії ад-атомів та кластерів [188–202], хімічних реакцій на поверхнях [203], моделювання генерації дефектів [204–207] та іонної імплантації [208]. У зв'язку з розвитком цих напрямків зріс інтерес до моделювання низькоенергетичного бомбардування та зв'язаних з ним ефектів [209–213]. Слід зазначити, що існують дані, які стверджують неістотність розбіжностей результатів молекулярно-динамічного методу та методу Монте-Карло, що застосовувались для моделювання напилювання тонких плівок. Це відкриває широкі можливості для використання методу Монте-Карло, оскільки він дозволяє моделювати процес протягом часу, який відповідає реальному напилюванню [214]. Значним кроком у розвитку молекулярно-динамічного методу була

поява розпаралелених молекулярно-динамічних алгоритмів, розроблених для сучасних високопродуктивних комп'ютерів з паралельними процесорами [215–222].

1.5. Іонне перемішування

На початку 80-х років у роботах Хофера (Hofer) і Літмарка [3, 223, 224], а також Зігмунда і Грас-Марті (Gras-Marti) [4–6, 225] була розроблена і викладена транспортна теорія іонного перемішування, яка залишається актуальною і зараз.

1.5.1. *Перемішування первинними атомами віддачі.* Іонне перемішування первинними атомами віддачі, які знаходилися на початку бомбардування в поверхневому прошарку і отримали енергію безпосередньо від бомбардуючих іонів, можна описати згідно з [3]:

$$\frac{dY_{PR}}{dx} = N_0 \int_0^{D_2} \int_{E_d}^{E_{2,\max}} d\sigma_{12}(E_1(x'), E_2) \cdot F_{R2}(E_2, \cos(\theta_2), x-x') dx', \quad (1.28)$$

$$\cos(\theta_2) = \sqrt{\frac{E_2}{E_{2,\max}}}, \quad (1.29)$$

$$E_{2,\max} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_1, \quad (1.30)$$

де $d\sigma_{12}$ – ймовірність генерації первинного атома віддачі масою M_2 з кінетичною енергією E_2 іоном з енергією E_1 і масою M_1 на глибині x ;

F_{R2} – розподіл первинних атомів віддачі з глибиною, швидкості яких мають кут θ_2 відносно нормалі до поверхні;

D_2 – товщина прошарку, з якого генеруються первинні атоми віддачі.

Інтеграл (1.28) був обчислений аналітично в [3–6] для перерізу розсіювання:

$$d\sigma_{12}(E_1, E_2) = C_m \cdot E_1^{-m} \cdot E_2^{-1-m} dE_2, \quad (1.31)$$

де константа C_m наведена, наприклад, у [2]. Параметр m обговорювався в розділі 1.3.2. Для отримання параметрів рівняння (1.28) використовувався енергетичний потенціал взаємодії $V(r) \sim r^{-1/m}$ [2].

У випадку перемішування мішені первинними атомами віддачі, час виникнення, переміщення та релаксації яких, а отже, і перемішування первинними атомами віддачі складає $\sim 10^{-14}$ с, поширення межі розподілу компонентів двошарової системи пропорційно флюенсу енергетичних іонів [226–229]. Згідно з експериментальними [227, 230, 231] та теоретичними [232] даними, а також результатами динамічного однокрокового моделювання [233], мова про яке буде в п. 1.5.5, внесок первинних атомів віддачі в загальне поширення межі розподілу між компонентами складає не більше десяти відсотків. Слід підкреслити, що згідно з існуючим молекулярно-динамічним уявленням про кінетику розвитку атомних каскадів зіткнень, важко виділити у чистому вигляді внесок первинних атомів на фоні каскадної частини перемішування, оскільки, з самого початку каскаду виникають колективні взаємодії частинок системи і таке виділення різних стадій розвитку каскаду носить штучний характер.

1.5.2. *Каскадне перемішування: транспортне рівняння.* Після завершення процесу виникнення первинних атомів віддачі в наступні $\sim 10^{-12}$ с розвивається процес взаємодії атомів, що рухаються, з нерухомими атомами – стадія зіткнень атомного каскаду, коли найбільш істотними виявляються парні взаємодії атомів. Якщо густина каскаду є значною, то далі в наступні $\sim 10^{-12} \div 5 \cdot 10^{-12}$ с каскад розвивається в термічних піках, які є нелінійною системою і в яких переважно спостерігаються взаємодії атомів, що рухаються [2]. Було встановлено, що поширення межі розподілу двошарової системи завдяки каскадному перемішуванню пропорційно квадратному кореню від флюенсу бомбардуючих частинок [14, 15, 234].

У роботах [3–6] було отримано інтегро-диференціальне рівняння іонного перемішування на основі рівняння балансу маси. Зміна концентрації компонента може бути описана рівнянням у наступному вигляді:

$$d(C_2(\Phi, x) \cdot \Delta x) = d\Delta x \left[\Delta x \cdot \int_0^{+\infty} C_2(\Phi, x') \cdot F_2(x', x) dx' - \Delta x \cdot C_2(\Phi, x) \int_{-\infty}^{+\infty} F_2(x, x') dx' \right], \quad (1.32)$$

де $\Phi = I \cdot t$ – флюенс;

I – густина потоку іонів, що падають на поверхню;

t – час;

$C_2(\Phi, x)$ – концентрація компонента;

Δx – розмір елементарного прошарку, на якому відбувається зміна концентрації компонентів.

Функція $F_2(x, x')$ визначається виразом $C_2(x) \cdot F_2(x, x') \cdot dx \cdot dx'$, який показує кількість атомів, зміщених з інтервалу $(x, x + dx)$ в інтервал $(x', x' + dx')$ у розрахунку на один бомбардуючий іон. Перший доданок у квадратних дужках рівняння (1.32) визначає кількість атомів, які прийшли в інтервал $(x, \Delta x)$, а другий – кількість атомів, які залишили цей інтервал. Функція F_2 залежить від концентрацій всіх компонентів мішені. Таким чином, для вирішення n -компонентної задачі необхідно мати у загальному випадку n зв'язаних між собою рівнянь аналогічних рівнянню (1.32). Їх розв'язання стає можливим тільки у разі розриву ланцюга рівнянь і приведення їх до взаємно незалежного вигляду. Тільки у разі еквівалентних балістичних якостей компонентів, рівняння можуть бути коректно приведені до взаємно незалежного вигляду. З іншого боку, лінеаризація рівнянь при низькій концентрації компонентів також може призвести до взаємної незалежності рівнянь іонного перемішування [3].

Загальне рівняння іонного перемішування (1.32) може бути розв'язано тільки за умов залучення додаткових теоретичних уявлень для отримання функцій атомних переміщень у каскадах $F_{1,2}$. Відповідно до роботи [3], це може бути зроблено трьома способами: 1) згідно формалізму з урахуванням збереження сталою загальної концентрації компонентів, описаному в [3]; 2) шляхом розв'язання спеціального транспортного рівняння для функції атомних переміщень [4–6]; 3) шляхом моделювання каскадів у наближенні парних зіткнень методом Монте-Карло [235–240] або МД методом [101, 241–248]. Слід підкреслити, що робота [235] з'явилася значно раніше, ніж були надруковані перші праці по аналітичному розв'язанню рівняння іонного перемішування. У роботі [249] алгоритм Монте-Карло використовувався для накопичення дози бомбардуючих іонів у мішені, тоді як коефіцієнт дифузії був сталим і не залежав від координати. У одній із своїх статей кінця 80-х [250] Літмарк передбачав розвиток теорії іонного перемішування в напрямку комп'ютерного моделювання функцій атомних переміщень, що почало виправдовуватися в 90-х роках.

Серед інших досліджень, де використовувався транспортний підхід до моделювання іонного перемішування, а функції атомних переміщень оцінювалися аналітично в наближенні парних взаємодій, слід виділити роботи Кучинського і Ізмайлова [251, 252], Галкуте і Пронявічуса [82, 83], Манінга (Manning) [253], а також Степанової [254, 255]. У [254] вдало врахована періодичність кристалічної ґратки при розв'язанні транспортного рівняння перемішування шляхом введення незмінної довжини вільного пробігу атома в каскаді, що було використано в [255] для розрахунків енергетичних залежностей коефіцієнтів розпилення в Ni_3Al та $TaSi_2$ і дозволило отримати задовільний збіг з експериментом. При цьому, на протязі усього часу існує практична зацікавленість експерименту у теоретичному розгляді масоперенесення у випадку низьких енергій іонів [256].

1.5.3. *Каскадна релаксація мішені.* У роботах [257, 258], з метою збереження сталою загальної концентрації компонентів в умовах іонного бомбардування та пов'язаних з цим локальних змін концентрації атомів у каскадах, у рівняння (1.32) був введений додатковий член:

$$J_c \propto \frac{\partial}{\partial x} \left[C_2(\Phi, x) \int \sum_{i=1}^n \left(\int_0^{\infty} C_i(\Phi, x') \cdot F_i(x', x) dx' - C_i(\Phi, x) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} F_i(x, x') dx' \right) \right], \quad (1.33)$$

де n – кількість компонентів у мішені.

Додатковий член безумовно ускладнює розв'язання рівняння (1.32), але дозволяє безупинно ренормувати концентрації компонентів у процесі інтегрування, залишаючи сталою сумарну концентрацію. Інший засіб підтримки сталою загальної концентрації атомів мішені був запропонований в [3]. При цьому, масштаб координати змінювався через кожний крок флюенсу $d\Phi$ згідно правила:

$$x''(\Phi, x) = \frac{1}{N} \int_0^x \sum_i N_i(\Phi, x') dx', \quad (1.34)$$

де $N_i(\Phi, x')$ – абсолютна концентрація компонента i ;

$x''(\Phi, x)$ – новий масштаб координати уздовж напрямку, нормального до поверхні;

N – загальна абсолютна концентрація атомів.

Такий спосіб ренормування концентрації використовується також в однокрокових динамічних моделях Монте-Карло, заснованих на наближенні парних зіткнень.

Проблема збереження незмінною загальної концентрації існує також і в разі розрахунку іонного перемішування з використанням дифузійного рівняння. Вона була розв'язана шляхом введення в рівняння Фокера – Планка додаткового потоку K , який отримав назву «колективний потік» [14, 259] і є математичним аналогом члена (1.33):

$$\frac{\partial N_i(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[-J_i + N_i K + V_f N_i \right], \quad (1.35)$$

$$K = \sum_{m=1}^n \tau_m \cdot J_m, \quad (1.36)$$

де V_f – швидкість розпилення поверхні, що бомбардується іонами ($V_f = I \cdot Y / N$ у випадку низькоконцентраційної домішкової системи, Y – коефіцієнт розпилення матриці);

τ_m – об'єм одного атома мішені;

J_i – псевдо-дифузійний потік атомів у каскаді, який в багатьох випадках має форму закону Фіка [14].

Усі три способи збереження сталою загальної концентрації атомів у мішені дають тільки математичне розв'язання проблеми, але нічого не кажуть про фізичні механізми реалізації каскадної релаксації кристалів, швидкість якої зрівняна зі швидкістю звукових хвиль у твердих тілах [14].

1.5.4. *Дифузійне наближення.* Одночасно з транспортною теорією іонного перемішування самостійно розвивалася дифузійна теорія іонного перемішування [14, 259–268]. У роботі [261] у випадку сталого коефіцієнта дифузії D в області перемішування L були отримані вирази для поширення псевдопрошарку у випадках його різних початкових положень по відношенню до області перемішування. За умови, що псевдопрошарок на початку розпилення знаходиться на внутрішній межі області перемішування, був отриманий вираз для поширення тонкого псевдопрошарку σ^2 шляхом застосування перетворення Лапласа до рівняння дифузії:

$$\sigma^2 = \frac{2D^2}{V_f^2} \left[\frac{V_f L}{D} - 1 + \exp \left(-\frac{V_f L}{D} \right) \right]. \quad (1.37)$$

Рівняння (1.37) дає зв'язок між трьома головними параметрами, які впливають на поширення пошарового профілю: D , L , V_f . Оскільки розв'язання (1.37) було отримано для найпростішого випадку, коли D не змінюється в області перемішування, то воно має тільки оціночну цінність.

Принципово транспортне рівняння іонного перемішування (1.32) з релаксаційним членом (1.33) спрощується шляхом розкладання правої частини рівняння (1.32) з членом (1.33) у ряд Тейлора з точністю до квадратичних членів послідовності за виконання умови, що довжина каскадного стрибку $x-x'$ атома є значно меншою ніж розмір області перемішування L ($(x - x') / L \ll 1$), до виду рівняння типа Фоккера – Планка [14, 269] (1.35). При цьому, запропонований в роботі [259], так званий, «колективний потік» атомів для збереження сталою сумарної концентрації атомів у мішені (1.36) формується автоматично в процесі спрощення рівнянь (1.32) і (1.33). Були отримані математичні вирази для коефіцієнта іонного перемішування $D(x)$ та середньої швидкості дрейфу атомів віддачі $V(x)$, відповідно, як другого і першого моментів функції атомних переміщень $F_2(x, x')$ [257, 258]:

$$D(x) = \frac{1}{2} I \int_{-\infty}^{+\infty} F_2(x, x') x'^2 dx', \quad (1.38)$$

$$V(x) = I \int_{-\infty}^{+\infty} F_2(x, x') x' dx'. \quad (1.39)$$

Вирази (1.38) і (1.39) є універсальними для всіх умов бомбардування, однак, для отримання кінцевого результату необхідно знати функцію F_2 , що становить самостійну і досить складну проблему. Тому була отримана більш пристосована для оціночних розрахунків формула коефіцієнта іонного перемішування [232] у наступному вигляді:

$$D(x) = \frac{1}{6} \cdot \frac{0,42I}{NE_d} \cdot \left(\frac{dE}{dx} \right)_n \cdot \langle d^2 \rangle, \quad (1.40)$$

де E_d – ефективна енергія зміщення атомів;
 $\langle d^2 \rangle$ – середньоквадратичне зміщення атома в каскаді;
 $(dE/dx)_n$ – пружні енергетичні втрати бомбардуючого іона.

Формула (1.40) справедлива в наближенні лінійних каскадів при умові, що область енергетичних втрат іона співпадає з областю перемішування. Таке припущення має місце при кутах бомбардування близьких до нормальних по відношенню до поверхні та енергіях більших ніж 500 еВ. При менших енергіях бомбардування слід користуватися формулою (1.38). З іншого боку, формула (1.40) описує тільки внесок каскадної стадії зіткнень в перемішування, оскільки енергія зміщень E_d , яка включає в себе енергію, необхідну для створення пари вакансія-міжвузловий атом і енергію, необхідну для взаємного віддалення вакансії і міжвузлового атома на відстань, яка б гарантувала стабільність пари Френкеля, має відношення скоріше до кристалічних тіл і залежить від напрямку в кристалі [16].

Дифузійне наближення, в силу простоти математичного розв'язання та можливості використання оціночних формул для розрахунку коефіцієнта іонного перемішування [232], виявилось більш пристосованим для опису результатів пошарового аналізу, що вперше було використано в роботах Тсонга (Tsong), Кінга (King), Тонна (Tonn) та ін. [270–276]. У перших своїх роботах вони використовували рівняння Фокера – Планка з однорідним в області перемішування коефіцієнтом перемішування D , що дозволяло отримати аналітичне розв'язання:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} + V_f \cdot \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}, \quad (1.41)$$

де $C(x, t)$ – відносна, нормована на одиницю, концентрація компонента.

Слід зазначити, що рівняння (1.41) виникає з (1.32) за умови однакових балістичних якостей атомів компонентів [258]. Однак, незважаючи на цю обставину, воно було досить вдало застосовано для моделювання пошарового аналізу систем з різними балістичними властивостями компонентів, наприклад, плівок різних металів у Si [270, 273, 274]. Рівняння (1.41) дозволяє отримувати такий фундаментальний

результат, як зміщення пошарового профілю концентрації до поверхні одночасно з його поширенням відносно початкового положення максимальної концентрації домішка [271, 272]. При цьому, передній фронт пошарового профілю більш крутий, а задній – більш пологий. Виявилось, що задній фронт пошарового профілю в області низької концентрації має однакову експоненціальну форму залежності концентрації від пошарової координати:

$$C(0, t) \propto \exp(-V_f \cdot t/\lambda), \quad (1.42)$$

де λ – параметр загасання хвоста пошарового профілю.

Ефективність іонного перемішування [276] також може бути отримана через дифузійні параметри:

$$\mu = Dt / \Phi F_d. \quad (1.43)$$

Рівняння (1.43) показує, що ефективність перемішування не залежить від розподілу пружних втрат іона за глибиною, флюенсу іонів та типу іона, що робить цей параметр універсальним і залежним тільки від властивостей системи домішка – матриця, що справедливо тільки для лінійних каскадів.

У роботі [275] вперше отримано розв'язання зворотної задачі пошарового аналізу – початковий профіль концентрації домішки у межах дифузійного наближення зі сталим коефіцієнтом іонного перемішування, де були розглянуті тільки перемішування і переважне розпилення. Картер (Carter), Нобес (Nobes) і Катарджиев (Katardjiev) на основі дифузійного наближення розвинули метод обчислення параметрів іонного перемішування, використовуючи дані пошарового профілю концентрації при великій концентрації імплантованого компонента [277–279]. У роботі [265] була врахована різниця атомних об'ємів компонентів τ_1 і τ_2 в двошаровій системі Ag/Si, що призвело до його математичного ускладнення. Ця модифікація рівняння, однак, не набула широкого розповсюдження. Інші автори також використовували дифузійне наближення для опису результатів пошарового аналізу [280–290], хоч у деяких роботах використовувалося також транспортне рівняння [291].

1.5.5. *Однокрокові динамічні алгоритми.* На початку 80-х років один за одним з'являлися однокрокові динамічні алгоритми Монте-Карло (наближення парних зіткнень) для безпосереднього розрахунку іонного перемішування без використання рівняння іонного

перемішування: TRIDYN [292] (динамічна версія програми TRIM [293]), EVOLVE [294], DYNA [295–297] та інші. Алгоритми передбачали випадковий початковий розподіл атомів компонентів. Кожний новий іон падав на вже змінену попередніми іонами поверхню, що призводило до накопичення ефекту перемішування. Алгоритми також передбачали збереження сталими концентрації компонентів, в більшості випадків методом, описаним формулою (1.34), що призводить до зміни товщини початково еквідистантних прошарків мішені, на які вона була умовно розділена на початку моделювання. Товщина прошарків у цих програмах знаходиться в межах $(0,5 \div 1,5)$ від їх початкової товщини [292]. Завдяки великій швидкості розрахунків динамічні алгоритми Монте-Карло дозволяють враховувати накопичення дози, що робить їх корисними для моделювання високоенергетичного перемішування без використання аналітичних засобів. Динамічні алгоритми використовують енергетичний відштовхуючий атомний потенціал $V(r) \sim 1/r^s$ без складової притягання.

1.5.6. *Термічна стадія каскаду на межі розподілу компонентів.* З середини 80-х років з'являється багато свідочств значного впливу взаємного розчинення компонентів в багатокомпонентних матеріалах на поширення профілів концентрації при іонному бомбардуванні. Ці прояви хімічної природи компонентів тісно пов'язані з розвитком каскаду на термічній стадії [14–17, 234, 276, 298–301] і не враховуються класичною теорією іонного перемішування. Наприклад, у системах Pt/Fe і Au/Fe [302], Ti/Ni і Mo/Ni [303], Pb/Si і Ta/Si [304] балістичні якості атомів різних компонентів мало відрізняються, тоді як реальні ефективності перемішування μ (1.43) перших сплавів цих пар є значно вищими. Ефективність перемішування μ (1.43) згідно оцінок класичної теорії повинна бути $\sim 1 \text{ \AA}^5/\text{eV}$ [3]. У цих роботах ефективність перемішування μ становила від $10 \text{ \AA}^5/\text{eV}$ до $100 \text{ \AA}^5/\text{eV}$. Оцінка внеску балістичних каскадних зіткнень у поширення профілів робилася в наближенні парних зіткнень, що може давати похибку до половини порядку.

Систематичні досліді впливу теплоти перемішування на швидкість іонного перемішування для багатьох сплавів були проведені Ченгом (Cheng) та ін. [16]. Двошарові системи Au/Co, Au/Cr, Au/Ti, Pt/Ni, Pt/Mn, Pt/Cr, Pt/V, Pt/Ti бомбардувалися іонами Xe^{2+} з енергією 600 кеВ при температурі мішені 77 К, щоб запобігти впливу РПД. Поширення межі розподілу компонентів фіксувалося резерфордівським зворотним розсіюванням [39, 40]. Було встановлено лінійний зв'язок між $4Dt$ і дозою ϕ . Величина $d(4Dt)/d\phi$ – швидкість перемішування двошарової

системи, наведена на рис.1.1, як функція теплоти перемішування ΔH_m , яка оцінювалася згідно даних Мієдеми (Miedema) [305]. Видно, що збільшення швидкості перемішування відповідає збільшенню ΔH_m .

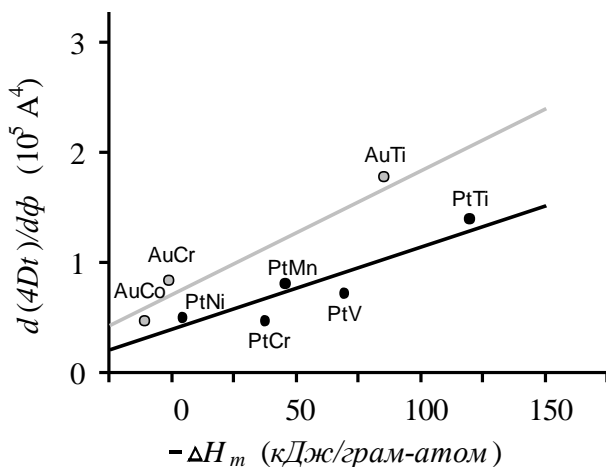


Рис. 1.1. Залежність швидкості перемішування $d(4Dt)/d\phi$ двошарової системи від теплоти перемішування її компонентів ΔH_m у випадку бомбардування мішені іонами Xe^{2+} з енергією 600 кеВ при 77 К [16]

Джонсон (Johnson) та ін. запропонували співмножник, який збільшує коефіцієнт перемішування, якщо теплота перемішування компонентів від'ємна, та зменшує його у протилежному випадку [306]. Келлі і Міотелло [17] включили у співмножник ентропію перемішування:

$$D = (D_1 C_2 + D_2 C_1) \left(1 - \frac{2(\Delta H_m - TS_m)}{kT} \right), \quad (1.44)$$

де $D_{1,2}$ – коефіцієнти дифузії компонентів;

T – ефективна температура каскаду;

$\Delta H_m = C_1 \cdot (1 - C_1) \cdot Z_v \cdot (U_{12} - (U_{11} + U_{22}) / 2)$ – теплота перемішування;

S_m – ентропія перемішування;

$C_{1,2}$ – відносні концентрації компонентів.

У випадку, коли теплота перемішування додатна і велика, коефіцієнт перемішування може бути від'ємним, що відповідає випадку

компонентів, які не змішуються. При бомбардуванні таких попередньо гомогенних систем ступень їх змішаності може знижуватися, як наприклад, у випадках Ag–Fe [16], Cu–Pb [307].

Іншою причиною, яка перешкоджає перемішуванню, як наприклад у двошаровій системі Ag/Ni (прошарок Ag на поверхні Ni), є різниця поверхневих енергій. Для Ag/Ni, поверхнева енергія Ag (1500 мДж/м²) менша за поверхневу енергію Ni (2700 мДж/м²), що призводить до накопичення атомів Ag на поверхні Ni у вигляді островів, якщо кількість атомів Ag недостатня для покриття усєї поверхні [300]. Вплив різниці поверхневих енергій Au і Ni на перемішування тонкої плівки Ni/Au був описаний також в [166]. Однак, у випадку перемішування Ti/Si спостерігалася відповідність експериментальних результатів дифузійній моделі перемішування, що враховувала тільки каскадну складову [273].

Формула (1.40) включає в себе енергію зміщення E_d , яка є характеристикою кристалічного тіла. З іншого боку, в період низькоенергетичної стадії розвитку каскаду може виникати термічний пік, в якому кристалічна ґратка руйнується, і концепція пари Френкеля втрачає свій сенс. Однак, атоми продовжують бути зв'язаними між собою всередині піка і замість E_d може бути використана енергія когезії ΔH_{coh} . Таким чином, слід чекати більшої активності переміщення атомів у системах з меншою енергією ΔH_{coh} за умови, що термічні піки відіграють значну роль у розвитку каскадів зіткнень [16].

Для перевірки цієї гіпотези проводилися експерименти по вимірюванню швидкості поширення межі розподілу при іонному бомбардуванні в двошарових системах Au/Ag, Pt/Pd, Hf/Zr, W/Mo, Ta/Nb [16], які мають практично нульову теплоту перемішування. Результати, наведені на рис. 1.2, підтверджують, що швидкість перемішування зростає при зниженні енергії когезії. Якщо взяти до уваги, що у формулі (1.40) вираз $D_1 C_2 + D_2 C_1 \sim \exp(-Q/kT)$, де $Q \sim \Delta H_{coh}$, то інтегрування (1.40) в циліндричному об'ємі, припускаючи, що температура $T = T(r, t)$ є функцією координати та часу каскаду, призводить до ефективного коефіцієнта дифузії всередині термічного піка:

$$D_{eff} = \frac{K_1 F_d^2 I}{4\rho^{5/3} (\Delta H_{coh})^2} \left(1 + K_2 \frac{\Delta H_m}{\Delta H_{coh}} \right), \quad (1.45)$$

де ρ – атомна густина; $K_1 = 0,035 \text{ \AA}$; $K_2 = 27,4$.

З формули (1.45) видно, що коефіцієнт перемішування залежить від квадрату розподілу пружних втрат бомбардуючого іона з глибиною. Завдяки великому значенню константи K_2 врахування теплоти перемішування ΔH_m може збільшити коефіцієнт перемішування на порядок. Ефективність іонного перемішування (1.43) з врахуванням внеску термічного піка (1.45) залежить від розподілу пружних втрат з глибиною і, як наслідок, від типу бомбардуючого іона, що докорінно відрізняє випадок термічних піків від випадку лінійних каскадів.

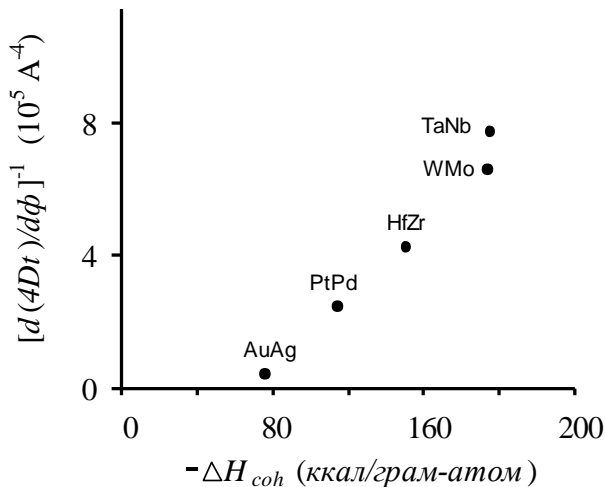


Рис. 1.2. Залежність швидкості перемішування $d(4Dt)/d\phi$ від середньої енергії когезії ΔH_{coh} для двошарових систем при бомбардуванні іонами Xe^{2+} з енергією 600 кеВ при 77 К [16]

Критерієм виникнення термічного піка може служити правило Ченга [16]: якщо атомний номер дорівнює ~ 20 , ймовірність виникнення термічного піка є незначною. У цьому випадку важливим стає теплопровідність мішені та електрон-фононної взаємодії. Експерименти [16, 276, 300], виконані при низьких енергіях бомбардування $\sim 1\text{--}3$ кеВ показали, що теплота перемішування та енергія когезії грають таку саму роль у нізкоенергетичному перемішуванні, як і при перемішуванні високоенергетичними іонами, що підтверджує гіпотезу про виникнення термічних піків навіть при низьких енергіях бомбардування. Пряме МД моделювання каскаду зіткнень на межі розподілу різних компонентів із залученням багаточастинкових потенціалів атом-атомної взаємодії якісно підтвердило вплив знаку та величини теплоти перемішування, а

також енергії когезії на ефективність іонного перемішування при низькоенергетичному іонному бомбардуванні [307–312]. Теплота перемішування та енергія когезії відіграють домінуючу роль при перемішуванні багаточарових систем, які складаються з компонентів з важкими атомами, що мають низьку енергію когезії. При цьому, ізотропність каскаду – важливий критерій виникнення термічного піка, тоді як анізотропність – результат внеску балістичної стадії.

У разі бомбардування систем з тонкими прошарками домішки, роль теплоти перемішування знижується завдяки низькій концентрації домішки [16].

Оскільки хімічні взаємодії проявляють себе на низькоенергетичній стадії каскаду, коли енергія атомів віддачі становить ~ 1 еВ, термічна стадія, яка в багатьох випадках проходить у вигляді термічного піка, була піддана детальному теоретичному розгляду. Де ла Рубія (De la Rubia) і Авербах (Averback) та ін., використовуючи МД моделювання [133, 313–320], а також Ліконен (Likonen), Копонен (Koronen) та Хаутала (Hautala) в межах аналітичної моделі, що була заснована на рівняннях теплопровідності через кристалічну ґратку та електронний газ [321–323], показали, що в центрі термічного піка речовина перебуває в близькому до розплаву стані. Аналітичні оцінки температури каскаду, виконані Тсатісом (Tsatis) у межах моделі термічного піка (1.45), показали, що миттєва температура каскадів у Cu/Ti та Cu/Fe, породжених іонами Хе з енергією 330 кеВ, може досягати $3 \cdot 10^6$ К [324]. Наближення парних зіткнень в інтерпретації програми TRIM може при цьому використовуватися на стадії розпаду високоенергетичного каскаду на низькоенергетичні субкаскади [325].

Однак, важливість внеску перенесення атомів на стадії «термічного піка» викликає деякий сумнів у зв'язку з роботами Келлі (Kelly) та Міотелло (Miotello) [17, 326, 327]. Вони модифікували співмножник з теплою перемішування [17] (1.44) припустивши, що параметр T у (1.45) не є ефективна температура каскаду, а є звичайна рівноважна температура мішені. Крім того, в (1.44) ними була введена ентропія перемішування з температурним співмножником. Замість параметра T був введений параметр $T' = T(1 + p) / p$, де $p = D^g / (D^b + D^{ng})$, D^g – коефіцієнт хімічно-керованого руху домішки, D^b – коефіцієнт балістичного перемішування, D^{ng} – коефіцієнт некерованого (випадкового) руху домішки. Згідно [17], для більшості випадків $p \approx 0,01-0,1$ і, відповідно, T' виявляється значно більшою за кімнатну температуру. Отже, ідея домінуючої ролі термічного піка в перемішуванні може бути замінена ідеєю домінуючої ролі хімічних сил і, при цьому, не обов'язково робити припущення відносно величезних

температур всередині каскаду зіткнень [326]. Саме ж існування стадії термічних піків, як етапу в розвитку атомного каскаду в багатьох випадках не піддається сумніву в працях Келлі і Міотелло.

Слід відзначити, що у випадку використання хімічно активних атомів для бомбардування, можливо виникнення додаткового ефекту перенесення маси та модифікації поверхні, що бомбардується, незалежно від енергії частинок [328–330].

Не до кінця з'ясовано залишається також і роль електрон-фононної взаємодії в охолодженні каскаду зіткнень [331–333], особливо для перехідних металів [334, 335]. При цьому, одним з головних недоліків молекулярно-динамічного моделювання вважається наявність тільки механізму теплопровідності по кристалічній ґратці. Взагалі, недостатньо уваги приділялося розгляду механізмів обміну енергією між електроном і атомом у стані, далекому від рівноваги, хоч мали місце спроби включити електронну теплопровідність у демпінгову сталу γ в (1.12) [335]. У роботі [333] шляхом порівняння експериментів по вимірюванню ефективності перемішування в Ni, Pd, Pt і результатів молекулярно-динамічного моделювання, де електронна теплопровідність не враховується, показано, що її внесок у охолодження каскадів, зокрема при високих енергіях іонів, не перевищує в цих металах 30%. У цілому, проблема виглядає так, що навколо каскаду зіткнень, де ґратка кристала сильно деформована, важко оцінити електронну теплопровідність. Проблему може становити також врахування каналу передачі енергії іон – тверде тіло, описаного в [336–338].

1.6. Радіаційно-прискорена дифузія

Наприкінці 70-х років з'явилися перші теоретичні роботи по РПД, в яких коефіцієнт дифузії вважався незмінним у всій області перенесення маси: [339] (модель Хо) і [340] (модель Веба – Картера – Коллінза). В основу моделей покладалася закон Фіка для потоку атомів. Видалення атомів з поверхні та початкові зміни концентрації протікають завдяки розпиленню поверхні. Ці моделі дали змогу отримати оцінки зміненого прошарку D/V_f і характерного часу релаксації системи – D/V_f^2 .

Пізніше з'явилися моделі дифузії з конкретизованими механізмами перенесення атомів по вакансіях, міжвузловим атомам або за допомогою кластерів [341–364]. При цьому, радіаційно-прискорена дифузія тісно пов'язана з радіаційно-посиленою сегрегацією для компонентів з різною рухливістю атомів. Оцінюється також інтервал значень рівноважної температури, у якому радіаційно-прискорена

дифузія робить істотний внесок у загальне перенесення маси [351, 359, 364–368].

1.6.1. *Критична температура радіаційно-прискореної дифузії.* У багатошарових системах метал – метал або метал – напівпровідник швидкість перемішування неістотно залежить від температури до деякої критичної температури T_c , вище якої відбувається значне збільшення швидкості перемішування із зростанням температури мішені за рахунок збільшення коефіцієнта дифузії, як показано на рис. 1.3.

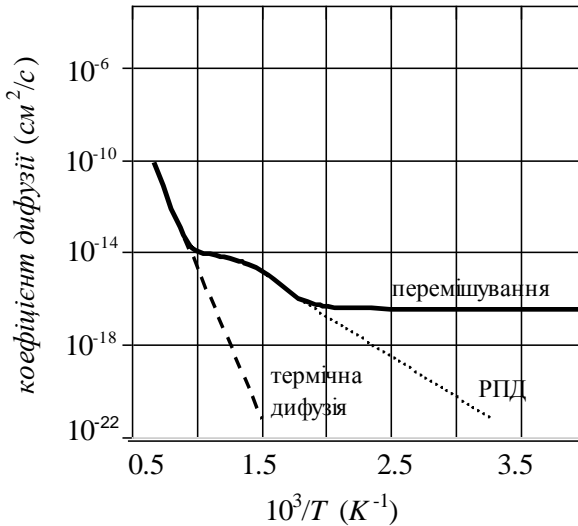


Рис. 1.3. Типова температурна залежність коефіцієнта дифузії з врахуванням внесків іонного перемішування, радіаційно-прискореної дифузії та термічної дифузії. Розрахунки і рисунок виконані для випадку кристала Ni в роботі [81]

Для багатьох систем температура T_c дорівнює кімнатній [227, 369], хоч у деяких випадках за критичну температуру приймають межу ~ 500 К або навіть ~ 80 К [234]. При температурах нижче T_c термоактивоване переміщення вакансій не спостерігається, однак дифузія може відбуватися по міжвузловинах, в яких атоми зберігають рухливість при температурах нижче кімнатної завдяки тому, що типова ентальпія переміщення атомів по міжвузловинах становить $\sim 0,1\text{--}0,15$ еВ [371]. Згідно [261], РПД можна не враховувати при

температурах $T < 0,15 \cdot T_m$, де T_m – температура плавлення. У [364] для двошарової системи Ni/Cu і в [352] для сплаву 6% Au–Ni дифузія має характер радіаційно-прискореної при температурах, відповідно, нижче 500 К і 700 К, що відповідає межовому критерію $\sim 0,6 \cdot T_m$ [364], вище якого термічна дифузія стає домінуючою порівняно з РПД.

У роботі [367] отримані прості аналітичні співвідношення для оцінки температур T_c і T_{eq} , вище яких рухливість атомів компонентів меншого та більшого розмірів у двокомпонентному сплаві стає значною:

$$T_c = 4.0(\pm 0.2) \cdot \Delta H_{Vsmall}, \quad (1.46)$$

$$T_{eq} = 3.8(\pm 0.2) \cdot \Delta H_{Vlarge}, \quad (1.47)$$

де T_{eq} – критична температура для атомів великого розміру; ΔH_{Vsmall} і ΔH_{Vlarge} – теплоти утворення пустот на місцях, де були відповідно менші та більші атоми компонентів.

Таблиця відповідних теплот утворення наведена в [367].

Інша оцінка критичної температури виникнення радіаційно-прискореної дифузії для однокомпонентного матеріалу була запропонована в [368]:

$$T_c = H_v^m / \left[k \cdot \ln \left(\chi K v_0 a_0^4 / D_0^2 \right) \right], \quad (1.48)$$

де χ – ефективність створення вільно мігруючих вакансій і міжвузлових атомів (~ 0.015);

a_0 – стала ґратки;

K – швидкість генерації зміщень;

v_0 – частота спроб перескоку вакансії;

H_v^m – ентальпія міграції вакансій;

k – стала Больцмана;

D_0 – максимальне значення коефіцієнта іонного перемішування.

У роботі [16] також існують деякі оцінки критичної температури, одна з яких використовує температуру Дебая:

$$T_c = \Theta_D. \quad (1.49)$$

У цілому ж, всі рівняння (1.46) – (1.49) мають оціночний характер.

1.6.2. *Область радіаційно-прискореної дифузії.* При низьких температурах зміни концентрації і структури речовини у приповерхневому прошарку завдяки іонному каскадному перемішуванню відбуваються на глибину розповсюдження каскаду зіткнень, що при енергіях у декілька кеВ і вище співпадає з глибиною проникнення іонів [292, 370–372]. Генеровані при цьому радіаційні дефекти залишаються майже нерухомими, за винятком міжвузлових атомів [373]. Досягнення стаціонарної концентрації дефектів відбувається за рахунок перекривання зон релаксації сусідніх дефектів. З іншого боку, розвиток ідеї «колективного потоку» призвів до моделі пружної релаксації середовища з виникаючими там областями підвищеної густини матеріалу мішені при еволюції каскаду [374, 375], на базі якої було запропоновано механізм розвитку зміненого прошарку в арсеніді галію [376] та силіцидах металів [375] на глибинах, які значно перевищують глибину проникнення бомбардуючих іонів. Ця модель дає реалістичні результати, що співпадають з експериментом навіть при кімнатних температурах, ставлячи під сумнів універсальність прямого зв'язку між температурою і розміром зміненої області мішені. При цьому, пояснення самого ефекту може бути також пов'язане з накопиченням міжвузлових атомів.

Однак, загальноприйнятою залишається ідея залежності розміру зміненої області від температури. Збільшення розміру зміненого прошарку до значень порядку сотень ангстрем спостерігалось в багатьох матеріалах, наприклад, у сплавах Cu–Ni і Cu–Pt при енергіях до 3 кеВ і температурах від 300 К до 800 К [40, 370, 377]. При високих температурах, дифузійні процеси можуть бути досить інерційними, уповільнено реагуючи на миттєві зміни умов бомбардування [370, 378]. Із зростанням температури концентрація дефектів починає зменшуватися за рахунок анігіляції мобільних радіаційних дефектів на нерухомих стоках (поверхнях, міжзернових межах тощо), взаємної рекомбінації, розпаду розмірних дефектів на точкові та переміщення дефектів на великі відстані від поверхні, що і призводить до зростання зміненого прошарку РПД.

1.6.3. *Теоретичний опис радіаційно-прискореної дифузії.* Загальний підхід до розрахунку потоків компонентів і дефектів може бути записаний в термінах термодинамічних сил:

$$J_i = - \sum_j M_{ij} X_j, \quad (1.50)$$

де $X_j = - \partial\mu_j/\partial x$ – термодинамічні сили;

μ_j – хімічні потенціали.

Коефіцієнти M_{ij} повинні відповідати співвідношенню Онсагера $M_{ij} = M_{ji}$. За відсутністю зміщення системи координат завдяки розпиленню повинна виконуватися умова незмінності загального об'єму системи $\sum_i \tau_i J_i = 0$. Для того, щоб це співвідношення виконувалося незалежно від виду хімічних потенціалів, необхідно виконання умови $\sum_i \tau_i M_{ij} = 0$. Остання умова виконується автоматично для коефіцієнтів M_{ij} у вигляді:

$$M_{ij} = \sum_k \tau_k \left(N_k M_{ij}^* - N_i M_{kj}^* \right). \quad (1.51)$$

Наступне спрощення моделі полягає у неврахуванні взаємодії між атомами різних компонентів і різними типами дефектів (вакансій і міжвузлових атомів): $M_{ij}^* = 0$ для $i \neq j = 0, \dots, n$ і для $i \neq j = n + 1 \dots n + z$, де n – кількість компонентів, z – кількість типів дефектів. Для моделі, що має два типи дефектів, залишаються по два незалежних коефіцієнта дифузії на кожний компонент [81].

Виходячи з цих спрощень та рівнянь (1.50)–(1.51), Відерсіхом (Wiedersich), Лемом (Lam), Окамотою (Okamoto) та Реном (Rehn) [342, 343] був розроблений підхід до створення моделей радіаційно-прискореної дифузії у висококонцентраційних багатокомпонентних системах, який пізніше був узагальнений з позицій нерівноважної термодинаміки Зігмундом і Лемом у [81] і в різних варіантах використовується і зараз. Згідно з цим підходом, можна записати потоки вакансій, міжвузлових атомів та компонентів мішені з урахуванням потоків атомів компонентів по градієнтах концентрації радіаційних дефектів у наступному вигляді [81]:

$$J_V = \alpha C_V \sum_{j=1}^n d_{jV} \frac{\partial N_j}{\partial x} - D_V \frac{\partial N_V}{\partial x}, \quad (1.52)$$

$$J_I = -\alpha C_I \sum_{j=1}^n d_{jI} \frac{\partial N_j}{\partial x} - D_I \frac{\partial N_I}{\partial x}, \quad (1.53)$$

$$J_i = -C_i d_{iI} \frac{\partial N_I}{\partial x} + C_i d_{iV} \frac{\partial N_V}{\partial x} - \alpha D_i \frac{\partial N_i}{\partial x}, \quad (1.54)$$

де α – фактор, який відрізняється від одиниці в неідеальних розчинах;
 $d_{iI}, d_{iV}, D_i, D_I, D_V$ – коефіцієнти дифузії;
 $C_{i, I, V}, N_{i, V, I}$ – відносні та абсолютні концентрації компонентів і дефектів.

Потоки дефектів у межах такого наближення керуються градієнтами концентрацій атомів компонентів і дефектів, а потоки атомів виникають, як наслідок градієнтів концентрації дефектів, компонентів та інших причин, як наприклад, градієнта температури і/або механічної напруги.

Використовуючи рівняння неперервності з врахуванням взаємної рекомбінації дефектів та їх анігіляції на нерухомих стоках, можна отримати нестационарні рівняння радіаційно-прискореної дифузії без взаємодії між різними типами дефектів:

$$\frac{\partial N_{I,V}(x,t)}{\partial t} = -\nabla J_{I,V} + A_1(r) - \left(\frac{\partial N_{I,V}}{\partial t} \right)_{IV} - \left(\frac{\partial N_{I,V}}{\partial t} \right)_{I,VS}, \quad (1.55)$$

$$\frac{\partial N_i(x,t)}{\partial t} = -\nabla J_i, \quad (1.56)$$

де $A(r)$ – функції, відповідно, народження і знищення дефектів;
 $J_{V,I}$ – щільності потоків вакансій і міжвузлових атомів;
 J_i – щільність потоку атомів компонента i .

Третій і четвертий члени правої частини рівняння (1.55) відповідають, відповідно, за взаємну рекомбінацію і анігіляцію точкових дефектів на нерухомих стоках:

$$\left(\frac{\partial N_{I,V}}{\partial t} \right)_{IV} = a_{IV} N_I N_V, \quad (1.57)$$

$$\left(\frac{\partial N_{IV,S}}{\partial t} \right)_{IV,S} = a_{IV,S} N_{I,V} N_S, \quad (1.58)$$

де N_s – концентрація нерухомих стоків;
 $a_{IV}, a_{IV,S}$ – константи швидкостей взаємної рекомбінації і анігіляції дефектів на стоках.

Згідно [341–343], константи швидкостей, відповідно, взаємної рекомбінації і анігіляції дефектів можуть бути представлені у вигляді:

$$a_{IV} = 4\pi r_{IV}(D_I + D_V), \quad (1.59)$$

$$a_{I,VS} = 4\pi r_{I,V}D_{I,V}, \quad (1.60)$$

де r_{IV} – радіус рекомбінації, який дорівнює близько двом сталим ґратки d ;

$r_{I,VS}$ – ефективний радіус стоку дефектів типу I і V , який дорівнює $\sim d$.

Коефіцієнти дифузії дефектів і компонентів записувалися у формі:

$$D_j = \sum_{k=1}^n d_{kj} N_k / \sum_{m=1}^n N_m, \quad (1.61)$$

$$D_k = \sum_{j=1}^2 d_{kj} N_j / \sum_{m=1}^n N_m, \quad (1.62)$$

$$d_{kj} = \frac{1}{6} \lambda_j^2 z_j v_{kj}, \quad (1.63)$$

де λ_j – довжина стрибка j -го дефекту;

z_j – координаційне число дефекту j ;

v_{kj} – ефективна частота стрибків пари k - j .

Парціальні коефіцієнти дифузії d_{kj} (1.63) не залежать від координати і концентрації компонентів.

Існують також інші моделі радіаційно-прискореної дифузії. У [349] при розгляді концентрованих сплавів беруться до уваги тільки потоки, які пропорціональні градієнтам компонентів $C_{1,2}$ і вакансій C_v . У [347] враховувалася різниця розмірів міжвузлових атомів різних сортів. У [342, 349] були зроблені спроби, відповідно, врахувати виникнення комплексів міжвузловий атом – атом домішки для сплавів зі значною різницею розмірів атомів, а також дифузію по комплексах атомів домішки.

МД моделювання було використано в розрахунках генерації вакансій та атомів у міжвузловинах для розв’язання рівнянь радіаційно-прискореної дифузії при низьких енергіях бомбардування [379, 380].

Моделювання генерації дефектів дало можливість коректно порівняти внески радіаційно-прискореної дифузії та іонного перемішування до загального перенесення маси у мішені при високих температурах. Ідея використання комп'ютерного моделювання для розрахунків радіаційно-прискореної дифузії розроблялася Пугачевою із співробітниками у [381], де генерація дефектів моделювалася методом Монте Карло в наближенні парних зіткнень для великих енергій іонів.

1.6.4. *Врахування комплексів дефектів.* Розглянемо один з можливих напрямків врахування дифузії по комплексам дефектів [341]. Візьмемо до уваги міжвузлові атоми C_I , вакансії C_V , атоми заміщення розчиненого компонента C_i , два типи комплексів міжвузловий атом – атом заміщення C_{Iia} і C_{Iib} , комплекси розчинений атом – вакансія C_{Vi} . Комплекси Iib передбачалися нерухомими. Наведемо реакції між дефектами в цій моделі:

$$\text{потік іонів } K_0 \Rightarrow C_I + C_V,$$

$$C_I + C_V K_1 \Rightarrow 0,$$

$$C_I + C_i K_2 \Leftrightarrow K_2' C_{Iia},$$

$$C_I + C_i K_3 \Leftrightarrow K_3' C_{Iib},$$

$$C_V + C_i K_4 \Leftrightarrow K_4' C_{Vi},$$

$$C_I + C_{Vi} K_5 \Rightarrow C_i,$$

$$C_V + C_{Iia} K_6 \Rightarrow C_i,$$

$$C_V + C_{Iib} K_7 \Rightarrow C_i,$$

$$C_I + C_{IS} K_8 \Rightarrow C_{IS},$$

$$C_V + C_{VS} K_9 \Rightarrow C_{VS},$$

де C_{IS} і C_{VS} – концентрації стоків для міжвузлових атомів і вакансій.

Проблемою є коректне обчислення коефіцієнтів швидкостей реакцій K_0, \dots, K_9 . У моделі враховуються потоки відповідних

концентрацій C_I , C_V , C_{Iia} , C_{Vi} згідно із законом Фіка і зворотним потоком Кіркендала.

У протилежність РПД, яка інтенсифікує процеси переходу до термодинамічної рівноваги, радіаційно-стимульована сегрегація підтримує тенденцію до збільшення концентраційних градієнтів. Цей процес складається з комбінації двох ефектів: потоків дефектів з деякої області, а також з переважної взаємодії між атомами компонентів і дефектами [81], і реалізується згідно зворотного ефекту Кіркендала, виникнення комплексів вакансія – атом ґратки і міжвузловий атом – атом ґратки [347, 383].

Радіаційно-стимульована сегрегація відіграє значну роль у переміщенні атомів при температурах $\sim 0,23-0,56 \cdot T_m$, коли домінує анігіляція на стоках. При низьких температурах, висококонцентраційні точкові дефекти знищуються переважно за рахунок взаємної рекомбінації, перешкоджаючи міграції атомів на великі відстані. При великих температурах висока концентрація і значна мобільність термічних дефектів не дозволяють утворюватися градієнтам концентрації [81].

1.7. Особливості приповерхневого масоперенесення

Ефект збагачення поверхневого прошарку атомами одного з компонентів під дією іонного бомбардування отримав назву радіаційно-стимульованої сегрегації Гібса за аналогією з існуванням рівноважної сегрегації Гібса [80, 81, 348, 353, 359, 382–387], яка є результатом мінімізації поверхневої вільної енергії [388] і проявляється в збагаченні поверхні компонентом з меншою поверхневою енергією [389, 390].

Вперше вплив сегрегації Гібса та дифузії на переважне іонне розпилення був теоретично розглянутий в моделі Ітоха (Itoh) і Моріти (Morita) [391], а також трохи пізніше у роботах Келлі та інших авторів [383–386, 392, 393]. У моделі Ітоха і Моріти зовнішній прошарок розглядається окремо за рахунок крайових умов між об'ємом і першим прошарком. При цьому, моделюється додатковий потік з об'єму в поверхневий прошарок шляхом введення ймовірностей атомних переміщень між об'ємом і поверхневим прошарком, що і призводить до збагачення поверхні одним з компонентів. Потік атомів одного з компонентів до поверхні може бути представлений у вигляді [81]:

$$J_i = -\frac{\partial}{\partial x} [N_i D_i(x)], \quad (1.64)$$

$$D_i(x) = D_{0i} \exp\left(\frac{V_i(x)}{kT}\right). \quad (1.65)$$

Потік (1.64) з коефіцієнтом (1.65) описує як звичайну дифузію, так і поверхневу сегрегацію завдяки сегрегаційному потенціалу $V_i(x)$, який в роботі [359] пропонується записувати у експоненціальному вигляді:

$$V_i(x) = C_i \exp(-q_i x), \quad (1.66)$$

де константи C_i і q_i вибираються так, щоб отримати приповерхневе збільшення концентрації потрібного компонента. Потенціал $V_i(x)$ являється від'ємним на поверхні і дорівнює нулю в об'ємі мішені. Перевагою цього підходу є відсутність необхідності виділяти окремо поверхневий прошарок.

Келлі розглядав стаціонарний випадок [383] і за аналогією з експоненціальним множником рівноважної сегрегації вводив константу радіаційно-стимульованої сегрегації Гібса K_s , яка, у загальному випадку, є функцією температури, умов бомбардування та структури системи.

У роботі [387] показано, що профілі стаціонарних концентрацій компонентів при бомбардуванні багатокомпонентних систем залежать від загального впливу переважного розпилення, сегрегації Гібса, іонного перемішування, радіаційно-прискореної дифузії та об'ємної сегрегації, що може призводити до виникнення поблизу поверхні мінімуму концентрації компонента, який розпилюється переважно. Серед цих явищ змагання сегрегації Гібса та радіаційно-прискореної дифузії з можливим впливом об'ємної сегрегації відіграє домінуючу роль у формуванні кількісних показників переважного розпилення при підвищених температурах [377, 390, 394–405] і профілів концентрації поблизу поверхні [406]. Слід зазначити, що особливості взаємодії точкових дефектів і домішок з поверхнями розділу фаз, компонентів, зерен, а також з вільною поверхнею, що бомбардується, безумовно відіграють істотну роль у процесах перенесення маси біля меж розділу [407–410], однак це складне питання потребує окремого розгляду у випадку іонного бомбардування.

Висновки до глави 1

У главі 1 були розглянуті та обговорені сучасні теоретичні уявлення різних аспектів взаємодії іонів з поверхнями твердих тіл, що призводять до перенесення маси: іонне розпилення, перемішування, РПД, радіаційно-стимульована сегрегація та поверхнева сегрегація Гібса. Обговорювалися МД алгоритми, що моделюють каскади зіткнень атомів.

Теорія іонно-стимульованого перенесення маси все ще переживає період пошуку кількісних підходів до опису малorozмірних фізичних об'єктів (тонкі прошарки домішки, великі кластери атомів, поверхневі неоднорідності тощо), оскільки усі основні ефекти вже мають оцінний теоретичний опис. Зацікавленість виказується до модельного розгляду з мінімальним числом зовнішніх параметрів. Цю можливість надає впровадження комп'ютерного моделювання і, в першу чергу, МД моделювання на основі багаточастинкових потенціалів, параметри яких отримані на основі відомих характеристик матеріалів (пружні константи, енергія когезії, енергія утворення вакансії тощо). Це дозволяє реалістично враховувати низькоенергетичну частину каскаду, можливі взаємодії розчинення компонентів, а також генерацію дефектів.

* * *

Наступний розгляд результатів засновується на розв'язанні транспортного та дифузійного рівнянь іонного перемішування для однокомпонентної мішені (Глави 2, 4), дифузійного рівняння в двокомпонентному випадку з низькою концентрацією одного з компонентів (Глава 6), а також рівнянь РПД для однокомпонентної мішені (Глава 5) з використанням результатів МД розрахунків каскадів. У Главі 2 виконана модифікація підходу Картера – Коллінза – Томпсона до обчислення поширення пошарового профілю концентрації компонента з урахуванням просторової неоднорідності коефіцієнта перемішування. Моделювалися також двошарові металеві кристали з метою встановлення ролі взаємного розчинення у перемішуванні, а також генерації дефектів (Глави 3, 4). Моделювання проводилося для іонів Ag і Xe з енергіями 15–200 eV за температур кристалів від 0 К до 750 К.

ГЛАВА 2. КВАЗІСТАБІЛЬНІ МОДЕЛІ ІОННОГО ПЕРЕМІШУВАННЯ

2.1. Вступ до глави 2

2.1.1. *Кількісна достовірність і двоетапні моделі.* Для отримання кількісних результатів пошарового аналізу неоднорідних концентраційних систем шляхом іонного розпилювання поверхні необхідно застосування більш досконалих моделей низькоенергетичного іонного перемішування. Існуючі моделі іонного перемішування не дозволяють проводити кількісно достовірні розрахунки за обставин використання значного числа зовнішніх параметрів. З іншого боку, невирішеними залишаються проблеми врахування атомної структури матеріалу мішені, а також багаточастинкових взаємодій в каскадах зіткнень. Більшість відомих моделей будувалися для середовищ з випадковим розподілом атомів і враховували тільки парні зіткнення частинок у каскадах [3–6, 80, 81, 254, 255, 269, 411–413]. У роботах [259–268] проблема опису пошарового аналізу профілів концентрацій з використанням іонних пучків вирішується в межах дифузійного наближення, параметри якого оцінюються на основі моделі парних зіткнень. У роботах [292–297] перемішування моделювалося однокроковими комп'ютерними алгоритмами, які теж були засновані на наближенні парних зіткнень.

Практично єдиною реальною можливістю врахування багаточастинкових взаємодій на низькоенергетичній стадії каскаду залишається метод молекулярної динаміки [1, 95]. Головна проблема на шляху його застосування полягає у великому об'ємі розрахункової роботи, що часто робить неможливим отримання реальних результатів навіть на потужних ЕОМ. У зв'язку з цим, виглядає закономірним використання результатів молекулярно-динамічного моделювання сумісно з аналітичними методами досліджень, котрі дозволяють розглядати еволюцію фізичних систем протягом часу, який є недосереднім для безпосереднього молекулярно-динамічного моделювання. Молекулярно-динамічне моделювання дозволяє детально розглядати процеси зіткнень у каскаді, що тривають протягом $\sim 10^{-12}$ – 10^{-11} с, тоді як аналітична частина моделі описує макроскопічні зміни концентрації компонентів, що відбуваються завдяки великій кількості атомних каскадів протягом $\sim 10^{-3}$ – $1,0$ с. Такий підхід отримав назву двоетапного моделювання. У такому вигляді ідея двоетапного моделювання, що складається з комп'ютерного моделювання і елементів аналітичних підходів, була сформульована і вперше реалізована в роботі Ішітани (Ishitani) і Шімізу (Shimizu) [235] для опису

іонного перемішування атомів псевдомаркера з атомами матриці при високих енергіях бомбардування, де зіткнення описувалися в наближенні парних взаємодій. У молекулярно-динамічній інтерпретації двоетапний метод розрахунку іонного перемішування вперше був розроблений незалежно Корнічем і Пінчуком [241, 242] та Кареттою (Karetta) і Урбасеком (Urbassek) [101].

Глава 2 присвячена розгляду двоетапної квазістабільної моделі перемішування [241, 242], яка складається з сумісного використання транспортного рівняння [257, 258] для опису зміни форми концентраційного профілю при пошаровому аналізі без аналітичної деталізації інтеграла зіткнень і молекулярно-динамічного методу в двовимірній інтерпретації для моделювання функції атомних перемішень у каскадах зіткнень. Двовимірний модельний квазістабільний кристал використовувався виключно для прискорення молекулярно-динамічних розрахунків. Двовимірні результати моделювання порівнюються також з аналогічними тривимірними результатами. Крім того, аналітично розглянуто вплив неоднорідності коефіцієнта іонного перемішування на поширення пошарового концентраційного профілю (п. 2.4).

2.1.2. Проблема верифікації модельних результатів. Аналітичні дифузійні моделі, які використовуються для аналізу та інтерпретації експериментальних результатів, мають, щонайменше, три зовнішніх параметра: коефіцієнт іонного перемішування, розмір області перемішування та швидкість руху поверхні, що розпилюється [260, 261]. Серед цих параметрів тільки швидкість руху поверхні може бути достатньо однозначно оцінена експериментально [2, 40].

У роботі [283] була зроблена спроба отримати однозначні числові значення області перемішування та коефіцієнта іонного перемішування шляхом експериментальної верифікації цих параметрів дифузійної моделі зі сталим коефіцієнтом іонного перемішування в обмеженій області перемішування [260, 261]. Така модель вперше була використана в [270–272] для аналізу експериментальних результатів пошарового аналізу. Загальна ідея використання дифузійноподібних рівнянь для опису перемішування незалежно від інших фахівців була сформульована Теплодим у Донецькому державному університеті на початку другої половини 80-х років.

Для того, щоб зрозуміти проблематику отримання реалістичних параметрів перемішування, розглянемо показовий експеримент з відповідними супутніми модельними розрахунками в межах дифузійноподібної моделі перемішування. У растровому Оже-спектрометрі РНІ-590 вимірювалося відношення поверхневих

концентрацій компонентів на однорідному зразку $\text{CoSi}_2(100)$ під час двох миттєвих змін енергії пучка іонів Ar 1 кеВ – 4 кеВ – 1 кеВ. Перед наступною зміною енергії пучка проходив час, достатній для встановлення стаціонарного стану поверхні, що бомбардується. Вакуум у робочій камері був не гірший за $5 \cdot 10^{-8}$ Па. Щільність пучка іонів була 10^{13} іонів / (с · см²). Кут падіння пучка іонів на поверхню становив 60° до нормалі до поверхні. Під час розпилення тиск аргону в камері був не більше 10^{-5} Па. Можлива адсорбція домішок хімічно-активних газів контролювалася квадрупольним мас-аналізатором. Експеримент було виконано Запорожченко і Войтусиком у «ВНИ Центр изучения свойств поверхности и вакуума» у Москві в кінці 80-х років.

У розрахунках використовувалося експериментально отримане відношення коефіцієнтів розпилення $Y_{\text{Co}}/Y_{\text{Si}} = 0,4 \div 0,6$. Оскільки абсолютні значення коефіцієнтів розпилення залишалися невідомими, коефіцієнт розпилення Si оцінювався за даними літератури для заданої енергії (наприклад, [2]), а коефіцієнт розпилення Co – згідно отриманого експериментально відношення $Y_{\text{Co}}/Y_{\text{Si}}$, яке зберігалось незмінним протягом усього розрахунку. Задовільний збіг модельного розрахунку кінетики відношення концентрацій компонентів і експериментального результату при зміні енергії бомбардуючих іонів був отриманий, щонайменше, для двох наборів коефіцієнтів іонного перемішування та розміру областей перемішування. Перший набір параметрів складав: $D^{(1)} = D^{(3)} = 5 \cdot 10^{-4}$ нм²/с, $D^{(2)} = 7 \cdot 10^{-3}$ нм²/с, $L^{(1)} = L^{(3)} = 0,7$ нм, $L^{(2)} = 1,3$ нм. Інший набір, який також давав задовільний збіг теорії і експерименту, складав: $D^{(1)} = 1,3 \cdot 10^{-3}$ нм²/с, $D^{(2)} = 7 \cdot 10^{-3}$ нм²/с, $D^{(3)} = 2 \cdot 10^{-3}$ нм²/с, $L^{(1)} = 0,5$ нм, $L^{(2)} = 1,3$ нм, $L^{(3)} = 1,3$ нм. Крім того, були отримані інші набори значень D і L , які не так добре збігалися з експериментом, але теж були у межах фізично реальних значень. Таким чином, експеримент у випадку пошарового аналізу та використання дифузійного наближення іонного перемішування дозволяє отримати значення параметрів такої моделі з точністю до половини порядку. Інший аспект проблеми полягає в тому, що залишається без відповіді питання про можливий внесок у експериментальний результат інших механізмів перенесення маси. Таким чином, необхідність отримання кількісно достовірних модельних результатів та оцінки внеску різних механізмів перенесення маси при низькоенергетичному іонному бомбардуванні змушувало до пошуку нових розрахункових схем таких процесів перенесення, про що розповідається нижче.

2.2. Опис моделі

2.2.1. *Моделювання двовимірного каскаду зіткнень.* Моделювання виконувалося для випадку бомбардування двовимірного кристала, який складався з 300 атомів Cu і являв собою площину типу (100) ГЦК кристала, іонами Ag з енергією 2 кеВ, що падали на кристал теж у площині (100). У моделі враховувалися тільки парні взаємодії відштовхування. Взаємодії атомів Cu–Cu і Ag–Cu описувалися потенціалом Борна – Майєра (1.21) з константами, наведеними, наприклад, у [7, 119]. При цьому, для опису взаємодії Cu–Cu використовувалася найбільш вдала [98] версія Гібсон 2 потенціалу Борна – Майєра: $A_{bm} = 22,565$ кеВ, $a_{bm} = 0,01965$ нм, а для пар Ag–Cu, версія: $A_{bm} = 59,874$ кеВ, $a_{bm} = 0,01389$ нм. Радіуси обрізання потенціалу взаємодії Cu–Cu в кристалі дорівнювали $R_{cutoff} = 0,254$ нм, а для взаємодії Ag–Cu $R_{cutoff} = 0,3$ нм. Таким чином, атоми Cu не взаємодіяли один з одним у початковому ідеальному кристалі, де стала ґратки була $d = 0,3615$ нм. Атом Cu залишав своє місце у ґратці тільки у випадку, коли потенціальна енергія взаємодії з іншими атомами і/або іоном Ag ставала більшою за $E_{th} = 23$ еВ, що відповідає пороговій енергії зміщення атома в кристалі Cu, яка використовувалася також у [413]. Загальним недоліком такого молекулярно-динамічного розгляду кристалу можна вважати неможливість коректного врахування нульових коливань атомів ґратки.

Обчислення каскаду закінчувалося, коли загальна енергія кожного з атомів, які вступали у взаємодію з іоном Ag в процесі розвитку каскаду, а також самого іона Ag, падала нижче деякої енергії E_{st} , яка в цій моделі, як і в [294, 411], дорівнювала енергії зміщення $E_{st} = E_{th}$:

$$\sum_j U_i(r_{ij}) + K_i \leq E_{st}, \quad (2.1)$$

де $i, j = 0-300$ – індекси іона ($i, j = 0$) та атомів кристала;

$U_i(r_{ij})$ – потенціальна енергія взаємодії i -го атома (іона) з j -м атомом (іоном);

K_i – кінетична енергія i -го атома (іона).

З урахуванням енергетичного критерію зупинки молекулярно-динамічної програми (2.1), каскад зіткнень обчислювався протягом $\sim 0,2-0,6$ пс.

Було виконано 100 випробувань. Кожне нове випробування виконувалося на початковому неушкодженому кристалі. Початкова координата y_0 іона Ag, що входить у кристал, встановлювалася за законом випадкових чисел на інтервалі $0 \leq y_0 \leq d/2$. У процесі

моделювання записувалися номери атомних прошарків, з яких і в які атоми переміщувалися в каскаді до закінчення роботи програми, а також номер атомного прошарку, в якому знаходився іон Ag у момент зупинки програми. Товщина одного атомного прошарку дорівнювала $d/2$. Атомні прошарки двовимірного кристала моделювалися послідовностями, що складалися з 10 атомів і мали однакову координату x . При накопиченні статистики атомних переміщень, враховувалися тільки перескоки тих атомів, які безпосередньо взаємодіяли з бомбардуючим іоном у процесі розвитку каскаду, а саме, зближувалися з ним менше ніж на 0,3 нм.

Траєкторії і швидкості атомів Cu і іона Ag розраховувалися шляхом інтегрування системи двовимірних рівнянь Ньютона у відповідності з модифікованим методом Ейлера [414]. Закон збереження енергії в процесі розвитку каскаду виконувався з точністю не гірше 1%. Точність виконання закону збереження енергії може бути кращою завдяки збільшенню радіуса обрізання R_{cutoff} потенціалів взаємодії між частинками, оскільки стрибок числового значення потенціалу на межі обрізання, в значній мірі, відповідає за накопичення похибки збереження енергії в модельному каскаді. З іншого боку, значне збільшення радіуса обрізання є неможливим, оскільки це призводить до втрати квазістабільності модельної ґратки, збереження якої необхідно при моделюванні іонного перемішування в межах моделі.

У випадку перетинання іоном Ag або атомом Cu, який безпосередньо взаємодіяв раніше з іоном Ag, бічної межі кристала, передбачається дзеркальне відбиття частинки від неї всередину кристала. Поверхневий потенціальний бар'єр U_s , який становив 3,5 eV [2], не відігравав значної ролі в розвитку каскаду, тому що енергія зупинки розрахунку каскаду E_{st} дорівнювала 23 eV, і низькоенергетичні атоми, практично, не розглядалися в цій версії моделі. Таким чином, усі переміщення атомів у каскаді визначалися їх пружною взаємодією з іншими атомами кристала і іоном. У моделі враховувалися тільки ті зміни концентраційного профілю, які визначалися переміщеннями атомів, що взаємодіяли безпосередньо з іоном Ag у процесі розвитку каскаду зіткнень.

Початкова версія програми була написана на алгоритмічній мові TURBO BASIC, оскільки ця мова свого часу мала найкраще розвинуту графіку, що було необхідно для візуалізації атомних каскадів зіткнень. Ідея візуалізації каскадів у цій задачі була запропонована Пінчуком (ЗДТУ, Запоріжжя). Подальші версії алгоритму були написані алгоритмічною мовою FORTRAN, яка в більшій мірі відповідала особливостям молекулярно-динамічних розрахунків і дозволила збільшити швидкість моделювання.

2.2.2. *Транспортне рівняння.* У роботі розглядається випадок, коли домішкові атоми є ідентичними за своїми балістичними якостями матричним атомам, а саме, домішковий атом – це мічений матричний атом. Кінетика концентрації домішкових атомів описується рівнянням, що виникає в разі комбінації рівнянь (1.32) та (1.33) і вперше розглядалося в роботах [3–6, 257, 258]:

$$\frac{\partial C(x, t)}{x \partial t} = \tau \int_{-\infty}^{+\infty} F(x-z, z) C(x-z, t) dz - \tau \int_{-\infty}^{+\infty} F(x, z) C(x, t) dz - \tau \frac{\partial}{\partial x} \left[C(x, t) \int_0^x h(\zeta) d\zeta \right], \quad (2.2)$$

де $F(x-z, z) \Delta z \Delta x$ – кількість стрибків атомів з прошарку $(x-z, \Delta x)$ на величину $(z, \Delta z)$ за один каскад зіткнень;

$C(x, t)$ – відносна концентрація домішки (абсолютна концентрація атомів домішки/густина вузлів ґратки);

I – густина потоку бомбардуючих іонів;

τ – атомний об'єм одного атома Си.

Перший член правої частини рівняння (2.2) описує кількість атомів, що потрапляють в область $(x, \Delta x)$ з усього об'єма мішені в результаті процесів зіткнень за одиницю часу, другий – кількість атомів, що залишають область $(x, \Delta x)$ у всіх напрямках, у тому числі і за межі мішені за одиницю часу. Таким чином, опис ефекту розпилення атомів з поверхневих атомних прошарків закладається в самому рівнянні, і для врахування цього явища в моделі не треба будувати спеціальні крайові умови, що і було враховано, наприклад, у роботах [411, 412]. Останній член у (2.2) відповідає за виконання умови нормування загальної концентрації атомів у мішені, а саме незмінність густини вузлів ґратки у каскаді, де функція h має наступний вигляд:

$$h(\zeta) = \int_{-\infty}^{\zeta} F(\zeta-z, z) dz - \int_{-\infty}^{+\infty} F(\zeta, z) dz. \quad (2.3)$$

Значення функції $F(x, z)$ обчислюються в результаті багаторазового моделювання каскаду зіткнень описаним у пп. 2.2.1 молекулярно-динамічним методом і, таким чином, включають статистичну інформацію про реальну структуру кристала і багаточастинкові взаємодії в каскадах. Рівняння (2.2) розв'язується чисельно з уже відомою функцією $F(x, z)$, і, завдяки їй, кінцева концентрація атомів

$C(x, t)$, як функція часу і координати, залежить також від структури кристала і багаточастинкових взаємодій в каскадах.

Початковий профіль концентрації псевдомаркера був використаний, як початкова умова, для розв'язання рівняння іонного перемішування (2.2). Крайова умова формулювалася для дальньої межі області перемішування. Концентрація домішки в атомному прошарку, який знаходився за останнім прошарком області перемішування, відповідає концентрації в атомному прошарку $k = n + 1 +$ (ціла частина від $(V_f \cdot t/d)$ початкового профілю), де n – число атомних прошарків, які складають область перемішування. Швидкість руху поверхні V_f , що розпилюється [256, 257], представляється як:

$$V_f = I\tau \int_0^{\infty} h(\zeta) d\zeta, \quad (2.4)$$

де функція $h(\zeta)$ наводиться в (2.3) для випадку однокомпонентної мішені.

Видно, що швидкість руху поверхні залежить від матриці атомних перемішень у каскадах, що моделюються МД методом у межах цієї роботи.

2.3. Результати розрахунків

2.3.1. *Проникнення бомбардуючих іонів у кристал.* Діаграма розподілу ймовірності перебування бомбардуючих з енергією 2 кеВ іонів Ag у двовимірному кристалі Cu наведена на рис. 2.1. Діаграма демонструє тенденцію спадання ймовірності зі зростанням глибини від поверхні. Ймовірність, у незначній мірі, змінюється в атомних прошарках 3–6, тоді як у прошарках 7 і 8 має місце різке спадання, що пов'язано з розвитком типів каскадів зіткнень, що показані на рис. 2.2 (б, в). Параметри отриманого розподілу непогано відповідають розрахункам згідно з програмою SUSPRE [415], яка заснована на розв'язанні транспортного рівняння в наближенні парних зіткнень. Згідно з програмою, максимум концентрації імплантованих іонів Ag при енергії 2 кеВ знаходиться в точці $x_m = 1,95$ нм. Каналювання частинок у напрямку [110] двовимірного кристала (рис. 2.2 (а)) виникає тільки у ~ 5% випадків від загальної кількості випробувань. У значно більшій кількості випадків частинки каналюють у напрямку [100]. Однак, оскільки ширина каналу в цьому напрямку є меншою, то глибина проникнення іонів складає ~ 4–8 атомних прошарків. Такі переміщення частинок виникають у близько 20% випадків від загальної кількості

кинутих на двовимірну поверхню іонів (рис. 2.2 (б)). Більшість іонів Ag втрачає значну частину енергії в перших 2–3 прошарках (рис. 2.2 (в)). Приблизно 35% кинутих на поверхню енергетичних іонів Ag відбиваються від двовимірного кристала або, після деякого перебування в кристалі, залишають його (рис.2.2 (г)).

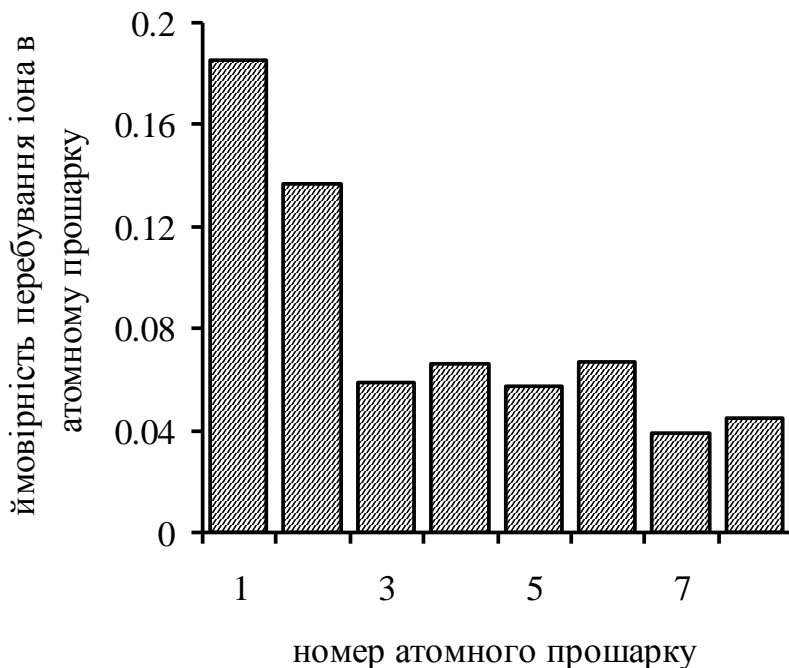


Рис. 2.1. Розподіл ймовірності перебування іонів Ag, що бомбардують, з початковою енергією 2 кеВ в двовимірному кристалі Cu [242] у випадку використання відштовхуючого потенціалу Борна – Майера [97] для опису взаємодій Cu–Ag і Cu–Cu

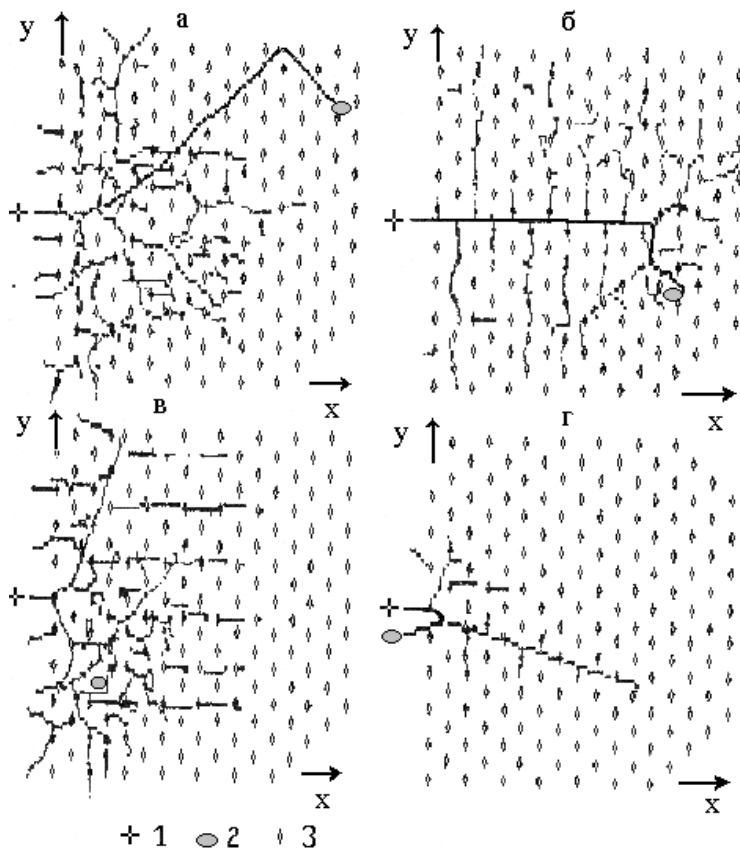


Рис. 2.2. Можливі випадки розвитку каскаду зіткнень у двовимірному кристалі Si при енергії бомбардуючих іонів Ar – 2 кеВ [242]

2.3.2. *Переміщення атомів у каскадах зіткнень.* Як і статистику розподілу іонів у кристалі, статистику атомних переміщень можна розглядати, як достатньо надійну тільки у перших 8 атомних прошарках. Для більш глибоко розташованих атомних прошарків статистика переміщень атомів була недостатньою для того, щоб використовувати її в розрахунках, а роль глибоких переміщень атомів у іонному перемішуванні виглядала незначною. У зв'язку з цим, область перемішування була обмежена першими вісьмома прошарками. Моделювання показало, що більша частина переміщень атомів із прошарку в прошарок відбувається в перших шести атомних прошарках

двовимірного кристала. При цьому, значення довжини переміщення одного атома становило $\sim 1\text{--}3$ сталих ґратки d . Таким чином, область перемішування дорівнювала $\sim 2\text{--}5$ величинам атомних переміщень у двовимірному квазістабільному кристалі при енергії іонів $\text{Ag } 2 \text{ кеВ}$.

Значну роль у каскадах зіткнень відіграють атоми віддачі, що відбиваються від більш глибоко розташованих атомних прошарків і переміщуються до поверхні. Таких переміщень особливо багато виникає з глибоко розташованих прошарків у 2-й, 3-й та 4-й прошарки. На переміщення з 1-го і 2-го прошарків істотно впливає поверхня кристала. Переміщення атомів з 4-го прошарку можна розглядати як практично симетричні відносно обох напрямків у кристалі. Особливості розподілу переміщень з 5–8-го прошарків пояснюються тим, що чим далі від поверхні в глибину мішені розповсюджується каскад, тим більше зустрічається непорушних атомів, які в багатьох випадках відбивають атоми та іон, що рухаються. Після відбиття від глибоко розташованих атомів, атоми віддачі переміщуються до поверхні, де більше зміщених атомів і, відповідно, більше можливостей віддати енергію. Таким чином у процесі пошарового аналізу низькоенергетичне іонне перемішування не породжує симетричного розподілу ймовірності переміщень атомів «до поверхні» та «від поверхні». Найбільш близькими до симетричного можуть вважатися розподіли переміщень з четвертого та п'ятого атомних прошарків, а також розподіл переміщень у п'ятому прошарку. Розподіли переміщень атомів, які наближаються до симетричних, розміщуються переважно всередині атомного каскаду зіткнень.

2.3.3. Пошаровий аналіз і розпилення. На рис. 2.3 наведено приклад пошарового профілю концентрації від тришарової системи. Видно, що перший атомний прошарок деформується більше, ніж другий і третій. Має місце також деяке зміщення до поверхні пошарових максимумів концентрації прошарків по відношенню до їх початкового положення, що відповідає результатам робіт [271–275], в яких використовувалися аналітичні дифузійні моделі. У моделі, що пропонується, можливість переважного розпилення не враховується. Третій доданок з правої частини рівняння іонного перемішування (2.2) включає також і ефект зміщення розпиленої поверхні. При цьому, система координат вважається зв'язаною з поверхнею, що розпилюється, і поверхня весь час зміщується зі швидкістю розпилення назустріч пучку бомбардуючих іонів. Рівняння (2.2) враховує можливість розпилення атомів не тільки з першого прошарку, як це має місце у крайових умовах дифузійних моделей перемішування [271], але й з більш глибоко розташованих прошарків. На рис. 2.4 показана діаграма розпилення атомів Cu з різних атомних прошарків у межах двовимірної моделі.

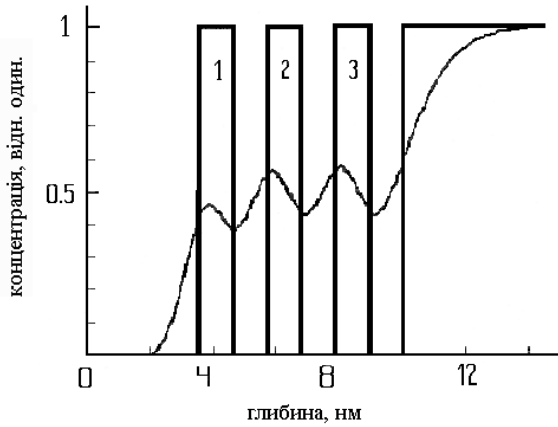


Рис. 2.3. Пошаровий профіль псевдомішкової багат шарової системи у двовимірному кристалі Cu при бомбардуванні іонами Ag з енергією 2 кеВ і щільністю потоку іонів $1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/(см² · с) [242]

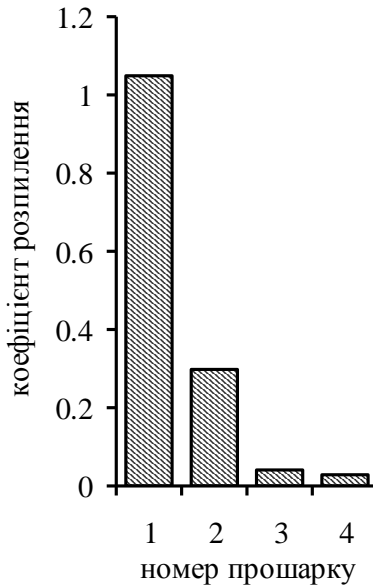


Рис. 2.4. Ймовірність розпилення атомів Cu з різних прошарків двовимірного кристала Cu іонами Ag з енергією 2 кеВ [242]

Видно, що ймовірність розпилення атома, як функція глибини, носить відомий експоненціально спадаючий характер. Ця залежність уже використовувалася для опису іонного перемішування і розпилення при низьких енергіях іонів [82, 83]. Отриманий загальний коефіцієнт розпилення з двовимірного кристала дорівнював 1,44 атомів/іон, що не суперечить розрахованому за допомогою програми SUSPRE [415] коефіцієнта розпилення міді, який дорівнював 2,38 атомів/іон. При цьому враховувалася тільки статистика атомів (у тому числі і розпиленіх), які безпосередньо взаємодіяли з іоном Ag, потрапляючи всередину сфери навколо іона з радіусом, що дорівнює радіусу обрізання потенціалу.

2.3.4. *Дифузійне наближення.* Достовірність дифузійного наближення можлива тільки за умовами, коли $z/x \ll 1$, і вплив поверхні на перемішування є незначним настільки, що виконання граничного переходу $x \rightarrow +\infty$ на верхній межі першого інтегралу в рівнянні (2.2) не призводить до значних кількісних змін [258]. З рис. 2.1 та рис. 2.2 видно, що обидві умови не виконуються в достатній мірі при низьких енергіях іонів. Більше того, врахування впливу другої умови на результат обчислювання профілю концентрації є практично неможливим, оскільки кристал з самого початку моделювався з реальною межею. Порівняння профілів концентрації, отриманих шляхом чисельного розв'язання загального рівняння перемішування (2.2) і його дифузійного наближення для компонентів з ідентичними балістичними якостями атомів матриці і псевдопрошарку (2.5) показало лише незначні розбіжності між профілями. До рівняння (2.5) не увійшла середня швидкість дрейфу атомів віддачі (перший момент функції атомних переміщень (1.39)) в силу ідентичності балістичних якостей атомів матриці і псевдопрошарку:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right] + V_f \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}. \quad (2.5)$$

Принципово рівняння (2.5) відрізняється від рівняння (1.41) координатно-залежним коефіцієнтом іонного перемішування.

На рис. 2.5 показані розрахункові діаграми, відповідно, а) коефіцієнта іонного перемішування та б) середньої швидкості дрейфу атомів віддачі, як функцій глибини кристала, що вимірюються кількістю атомних прошарків від поверхні, що бомбардується іонами Ag (діаграми 1). Окрім максимуму коефіцієнта перемішування на поверхні існує також незначний максимум в області 5-го та 6-го атомних прошарків, що співпадає з даними про розподіл ймовірності

перебування бомбардуючого іона в заданому прошарку (рис. 2.1), яка в 5-му та 6-му прошарках має відносно велике значення порівняно з 7-м та 8-м прошарками завдяки каналюванню іонів у напрямку [100] (рис. 2.2 (б)). З діаграми на рис. 2.5 видно, що числові значення коефіцієнта іонного перемішування $D(x)$ добре відповідають відомим оцінкам [270, 304]. Крім того, ефективність перемішування μ (1.43), при врахуванні тільки стадії зіткнень атомних каскадів, згідно з роботами [3, 15, 16, 304], складає $\sim 1-3 \text{ \AA}^5/\text{eV}$. Двоетапна модель дає $1,14 \text{ \AA}^5/\text{eV}$, що відповідає вказаним вище даним інших авторів. Форма залежності $D(x)$ від глибини підтверджує припущення [261, 271] про реалістичність наближення «сходинки» для опису форми коефіцієнта $D(x)$ для напівкисного розгляду проблеми.

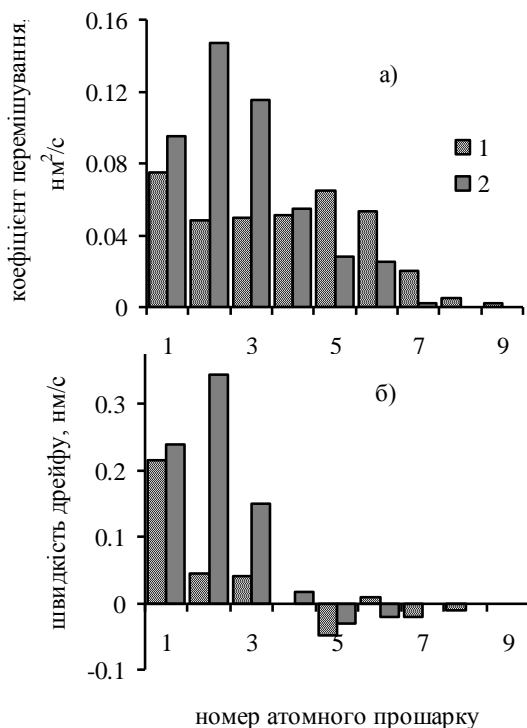


Рис. 2.5. а) Коефіцієнт іонного перемішування в двошаровому кристалі Cu при бомбардуванні іонами Ag (1) і Xe (2), б) середня швидкість дрейфу атомів віддачі. Енергія іонів 2 keV , щільність потоку іонів $1,25 \cdot 10^{15} \text{ іонів}/(\text{cm}^2 \cdot \text{с})$ [242, 243]

У першому прошарку на рис. 2.5 (б) має місце максимум середньої швидкості дрейфу атомів віддачі. У перших трьох прошарках $V(x) > 0$. У четвертому атомному прошарку домінує каскадне перемішування і $V(x) = 0$. У 5-му, 7-му та 8-му прошарках $V(x) < 0$, що пов'язується з ефектом відбиття, обговорення якого вже наводилося. Слабкий додатний сплеск функції $V(x)$ у 6-му прошарку обумовлюється каналуванням іонів Ag у напрямку [100] кристала (рис. 2.2 (б)) і, відповідно, виникненням в області 6-го прошарку високоенергетичних атомів віддачі з $V(x) > 0$. Незважаючи на те, що перший момент функції атомних переміщень $V(x)$ (1.39) не входить до рівнянь (1.41) і (2.5) у випадку ідентичності балістичних якостей атомів компонентів мішені, він також містить інформацію про напрямки усереднених переміщень атомів у каскадах зіткнень.

2.3.5. *Переміщення атомів, ініційовані важкими іонами.* Як показало моделювання [243], у випадку бомбардування двовимірного кристала Cu іонами Xe з такою самою енергією, ефект каналування іона не виникає. У багатьох випробуваннях було встановлено ефект колективного переміщення атомів двовимірної ґратки попереду важкого іона, які звільняють шлях для просування іона в глибину кристала. Один з розрахункових фрагментів розвитку двовимірного каскаду зіткнень, що ілюструє цей ефект, наводиться на рис.2.6.

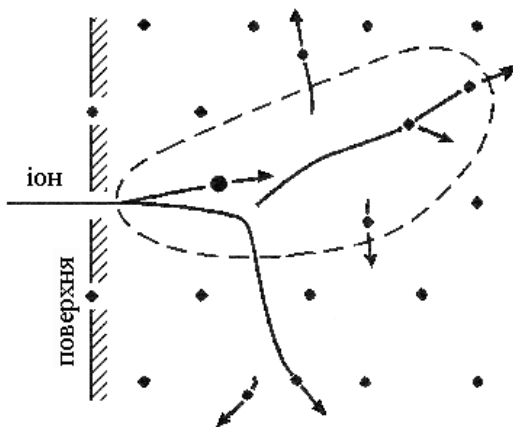


Рис. 2.6. Фрагмент розвитку каскаду зіткнень, де видно процес «очищення шляху» (назва ефекту вперше була надана в [414]), при бомбардуванні двовимірного кристала Cu іонами Xe з енергією 2 кеВ [243]

Аналогічний ефект, який отримав назву «ефект очищення шляху», був встановлений раніше Шульгою, Віканеком (Vicanek) та Зігмундом [416]. Повна відсутність каналювання іона та притягання між атомами призводять до існування тільки одного максимуму коефіцієнта іонного перемішування $D(x)$ у випадку бомбардування двовимірного кристала Cu іонами Хе, що показано на рис. 2.5 (а) (діаграма 2). Зміна знаку середньої швидкості дрейфу атомів віддачі має місце також і у випадку бомбардування іонами Хе, однак, при цьому, зміна знаку швидкості $V(x)$ завдяки каналюванню іонів не відбувається, що видно на рис. 2.5 (б) (діаграма 2). Обидва максимуми функцій $D(x)$ і $V(x)$, що розташовані в другому атомному прошарку у випадку іонів Хе, являються в 1,5–3 рази більшими порівняно з максимумами цих функцій в першому прошарку у випадку іонів Ag. Виявлена закономірність, а саме те, що максимуми функцій $D(x)$ і $V(x)$ у випадку іонів Хе зміщуються від поверхні в глибину кристала і стають значно більшими, ніж у випадку іонів Ag, має більш загальний характер і спостерігається на інших прикладах складніших тривимірних молекулярно-динамічних моделей [246] з багаточастинковими атомними потенціалами та для інших умов бомбардування. Слід зазначити, що у випадку іонів Хе розмір області, де коефіцієнт іонного перемішування і середня швидкість дрейфу атомів віддачі не дорівнюють нулю (рис.2.5), є меншою порівняно з випадком бомбардування кристала іонами Ag. Це пояснюється особливостями проникнення іонів Ag і Хе у кристал. За незначним виключенням, практично всі іони Хе зупиняються в перших шести атомних прошарках, тоді як іони Ag – у перших восьми прошарках при енергії 2 кеВ. Отже, іони Хе втрачають свою енергію в меншій області, ніж іони Ag у межах двовимірної квазістабільної моделі. Цим, частково, пояснюються більші зміщення атомів віддачі поблизу поверхні у випадку іонів Хе.

2.3.6. *Випадок $E_{th} = 0$ з урахуванням усіх атомів віддачі.* У роботі [244] молекулярно-динамічна частина двоетапної моделі, що була запропонована в [242, 243], була значно вдосконалена завдяки врахуванню усіх атомів віддачі, які виникають у процесі розвитку каскаду зіткнень. Крім того, мінімальна енергія зміщення атома з його початкового положення в кристалі була встановлена $E_{th} = 0$, що в більшій мірі відповідає реальному розвитку каскаду зіткнень. Було також розглянуто два різних значення енергії припинення розрахунку модельного каскаду: $E_{st} = 23$ еВ і $E_{st} = 10$ еВ. На рис. 2.7 (а) наведено залежності середньої швидкості дрейфу атомів віддачі з модифікованими параметрами $E_{th} = 23$ еВ і $E_{st} = 23$ еВ для першої кривої

та $E_{th} = 0$ і $E_{st} = 10$ еВ – для другої. При цьому, враховувалися усі атоми, що брали участь у каскадах зіткнень.

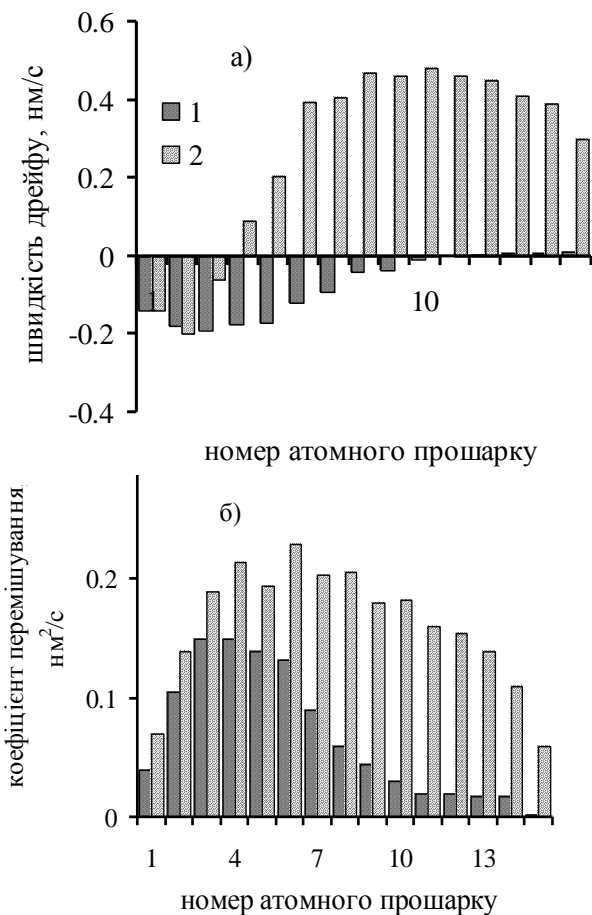


Рис. 2.7. а) Залежність середньої швидкості дрейфу атомів віддачі для двовимірного кристала Cu з параметрами $E_{th} = 23$ еВ і $E_{st} = 23$ еВ (діаграма 1) та $E_{th} = 0$ і $E_{st} = 10$ еВ (діаграма 2). б) Залежність коефіцієнта іонного перемішування для двовимірного кристала Cu з параметрами $E_{th} = 23$ еВ і $E_{st} = 23$ еВ (діаграма 1) та $E_{th} = 0$ і $E_{st} = 10$ еВ (діаграма 2). Враховувалися переміщення усіх атомів, що брали участь у каскадах. Щільність потоку іонів $1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/(см² · с) [244]

На відміну від попередніх розглядів середньої швидкості дрейфу атомів віддачі $V(x)$, на рис. 2.5 (б) врахування усіх атомів віддачі в каскаді призводить до від'ємних значень $V(x)$ у поверхневих прошарках та додатних значень $V(x)$ у глибині кристала. З рис. 2.7 (а) видно, що напрямки середніх швидкостей $V(x)$ і їх абсолютні значення практично співпадають у випадках 1 і 2 тільки у перших двох атомних прошарках, що пов'язано з домінуючою роллю розпилення в поверхневій області кристала. У прошарках з четвертого по десятий швидкості дрейфу відрізняються як за абсолютною величиною, так і за знаком. Починаючи з десятого прошарку, середні швидкості знову мають однаковий напрямок, однак їх абсолютні значення сильно відрізняються. Різниця між випадками 1 і 2 на рис. 2.7 (а) пов'язана зі значенням параметра E_{th} . Значна додатна швидкість $V(n) > 0$ для $n > 3$ у випадку 2 пояснюється тим, що $E_{th} = 0$, тоді як у випадку 1, де $V(n) < 0$ для $n < 10$, $E_{th} = 23$ еВ. У випадку 1 значну роль відіграють ефекти відбиття атомів, що рухаються, від нерухомих атомів, що знаходяться в своїх початкових положеннях і, як наслідок, $V(n) < 0$ для $n < 10$. Мала додатна швидкість $V(n) > 0$ для $n > 10$ має місце завдяки близькій задній межі кристала, а також розповсюдженню послідовностей атомних зіткнень заміщення, які спрямовані в глибину кристала від поверхні. Цими ж ефектами обумовлено існування «хвоста» коефіцієнта іонного переміщення у випадку 1 на рис. 2.7 (б) при $n > 10$. У випадку 2, який відрізняється більшими значеннями $V(x)$ і $D(x)$, вказані вище ефекти поблизу задньої межі кристала теж мають місце, однак, в силу більш значного розвитку каскаду зіткнень ($E_{st} = 10$ еВ), кристал, що використовується в цій роботі, є недостатньо великим, і ефект послідовностей зіткнень заміщення перекривається значною кількістю випадкових каскадних зіткнень атомів. Випадок 2, на відміну від випадку 1, якісно співпадає з результатами аналітичних розрахунків [304, 270], моделюванням у межах методу Монте-Карло [236] та молекулярно-динамічного моделювання [100] і тому, в більшій мірі, відповідає реальності.

2.3.7. *Інтерпретація двовимірних результатів.* Слід врахувати, що моделювання на двовимірній ґратці дає завищені результати для коефіцієнтів розпилення та внутрішніх атомних потоків уздовж напрямку бомбардування, оскільки уся енергія бомбардуючого іона може поширюватися разом із зміщеннями атомів тільки у двох напрямках замість трьох напрямків у реальному кристалі. Для обчислення коефіцієнтів розпилення і перенормування внутрішніх атомних двовимірних потоків для випадку тривимірного простору в [244] додатково використовувалася програма SUSPRE [415]. Потоки атомних частинок, що були отримані в результаті молекулярно-

динамічного моделювання, ділилися на нормувальний коефіцієнт k так, що на поверхні вони давали коефіцієнт розпилення, що дорівнює отриманому за програмою SUSPRE.

Програма SUSPRE для полікристалічної міді, що бомбардується іонами Ag з енергією 2 кеВ, дає коефіцієнт розпилення $Y_s = 2,38$ атомів/іон. Таким чином, нормувальний коефіцієнт k у випадку 1 ($E_{th} = E_{st} = 23$ еВ) дорівнював $k = Y/Y_s = 7,89$, де $Y = 18,79$ атомів/іон – коефіцієнт розпилення двовимірної ґратки, з урахуванням усіх атомів у каскадах. Для випадку 2 ($E_{th} = 0$, $E_{st} = 10$ еВ), $k = 6,22$, $Y = 14,8$ атомів/іон. Завдяки такому методу врахування двовимірності ґратки є можливість отримувати напівякісні результати для функції атомних переміщень $F(x, z)$ (розділ 2.2.2) у тривимірному випадку і, як наслідок, оцінювати приблизно коефіцієнт іонного перемішування $D(x)$ та середню швидкість дрейфу атомів віддачі $V(x)$ для каскадів у тривимірній ґратці. У загальному випадку для виконання процедури перенормування потоків атомів у каскадах зіткнень можна використовувати не тільки програму SUSPRE, але й інші програми та алгоритми, які дають реалістичні коефіцієнти розпилення з тривимірних кристалів, що і було реалізовано в роботі [417].

Запропонований метод переходу від двовимірного каскаду до тривимірної інтерпретації результатів дає можливість у деяких випадках, де достатньо якісної оцінки результату, користуватися спрощеною двовимірною моделлю, яка дозволяє значно скоротити час розрахунку. З метою оцінки реалістичності запропонованого методу слід порівняти адаптовані до тривимірного простору перенормовані двовимірні результати з реальними тривимірними результатами у межах максимально зближених моделей, які відрізнялися б тільки мірністю кристала. У роботі [417] було виконано порівняння коефіцієнтів іонного перемішування, середніх швидкостей дрейфу атомів віддачі та поширень псевдомаркера в двовимірному та тривимірному кристалах Cu при їх нормальному бомбардуванні іонами Ag з енергією 100 еВ. Обидві моделі відрізнялися тільки мірністю кристалів і, відповідно, кількістю атомів у кристалах. У двовимірному кристалі, який представляв собою площину (001), було 400 атомів, а відповідний тривимірний кристал Cu мав 1575 атомів, які складали квазістабільну ГЦК ґратку з поверхнею (100) для бомбардування. Обидва алгоритми припиняли обчислювання атомного каскаду, коли сума потенціальної і кінетичної енергій кожного з атомів віддачі ставала меншою за 5 еВ. Таким чином, моделі описували тільки стадію зіткнень атомних каскадів [15, 16], яка продовжується приблизно 0,1–0,3 пс при таких низьких енергіях. У випадку тривимірної ґратки було виконано 500, а у випадку двовимірної ґратки – 100 статистичних випробувань. В обох

моделях, у початковий момент часу бомбардуючі іони рухалися в напрямку [100].

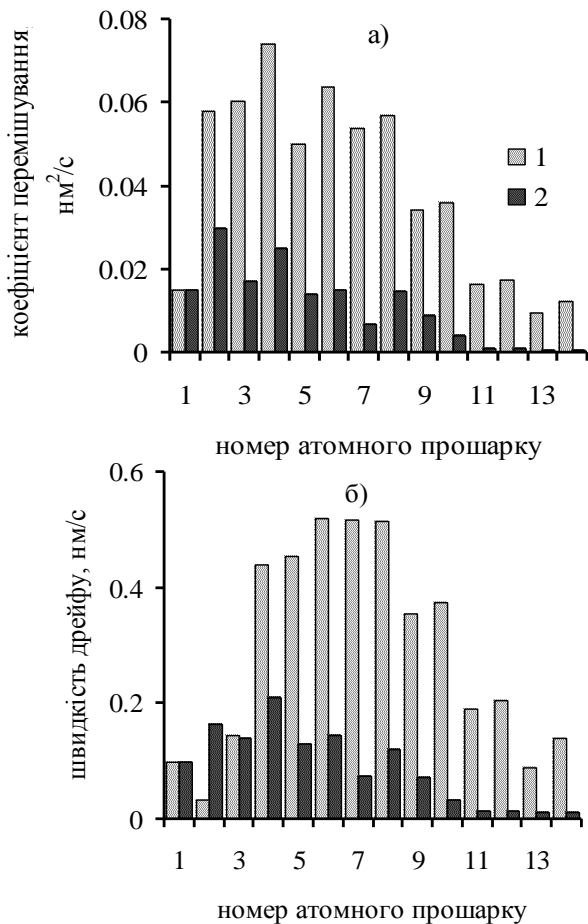


Рис. 2.8. а) Залежність коефіцієнта іонного перемішування для двовимірної (діаграма 1) та тривимірної кристалічних ґраток (діаграма 2) міді у випадку бомбардування іонами Аг. б) Залежність середньої швидкості дрейфу атомів віддачі для двовимірної (діаграма 1) та тривимірної кристалічних ґраток (діаграма 2) міді у випадку бомбардування іонами Аг. Щільність потоку іонів $1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/($\text{cm}^2 \cdot \text{s}$) [417]

На рис. 2.8 (а) наведено розрахунки коефіцієнта іонного перемішування (1.38) для двовимірної та тривимірної кристалічних ґраток. У обох випадках головний внесок в іонне перемішування створюють переміщення атомів у перших десяти атомних прошарках, хоч, як показують результати моделювання, в обох ґратках виникає значна кількість атомних послідовностей зіткнень заміщення, які можуть виходити за межі модельних кристалів [417]. Роль атомних послідовностей зіткнень заміщення виявляється особливо значною в двовимірній ґратці, оскільки там кожний атом має менше число найближчих сусідніх атомів i , відповідно, долає менші потенціальні бар'єри у процесі заміщення атомів уздовж напрямку розвитку атомних послідовностей зіткнень порівняно з тривимірною ґраткою. Наведені на рис. 2.8 (а) значення коефіцієнтів перемішування в 11–14-му атомних прошарках ілюструють цей модельний результат. За тих самих обставин, сума квадратів зміщень атомів уздовж напрямку [100] в глибину мішені і до поверхні, що бомбардується, а також відповідні пошарові значення коефіцієнтів іонного перемішування є більшими у двовимірній ґратці порівняно з аналогічним результатом для тривимірної ґратки. Як видно з рис. 2.8 (а), із зростанням глибини кристала ця різниця також збільшується. При цьому, нормувальний коефіцієнт ($k = 0,35$) атомних потоків у двовимірній ґратці, який дорівнює в [244] відношенню коефіцієнтів розпилення $k = Y_3/Y_2$, де $Y_3 = 0,17$ атомів/іон і $Y_2 = 0,49$ атомів/іон (індекси 2 і 3 у цьому підрозділі показують вимірність модельного кристала), зменшуючи коефіцієнт іонного перемішування майже в три рази, як видно з рис. 2.8 (а), дає непоганий, з урахуванням напівякісного характеру моделей, збіг між реально тривимірними і перенормованими до тривимірного простору двовимірними результатами.

На рис. 2.8 (б) показані результати розрахунків середньої швидкості дрейфу атомів віддачі (1.39) для обох ґраток. Як і у випадку коефіцієнтів іонного перемішування, пошарові значення середньої швидкості в двовимірній ґратці є значно вищими, ніж у тривимірній. Тільки швидкості атомів у 1-му та 3-му атомних прошарках не залежать від вимірності кристала, що, найбільш ймовірно, не підтвердилося б при більшій статистиці атомних переміщень.

Поширення дельта-подібного профілю концентрації домішки у результаті перемішування при ідентичності балістичних якостей атомів домішки і матриці у випадку, коли профіль концентрації домішки на початку розпилення знаходиться за межами області перемішування, були отримані шляхом чисельного розв'язання рівняння іонного перемішування в дифузійному наближенні (2.5) [3, 257, 258], з координатно-залежними коефіцієнтами іонного перемішування $D(x)$, які

представлені на рис. 2.8 (а) і були отримані шляхом МД моделювання. При цьому, поширення дельта-подібного маркера σ^2 розраховано згідно з правилом обчислення поширення пошарових профілів, що було запропоновано в [260, 261]:

$$\sigma^2 = \overline{\tau^2} - \bar{\tau}^2, \quad (2.6)$$

$$\bar{\tau} = \frac{\int_0^{\infty} t C(0, V_f t) dt}{\int_0^{\infty} C(0, V_f t) dt}, \quad (2.7)$$

$$\overline{\tau^2} = \frac{\int_0^{\infty} t^2 C(0, V_f t) dt}{\int_0^{\infty} C(0, V_f t) dt}. \quad (2.8)$$

У формулах (2.6)–(2.8) пошарова концентрація $C(0, V_f t)$ обчислюється шляхом чисельного розв'язання рівняння іонного перемішування (2.5). Згідно з цими формулами поширення σ_2^2 і σ_3^2 пошарових профілів концентрації у випадках, відповідно, двовимірної і тривимірної ґраток становили 2,1 нм² і 1,6 нм². Видно, що незважаючи на значну різницю в коефіцієнтах іонного перемішування $D_2(x)$ і $D_3(x)$ (рис. 2.8 (а)), поширення σ_2^2 і σ_3^2 концентраційних профілів $C(0, V_f)$ мало відрізняються між собою. Для з'ясування і пояснення цього результату розглянемо формулу поширення дельта-подібного профілю, який на початку профілювання знаходився на дальній межі області перемішування у випадку сталого в області перемішування коефіцієнта іонного перемішування (1.37). Коефіцієнт D у (1.37) оцінювався згідно із середньоарифметичним значенням пошарових коефіцієнтів перемішування D_i , наведених на рис.2.8 (а):

$$D = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n D_i, \quad (2.9)$$

де n – кількість атомних прошарків у модельному кристалі і $D_i \neq 0$ ($n = 8$ в умовах цього розгляду).

Розмір області перемішування оцінювався, як $L = d \cdot n/2$. За результатами МД моделювання, були отримані наступні швидкості руху поверхні, що розпилюється: $V_f^{(2)} = 0,072$ нм/с і $V_f^{(3)} = 0,024$ нм/с для, відповідно, двовимірної і тривимірної ґраток. Формула (1.37) показує, що невеликі розбіжності поширень, що були отримані згідно з розв'язанням рівняння перемішування в дифузійному наближенні (2.5) і формулами (2.6)–(2.8), а також за оцінками (1.37) і (2.9) ($\sigma_2^2 = 2.2$ нм² і $\sigma_3^2 = 1.9$ нм²), являються результатом значної різниці швидкостей $V_f^{(2)}$ і $V_f^{(3)}$ розпилення поверхні бомбардуючими іонами.

Таким чином, двовимірна молекулярно-динамічна модель може використовуватися для отримання напівкількісних оцінок поширення пошарових профілів атомних концентрацій при низьких енергіях бомбардування навіть без процедури перенормування, тоді як для отримання реалістичних оцінок коефіцієнтів іонного перемішування і середньої швидкості дрейфу атомів віддачі необхідно врахування нормувального співмножника у матриці атомних переміщень. При цьому, тривимірні оцінки, виконані на основі двовимірної моделі з наступним перенормуванням, дають, як правило, завищені результати у порівнянні з результатами моделювання іонного перемішування в реально тривимірному кристалі.

2.3.8. Внесок стадії зіткнень атомних каскадів у перемішування. У роботі [419] було виконано аналіз можливості застосування квазістабільних моделей кристалів для розгляду іонного перемішування в межах двоетапного розрахунку, і докладніше розглянута роль енергії припинення розрахунку каскаду зіткнень E_{st} . У цілому, квазістабільні моделі можуть використовуватися тільки для розгляду початкової стадії каскадів, яка має назву «стадія зіткнень», оскільки вони не мають потенціалів притягання і не можуть бути використані для розгляду низькоенергетичної стадії каскадів, на якій важливими стають процеси релаксації ґратки.

Було виконано моделювання нормального бомбардування тривимірного кристала Cu (100), який складався з 4608 атомів, іонами Ag з енергією 200 еВ. Розраховувалося 100 випробувань. Для опису атом – атомної і атом – іонної взаємодій використовувалися потенціали Борна – Майєра, що описані в п. 2.2.1. Усі обчислення виконувалися для двох енергій E_{st} : 10 еВ і 5 еВ. Згідно з оцінками Екштайна [7], наближення парних взаємодій виправдовується для енергій частинок не нижче 5–10 еВ. Для менших енергій суттєвими стають багаточастинкові взаємодії, що характерно для термічної стадії каскаду. Час еволюції каскадів складав не більше 0,4 пс, що відповідає концепції стадії зіткнень атомного каскаду.

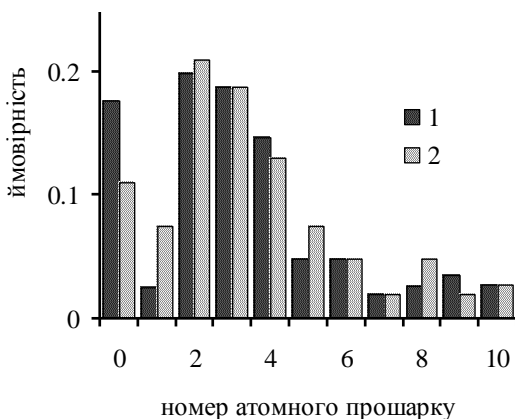


Рис. 2.9. Розподіл іонів Ag, що бомбардують з енергією 200 eV, за глибиною мішені Cu в момент зупинки програми для $E_{st} = 5$ eV (діаграма 1) і $E_{st} = 10$ eV (діаграма 2). Нульовий прошарок показує ймовірність відбиття бомбардуючого іона від поверхні кристала [419]

На рис. 2.9 представлені дані моделювання розподілу бомбардуючих іонів за глибиною мішені в момент зупинки програми для обох значень E_{st} . Нульовий прошарок показує ймовірність відбиття бомбардуючого іона від поверхні (0,11 при $E_{st}=10$ eV і 0,18 при $E_{st}=5$ eV), яка, в деякій мірі, занижена для обох E_{st} порівняно з модельними розрахунками, які використовують багаточастинкові потенціали взаємодії [9]. Більшість іонів для обох енергій зупинки програми були зареєстровані в 2 – 4-му атомних прошарках, що добре співпадає з даними, отриманими за допомогою програми SUSPRE [415], яка дає максимум концентрації іонів Ag у міді при енергії 200 eV – 0,43 нм. Ймовірність знаходження іона в перших десяти атомних прошарках зберігається значною після закінчення розрахунку каскадів, тоді як різниця в кількості іонів у кристалі між двома енергіями зупинки виявилася неістотною.

На рис. 2.10 представлені результати розрахунків залежності коефіцієнта іонного перемішування від глибини. Згідно з результатами найбільші пошарові значення коефіцієнта іонного перемішування мають місце у 1 – 7-му атомних прошарках, що добре корелює з наведеними на рис. 2.9 даними про розподіл імплантованих іонів Ag. Збіг просторових областей іонної імплантації і основної області перемішування свідчить про виконання цього моделювання в наближенні стадії зіткнень атомного каскаду [15, 16]. Це дозволяє оцінити ефективність іонного перемішування (1.43), яка у випадках

енергій E_{st} : 10 еВ і 5 еВ становила, відповідно, $0,74 \text{ \AA}^5/\text{eV}$ і $0,87 \text{ \AA}^5/\text{eV}$, що добре відповідає сучасним уявам про значення ефективності іонного перемішування μ на стадії зіткнень атомного каскаду [3]. Дані статистики молекулярно-динамічного моделювання атомних переміщень говорять про значну роль послідовностей атомних зіткнень заміщення в іонному перемішуванні при низьких енергіях бомбардування [15, 420, 421]. З цим узгоджується, як видно з рис. 2.10, значення коефіцієнтів іонного перемішування глибше 10-го атомного прошарку.

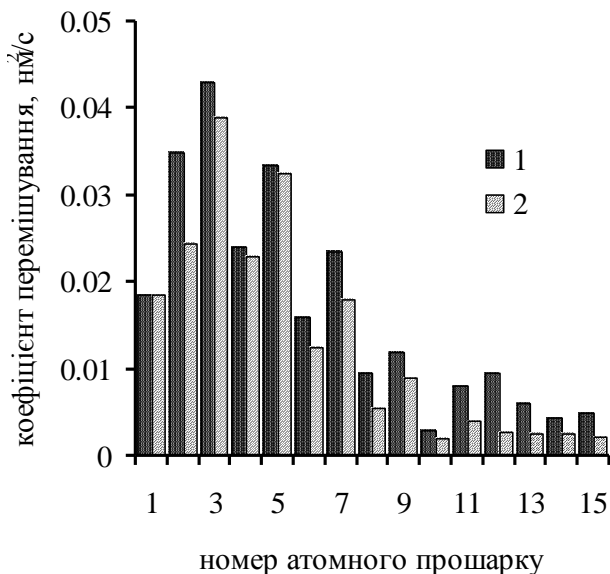


Рис. 2.10. Залежність коефіцієнта іонного перемішування від глибини кристала Cu при бомбардуванні іонами Ag з енергією 200 еВ. Енергії зупинки розрахунку каскаду $E_{st} = 5 \text{ eV}$ (діаграма 1) і $E_{st} = 10 \text{ eV}$ (діаграма 2) [416]. Квазістабільний кристал з відштовхуючим потенціалом Борна – Майера [98]. Щільність потоку іонів $1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/($\text{cm}^2 \cdot \text{c}$)

У роботі було чисельно обчислено також пошарові профілі концентрації в межах розв'язання загального рівняння іонного перемішування з релаксаційним членом (2.2) і (2.3), а також його дифузійного наближення (2.5), відповідно, $C_{\text{int}}(0, V_f \cdot t)$ і $C_{\text{dif}}(0, V_f \cdot t)$. На основі пошарових профілів концентрації та рівнянь (2.6)–(2.8) були

отримані поширення дельта-подібних псевдопрофілів концентрації, відповідно, σ_{int}^2 і σ_{dif}^2 . Коефіцієнт розпилення Y , який входить до виразу швидкості розпилення поверхні $V_f = IY\tau$ – моделюється в межах молекулярно-динамічної моделі.

Було отримано, що $Y = 1,1$ атомів/іон для обох енергій E_{st} . Модельний коефіцієнт розпилення добре відповідає відомим експериментальним результатам [2]. Поширення σ_{int}^2 і σ_{dif}^2 наведені в таблиці 2.1 разом з оцінкою поширення профілю концентрації згідно з формулою Андерсена [231]:

$$\sigma_A^2 = \frac{R_A^2}{3Y} N_A, \quad (2.10)$$

де R_A – середня довжина переміщення атома віддачі, яка оцінювалася в [232] $\sim 1,0$ нм для усіх металів;

N_A – число атомів віддачі, які генеруються за один каскад.

Формула Кінчина – Піза [15] може бути використана для оцінки кількості атомів віддачі $N_A = 0,42 \cdot E/E_{d, eff}$, де $E_{d, eff} = 19$ еВ – порогова ефективна енергія зміщення для міді [232].

Значення поширень σ_{int}^2 і σ_{dif}^2 , що розраховані згідно з формулами (2.2)–(2.8), являються значно меншими порівняно з оцінкою за формулою Андерсена (2.10), що відповідає початковим положенням моделі про врахування внеску в іонне перемішування тільки стадії зіткнень атомних каскадів. Слід зазначити, що формула (2.10) дає завищені результати порівняно з даними молекулярно-динамічного моделювання при низьких енергіях бомбардування навіть у випадках врахування термічної стадії розвитку модельного каскаду [246, 247]. Це може бути наслідком завищених оцінок R_A та N_A . При цьому, N_A розраховувалася, виходячи з наближення парних зіткнень атомів.

Таблиця 2.1. Розрахункові поширення дельта-подібного псевдопрошарку в кристалі Cu(100) при бомбардуванні іонами Ag з енергією 200 еВ

E_{st}, eV	$\sigma_{int}^2, \text{нм}^2$	$\sigma_{dif}^2, \text{нм}^2$	$\sigma_A^2, \text{нм}^2$
10	0,66	0,4	1,34
5	0,76	0,48	

Як показали наведені вище обчислення і порівняння з відомими результатами, запропонований алгоритм реалістично описує стадію зіткнень атомного каскаду і може використовуватися для підвищення швидкості розрахунку, як частина повного молекулярно-динамічного

алгоритму двоетапного розрахунку іонного перемішування, в якому на подальших стадіях розвитку каскаду для опису атом – атомних зіткнень слід використовувати потенціали зі складовими притягання. При цьому, енергія припинення розрахунку каскаду, що становить 10 еВ для випадку опису стадії зіткнень у наближенні чисто відштовхуючих потенціалів більш прийнятна, ніж 5 еВ, про що свідчать результати наведених оцінок.

2.3.9. *Міжатомне притягання на стадії зіткнень каскаду.* Використання багаточастинкових атомних потенціалів [143–146] для металів, особливо їх складових притягання, значно підвищує достовірність отриманих результатів, особливо на низькоенергетичній стадії каскаду, однак потребує в 2–4 рази більше машинного часу порівняно з випадком використання тільки відштовхуючого парного потенціалу взаємодії за інших рівних умов. Отже, практично важливою стає оцінка значущості відмінності модельних параметрів іонного перемішування, отриманих з використанням багаточастинкового потенціалу, приєднаного до відштовхуючого парного потенціалу при високих енергіях і результатів, отриманих з використанням тільки відштовхуючого парного потенціалу атом – атомної взаємодії. При цьому, коректне порівняння може проводитися тільки на стадії зіткнень атомного каскаду (0,1–0,3 пс). При великих інтервалах часу еволюції каскаду, модель, що враховує тільки відштовхуючі взаємодії, дає завищені значення переміщень атомів віддачі [244]. У цьому підрозділі наведено результати [418] аналізу порівняння коефіцієнтів іонного перемішування і середніх дрейфових швидкостей атомів віддачі, отриманих у межах двоетапного методу розрахунку [101, 241–248] на основі молекулярно-динамічного моделювання каскадів зіткнень в кристалі Сі з потенціалами взаємодії двох типів: багаточастинкового атомного потенціалу [143, 418] (2.11)–(2.15), приєднаного до потенціалу Борна – Майера (Гібсон 2) (1.21) [7, 98] в області значних енергій [424], і окремого атомного потенціалу Борна – Майера (Гібсон 2), що використовувався при розгляді двовимірних кристалів міді:

$$E_{tot} = \sum_i F(\rho_i) + \sum_{i<j} \Phi(r_{ij}), \quad (2.11)$$

$$\rho_i = \sum_{i \neq j} g(r_{ij}), \quad (2.12)$$

$$F(\rho) = -c\sqrt{\rho}, \quad (2.13)$$

$$\Phi(r) = \Phi_0 \exp(-\alpha r), \quad (2.14)$$

$$g(r) = \exp(-\beta \cdot r), \quad (2.15)$$

де $\alpha = 42,87 \text{ nm}^{-1}$, $\beta = 18 \text{ nm}^{-1}$, $c = 12,17 \text{ eV}$, $\Phi = 9,892 \text{ keV}$, $0,13 \text{ nm} < r < 0,54 \text{ nm}$;

E_{tot} – потенціальна енергія кристала, r – відстань між атомами i і j .

Числові значення параметрів потенціалу Борна – Майєра наведені в п. 2.2.1, а область його дії в складі потенціалу зі складовою притягання становить інтервал $0 < r < 0,13 \text{ nm}$. Без складовою притягання область дії атомного потенціалу $0 < r < 0,254 \text{ nm}$. Радіус обрізання потенціалу Борна – Майєра при взаємодії з іоном – $0,3 \text{ nm}$. Розглянуто випадок нормального бомбардування кристала міді іонами Ag з енергією 200 eV в напрямку $[100]$. Було виконано по 100 випробувань для кожного з двох випадків. У обох випадках іони падали в елементарну область $[119]$ на поверхні кристала $[100]$, а їх початкові координати обиралися за законом випадкових чисел. Модельні кристали склалися з 4032 і 4608 атомів і були розміщені, відповідно, в 14 і 16 атомних прошарках у випадках потенціалу зі складовою притягання та без неї. Модель зі складовою притягання потенціалу у випадку, що розглядається – стабільна модель, оскільки на бічних межах кристала використовувалися періодичні крайові умови (1.10). Демпінговий коефіцієнт γ становив $6,75 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ у формулі (1.12) для рівняння руху межових атомів на бічних межах і передостанньому атомному прошарку на дні кристала. Початкова температура кристала T_0 становила 0 K . Таким чином, теплові коливання атомів не враховувалися в цій версії молекулярно-динамічної програми з багаточастинковим потенціалом. Крім того, один атомний прошарок на дні кристала передбачався нерухомим для запобігання зміщення кристала загалом в результаті передачі йому імпульса налітаючого іона. Поверхня, що бомбардується, залишалася вільною і поводитися відповідно до дії потенціалів взаємодії. В обох випадках моделювання еволюція кожного з модельних каскадів розглядалася протягом $0,2 \text{ ps}$. Таким чином, у роботі моделювалася тільки стадія зіткнень атомних каскадів, у кінці якої максимальна кінетична енергія атомів віддачі була $\sim 2\text{--}10 \text{ eV}$. Коефіцієнти іонного перемішування та середні швидкості дрейфу атомів віддачі обчислювалися на основі результатів молекулярно-динамічного моделювання атомних переміщень у каскадах та формул (1.38) і (1.39) [3–6, 257, 258].

На рис. 2.11(а) показано, що коефіцієнт іонного перемішування у випадку моделі, що враховує тільки взаємодії відштовхування атомів,

трохи більший, ніж коефіцієнт у моделі, що використовує комбінований потенціал. Середні значення коефіцієнтів іонного перемішування в перших 12 атомних прошарках, що отримані наведеними вище методами, дорівнюють, відповідно, $0,018 \text{ нм}^2/\text{с}$ і $0,016 \text{ нм}^2/\text{с}$.

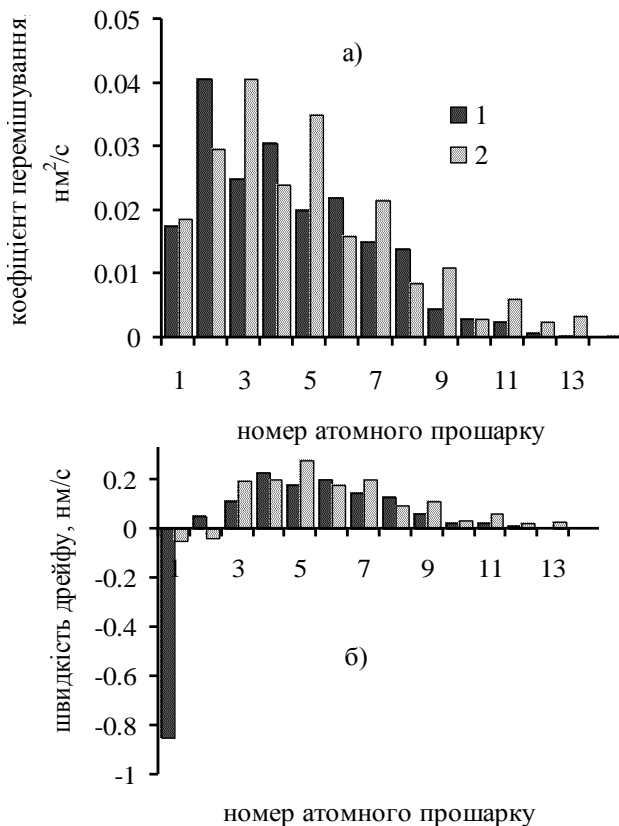


Рис. 2.11. а) Залежність коефіцієнта іонного перемішування від глибини кристала Cu у випадку моделі, що використовує комбінований потенціал з багаточастинковою складовою [94] (діаграма 1) і яка моделює тільки взаємодії відштовхування атомів з потенціалом Борна – Майєра (діаграма 2) при енергії іонів $\text{Ag} - 200 \text{ eV}$. Еволюція кожного з модельних каскадів розглядалася протягом $0,2 \text{ пс}$. Щільність потоку іонів $1,25 \cdot 10^{15} \text{ іонів}/(\text{см}^2 \cdot \text{с})$. б) Залежність середньої швидкості дрейфу атомів віддачі від глибини кристала Cu . [422]

Рис. 2.11(а) також показує, що максимум функції $D(x)$ знаходиться в 2-му атомному прошарку – у випадку використання комбінованого потенціалу і в 3-му – у випадку потенціалу Борна – Майєра без складової притягання. Частково, це пов'язано з існуванням у моделі зі складовою притягання потенціалу прошарку радіаційно-адсорбованих атомів на поверхні кристала (ад-прошарок). Згідно з результатами моделювання, після 0,2 пс еволюції каскаду, в ад-прошарку знаходяться, в середньому, 4,2 атомів/іон, які змістилися туди з першого атомного прошарку. Відповідно, наявність великої кількості поверхневих вакансій ($\sim 3,3$ вакансій/іон), які генеруються в більшості випадків ад-атомами, полегшує атомні переміщення в цій області кристала, що і призводить до зростання коефіцієнта іонного перемішування в 2-му атомному прошарку у випадку використання потенціалу зі складовою притягання. Для порівняння, модель кристала з чисто відштовхуючим потенціалом показує існування в першому атомному прошарку, в середньому, тільки 0,5 вакансій/іон.

Модель з чисто відштовхуючим атомним потенціалом демонструє на рис. 2.11 (а) значні коливання пошарових значень коефіцієнта іонного перемішування при переході від прошарку до прошарку, тоді як у моделі з комбінованим атомним потенціалом незначні коливання мають місце тільки в області атомних прошарків 1–6. Ці результати якісно узгоджуються з даними [101], де аналогічні коливання значення коефіцієнта іонного перемішування від прошарку до прошарку були пов'язані, на думку авторів [99], з періодичністю кристалічної ґратки. Проведений нами більш детальний розгляд показав, що у випадку моделі з чисто відштовхуючим атомним потенціалом, максимум у 3-му прошарку, а також локальні максимуми у 5-му, 7-му, 9-му, 11-му і 13-му атомних прошарках пов'язані з генерацією в каскаді зіткнень довгих стрибків атомів (з прошарку n в прошарок $n + 2$) у напрямку [100], які можуть бути ідентифіковані, як відповідним чином спрямовані послідовності атомних зіткнень заміщення. Послідовності атомних зіткнень заміщення мають місце і в моделі зі складовою притягання атомного потенціалу, однак вони не дають такої чіткої періодичної картини зі зростанням глибини кристала. Можливо, це пов'язано з радіусом обривання потенціалу. Багаточастинковий атомний потенціал [94] враховує взаємодію трьох сфер найближчих сусідніх атомів, що призводить до швидкого розповсюдження розбалансування ґратки і порушення її періодичності, а також до більш інтенсивного розсіювання енергії каскадних атомів віддачі в пружних взаємодіях з атомами ґратки. Цей ефект наглядно проявляється в 9–13-му атомних прошарках, де має місце більш значне зменшення коефіцієнту іонного перемішування для моделі з комбінованим атомним потенціалом.

Як видно з рис. 2.11 (б), значне від'ємне значення середньої швидкості дрейфу атомів віддачі в першому прошарку у випадку потенціалу з частиною притягання відповідає твердженню про вплив прошарку ад-атомів на значення коефіцієнта іонного перемішування в поверхневій області. За відсутністю ад-прошарку модуль середньої швидкості дрейфу атомів віддачі в першому прошарку є істотно меншим. Всередині модельних кристалів, у атомних прошарках 3–13, середні швидкості дрейфу атомів віддачі відрізняються значно менше, ніж на поверхні кристалів.

В обох випадках спостерігається збіднення речовиною приповерхневих прошарків. В обох моделях збіднення поверхні відбувається, в значній мірі, завдяки перенесенню атомів з поверхневої області в глибину кристала. Однак, у випадку потенціалу зі складовою притягання, значну роль у цьому відіграє також і процес генерації ад-атомів. Збіднення поверхні відбувається також за рахунок розпилення кристала. До моменту часу 0,2 пс цей процес сильніше проявляється в моделі з чисто відштовхуючим потенціалом. Отримані коефіцієнти розпилення дорівнювали, відповідно, 1,14 атомів/іон і 0,13 атомів/іон. Слід відзначити, однак, що незважаючи на велику кількість ад-атомів у моделі з частиною притягання потенціалу, кількість зворотних переміщень атомів з глибини кристала до поверхні без врахування переміщень атомів у ад-прошарок є в ~ 2 рази більшою у випадку моделі з чисто відштовхуючим потенціалом (2,2 і 1,1 переміщень/іон). Значна різниця між обома моделями пов'язана також і з кількістю прямих переміщень атомів віддачі в глибину кристала. Так, кількість прямих переміщень у сусідній атомній прошарок у 1,5 рази більша в моделі з чисто відштовхуючим потенціалом (10,6 і 7,0 переміщень/іон), тоді як кількість довгих прямих переміщень (дивіться вище) у 1,4 рази більша в моделі з потенціалом притягання (1,14 і 0,78 переміщень/іон). З іншого боку, середньоквадратичні зміщення атомів (СКЗ) з одної комірки Вігнера – Зейтца в іншу після 0,2 пс еволюції каскаду без врахування ад-атомів відрізняються неістотно: $0,58 \text{ nm}^2$ і $0,88 \text{ nm}^2$ (з них $0,57 \text{ nm}^2$ без врахування ад-атомів) у моделях, відповідно, з чисто відштовхуючим атомним потенціалом і з потенціалом, що враховує складову притягання.

Таким чином, вже на початковій стадії розвитку низькоенергетичного каскаду зіткнень спостерігається значний вплив типу потенціалу атом – атомної взаємодії на мікроструктуру атомного каскаду, що призводить до значних розбіжностей параметрів перемішування у поверхневій області кристала, а також до розбіжностей в ступені впливу періодичності ґратки на ці параметри. Однак, середні інтегральні характеристики іонного перемішування,

якими є усереднені за атомними прошарками коефіцієнт іонного перемішування і середньоквадратичне зміщення атомів віддачі без врахування зміщень ад-атомів, неістотно відрізняються для обох моделей, що дає підставу для використання моделі кристала з чисто відштовхуючим потенціалом атом – атомної взаємодії для проведення оціночних розрахунків іонного перемішування на стадії зіткнень атомного каскаду з урахуванням різниці коефіцієнтів розпилення. Проблему, однак, складає питання коректного визначення часу закінчення стадії зіткнень атомного каскаду.

2.4. Підвищення точності оцінки поширення пошарового профілю

Оціночна формула (1.37) була отримана в «сходинковому» наближенні методом «моментів часу» за умови, що коефіцієнт іонного перемішування не змінюється в області перемішування. Між тим, неоднорідність коефіцієнта іонного перемішування з глибиною кристала має певний вплив на значення усіх інших пошарових параметрів. У роботі [423] був аналітично розглянутий вплив градієнта коефіцієнта іонного перемішування на поширення дельта-подібного псевдомаркера, атоми якого мають ідентичні з атомами матриці балістичні якості. У основу моделі покладено дифузійне наближення, а саме, рівняння (2.5). Для розв'язання рівняння (2.5) були використані стандартні крайові умови, які моделюють закон збереження маси на поверхні кристала та на дальній межі області перемішування, як, наприклад, у [271, 272]. Згідно з процедурою обчислення моментів часу (2.6)–(2.8) параметри поширення (2.6) можуть бути представлені в формі Лаплас-образів концентрації:

$$\bar{\tau} = - \frac{\lim_{s \rightarrow 0} \frac{dC(0, s)}{ds}}{\lim_{s \rightarrow 0} C(0, s)}, \quad (2.16)$$

$$\bar{\tau}^2 = \frac{\lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^2 C(0, s)}{ds^2}}{\lim_{s \rightarrow 0} C(0, s)}, \quad (2.17)$$

$$C(0, s) = \int_0^{\infty} \exp(-s \cdot t) \cdot C(0, t) dt, \quad (2.18)$$

де $C(0, s)$ – Лаплас-образ від поверхневої концентрації псевдомішки.

Поверхнева концентрація $C(0,t)$ є розв'язанням рівняння іонного перемішування в дифузійному наближенні (2.5) для випадку обчислення пошарових концентрацій. На рис. 2.12 наведені пошарові профілі концентрації дельта-подібного псевдомаркера, розташованого в початковий момент часу за межами області перемішування.

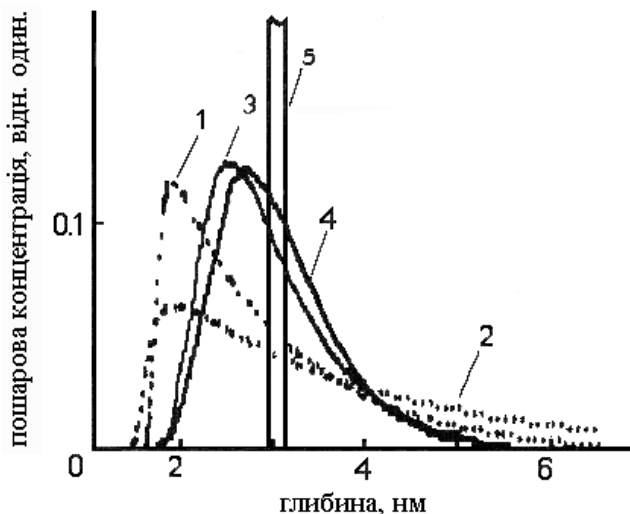


Рис. 2.12. Пошарові профілі концентрації дельта-подібного псевдомаркера, розташованого в початковий момент часу за межами області перемішування. Профілі отримані шляхом чисельного розв'язання рівняння (2.5) для $l = 10$ (крива 1) і $l = 1$ (крива 2) [423]

Профілі отримані шляхом чисельного розв'язання рівняння (2.5) для $l = 10$ і $l = 1$, де $l = L \cdot V_f / D_m$, L – розмірна величина області ефективного перемішування, D_m – середньоарифметичне значення пошарових коефіцієнтів іонного перемішування в області перемішування (2.9). Графіки для випадку $l = 0,1$ тільки у незначній мірі відрізняються від випадку $l = 1$ і не наведені на рис. 2.12. Залежність коефіцієнта іонного перемішування від глибини x обрана у вигляді $D(x) = D_{max} \cdot (1 - x/R)$ для кривих 1 і 3, тоді як криві 2 і 4 обчислювалися для випадку однорідного усередненого за областю перемішування коефіцієнта перемішування $D_m = D_{max}/2$ і оціночного значення безрозмірного градієнта $g = -D_m/(R \cdot V_f)$. Залежність $D(x)$ від глибини x є задовільною для розв'язання задачі у випадку низькоенергетичних бомбардуючих іонів, наприклад, у випадку нормального бомбардування

кристала Cu(100) іонами Ag з енергією 100 еВ [246]. Результати чисельних розрахунків, що наведені на рис. 2.12, свідчать, що кількісна відповідність між моделями, заснованими на наведеному вище математичному вигляді коефіцієнта іонного перемішування $D(x)$ і його однорідному в області перемішування наближенні D_m з врахуванням градієнта g , можлива для випадку наближення $l \gg 1$, тоді як у випадку $l \ll 1$ або $l \sim 1$ може бути тільки якісна відповідність.

Лаплас-образ розв'язання рівняння (2.5) з вибраними вище незмінними в усій області перемішування параметрами перемішування D_m і градієнта g для поверхневої концентрації, як функція образу часу має вигляд:

$$C(0, s) = \frac{C_0 \left[(1+k_2) \cdot \exp(k_2 \cdot (l - \zeta_0)) - (1+k_1) \cdot \exp(k_1 \cdot (1 - \zeta_0)) \right]}{(1+k_1) \cdot k_2 \cdot \exp(k_1 \cdot l) - (1+k_2) \cdot k_1 \cdot \exp(k_2 \cdot l)}, \quad (2.19)$$

$$k_{1,2} = -m \pm \sqrt{m^2 + s}, \quad (2.20)$$

де $m = (I + g)/2$, $\zeta_0 = x_0 \cdot V_f/D_m$;

x_0 – початкове положення δ – прошарку в області $0 < x < L$;

C_0 – константа, яка входить у початкову умову профілю концентрації псевдодомішки.

Початкова умова має вигляд:

$$C(x, 0) = C_0 \cdot \delta(x - x_0). \quad (2.21)$$

Використовуючи співвідношення (2.16)–(2.21), отримуємо в загальному випадку з врахуванням g :

$$\bar{\tau} = Z_1 + \frac{Z_3}{2 \cdot m \cdot Z_2}, \quad (2.22)$$

$$Z_1 = \frac{1}{2m} \left[2l - \zeta_0 - \left(1 - \frac{1}{2m} \right) \cdot (\exp(-2ml) - 1) \right], \quad (2.23)$$

$$Z_2 = 1 - (1 - 2 \cdot m) \cdot \exp(-2 \cdot m \cdot (l - \zeta_0)), \quad (2.24)$$

$$Z_3 = \left(1 - \frac{1}{m} \right) \cdot (\exp(-2 \cdot m \cdot (l - \zeta_0)) - 1) - 2 \cdot (l - \zeta_0). \quad (2.25)$$

Поширення δ – подібного псевдопрошарку має наступний вигляд:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4m^2} (5 + \exp(-2ml)) + (1-2m) \frac{l}{2m} \cdot \exp(-2ml) + \frac{(l-\zeta_0)^2}{2} - \\ & \frac{1}{Z_2} \cdot (\exp(-2m(l-\zeta_0)) + 1 + 2 \cdot (l-\zeta_0)) \cdot \left(2mZ_1 + \frac{1}{m} - (l-\zeta_0) \right) - \\ & \frac{1}{Z_2} \cdot \left((\exp(-2m(l-\zeta_0)) + 1) \cdot (1+l-\zeta_0) \cdot \frac{1}{2m} - (l-\zeta_0) \right) \Big\} - \\ & \frac{Z_3}{2m^2 \cdot Z_2} \cdot \left(\frac{Z_3}{2 \cdot Z_2} + 2mZ_1 \right). \end{aligned} \quad (2.26)$$

При $m = l/2$ ($g = 0$), коли градієнт коефіцієнта іонного перемішування не враховується, формули (2.25) і (2.26) переходять у відомі з літератури вирази [259]:

$$\bar{\tau} = 1 + \zeta_0 - \exp(\zeta_0 - l), \quad (2.27)$$

$$\sigma^2 = 3 + 2\zeta_0 - 4\exp(\zeta_0 - l)(1 + l - \zeta_0) + 2\exp(-l) - \exp(2\zeta_0 - 2l). \quad (2.28)$$

Розглянемо різні випадки виразів (2.25) і (2.26). Випадок $l \ll 1$, $|g| \gg 1$. З формул (2.25) і (2.26) для будь-якого початкового положення δ – прошарку отримуємо вирази для поширення і першого «моменту часу»:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{g} \cdot (1 - \exp(-g \cdot l)), \quad (2.29)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{g^2} \cdot (1 - \exp(-g \cdot l))^2. \quad (2.30)$$

Порівнюючи (2.28) і (2.30), у випадку $l \ll 1$ отримуємо, що врахування градієнта коефіцієнта іонного перемішування збільшує поширення σ^2 в ~ 3 рази. Поширення в цьому випадку, як і в роботі [261], не залежить від початкової координати δ – прошарку по відношенню до поверхні, в лінійному наближенні по l .

Випадок $l \gg 1$, $|g| \ll 1$. У цьому випадку можна виділити три якісно різних положення δ – прошарку в матриці:

1) Прошарок знаходиться на межі області перемішування ($R=x_0$):

$$\bar{\tau} = l + g \cdot (1 - l + g \cdot l), \quad (2.31)$$

$$\sigma^2 = 2 \cdot l \cdot (6g^2 - 3g + 1) + 12g - 2. \quad (2.32)$$

2) Прошарок знаходиться на поверхні, яка розпилюється ($x_0 = 0$):

$$\bar{\tau} = 1 - 2g, \quad (2.33)$$

$$\sigma^2 = 3 - 12g. \quad (2.34)$$

3) Прошарок знаходиться в межах області перемішування ($x_0 \sim R/2$):

$$\bar{\tau} = 1 + \zeta_0 + g \cdot (g \cdot \zeta_0 - \zeta_0 - 2), \quad (2.35)$$

$$\sigma^2 = 3 + 2 \cdot \zeta_0 - 6 \cdot g \cdot \zeta_0 - 12g + 12 \cdot g^2 \cdot \zeta_0. \quad (2.36)$$

Використовуючи перехідні формули:

$$\bar{\tau}_p = \frac{D_m}{V_f} \cdot \bar{\tau}, \quad (2.37)$$

$$\sigma_p^2 = \frac{D_m^2}{V_f^2} \sigma^2, \quad (2.38)$$

легко привести формули (2.31)–(2.36) до розмірного еквіваленту, де τ_p і σ_p – розмірні зміщення максимуму і поширення профілю концентрації псевдомаркера.

Як видно з (2.31)–(2.36), врахування градієнта коефіцієнта іонного перемішування в межах даної моделі призводить до зростання поширення пошарового профілю. Істотно значні зміни мають місце у випадку наближення $R \ll D/V_f$, коли роль градієнта іонного перемішування особливо значна. Отримані висновки відповідають результатам обговорення цієї проблеми у [14]. Однак, тільки у випадку наближення $l \gg 1$ аналітичні результати для поширення можуть бути кількісно порівняні з чисельними розв'язаннями рівняння (2.5), тоді як оцінки поширення для випадків наближень $l \sim 1$ і $l \ll 1$ мають тільки якісний характер.

Висновки до глави 2

Показано, що молекулярно-динамічні моделі, незважаючи на низьку швидкість розрахунків, дозволяють отримувати значення параметрів моделей перенесення маси з врахуванням особливостей розвитку каскадів за глибиною кристала. На прикладі сполучення CoSi_2 [283] показано, що збіг теоретичної і експериментальної кінетик відношення концентрацій компонентів у межах дифузійної моделі іонного перемішування дозволяє отримати значення зовнішніх параметрів моделі з точністю, яка не перевищує половину порядку.

Результати двовимірного моделювання напівякісно інтерпретуються для тривимірного простору шляхом множення атомних каскадних потоків на співмножник $k = Y_3/Y_2$, де Y_3 і Y_2 – коефіцієнти тривимірного і двовимірного розпилення. Середня глибина проникнення іона в двовимірний кристал задовільно співпадає з аналогічною величиною, отриманою з даних тривимірних аналітичних моделей (SUSPRE). Пряме порівняння результатів двовимірного і тривимірного молекулярно-динамічного моделювання підтвердило напівякісну достовірність перенормування атомних двовимірних потоків відповідно до тривимірного простору шляхом врахування множника Y_3/Y_2 . При цьому, перенормовані з двовимірних даних, результати переміщень атомів призводять до завищених значень моментів функції атомних переміщень порівняно з результатами реально тривимірного моделювання, що пов'язано з, відносно, більш значною роллю послідовностей зіткнень заміщення атомів у двовимірних кристалах.

Врахування переміщень усіх атомів віддачі, нульове значення енергії зміщення атома з початкового положення в кристалі ($E_{th} = 0$) та енергія припинення моделювання каскаду $E_{st} = 5 \div 10$ еВ відповідають оптимальним параметрам розрахунку стадії зіткнень атомного каскаду в межах квазістабільної молекулярно-динамічної моделі, при яких середня швидкість дрейфу атомів віддачі $V(x)$ являється від'ємною поблизу поверхні (1–3 атомні прошарки) і додатною в глибині кристала.

Порівняння пошарових значень коефіцієнта іонного перемішування на стадії зіткнень каскадів, які розраховувалися з використанням молекулярно-динамічної моделі з чисто відштовхуючим атомним потенціалом Борна – Майєра і комбінованим атомним потенціалом з багаточастинковою частиною притягання [94] показало, що квазістабільні моделі можуть бути використані для розрахунку початкової стадії розвитку каскаду протягом $\sim 0,1\text{--}0,2$ пс. У кількісному відношенні вони дають більш виразну періодичність значень коефіцієнта іонного перемішування з глибиною, а у випадку середньої

швидкості дрейфу атомів віддачі – занижені від’ємні значення поблизу поверхні, що пов’язано з відсутністю генерації ад-атомів, у порівнянні зі стабільними моделями, які використовують багаточастинкові атомні потенціали взаємодії.

Вдосконалення формули Картера – Коллінза – Томпсона [259] для поширення пошарового профілю псевдомаркера (1.37) шляхом оціночного врахування градієнта коефіцієнта іонного перемішування [423] показало, що неоднорідність коефіцієнта іонного перемішування, зокрема лінійно спадаюча від поверхні в глибину мішені координатна залежність коефіцієнта перемішування, призводить до зростання поширення профілю концентрації.

Авторські результати двоетапного моделювання іонного перемішування на основі квазістабільної двовимірної, а також квазістабільної і стабільної тривимірних молекулярно-динамічних моделей на стадії зіткнень атомного каскаду були надруковані в роботах [241–244, 417, 419, 422–424].

ГЛАВА 3. ГЕНЕРАЦІЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛАХ Cu, Ni, Al ТА ДВОШАРОВИХ СИСТЕМАХ Al/Ni І Ni/Al

3.1. Вступ до глави 3

У главі 2 еволюційний розгляд молекулярно-динамічних алгоритмів, починаючи з двовимірних квазістабільних моделей, продовжується розглядом стабільної моделі, яка використовує потенціал з багаточастинковою складовою притягання, що застосовується для моделювання стадії зіткнень атомних каскадів. Стабільність моделей цього типу дозволяє розглядати не тільки стадію зіткнень, а також і подальші стадії розвитку каскаду, як то термічну стадію та стадію охолодження з урахуванням релаксації ґратки, практично, до стану теплової рівноваги з навколишнім середовищем. Ці якості стабільних моделей є важливими для моделювання генерації дефектів та низькоенергетичних переміщень атомів, з яких складається процес утворення радіаційних дефектів. Проблема моделювання ускладнюється також впливом поверхні, яка не тільки змінює енергію зв'язку приповерхневих атомних прошарків, але й призводить до появи ще одного типу дефектів – радіаційно-адсорбованих атомів (ад-атомів), які виникають у разі переходу атомів з перших декількох атомних прошарків на поверхню і збільшують, таким чином, генерацію поверхневих вакансій.

Практично корисним виглядає розгляд генерації дефектів при іонному бомбардуванні в області енергій іонів, близьких до порогу розпилення, що становить менше 100 еВ. Цей інтерес викликано швидким розвитком іонних технологій виготовлення тонких плівок, які, у багатьох випадках, передбачають підвищену температуру матриці в процесі напилювання. Модельний розподіл генерації дефектів з глибиною кристала може бути використаний для розгляду високотемпературного перенесення маси при напилюванні тонких плівок у супроводі іонного бомбардування. З іншого боку, моделювання низькоенергетичного іонного бомбардування має власну цінність, оскільки радіаційна дефектність твердої поверхні при низьких енергіях бомбардування взагалі недостатньо вивчена.

У цій главі розглянуто генерацію точкових дефектів (вакансій, міжвузлових атомів, ад-атомів) при різних температурах від 0 К до 750 К та енергіях бомбардування від 15 еВ до 100 еВ у монокристалах Al, Ni, Cu та двошарових системах Al/Ni і Ni/Al. Моделювання двошарових систем демонструє можливість урахування впливу взаємної розчинності компонентів на генерацію точкових дефектів та на відповідні переміщення атомів у каскадах.

3.2. Генерація точкових дефектів у кристалі Cu при 0 К

3.2.1. *Особливості теоретичної моделі.* У цілому, опис молекулярно-динамічної моделі, що використовується в цій главі, а також у роботі [422], був приведений в п. 2.3.9 разом з багаточастинковим потенціалом [143, 94], який приєднується до відштовхуючого парного потенціалу Борна – Майєра (Гібсон 2). У главі розглянуто також кристал Cu (100), який описується окремим парним потенціалом Морзе (1.14) з константами [119]: $D = 0,48$ еВ, $\alpha = 14,05$ нм⁻¹, $r_0 = 0,2628$ нм. Потенціал Морзе моделювався в інтервалі $0,1988$ нм $< r < 0,4338$ нм. У інтервалі $0,15^\circ$ нм $< r < 0,1988$ нм атомний потенціал взаємодії описувався наступним поліномом:

$$\Phi(r) = C_0 + C_1 \cdot r + C_2 \cdot r^2 + C_3 \cdot r^3, \quad (3.1)$$

де $C_0 = 570,5$ еВ,

$C_1 = -8530$ еВ/нм,

$C_2 = 42800$ еВ/нм²,

$C_3 = -72000$ еВ/нм³.

В області $r < 0,15$ нм до комбінованого потенціалу було приєднано потенціал Борна – Майєра (Гібсон 2).

Еволюція каскадів зіткнень розглядається протягом 4 пс, за виключенням деяких випадків, про які буде сказано окремо. Це дозволяє моделювати систему до стану, коли максимальна кінетична енергія атомів віддачі становить не більше 0,1 еВ при температурі кристала 0 К. Програма містить також алгоритми ідентифікації вакансій та міжвузлових атомів, які були запропоновані в [101]. Відповідно до цих алгоритмів, спочатку проводиться визначення, чи знаходиться атом у сферичній області з радіусом $0,21 \cdot d/2$ і центром у вузлі ґратки. Якщо атома там немає, то розглядаються два випадки: 1) у сферичній області з радіусом $0,74 \cdot d/2$ знаходяться два атоми – реєструється міжвузловий атом типу «гантель»; 2) у області з радіусом $0,74 \cdot d/2$ немає жодного атома – реєструється вакансія. Якщо в цій області знаходиться один атом, то це означає, що ґратка перевернута, але реальних дефектів немає, і з часом атом повертається до свого вузла. Атоми розглядаються як радіаційно-адсорбовані, якщо вони знаходяться над поверхнею кристала в інтервалі відстаней від $d/4$ до 0,5 нм по відношенню до першого атомного прошарку. У підрозділі 3.2 розглядаються випадки нормального бомбардування поверхні Cu (100) іонами Ag і Xe з енергіями 25, 40, 50 і 100 еВ, а також додатково іонами Хе з енергією 15 еВ при початковій температурі кристала 0 К.

3.2.2. *Енергетичні втрати бомбардуючих іонів.* На рис. 3.1 наведені результати моделювання усередненого за кількістю випробувань розподілу пружних втрат енергії бомбардуючих іонів за глибиною кристала [424]. У випадку іонів Хе втрати енергії, що пов'язані з її винесенням з мішені зворотньо-розсіяними іонами зневажливо малі, чому значною мірою сприяє відсутність розсіяних на великі кути іонів у результаті однократних взаємодій іон Хе – атом Cu і, як результат, низький коефіцієнт відбиття іонів ксенону порівняно з іонами аргону (Ar: 0,86 – 50 eВ, 0,9 – 40 eВ, 0,96 – 25 eВ; Хе: 0,17 – 50 eВ, 0,27 – 40 eВ, 0,33 – 25 eВ). Зворотньо-розсіяні іони Ar виносять з кристала Cu, в середньому, ~ 5% початкової кінетичної енергії іонів у інтервалі початкових енергій 25–50 eВ, що збігається з даними молекулярно-динамічного моделювання [425].

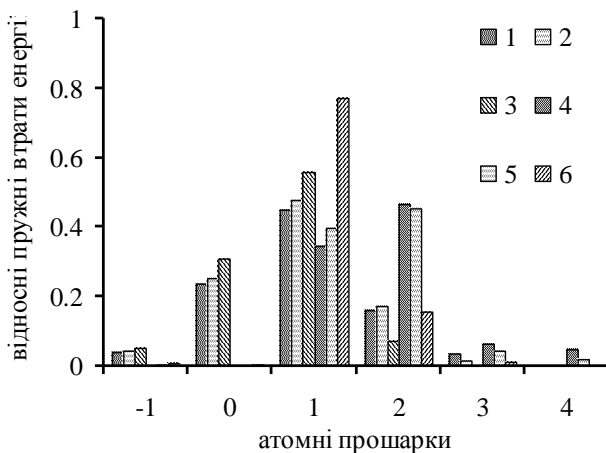


Рис. 3.1. Розподіл пружних втрат енергії бомбардуючих іонів Ar і Хе за глибиною кристала Cu (100) при температурі 0 К. Початкова енергія іонів 25, 40 і 50 eВ. Прошарок 1 є показником енергії, яка залишає кристал разом з відбитими іонами, прошарок 0 – втрати енергії в ад-прошарку, 1 – 50 eВ (Ar), 2 – 40 eВ (Ar), 3 – 25 eВ (Ar), 4 – 50 eВ (Xe), 5 – 40 eВ (Xe), 6 – 25 eВ (Xe) [424]

Істотні розбіжності між втратами кінетичної енергії іонів Ar і Хе спостерігаються в прошарку ад-атомів (ад-прошарок) у області 0,09–0,5 нм над першим атомним прошарком кристала. Як видно з рис. 3.1, іони Ar втрачають у ад-прошарку 25–30% початкової кінетичної енергії

для всіх розглянутих енергій, тоді як втрати енергії іонів Хе у ад-прошарку є неістотними, що пов'язано з великою різницею мас взаємодіючих частинок. У першому прошарку максимальний відсоток пружних втрат енергії у випадку бомбардування міді іонами Хе з енергією 25 еВ складав ~ 76% від початкової енергії, тоді як для енергій 40 еВ і 50 еВ втрачена частка початкової енергії іона була більшою у випадку іонів Аг (див. рис. 3.1). У 2–4-му атомних прошарках домінують пружні втрати енергії у випадку бомбардування міді іонами Хе, які, відповідно до результатів моделювання, показали у багатьох випробуваннях більш глибоке проникнення в кристал міді. При цьому, втрати кінетичної енергії іона Хе при початкових енергіях 40 еВ і 50 еВ мало відрізняються в 1-му і 2-му прошарках, хоч у другому прошарку втрати все ж були більші. Як видно з рис. 3.1, іони Аг втрачають більшу частину своєї енергії в ад-прошарку, 1-му і 2-му прошарках, тоді як іони Хе – у 1-му і 2-му прошарках. Для обох іонів Аг і Хе справедливим є збільшення відсотку енергетичних втрат у ад-прошарку і 1-му прошарку зі зменшенням енергії іонів. Протилежна тенденція спостерігалася для 2, 3 і 4-го атомних прошарків.

На рис. 3.2 наведені результати [246] розрахунків розподілу пружних втрат іонів Аг і Хе у кристалі Cu (100), що описується комбінованим атомним потенціалом. Цей потенціал у одному випадку включає багаточастинковий потенціал [94] (див. п. 2.3.9) а, в іншому – парний потенціал Морзе (1.14) [119] (див. п. 3.1.1). Початкова енергія бомбардуючих іонів дорівнювала 100 еВ. Видно, що іони Хе при такій енергії не відбиваються від поверхні кристала Cu (100). З іншого боку, енергія, що виноситься з кристала відбитими іонами Аг, практично ідентична у випадках багаточастинкового і парного атомних потенціалів і становить, у середньому, ~ 3% від початкової енергії іона. Значна різниця між цими потенціалами спостерігається в ад-прошарку, де пружні втрати у випадку багаточастинкового потенціалу дорівнюють ~ 3%, тоді як у ад-прошарку кристала з парним потенціалом Морзе залишається ~ 19% від початкової енергії. Така значна різниця може мати місце завдяки різній стабільності поверхневих прошарків у моделях з багаточастинковим та парним атомними потенціалами взаємодії. Поверхневий порядок ґратки легше порушити у випадку потенціалу Морзе при підході іона до поверхні кристала. Порушення порядку ґратки призводить до збільшення пружних втрат у приповерхневих атомних прошарках. У цілому, головні пружні втрати в усіх трьох випадках, включаючи випадок окремого відштовхуючого атомного потенціалу, мають місце в першому та другому атомних прошарках.

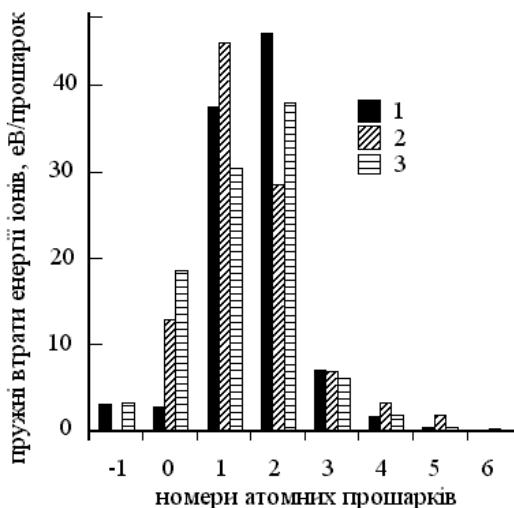


Рис. 3.2. Розподіл пружних втрат енергії бомбардуючих іонів Ag і Хе за глибиною кристала Cu (100) при температурі 0 К [246]. Початкова енергія іонів 100 еВ. Прошарок 1 є показником енергії, яка залишає кристал разом з відбитими іонами, 0 – втрати енергії в ад-прошарку. 1 – Ag, багаточастинковий потенціал [94], 2 – Хе, багаточастинковий потенціал [94], 3 – Ag, потенціал Морзе [119]

3.2.3. *Радіаційні вакансії.* На рис. 3.3 наведені усереднені за кількістю випробувань розподіли генерації вакансій за глибиною в розрахунку на один бомбардуючий іон Ag або Хе при енергіях 50, 40 і 25 еВ. Утворення вакансій при бомбардуванні іонами Хе з енергіями 40 еВ і 50 еВ відбувається в перших трьох атомних прошарках, а з енергією 25 еВ – у перших двох прошарках. У випадку бомбардування іонами Ag з енергіями 40 і 50 еВ, вакансії утворюються в перших двох прошарках і тільки при енергії 25 еВ – у першому атомному прошарку. При бомбардуванні кристала міді іонами Ag, максимум генерації вакансій знаходиться в першому прошарку, тоді як у випадку іонів Хе – у другому при усіх розглянутих енергіях іонів.

Кількість утворених за один модельний каскад вакансій значно зменшується зі зниженням енергії бомбардуючих іонів Ag (0,78 вакансії/іон – 50 еВ, 0,43 вакансії/іон – 40 еВ, 0,12 вакансії/іон – 25 еВ), тоді як у випадку бомбардування міді іонами Хе подібна енергетична залежність генерації вакансій в інтервалі енергій 25–50 еВ отримана не була (0,4 вакансії/іон – 50 еВ, 0,33 вакансії/іон – 40 еВ,

0,39 вакансії/іон – 25 еВ). В останньому випадку зменшення генерації вакансій зі зменшенням енергії іонів є не настільки навальним в аналізованому інтервалі енергій, як для аргону, і статистичні коливання кількості утворених за один каскад вакансій не дозволяють чітко виділити цю залежність. У цілому, при енергіях бомбардування 40 еВ і 50 еВ іони Ag генерують більшу сумарну кількість вакансій по всьому кристалу, ніж іони Хе. Ця закономірність зберігається і для вакансій, утворених у першому прошарку. При енергії бомбардування 25 еВ іонами Ag і Хе була утворена рівна кількість поверхневих вакансій (0,12 вакансій/іон). У свою чергу, іони Хе утворюють більшу кількість об'ємних вакансій, що особливо наочно проявляється при енергії 40 еВ (0,11 і 0,27 вакансій/іон, відповідно, для іонів Ag і Хе).

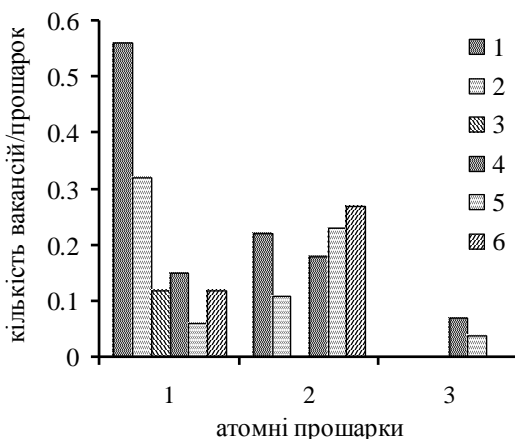


Рис. 3.3. Розподіли генерації вакансій за глибиною кристала Cu (100) в розрахунку на один бомбардуючий іон Ag або Хе при енергіях 50 еВ, 40 еВ і 25 еВ і температурі 0 К. Криві: 1 – 50 еВ (Ar), 2 – 40 еВ (Ar), 3 – 25 еВ (Ar), 4 – 50 еВ (Xe), 5 – 40 еВ (Xe), 6 – 25 еВ (Xe) [424]. Кристал описується багаточастинковим потенціалом [94]

На рис. 3.4–3.6 наведена розрахункова усереднена за кількістю випробувань еволюція генерації вакансій в каскаді при бомбардуванні кристала Cu (100) іонами Ag і Хе з енергією 100 еВ у випадку використання багаточастинкового атомного потенціалу [94] (див., відповідно, рис. 3.4 і 3.5) і парного атомного потенціалу Морзе (див. рис. 3.6), деякі подробиці яких обговорювалися в попередньому підрозділі.

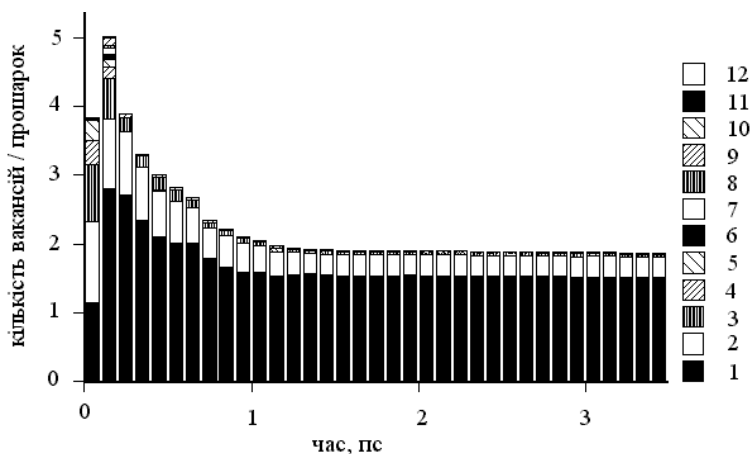


Рис. 3.4. Еволюція генерації вакансій в каскаді при бомбардуванні кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 eV у випадку використання багаточастинкового потенціалу [94]. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошкарам, в яких генеруються вакансії

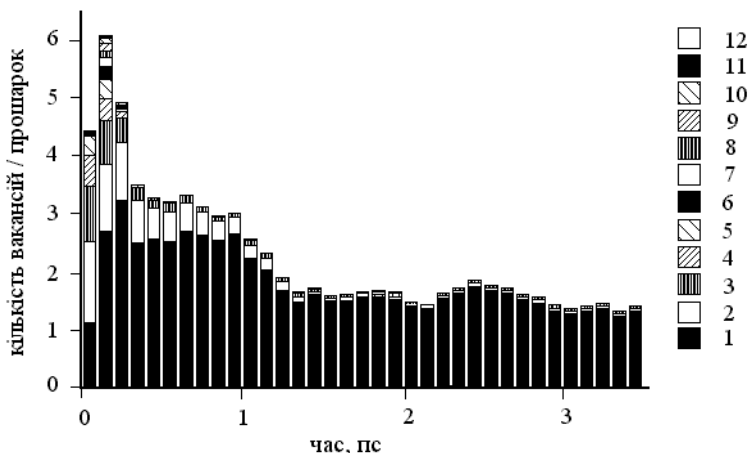


Рис. 3.5. Еволюція генерації вакансій в каскаді при бомбардуванні кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 eV у випадку використання парного потенціалу Морзе [119] при температурі 0 К. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошкарам, в яких генеруються вакансії

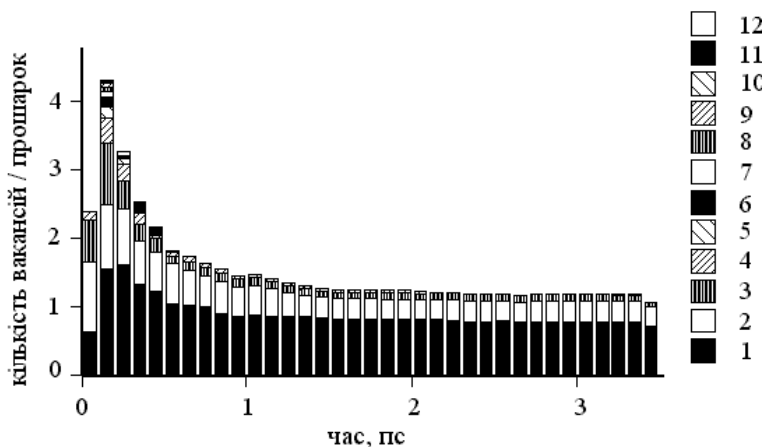


Рис. 3.6. Еволюція генерації вакансій в каскаді при бомбардуванні кристала Cu (100) іонами Хе з енергією 100 еВ у випадку використання багаточастинкового потенціалу [94] і температурі 0 К. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошаркам, в яких генеруються вакансії

Як видно з рис. 3.4, максимум кількості радіаційно-генерованих вакансій досягається після 0,1–0,2 пс, а стабілізація кількості вакансій настає після 1,0–1,2 пс. При цьому, спостерігається, практично, повна незмінність числа вакансій в прошарках після 1,2 пс еволюції каскаду. На стадії зіткнень вакансії знаходяться в 1–9-му атомних прошарках, хоч більшість їх весь час знаходиться в 1–3-му прошарках. На стадії стабілізації кількості дефектів, більшість вакансій розташовуються в першому та другому прошарках, а взагалі стабільні вакансії були зареєстровані в 1–4-му атомних прошарках. На рис. 3.5 представлена кінетика усередненої, за числом випробувань, кількості вакансій в кристалі в процесі розвитку каскаду зіткнень, який був ініційований іоном Хе з енергією 100 еВ. Як і у випадку бомбардування іонами Аг, найбільша кількість вакансій виникає в інтервалі 0,1–0,2 пс з початку каскаду в 1–10-му атомних прошарках, а стабілізація каскаду настає після 1,5 пс. Слід зазначити, що повної стабільності, як це має місце у випадку іонів Аг, у разі іонів Хе не спостерігається і кількість вакансій неістотно змінюється навіть після 3 пс еволюції каскаду. Це пояснюється значно довшим перебуванням іонів Хе у кристалі (0,5–1,5 пс), порівняно з іонами Аг (0,1–0,4 пс) і пов'язаними з цим порушеннями кристалічної ґратки. Слід зазначити, що іони Аг на усіх

стадіях розвитку каскаду генерують більшу кількість вакансій порівняно з іонами Хе при енергії бомбардування 100 еВ, наприклад, на стадії релаксації каскаду – в 1,6 рази. На рис. 3.6 наведена усереднена за числом випробувань кінетика кількості вакансій у випадку бомбардування кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ. При цьому, для опису атомних взаємодій Cu–Cu використовувався парний потенціал Морзе. З потенціалом Морзе кристал демонструє значну нестабільність, яка зберігається навіть після 4 пс еволюції каскаду. При цьому, як і в двох попередніх випадках, максимум числа вакансій з'являється після 0,1–0,2 пс з початку каскаду, а відносна стабілізація настає після 1,3 пс. Після 0,3 пс більша частина вакансій, як і у випадку багаточастинкового потенціалу, знаходиться в першому атомному прошарку. У випадку іонів Хе спостерігається якісно така сама картина, але кількість вакансій в другому прошарку є відносно великою, порівняно з випадком бомбардування кристала іонами Ag. На початковій стадії після 0,1–0,3 пс еволюції каскаду кількість вакансій у випадку потенціалу Морзе є значно більшою порівняно з випадком багаточастинкового атомного потенціалу, тоді як на стадії релаксації кристал з багаточастинковим потенціалом демонструє в 1,4 рази більшу кількість генерованих вакансій. У цілому, спроба використання парного потенціалу Морзе виглядає невдалою для розв'язання таких задач, оскільки на стадії релаксації каскаду цей потенціал призводить до нестабільності кристала.

3.2.4. *Міжвузлові та радіаційно-адсорбовані атоми.* На рис. 3.7 (а,б) наведено залежності розподілу генерації міжвузлових атомів від глибини кристала, а також кількість адсорбованих і розпиленних атомів при енергіях іонів Ag (а) і Хе (б) 25, 40 та 50 еВ [424]. Результати молекулярно-динамічного моделювання показують, що при бомбардуванні кристала міді іонами Ag кількість міжвузлових атомів зменшується зі зниженням енергії, тоді як у випадку іонів Хе спостерігається деяке зростання їх кількості в досліджуваному інтервалі енергій бомбардування. Так, при енергії 50 еВ кількість міжвузлових атомів була більшою у випадку іонів Ag (0,33 атома/іон – Ag; 0,21 атома/іон – Хе), тоді як при енергії 40 еВ іони Хе утворюють трохи більшу кількість міжвузлових атомів (0,15 атома/іон – Ag; 0,25 атома/іон – Хе), хоч це зростання може бути результатом статистичної флуктуації. Як видно з рис. 3.7 (а), у середньому, кількість ад-атомів, що генеруються іонами Ag за один каскад, зменшується зі зменшенням енергії іона, тоді, як видно з рис. 3.7 (б), у випадку іонів Хе, аналогічна залежність для ад-атомів, як і для вакансій, не була виявлена. При

бомбардуванні міді іонами Ar з енергією 25 еВ, кількість поверхневих вакансій відповідає кількості ад-атомів, що утворилися. При цьому, не було зареєстровано жодного випадку утворення міжвузлових атомів, тоді як для іонів Хе при тій самій енергії, міжвузлові атоми були зареєстровані в 4–8-му атомних прошарках (0,27 атома/іон).

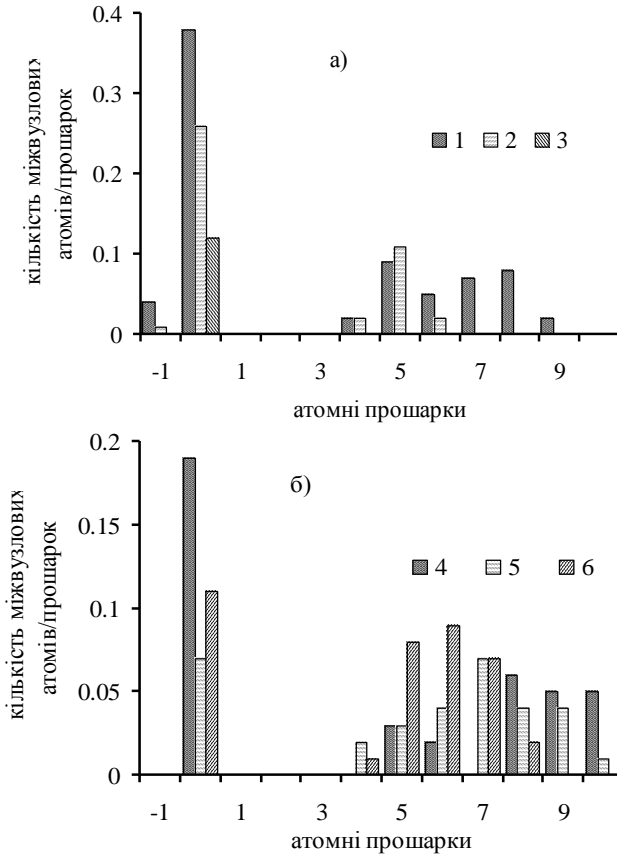


Рис. 3.7. Розподіл генерації міжвузлових атомів за глибиною кристала Cu (100), а також кількість адсорбованих і розпиленних атомів при енергіях іонів а) Ar і б) Хе 25, 40 та 50 еВ і температурі 0 К. Прошарок 1 є розпилені атоми, 0 – прошарок ад-атомів. Криві: 1 – 50 еВ (Ar), 2 – 40 еВ (Ar), 3 – 25 еВ (Ar), 4 – 50 еВ (Xe), 5 – 40 еВ (Xe), 6 – 25 еВ (Xe) [424]. Кристал описується багаточастинковим потенціалом [94]

У цілому ж, кількість утворених іонами Ag ад-атомів більше, ніж кількість ад-атомів, утворених іонами Xe, що пов'язано зі значними пружними втратами кінетичної енергії іонами аргону в першому про шарку при енергіях 40 еВ і 50 еВ. Зі зниженням початкової енергії іонів до 25 еВ, розходження в кількості утворених іонами Ag і Xe ад-атомів стає незначним, що, очевидно, є наслідком значних втрат кінетичної енергії іонами Xe у першому про шарку ($\sim 19,3$ еВ при початковій енергії 25 еВ). Варто підкреслити, що в усіх аналізованих випадках точність виконання закону збереження речовини відносно кількості дефектів різних типів була не гірша за 96%.

У роботі [426] були розглянуті результати молекулярно-динамічного моделювання утворення ад-атомів на поверхні кристала Pt (111) під дією іонів трьох типів, а саме Ne, Ar, Xe з різними енергіями (> 100 еВ). При енергії 100 еВ, незважаючи на незначну різницю між результатами для різних типів іонів, спостерігається зменшення утворення ад-атомів із зростанням розходження між масами атомів мішені і бомбардуючих іонів. Такі ж результати були отримані в роботі [427] з використанням тунельного мікроскопа для Pt і тих самих типів іонів у інтервалі енергій від 40 еВ до 5 кеВ. Так, при енергії іонів Ne і Ar 40 еВ, кількість утворених ад-атомів відрізнялася незначним чином (0,01–0,02 ад-атома/іон), тоді як у випадку іонів Xe з тією ж енергією, кількість ад-атомів була $\sim 0,1$ ад-атома/іон. Таким чином, для всіх результатів, що обговорюються, включаючи дані [426–428], спостерігається тенденція зменшення кількості утворених ад-атомів із зростанням розходження між атомними масами іонів, що бомбардують, і атомів мішені.

На рис. 3.8–3.10 наведені розрахункові дані кінетики генерації міжвузлових атомів бомбардуючими іонами Ag і Xe з енергією 100 еВ у випадках використання багаточастинкового атомного потенціалу [94] і парного потенціалу Морзе (у випадку іонів Ar) при температурі кристала 0°К. На всіх трьох рисунках максимальні значення кількості міжвузлових атомів, які лише незначним чином відрізняються одна від одної, з'являються в інтервалі часу 0,1–0,2 пс з початку каскаду зіткнень. Усі три випадки демонструють відсутність повної стабілізації системи навіть після 3,5 пс еволюції каскаду, хоч у всіх випадках стадія великої кількості міжвузлових атомів закінчується після $\sim 0,6$ пс еволюції каскаду. При цьому, кінцеві значення кількості міжвузлових атомів для обох атомних потенціалів у випадку бомбардування іонами Ag мало відрізняються одне від одної, тоді як у випадку бомбардування іонами Xe кількість міжвузлових атомів була в 1,4 рази більше. У всіх випадках на стадії релаксації каскаду міжвузлові атоми залишаються

лише в 6–10-му атомних прошарках. Таким чином, існує просторовий розподіл між стабільними міжвузловими атомами і вакансіями за таких умов бомбардування. Цей ефект спостерігається і на інших матеріалах, наприклад, в однокомпонентних кристалах Ni та Al.

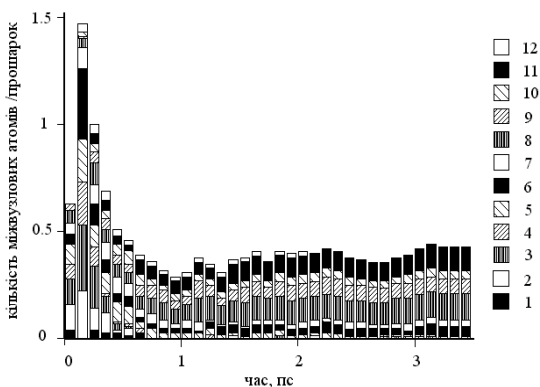


Рис. 3.8. Кінетика генерації міжвузлових атомів у кристалі Cu (100) бомбардуючими іонами Ag з енергією 100 еВ при використанні багаточастинкового потенціалу [94] і температурі кристала 0 К. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошаркам, у яких генеруються міжвузлові атоми

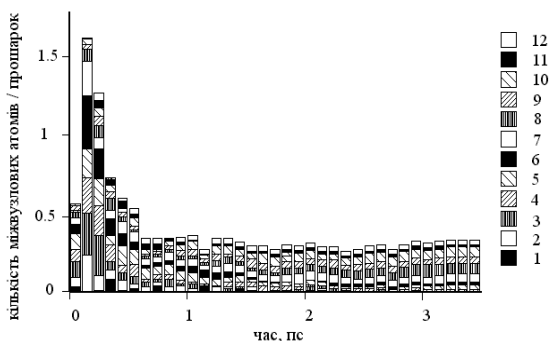


Рис. 3.9. Кінетика генерації міжвузлових атомів у кристалі Cu (100) бомбардуючими іонами Ag з енергією 100 еВ при використанні парного потенціалу Морзе [119] і температурі кристала 0 К. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошаркам, у яких генеруються міжвузлові атоми

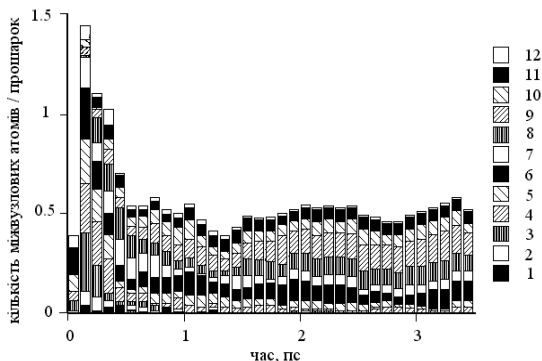


Рис. 3.10. Кінетика генерації міжвузлових атомів у кристалі Cu (100) бомбардуєчими іонами Хе з енергією 100 еВ при використанні багаточастинкового потенціалу [94] і температурі кристала 0 К. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошаркам, у яких генеруються міжвузлові атоми

На рис. 3.11–3.13 наведені кінетики ад-атомів та розпиленних атомів у випадку бомбардування іонами Ag і Хе з енергією 100 еВ. Для іонів Ag кінетика ад-атомів на поверхні кристала, який моделюється багаточастинковим потенціалом або парним потенціалом Морзе (див. рис. 3.11 та 3.12), є, практично, незмінною. Максимуми кількості генерованих ад-атомів у цих двох випадках мають місце після $\sim 0,2\text{--}0,25$ пс еволюції каскаду, а стабілізація їх кількості досягається після 1,3 пс. У випадку потенціалу Морзе коефіцієнт розпилення є значно більшим, ніж у випадку багаточастинкового потенціалу. Для іонів Хе спостерігаються два максимуми числа ад-атомів при 0,25 пс і 1,0 пс з наступним виходом до стану стабільної конфігурації атомів на поверхні кристала після 1,3 пс. Обидва максимуми мають, практично, однакове значення. Коефіцієнт розпилення кристала Cu іонами Хе був менше за 0,1 атомів/іон, а відповідна кількість стабільних ад-атомів, практично, в два рази менша, ніж кількість ад-атомів при бомбардуванні іонами Ag. Два максимуми числа ад-атомів у випадку Хе є наслідком двох різних механізмів генерації ад-атомів у міді. Перший механізм – це атомні переміщення на високоенергетичній стадії зіткнень під час входження іона в кристал, тоді як другий – атомні переміщення на стадії виходу іона Хе з кристала або його переміщення до поверхні, що розпилюється. При цьому, зокрема, можуть виникати послідовності атомних зіткнень заміщення, що переміщують атоми у напрямку з глибини кристала до його поверхні.

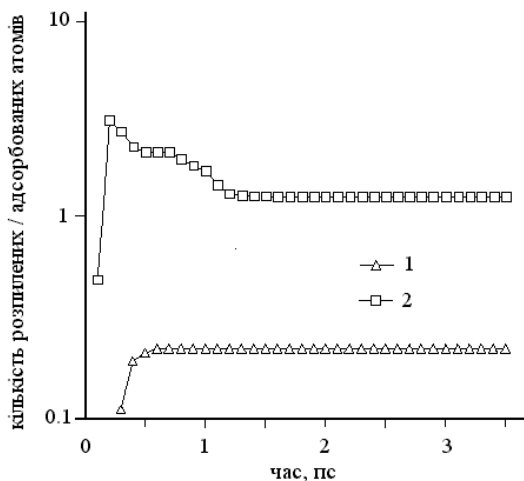


Рис. 3.11. Кінетика генерації розпиленних (крива 1) та радіаційно-адсорбованих (крива 2) атомів при бомбардуванні кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ і використанні багаточастинкового потенціалу [94]. Температура кристала 0 К

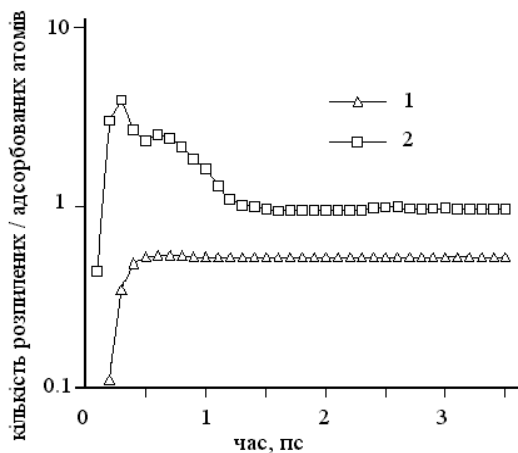


Рис. 3.12. Кінетика генерації розпиленних (крива 1) та радіаційно-адсорбованих (крива 2) атомів у випадку бомбардування кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ для потенціалу Морзе [98] і температурі кристала 0 К

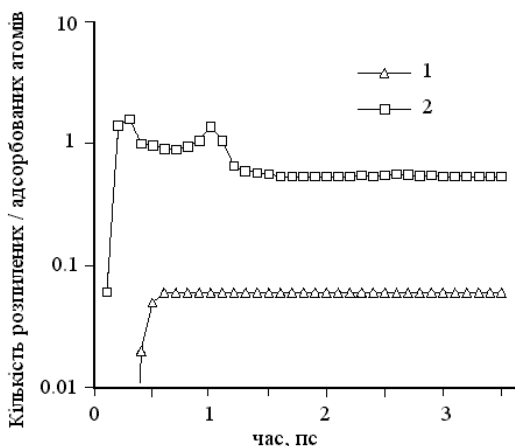


Рис. 3.13. Кінетика генерації розпиленних (крива 1) та радіаційно-адсорбованих (крива 2) атомів у випадку бомбардування кристала Cu (100) іонами Хе з енергією 100 еВ при використанні багаточастинкового потенціалу [94] і температурі кристала 0 К

Це припущення підтримується даними про вихід бомбардуючих іонів з кристала. У випадку іонів Ag з початковою енергією 100 еВ після 4 пс еволюції каскаду в кристалі залишається тільки 25%–30% бомбардуючих частинок незалежно від потенціалу взаємодії атомів кристала (багаточастинковий [94] або Морзе), тоді як у випадку іонів Хе у кристалі залишається ~ 95% бомбардуючих частинок. При цьому, максимуми імплантованих іонів Ag для обох потенціалів знаходяться в третьому атомному прошарку, тоді як максимум кількості імплантованих іонів Хе завдяки великій атомній масі – в п'ятому прошарку. Це також може призвести до виникнення ад-атома в кінці послідовності атомних зіткнень заміщення. Подібна форма кінетики кількості ад-атомів з двома максимумами зустрічається також при бомбардуванні кристала Ni іонами Хе з енергіями 25–50 еВ, хоч іон Хе і не проникає в кристал Ni глибше першого атомного прошарку.

3.2.5. *Дисипація енергії в модельному кристалі.* Загальна енергія в системі, що розглядається, не зберігається завдяки дисипативному прошарку на бічних сторонах та дні кристала (див. п. 1.4.1, формула (1.12)). Таким чином, кінетична енергія, що переноситься до кристала бомбардуючим іоном, поглинається з часом розвитку каскаду на його межах. На рис. 3.14 наведена залежність повної, кінетичної та

потенціальної енергії кристала від часу розвитку каскаду при падінні на поверхню кристала іона Ag з енергією 100 еВ.

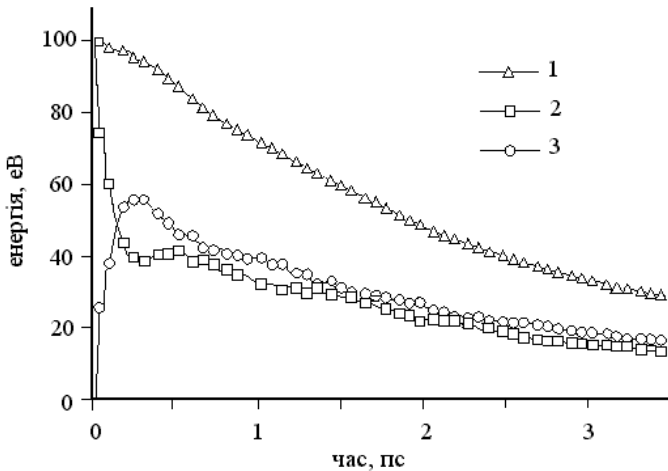


Рис. 3.14. Залежність загальної (крива 1), кінетичної (крива 2) та потенціальної (крива 3) енергій кристала від часу розвитку каскаду у випадку падіння іона Ag з енергією 100 еВ на поверхню Cu (100). Температура кристала 0 К

Великі коливання кінетичної та потенціальної енергій (початкова потенціальна енергія системи дорівнювала нулю) мають місце в перші 0,5 пс розвитку каскаду, однак незначні коливання відбуваються протягом 3 пс. При цьому, потенціальна і кінетична енергії коливаються в протифазі, що є в даних умовах проявом перенесення енергії від центру каскаду до межі кристала послідовними заміщеннями атомів кристалічної ґратки. На рисунку видно чотири коливання обох типів енергій протягом $\sim 0,75$ пс кожне. Якщо вважати, що найбільш ймовірними напрямками перенесення енергії у кристалі являються напрямки $[100]$ і $\langle 110 \rangle$, то середня швидкість такого механізму становить $\sim 350\text{--}400$ м/с. Для більшого часу еволюції каскаду, потенціальна і кінетична енергії приблизно дорівнюють одна одній і неперервно зменшуються з часом. Після 3 пс більше як 60% початкової енергії поглинається дисипативним прошарком на межах кристала. З іншого боку, необхідно 4–8 актів заміщення для того, щоб досягти межі кристала в залежності від напрямку розповсюдження атомної послідовності заміщення. Отже, можна стверджувати, що поряд з

механізмом перенесення енергії по атомних заміщеннях, існує ще один ґратковий механізм перенесення енергії каскаду. Цим механізмом можуть бути послідовності атомних зіткнень, але не заміщення, а тільки зміщення атомів, що спрямовані від каскаду до меж кристала.

Порівняно з розрахунками [101] було встановлено для обох потенціалів зі складовою притягання, що потенціальна енергія після найактивнішої фази стадії зіткнень залишається трохи більшою, ніж кінетична і не залежить якісно від типу іона. Додаткові модельні дослідження показали, що стабільні точкові дефекти, що залишаються в кристалі після закінчення атомного каскаду і не беруть участі в енергетичному обміні між потенціальною та кінетичною енергіями, є причиною цього ефекту. Стабільні дефекти, що залишилися в кристалі після закінчення каскаду призводять до підвищення потенціальної енергії системи. У результаті, баланс між потенціальною та кінетичною енергіями порушується. Слід зазначити, що кількісні та якісні показники дисипації енергії в атомному каскаді є практично ідентичними для іонів Ag і Xe, що свідчить про незалежність цього процесу від типу іона. У випадку атомного потенціалу Морзе різниця між потенціальною і кінетичною енергіями є ще більшою і досягає 10 еВ на стадії релаксації каскаду. Однак, парний потенціал Морзе демонструє погане збереження загальної енергії на початку розвитку каскаду. Так, у момент часу $\sim 0,25$ пс з початку каскаду була зафіксована похибка, оскільки загальна енергія системи дорівнювала ~ 130 еВ при початковій енергії іона 100 еВ. Згодом, після $\sim 0,4$ пс це порушення практично зникає. Очевидно, цей нефізичний результат є наслідком значного впливу стрибка потенціалу взаємодії при значенні аргументу потенціалу в точці R_{cutoff} , яка являється радіусом обривання. При великих енергіях значна кількість атомів зміщується на великі відстані від своїх положень рівноваги, що збільшує вплив стрибка потенціалу на відстані, що дорівнює радіусу обривання атомного потенціалу. При цьому, покладання нуля значення парного потенціалу на його кінці ($R = R_{cutoff}$) не дає бажаного результату, оскільки введення додаткової функціональної залежності не має під собою ніяких фізичних підстав. Багаточастинкові атомні потенціали менш чутливі до значення радіусу обривання, тому порушення закону збереження енергії на початку каскаду практично не відчувається. У цілому ж, кінетична енергія є більшою, ніж потенціальна тільки на початку каскаду в перші 0,25 пс. Аналогічне поглинання енергії на межах модельного кристала, що була привнесена бомбардуючим іоном, програмується також і у випадках, де розглядаються кристали Al, Ni, а також двошарові кристали Al/Ni та Ni/Al.

3.3. Генерація точкових дефектів у кристалах Ni та Al при 0 К

3.3.1. *Особливості моделі.* Для опису атом-атомних взаємодій в кристалах Ni та Al використовувався багаточастинковий (tight-binding) потенціал [143], для якого потенціальна енергія кристала записується у неадитивному за кількістю атомів вигляді (1.22), де складова притягання представляється, як сума квадратних коренів від n_i , що пропорціональні електронним густинам (див. п. 1.4.3). У роботі [429] було запропоновано:

$$n_i = \sum_{j=1}^N \Phi(x_{ij}), \quad (3.2)$$

де $\Phi(x_{ij})$ – парна кубічна функція для атомів i і j , була запропонована в [430]:

$$\Phi(x) = \sum_{k=1}^2 A_k \cdot H(R_k - x) \cdot (R_k - x)^3, \quad (3.3)$$

де $H(R-x)$ – «ступінчаста» функція Гевісайда.

Для кристала Ni константи $A_1 = 0,6574 \text{ eV}/\text{\AA}^3$, $A_2 = -2,1486 \text{ eV}/\text{\AA}^3$, $R_1 = 4,3169 \text{ \AA}$, $R_2 = 3,2773 \text{ \AA}$, а для кристала Al константи $A_1 = 0,28936 \text{ eV}/\text{\AA}^3$, $A_2 = 0,07466 \text{ eV}/\text{\AA}^3$, $R_1 = 4,86 \text{ \AA}$, $R_2 = 3,767 \text{ \AA}$. Відштовхуюча складова в (1.22) також була записана у вигляді кубічної функції з функцією Гевісайда:

$$V(x) = \sum_{k=1}^m a_k \cdot H(r_k - x) \cdot (r_k - x)^3, \quad (3.4)$$

де $m = 6$, а відповідні константи для Ni та Al наведені в таблиці 3.1.

Відштовхуючий ЗБЛ потенціал (1.16)–(1.18) з радіусом екранування (1.20) використовувався для опису взаємодії атомів при значних енергіях (більше декількох еВ). Екрануюча функція (1.17) була у вигляді:

$$\Phi(y) = 0.1818 \exp(-3.2 y) + 0.5099 \exp(-0.9423 y) + 0.2802 \exp(-0.4029 y) + 0.0281 \exp(-0.2016 y). \quad (3.5)$$

ЗБЛ потенціал приєднувався до багаточастинкового потенціалу [429, 430] через чотирьохпараметричну функцію зв'язку в інтервалі $x_1 < x < x_2$:

$$\Theta(x) = \exp(B_0 + B_1x + B_2x^2 + B_3x^3), \quad (3.6)$$

де $x_1 = 0,61 \text{ \AA}$, $x_2 = 1,465 \text{ \AA}$ для кристала Ni, і $x_1 = 0,61 \text{ \AA}$, $x_2 = 1,45 \text{ \AA}$ для кристала Al. Значення параметрів функції зв'язку (3.6) $B_i (i = 0 - 3)$ представлені в таблиці 3.2.

Таблиця 3.1 Параметри потенціалу (3.4) [429, 430] для Ni та Al

Параметри	Ni	Al
$a_1, (\text{eV/\AA}^3)$	0,752	0,4856
a_2	-1,1733	-1,1224
a_3	0,8959	2,1077
a_4	-2,0157	-1,6194
a_5	2,9966	0,4432
a_6	4,5701	1,5287
$r_1, (\text{\AA})$	4,317	4,9613
r_2	4,236	4,7790
r_3	3,8764	4,4145
r_4	3,1716	4,2525
r_5	2,8897	3,6450
r_6	2,4316	2,8633

Таблиця 3.2. Параметри функції зв'язку [429, 430]: Ni, Al та Al-Ni

Параметри	Ni	Al	Al-Ni
B_0	7,6583	7,6781	8,013
$B_1, (\text{\AA}^{-1})$	3,3339	-1,5826	-0,493
$B_2, (\text{\AA}^{-2})$	-10,6003	-4,6341	-5,933
$B_3, (\text{\AA}^{-3})$	3,9009	2,1076	2,389

Для опису рівнянь руху атомів межового прошарку (1.12), де поглинається енергія, що була принесена іоном, для кристала Ni використовувався демпінговий коефіцієнт $\gamma = 8,2 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, а для кристала Al $\gamma = 8,95 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$. Стала ґратки d кристала Ni дорівнювала 0,352 нм, а кристала Al – 0,405 нм. Для ідентифікації точкових дефектів був використаний алгоритм Урбасека і Каретти [101], який докладно описаний в п. 3.1.1. У роботі використовувалися попередньо стабілізовані при 0 К кристали без втручання бомбардуючого іона, кінетична енергія атомів яких не підіймалася вище 0,1 К за температурною шкалою. Було виконано 200 модельних випробувань з різними початковими координатами бомбардуючих іонів для ГЦК площини (100) у межах елементарної області бомбардування, опис якої наводиться, наприклад, в [119].

3.3.2. *Розпилення кристалів Ni та Al іонами Ar.* Модельний коефіцієнт розпилення кристала Ni (100) іонами Ar з енергією 100 eV при температурі 0 K дорівнював 0,25 атомів/іон. Це значення непогано відповідає експериментальному коефіцієнту розпилення для полікристала Ni, який дорівнює 0,28 атомів/іон [2, 22]. Для кристала Al реалістичний коефіцієнт розпилення вдалося отримати тільки у випадку, коли в молекулярно-динамічну програму був включений блок, що випадковим чином встановлював початкову відстань іона від поверхні модельного кристала так, що час руху іона до поверхні дорівнював 1–2 тепловим коливанням атома Al в кристалічній ґратці при кімнатній температурі, що давало можливість позбавитися впливу мікроскопічної миттєвої конфігурації поверхневих атомів, які в усіх випадках відрізняються від об'ємних атомів більшою амплітудою коливань. У випадку кристала Al вплив миттєвих конфігурацій поверхневих атомів був особливо відчутним. Враховуючи низький коефіцієнт розпилення полікристала Al при таких умовах бомбардування [2], було виконане додаткове моделювання: 500 випробувань моделювання каскаду зіткнень протягом 1 пс кожний, що було достатньо для накопичення достовірної статистики розпилення і каскадних переміщень атомів. Таким шляхом був отриманий коефіцієнт розпилення для Al, який дорівнював 0,038 атомів/іон. Модельний коефіцієнт розпилення все ж значно поступається експериментальним даним – 0,11 атомів/іон [2, 22], що однак може бути не тільки моделювання, але й експерименту. Модельні результати коефіцієнта розпилення кристала Ni відрізняються від кристала Al високим рівнем стабільності і майже не змінюються при введенні до програми блоку обчислення початкової відстані іона від поверхні кристала за законом випадкових чисел у межах часу руху іона до поверхні кристала, що складав 1–2 теплових коливань атомів при кімнатній температурі. Про це більш детально буде викладено в наступних розділах, де розглядається вплив температури кристала на результати моделювання генерації дефектів і розпилення.

3.3.3. *Пружні втрати енергії іона в Ni та Al.* На рис. 3.15 представлені результати молекулярно-динамічного моделювання розподілу за глибиною енергетичних пружних втрат іонів Ar з початковою енергією 100 eV в монокристалах Ni і Al. Максимум енергетичних втрат у модельному кристалі Ni знаходився в першому атомному прошарку, тоді як у кристалі Al максимум енергетичних втрат був розташований в другому прошарку. Незважаючи на те, що коефіцієнт відбиття іонів Ar від поверхні Ni був ~ 1 , тільки 7% від

початкової енергії іона залишають кристал разом з відбитими іонами. Для іонів Ag, що падають на кристал Al, модельний коефіцієнт відбиття дорівнював 0,8. При цьому, менше ніж 2% початкової енергії іонів залишали кристал Al разом з відбитими іонами. Обидва результати оціночно співпадають з аналогічними розрахунками [425], де моделювався кристал Cu під дією бомбардуючих іонів Ne, Ag і Xe з енергіями 5–400 еВ. Згідно з даними [425], відбиті іони Ag з початковою енергією 100 еВ виносять з кристала ~ 3–4% початкової енергії при температурі кристала 0 К.

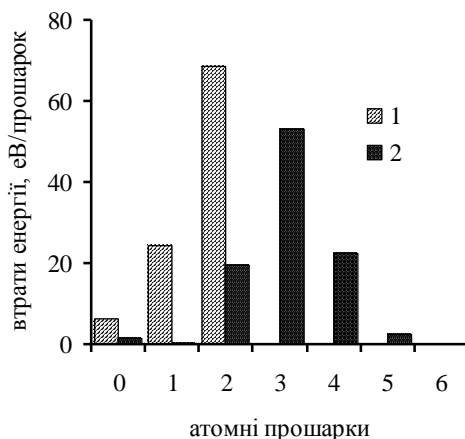


Рис. 3.15. Розподіл енергетичних пружних втрат іонів Ag з початковою енергією 100 еВ за глибиною кристалів Ni (100) (діаграма 1) і Al (100) (діаграма 2) при температурі 0 К [311], 0 – прошарок ад-атомів. Використовується багаточастинковий потенціал [430]

Як видно з рис. 3.15, практично вся енергія іонів Ag виділяється в першому прошарку, якщо враховувати, що втрати енергії в ад-прошарку реально теж належать до першого атомного прошарку. У модельному кристалі Al більша частина енергії розподіляється в 1–5-му атомних прошарках. Значно глибший розподіл енергетичних втрат іонів Ag у кристалі Al порівняно з модельними кристалами Ni і Cu може бути частково пояснений каналуванням іонів Ag у напрямках $\langle 110 \rangle$ навколо напрямку $[100]$ в більш відкритому кристалі Al порівняно з кристалами Ni та Cu [431].

Іншою причиною різниці між коефіцієнтами відбиття іонів від кристалів Al і Ni може бути те, що значення атомної маси Ag розташоване між значеннями атомних мас Al і Ni (або Cu). Максимальний фактор передачі енергії $k = 4 m_1 m_2 / (m_1 + m_2)^2$ між частинками з масами m_1 і m_2 незначним чином відрізняється для пар Ag–Al і Ag–Ni (або Cu), але зворотне розсіювання іонів на великі кути за одне зіткнення з атомами мішені може відбуватися тільки для пари Ag–Ni (або Ag–Cu), що також зменшує глибину проникнення іонів Ag у модельні кристали Ni та Cu порівняно з кристалом Al за таких умов.

Різниця розподілів втрат енергії за глибиною в кристалах Ni і Cu з одного боку та Al з іншого частково пояснює значну різницю коефіцієнтів розпилення відповідних кристалів, незважаючи на те, що поверхнева енергія в кристалі Ni значно більша, ніж в кристалі Al. Поверхневі енергії зв'язку в кристалах Cu і Al відрізняються неістотно. Для атомних потенціалів, що використовувалися в цій моделі, поверхнева енергія зв'язку (різниця енергій ідеального (100) кристала і кристала з одним виключеним поверхневим атомом без урахування релаксації модельного кристала) для поверхні Ni (100) становить 5,19 еВ, тоді як для Al (100) – 3,74 еВ, що знаходиться в задовільній відповідності до даних, наведених у роботі [2].

3.3.4. *Дефекти: ад-атоми, вакансії та міжвузлові атоми.* Середні значення кількості стабільних точкових дефектів після 4 пс релаксації каскаду, ініційованого іонами Ag з енергією 100 еВ, наведені в таблиці 3.3. Закон збереження маси виконувався з похибкою не більше ніж 1,5% для обох кристалів. Похибка виникала з вини, як правило, ад-атомів і міжвузлових атомів, які у багатьох випадках демонструють нестабільність кількості та локалізації.

Як видно з наведених даних, кількості ад-атомів N_{ad} , вакансій N_v та міжвузлових атомів N_m у кристалі Al, практично, в два рази більші за кількості відповідних дефектів у кристалі Ni.

Таблиця 3.3 Генерація дефектів іонами Ag з енергією 100 еВ

Кристали	γ	N_m	N_v	N_{ad}
Ni	0,25	0,58	1,86 (1,61) ^a	1,03 (1,03) ^b
Al	0.038	1.17	3.08 (1,45) ^a	1.94 (1,79) ^b

Примітки: 1.(^a) – поверхневі вакансії,
2.(^b) – ад-атоми, що народжуються з другого про шарку.

Кількість точкових дефектів у модельному кристалі Ni непогано збігається з кількістю аналогічних дефектів у модельному кристалі

Cu (100) при температурі 0 К і аналогічних умовах бомбардування [246, 247]. Ці результати корелюють з розрахунковими енергіями формування вакансій (0,71 еВ, 1,42 еВ, 1,21 еВ) та міжвузлових атомів (2,71 еВ, 4,85 еВ, 4,01 еВ для випадку міжвузлових пар атомів типу «гантель») [429], а також корелюють з пороговими енергіями зміщення E_d [418, 432], що наведені в таблиці 3.4. В усіх випадках ці енергії для кристалів Ni і Cu відповідають одна одній і значно відрізняються від енергій для кристала Al, в якому вони мають відчутно менші значення.

Таблиця 3.4 Порогові енергії зміщення E_d (еВ) для різних напрямків у кристалах Cu, Ni, Al [418, 432]

Елементи	[100]	[110]	[111]
Ni	33	38	56
Al	17	6	23
Cu	20	33	38

Усі ад-атоми Ni народжуються з атомів першого атомного прошарку кристала Ni, тоді як у кристалі Al $\sim 8\%$ ад-атомів народжуються з атомів другого атомного прошарку. Дані генерації дефектів, що наведені в таблиці 3.3 – кінцеві значення, які мала система після 4 пс еволюції каскаду. На ранніх стадіях каскадів зіткнень (0,1–0,3 пс) кількості ад-атомів були у три рази більші, ніж кількості стабільних ад-атомів як у модельному кристалі Ni, так і в кристалі Al. Подібні моделювання у випадку бомбардування кристала Pt (111) іонами Xe з енергією 100 еВ [426] показали, що $\sim 50\%$ ад-атомів відпалюються з часом розвитку каскаду. Час релаксації ад-атомів ~ 1 пс, що значно більше, ніж характерний час розпилення (0,2–0,3 пс) для бомбардування цих кристалів іонами Ag з енергією 100 еВ [246, 426].

Релаксація міжвузлових атомів протікає за час $\sim 2,2$ – $2,5$ пс в обох кристалах, але у випадку Al невеликі коливання концентрації міжвузлових атомів з часом мають місце навіть після 3 пс. Оцінки показують, що тільки половина міжвузлових атомів, які були генеровані на початку каскаду, залишаються в кристалі на своїх місцях (у міжвузловинах) після 4 пс. Кінцеві розподіли генерації міжвузлових атомів за глибиною в Ni та Al були подібними і показані на рис. 3.16 (а). Ці розподіли також подібні до розподілів міжвузлових атомів у Cu (100) за аналогічних умов бомбардування [101, 246]. Стабільні міжвузлові атоми локалізуються в 4–12-му атомних прошарках для обох кристалів Al і Ni. При цьому, максимальні значення генерації міжвузлових атомів у обох кристалах знаходяться в 9-му атомному прошарку. На початку розвитку каскаду міжвузлові атоми виникають також і в перших

чотирьох атомних прошарках, але після ~ 2 пс еволюції каскаду вони рекомбінують з вакансіями або стають ад-атомами.

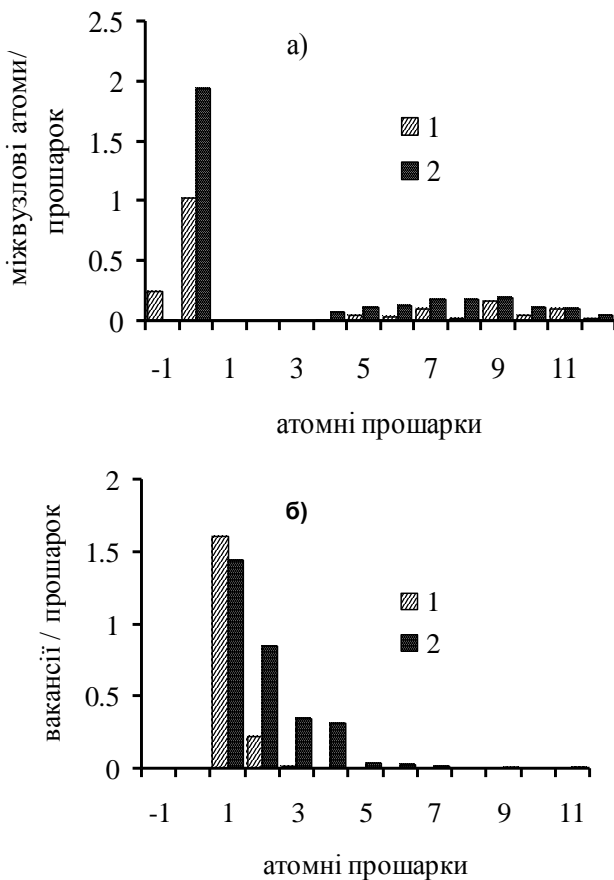


Рис. 3.16. Розподіли генерації а) стабільних міжвузлових атомів і б) вакансій за глибиною кристалів Ni (100) (діаграма 1) та Al (100) (діаграма 2) при температурі 0 К у випадку бомбардування іонами Ag з енергією 100 еВ [311], -1 – розпилені атоми, 0 – прошарок ад-атомів. Використовується багаточастинковий потенціал [430]

Навпаки, кінцеві розподіли вакансій в кристалах Al та Ni після 4 пс еволюції каскаду суттєво відрізняються між собою, що видно з рис.

3.16 (б). Стабільні радіаційні вакансії в модельному кристалі Ni розташовуються в перших трьох атомних прошарках у непоганій відповідності з розподілом стабільних вакансій в кристалі Cu (100) [244, 423], тоді як стабільні вакансії в кристалі Al після закінчення каскаду залишаються в 1–7-му атомних прошарках. При цьому, більшість вакансій в кристалі Al залишається тільки у 1–4-му атомних прошарках. Практично 90% всіх вакансій в кристалі Ni залишається в першому атомному прошарку, тоді як у кристалі Al тільки ~ 50% стабільних вакансій були розташовані в першому прошарку. При цьому, абсолютні кількості поверхневих стабільних вакансій в кристалах Al та Ni відрізняються неістотно.

Моделювання показало, що характерний час відпалення вакансій становив ~ 1,5 пс для обох кристалів Ni та Al. Тільки приблизно 50% поверхневих вакансій та 20% об'ємних вакансій (без урахування вакансій, що були розташовані в першому прошарку), що виникають на початку каскаду, зберігаються до кінця 4 пс еволюції каскаду. Генерація практично всіх поверхневих вакансій в кристалі Al безпосередньо пов'язана з генерацією ад-атомів, оскільки коефіцієнт розпилення Al має незначне значення за цих умов бомбардування, а потік атомів віддачі на межі між першим атомним прошарком та об'ємом кристала спрямовано з об'єма до поверхні, і, таким чином, зменшується кількість поверхневих вакансій у кристалі Al. У випадку кристала Ni, 36% поверхневих вакансій виникають завдяки розпиленню та атомним стрибкам у глибину кристала, оскільки в кристалі Ni, як показало моделювання, потік каскадних атомів на межі між першим атомним прошарком і об'ємом кристала спрямовується в об'єм. Крім того, коефіцієнт розпилення Ni (100) має значну величину (див. таблицю 3.3). Рис. 3.16 (а, б) показує чіткий розподіл за глибиною між вакансіями і міжвузловими атомами в кристалі Ni, що якісно співпадає з результатами, отриманими для кристала Cu [101, 246], тоді як у випадку кристала Al спостерігається менш виразний розподіл, навіть з деяким перекриванням областей розташування дефектів у 4–7-му атомних прошарках, що може бути наслідком меншої розрахункової енергії когезії в кристалі Al. Енергія когезії обчислювалася в кристалі при температурі 0 К, як відношення сумарної потенціальної енергії кристала до загальної кількості атомів кристала, і дорівнювала в Al 3,32 еВ, а в кристалі Ni – 4,38 еВ. Розділення стабільних вакансій та міжвузлових атомів за глибиною кристала є, частково, результатом генерації послідовностей атомних зіткнень заміщення [15, 131].

Послідовності атомних зіткнень заміщення є основним механізмом генерації стабільних пар вакансія – міжвузловий атом при енергіях

бомбардування 100 еВ і нижче [420, 421]. Дані порогових енергій зміщення атомів E_d у різних напрямках у кристалах Al і Ni [418, 432] були отримані для атомного потенціалу, який використовується також в авторській моделі, і представлені в таблиці 3.4. Як видно з таблиці 3.4, напрямки $\langle 100 \rangle$ і $\langle 110 \rangle$ у кристалі Ni і напрямки $\langle 110 \rangle$ у кристалі Al мають найнижчі значення порогових енергій зміщення у разі виникнення послідовностей атомних зіткнень заміщення. При цьому, приповерхнева область (перші 1–3 атомних прошарки) є зоною утворення послідовностей атомних зіткнень заміщення, де і залишається вакансія, як початок послідовності зіткнень. Міжвузловий атом виникає, як закінчення відповідної послідовності атомних зіткнень заміщення у глибині кристала. Відстань між вакансією і відповідним міжвузловим атомом перевищує радіус рекомбінації, який можна оцінити згідно з формулами, що наведені в [342, 343, 346]. Велика відстань між вакансією і відповідним міжвузловим атомом призводить до виникнення стабільної пари дефектів вакансія – міжвузловий атом. Відповідні пари дефектів, що виникають поблизу поверхні на початку розвитку каскаду в результаті хаотичних каскадних зміщень атомів, як правило, рекомбінують після 2–3 пс еволюції каскаду. Подібні результати для напрямків з найменшими енергіями E_d виникнення послідовностей зіткнень заміщення були отримані також і в інших молекулярно-динамічних розрахунках у ГЦК кристалах [131, 313]. У нашій комп'ютерній програмі не було передбачено накопичення статистики виникнення послідовностей заміщення з різними напрямками, але значну інформацію по енергетично найбільш ймовірних напрямках розповсюдження послідовностей атомних зіткнень заміщення дає статистика переміщень атомів до сусідніх прошарків, що буде розглядатися докладно в наступній главі 4. Крім механізму атомних зіткнень заміщення, значну роль у генерації стабільних дефектів відіграють так звані «довгі» переміщення атомів (з атомного прошарку n в прошарок $n + 3$ або $n - 3$), які спостерігалися в кристалі Al, але не були зареєстровані в жодному випадку в кристалі Ni. Цей ефект, подібний до модельованого каналювання іонів Ar з енергією 200 еВ в кристалі Al в напрямках $\langle 110 \rangle$ [429], також може призводити до виникнення стабільних пар дефектів, але його ефективність залишається недостатньо з'ясованою.

3.4. Дефекти в двошарових кристалах Al/Ni та Ni/Al при 0 К

3.4.1. *Особливості молекулярно-динамічного алгоритму.* Двошарові модельні системи Al/Ni та Ni/Al склалися з атомів двох типів так, що перший атомний прошарок атомів Al (для Al/Ni) або Ni (для Ni/Al), розміщувався на поверхні, відповідно, кристала Ni або Al. При цьому, в обох двошарових кристалах було по 3944 атомів, які розміщувалися в 14 атомних прошарках. По периметру першого (домішкового) атомного прошарку два ряди домішкових атомів були виключені з розгляду для того, щоб уникнути нефізичних перекручень приповерхневих прошарків у процесі розвитку каскаду. Такі перекручення можливі в зв'язку зі значною різницею сталих ґратки кристалів Al та Ni під дією періодичних крайових умов (див. п. 1.4.1) і спостерігалися в попередніх тестових розрахунках каскадів у кристалах Al/Ni та Ni/Al, у яких атоми, що були розташовані по периметру першого прошарку, не виключалися з розгляду. У кристалі з виключеними з розгляду межовими атомними рядами по периметру першого прошарку нефізичні зміни у структурі першого прошарку не спостерігалися. При цьому, атомна структура першого прошарку була у відповідності до ГЦК ґратки підкладинки з, практично, такою самою сталою ґратки. Модельні розрахунки показали, що після закінчення каскаду, бічні межі першого домішкового прошарку залишалися без зміни і були у відповідності до структури ґратки підкладинки.

Для опису взаємодій однакових атомів Al–Al та Ni–Ni використовувався комбінований атомний потенціал (3.2)–(3.6) з константами, наведеними у п. 3.2.1. Для опису взаємодій різних атомів Al–Ni використовувався такий самий комбінований потенціал, як і у випадках Al–Al і Ni–Ni, який включав багаточастинковий потенціал і відштовхуючий парний потенціал ЗБЛ. Ці частини були з'єднані чотирьохпараметричною функцією зв'язку. Константи для функції $V(x)$ (3.4) наведені в таблиці 3.5, а константи для відповідної функції зв'язку $\Theta(x)$ (3.6) – у таблиці 3.2. Як показали розрахунки (див. главу 4), цей атомний потенціал дає якісно реалістичні результати для змішування компонентів Al та Ni. Функція $\Phi(r)$ (3.3) у випадку взаємодії атомів різних типів Al–Ni розраховувалася згідно середнього геометричного відповідних функцій для однокомпонентних систем $(\Phi_{Al}(r) \cdot \Phi_{Ni}(r))^{1/2}$. Координати приєднання багаточастинкового потенціалу та потенціалу відштовхування до функції зв'язку у випадку взаємодії різнорідних атомів Al–Ni дорівнювали $x_1 = 0,061$ нм, $x_2 = 0,148$ нм. Для кожної двошарової системи було виконано по 200 випробувань.

Таблиця 3.5 Параметри комбінованого потенціалу для Al-Ni [429, 430]

Параметри (eV/Å ³)	Значення	Параметри (Å)	Значення
a_1	-0,64692	R_1	4,352
a_2	1,13926	R_2	4,245
a_3	-0,66551	R_3	3,888
a_4	1,46802	R_4	2,961
a_5	3,0	R_5	2,522
a_6	0,0	R_6	0,0

Для ефективного аналізу отриманих результатів у випадку двокомпонентних кристалів Al/Ni та Ni/Al були використані для порівняння псевдоізотопні двокомпонентні кристали Al/Ni(Ni) та Ni/Al(Al), які склалися з псевдоатомів, що мали атомну масу Al та Ni, але описувалися одним потенціалом, тип якого наводиться в дужках, відповідно, Ni або Al.

3.4.2. *Розпилення і енергетичні пружні втрати іонів в Al/Ni і Ni/Al.* Модельні коефіцієнти розпилення двокомпонентних систем Al/Ni (100) та Ni/Al (100) наводяться в таблиці 3.6. В обох випадках усі розпилені атоми були з першого атомного прошарку, отже розпилення атомів підкладинки не відбувалося. Коефіцієнт розпилення кристала Al/Ni (тільки атоми Al) був не тільки значно більшим (0,32 атомів/іон), ніж відповідний коефіцієнт для однокомпонентного кристала Al (0,038 атомів/іон, див. табл. 3.3 та п. 3.2.2), але й більшим, ніж коефіцієнт розпилення однокомпонентного Ni (0,25 атомів/іон, див. там же). Розрахована поверхнева енергія зв'язку кристала Al/Ni (100), а саме поверхневого атома Al дорівнювала 3,87 eV (визначення поверхневої енергії зв'язку див. в п. 3.2.4), що, практично, дорівнює поверхневій енергії зв'язку однокомпонентного Al (100) (3,74 eV). Як видно з рис. 3.16 і рис. 3.17, 93% і 85% початкової енергії іона залишається в першому атомному прошарку, відповідно, однокомпонентного кристала Ni і двошарового кристала Al/Ni, тоді як у однокомпонентному кристалі Al тільки 20% енергії іона залишається в першому атомному прошарку. При цьому, пружні енергетичні втрати у ад-прошарку зараховуються, як втрати у першому атомному прошарку. Для псевдоізотопної системи Al/Ni (Ni) аналогічні пружні втрати у першому атомному прошарку становлять 89% від початкової енергії бомбардуючого іона, але коефіцієнт розпилення дорівнює тільки 0,09 атомів/іон, що менше, ніж для однокомпонентного кристала Ni.

Таблиця 3.6 Генерація дефектів у Al/Ni, Ni/Al, Al/Ni (Ni), Ni/Al (Al) іонами 100 еВ Ar

Системи	Y , (атомів/іон)	N_{in}	N_v	N_{ad}
Al/Ni				
Al	0.32	0.015	4.0	3.22
Ni	-	0.17	0.115	0.04
Al/Ni(Ni)				
Al	0.09	-	1.36	1.19
Ni	-	0.46	0.4	0.02
Ni/Al				
Ni	0.14	0.115	3.38	0.78
Al	-	0.66	2.07	2.51(0.195) ^a
Ni/Al(Al)				
Ni	0.21	0.02	1.7	1.55
Al	-	1.09	1.26	0.11

Примітка. ()^a – ад-атоми з другого прошарку.

Цей результат є наслідком різниці поверхневих енергій зв'язку, оскільки в Al/Ni (Ni) і однокомпонентному Ni поверхнева енергія зв'язку становить 5,19 еВ, що значно більше, ніж в однокомпонентному Al. Таким чином, у випадку двошарової системи Al/Ni значний коефіцієнт розпилення є наслідком меншої поверхневої енергії зв'язку порівняно з однокомпонентним Ni і того, що більша частина початкової енергії іона Ar втрачається ближче до поверхні, ніж у випадку однокомпонентного кристала Al.

У кристалі Ni/Al розпилюються тільки атоми Ni. Коефіцієнт розпилення є значно меншим, ніж коефіцієнти розпилення кристала Ni і псевдоізотопної системи Ni/Al(Al) (див. таблицю 3.6). Цей результат узгоджується з тим, що розрахункова поверхнева енергія зв'язку в двошаровій системі Ni/Al дорівнює 4,89 еВ, що, в свою чергу, близько до значення відповідної величини у кристалі Ni і значно більше, ніж у Ni/Al(Al).

Глибини розподілу пружних втрат енергії іона в Ni/Al і Ni/Al(Al) є взаємно подібними (див. рис. 3.17), але значно відрізняються від розподілу втрат у кристалі Ni (див. рис. 3.15). Тільки 32% і 24% початкової енергії іонів Ar виділяються в першому атомному прошарку, відповідно, систем Ni/Al і Ni/Al (Al), тоді як у кристалі Ni ця величина сягає 93%. Таким чином, значення коефіцієнтів розпилення, які дає молекулярно-динамічне моделювання в кристалах Ni/Al і Ni/Al (Al) стають зрозумілими, якщо порівняти енергетичні втрати у першому атомному прошарку і поверхневій енергії зв'язку. Значні втрати енергії

~ 90% в першому прошарку спостерігаються для всіх систем з масою Ni атомів підкладки, включаючи мішень з псевдоалюмінія, атоми якої мають масу атомів Ni. Значні втрати енергії іона в першому прошарку мають місце тому, що іон Ag може бути відбитим назад до поверхні в зіткненні з атомом, що має масу атома Ni, але такого не може статися в процесі зіткнення іона Ag з атомом, що має масу атома Al. Це є одною з причин відносно низького коефіцієнта розпилення кристала Al.

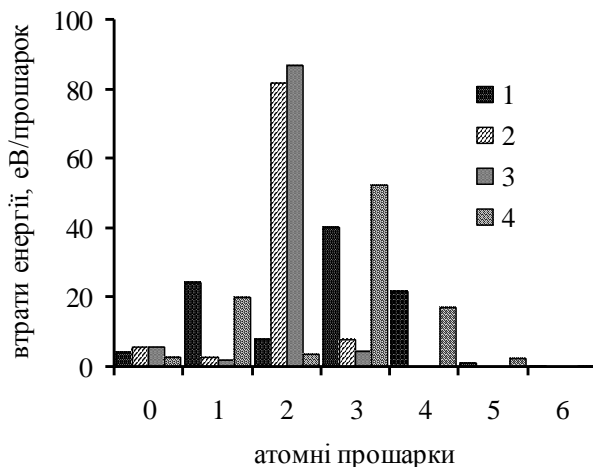


Рис. 3.17. Розподіл енергетичних пружних втрат іонів Ag з початковою енергією 100 eV за глибиною кристалів Ni/Al (100) (діаграма 1) і Al/Ni (100) (діаграма 2), Al/Ni (Ni) (діаграма 3) і Ni/Al (Al) (діаграма 4) при температурі 0 K. 0 – прошарок ад-атомів [311]. Використовується багаточастинковий потенціал [430]

3.4.3. *Радіаційні дефекти у двошарових системах Al/Ni та Ni/Al.* Закон збереження маси на стадії релаксації каскаду виконується з похибкою ~ 9% в Al/Ni і 20% в Ni/Al по відношенню до кількості генерованих у каскадах дефектів. Ця досить велика, порівняно з однокомпонентними системами, похибка моделювання кількості дефектів у двошарових системах пов'язана з тим, що повна релаксація двошарового кристала не досягається (див. також главу 4) навіть після 4 ps і 7 ps еволюції каскаду, відповідно, в Al/Ni і Ni/Al. Інша причина пов'язана з алгоритмом ідентифікації дефектів, особливо ад-атомів та міжвузлових атомів у сумішах компонентів з різними розмірами атомів. Програма, що використовується в роботі, ресструвала тільки міжвузлові

атоми типу «гантель» і не реєструвала можливих октаедричних міжвузлових атомів [428] поблизу від поверхні.

Для двошарової системи Al/Ni стабільні міжвузлові атоми Ni локалізувалися між 6-м і 11-м атомними прошарками. Незначна їх кількість знаходилася в перших двох приповерхневих прошарках, що видно з рис. 3.18 (а). На відміну від стабільних міжвузлових атомів Ni у глибині кристала, які досягають стабільності через $\sim 2,0$ – $2,5$ пс після початку каскаду, приповерхневі міжвузлові атоми не досягають стабільності навіть після 4 пс еволюції каскаду. Більшість внутрішніх міжвузлових атомів Ni відпалюються з часом і тільки $\sim 10\%$ від їх початкової кількості залишається після 4 пс. Міжвузлові атоми алюмінія початково генеруються в другому і третьому атомних прошарках, але тільки деякі з них продовжують існувати після 4 пс еволюції каскаду. Практично всі радіаційно-адсорбовані атоми є атомами алюмінія і генеруються з першого домішкового атомного прошарку (3,2 ад-атомів/іон). Кількість ад-атомів досягає стану стабільності після 2 пс еволюції каскаду.

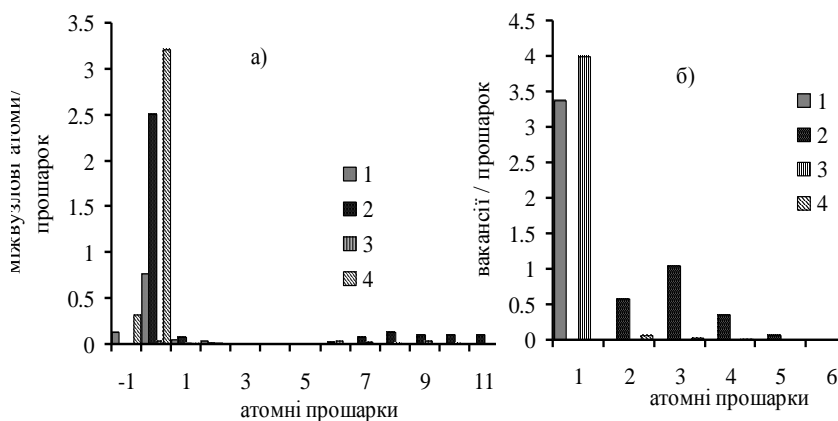


Рис. 3.18. Розподіли стабільних а) міжвузлових атомів і б) вакансій за глибиною кристалів Al/Ni (100) і Ni/Al (100) при 0 К і енергії іонів Ar – 100 еВ. -1 – розпилені атоми, 0 – ад-атоми. Багаточастинковий потенціал [429]. а) 1 – Ni/Al, міжвузлові атоми Ni; 2 – Ni/Al, міжвузлові атоми Al; 3 – Al/Ni, міжвузлові атоми Ni; 4 – Al/Ni, міжвузлові атоми Al; б) 1 – Ni/Al, вакансії в першому прошарку Ni; 2 – Ni/Al, вакансії в підкладинці Al; 3 – Al/Ni, вакансії в першому прошарку Al; 4 – Al/Ni, вакансії в підкладинці Ni [311]

У двошаровій системі Al/Ni ~ 3% усіх вакансій розташовані в Ni підкладинці в 2–5-му атомних прошарках, тоді як усі інші вакансії знаходяться в першому атомному прошарку, як видно з рис. 3.18 (б). Більшість генерованих у Ni підкладинці на початку каскаду вакансій відпалюються в інтервалі 1 пс–4 пс і тільки ~ 3% від їх початкової кількості залишаються в кристалі після закінчення розрахунку каскаду. Однак ~ 80% від кількості поверхневих вакансій в першому прошарку алюмінія залишаються після закінчення розрахунку каскаду. Поява великої кількості поверхневих стабільних вакансій пояснюється, головним чином, розпиленням атомів Al з домішкового прошарку і генерацією великої кількості ад-атомів (~ 3.5 ад-атомів/іон). Переміщення атомів з поверхні в підкладку не роблять, практично, ніякого внеску в генерацію поверхневих вакансій, оскільки їх кількість близька до кількості атомних переміщень з глибини кристала в перший домішковий атомний прошарок. У Ni підкладинці кількість вакансій N_v приблизно дорівнює кількості міжвузлових атомів N_{in} , що є наслідком роботи механізму послідовностей атомних зіткнень заміщення і обговорювалося в пункті 3.2.4.

Принципова різниця в розподілах за глибиною дефектів у Ni/Al і Al/Ni пов'язана з великою кількістю Al атомів, початково розташованих у 2–4-му атомних прошарках двошарової системи Ni/Al, які переміщуються в ад-прошарок. У двошаровій системі Al/Ni практично усі ад-атоми були Al атомами з поверхневого домішкового атомного прошарку, як видно з рис. 3.18 і рис. 3.19. Останній рисунок демонструє пошарову кількість атомних переміщень у кристалах Al/Ni та Ni/Al. У Ni/Al кількість Al ад-атомів з підкладинки є приблизно в три рази більшою порівняно з кількістю Ni ад-атомів, які були генеровані з першого атомного прошарку і залишилися після 7 пс еволюції каскаду. Таким чином, у Ni/Al більшість ад-атомів генеруються не з першого домішкового Ni прошарку, а з Al підкладинки і їх кількість дорівнює, приблизно, кількості ад-атомів з першого Al атомного прошарку в Al/Ni. Деякі ад-атоми на поверхні Ni/Al були генеровані з атомів, розташованих початково навіть у третьому (~ 0,2 ад-атомів/іон) і четвертому (~ 0,01 ад-атомів/іон) атомних прошарках. В обох системах спостерігалось, що серед Al ад-атомів, які виникають на початку каскаду, є більше стабільних ад-атомів. Приблизно 70% від їх початкової кількості залишається після 4 пс у Al/Ni і після 7 пс еволюції каскаду в Ni/Al. Ni ад-атоми демонструють значно менший відсоток стабільних ад-атомів: тільки ~ 30% від початкової кількості Ni ад-атомів у Al/Ni і 10% від початкової кількості ад-атомів у Ni/Al.

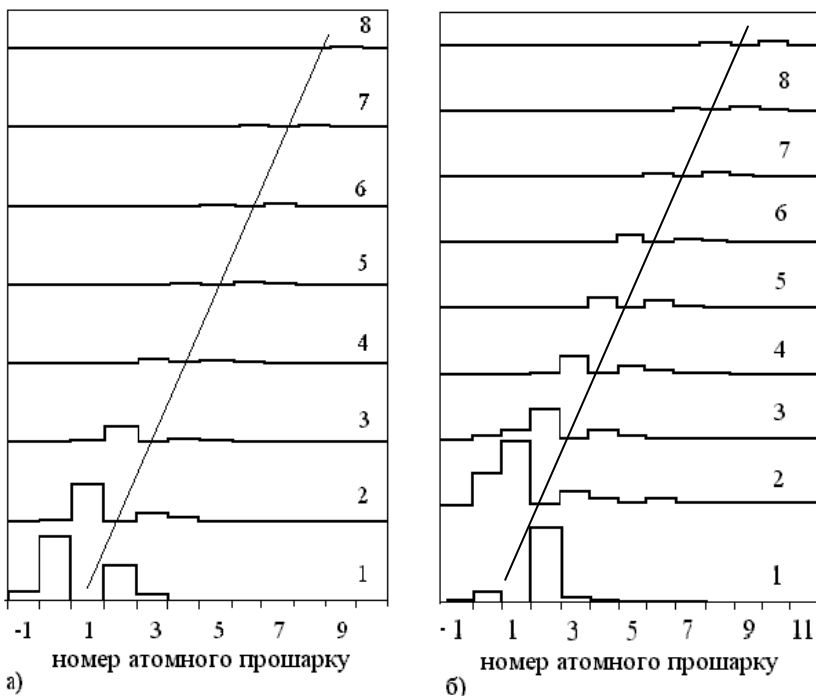


Рис. 3.19. Пошарова кількість атомних переміщень у кристалах а) Al/Ni та б) Ni/Al при температурі 0 К і енергії іонів Ar 100 eВ. Прошарок 1 показує кількість розпиленних атомів, 0 – кількість ад-атомів. По вертикалі відкладено номери атомних прошарків, з яких виконуються атомні переміщення [311]

Незначна кількість Ni і Al міжвузлових атомів знаходиться в першому і другому прошарках двошарової системи Ni/Al, але головний внесок у кількість міжвузлових атомів належить атомам Al в інтервалі між 6-м і 12-м прошарками (рис. 3.18 (а)). Після 7 пс у Al підкладинці залишаються тільки стабільні Al міжвузлові атоми, але поблизу поверхні міжвузлові атоми Al і Ni демонструють нестабільність, що збігається з результатами [165, 166].

Як і в системі Al/Ni, більшість вакансій в Ni/Al була розташована в 1-му прошарку (рис. 3.18 (б)), але, подібно до однокомпонентного Al, деяка кількість вакансій в Ni/Al залишається також і під поверхнею. Кількість поверхневих вакансій в Ni/Al була в два рази більшою, ніж у Ni/Al (Al) з потенціалом Al. Приблизно 75% від максимальної кількості

генерованих поверхневих вакансій залишається після еволюції каскаду протягом 7 пс. Кількість атомних стрибків до підкладинки двошарової системи Ni/Al з першого атомного прошарку є більшою на $\sim 0,8$ атомів/іон, порівняно з кількістю зворотних атомних стрибків з підкладинки у перший прошарок.

У Ni/Al поверхневі вакансії виникають завдяки генерації Ni ад-атомів з 1-го прошарку, переважному потоку атомів віддачі в підкладинку, а також розпиленню. Ці три механізми генерують 1,72 поверхневі вакансії/іон у Ni/Al. Однак, загальна кількість поверхневих вакансій, що була зареєстрована алгоритмом, становить 3,38 атомів/іон (див. таблицю 3.6). Ця суперечність породжується тим, що в алгоритмі не була врахована локальна реструктуризація поверхні, яка складається з «малорозмірних» атомів Ni. Реконструкція відбувається завдяки генерації поверхневих вакансій, які дають можливість переміщуватися атомам 1-го прошарку, не залишаючи меж прошарку. Колективні переміщення атомів у області падіння іона призводять до перебудови поверхневого порядку ґратки і зміщенню поверхневих атомів уздовж прошарку, що веде до реєстрації додаткових поверхневих вакансій.

Кінцеві вакансії в Al підкладинці в Ni/Al були розташовані між 2-м та 5-м прошарками (рис. 3.18 (б)). Тільки 20% від максимальної кількості вакансій залишилися після 7 пс, подібно до випадку Ni/Al (Al). Однак, кількість вакансій в підкладинці Ni/Al була в три рази більшою, ніж кількість відповідних вакансій в Ni/Al (Al), що пов'язано із загально більшою кількістю дефектів у приповерхневій області Ni/Al. Простий зв'язок між вакансіями підкладинки і внутрішніми міжвузловими атомами, що відповідає провідній ролі механізму послідовностей атомних зіткнень заміщення, не реалізується в Ni/Al завдяки значній кількості атомних переміщень з другого прошарку в ад-прошарок, а також з третього прошарку в другий (рис. 3.18 і рис. 3.19). Приповерхневі вакансії і міжвузлові атоми у Ni/Al не є повністю стабільними після 7 пс, тоді як об'ємні вакансії і міжвузлові атоми у підкладинці двошарової системи є практично стабільними. Значна активність утворення дефектів в приповерхневій області Al/Ni і Ni/Al, як буде показано у главі 4, пов'язана зі взаємним розчиненням та різницею сталей ґратки компонентів.

3.5. Генерація дефектів іонами Ag в Cu при підвищених температурах

У підрозділі 3.5 розглядається генерація дефектів у монокристалі Cu (100), який бомбардується іонами Ag і Xe з енергіями 25–100 eV при температурах 300 K і 500 K. Результати порівнюються з даними моделювання при температурі кристала міди 0 K.

3.5.1. *Моделювання кристала при ненульовій температурі.* При проведенні молекулярно-динамічного моделювання в кристалах з ненульовою температурою на їх межах атоми переміщуються у відповідності до рівнянь руху (1.12), де сума кінетичних енергій теплових коливань атомів у кристалі використовується для оцінки середньої температури кристала:

$$\sum_{i=1}^N \frac{m_i V_i^2}{2} = \frac{3}{2} kTN. \quad (3.7)$$

При виготовленні кристала з ненульовою температурою спочатку штучно збільшується стала ґратки кристала приблизно на 1%, відповідно до тієї температури, що планується для кристала. Далі виготовлення температурного кристала може бути продовжено двома способами. У відповідності з першим способом, енергія атомів кристала поступово збільшується від нуля до необхідного значення завдяки її перенесенню з меж кристала, де вона відповідає заданій температурі і пов'язана з рівняннями руху для межових атомів (1.12), до атомів у середині кристала. Однак, цей спосіб накачки енергії в кристал вимагає значних витрат комп'ютерного і модельного часу. Останній при цьому дорівнює не менше 15–20 пс, однак метод не завжди призводить до кінцевого успіху. Крім того, занадто великий час стабілізації кристала може призвести до значного накопичення похибки заокруглення чисел і отримання нефізичних результатів.

Значно ефективнішим виявився інший спосіб передачі теплової енергії до кристала. Згідно з ним, атоми кристала отримують компоненти V_{xib} , V_{yib} , V_{zib} початкових теплових швидкостей, які обчислюються за законом випадкових чисел навколо середньоквадратичної швидкості атомів у заданому напрямку $(kT_0/m)^{1/2}$. Далі кристал стабілізується при температурі T_0 (див. (1.12)) аж поки потенціальна і кінетична енергії атомів кристала не вирівнюються між собою з достатньою точністю. Слід зазначити, що при вдалому співвідношенні зміненої сталої ґратки і температури, амплітуда

коливання миттєвої температури навколо її середнього значення не повинна перевищувати 5% від T_0 . Період стабілізації модельного кристала складає у цьому випадку 4–10 пс, а при вдалому співвідношенні параметрів кристала і температури іноді достатньо навіть 1 пс. Останній 14-й атомний прошарок на дні кристала, як і у випадку нульової температури, залишається нерухомим. Періодичні крайові умови використовуються для збереження стабільності температурного кристала. Розробка основних положень модельної технології виготовлення кристала при ненульовій температурі належить Герхарду Бетцу (Prof. Gerhard Betz).

3.5.2. *Енергетичні пружні втрати іона Ar і розпилення Si.* Термічні коливання атомів у кристалі Si при температурах 300 К і 500 К перекручують ґратку кристала порівняно з випадком нульової температури. Неідеальність кристалічного порядку завдяки термічним коливанням атомів призводить до скорочення послідовностей атомних зіткнень заміщення в кристалі під час каскаду зіткнень [313, 433]. Температурне перекручення поверхні кристала призводить також до зростання енергетичних пружних втрат бомбардуючого іона в приповерхневому атомному прошарку. Максимум енергетичних втрат в атомному прошарку зміщується з другого прошарку при температурі 0 К в перший прошарок при температурах 300 К і 500 К. Так при температурі кристала 0 К, енергетичні втрати іона Ar становили 40% у першому атомному прошарку і 46% у другому прошарку (див. рис. 3.2, п. 3.1.2), тоді як при температурі кристала 300 К іон втрачає в першому прошарку 46% від початкової енергії і 41% – в другому прошарку. При температурі 500 К енергетичні втрати в першому атомному прошарку склали 59%, а в другому – 22% від початкової енергії іона.

Як видно з таблиці 3.7, внаслідок термічно-активованого зміщення енергетичних втрат бомбардуючого іона до поверхні, було встановлено зростання модельного коефіцієнта розпилення при температурах 300 К і 500 К, практично, в два рази, порівняно з випадком температури кристала 0 К. Було припущено, що це зростання пов'язане з термічним перекрученням ґратки кристала при підвищенні її температури. З підвищенням температури особливо суттєво збільшуються амплітуди коливань атомів поверхневих прошарків, що веде до часткової втрати прозорості кристала і, як наслідок, до збільшення втрат енергії бомбардуючого іона при проходженні через поверхню. Відомо, що для більш щільної поверхні (111) ГЦК кристала коефіцієнт розпилення є значно більшим, ніж для більш відкритої поверхні (100) [97, 101]. Модельний коефіцієнт розпилення при температурі 300 К знаходиться у

відповідності до експериментальних результатів [2]. Отримані результати для коефіцієнта розпилення при температурах 300 К і 500 К відрізняються не більше як на 10%, і цей факт також добре корелює із загальними уявленнями, що базуються на даних експерименту [2]. Значно менше значення коефіцієнта розпилення при температурі 0 К найбільш ймовірно пов'язане з тим, що при моделюванні при 0 К у моделі відсутні нульові коливання атомів, а тому має місце значна ймовірність генерації послідовностей атомних зіткнень заміщення та фокусонного механізму, які спрямовано переносять енергію від поверхні в глибину кристала і забирають більшу частину енергії, що виділяється в приповерхневих прошарках при проходженні бомбардуючого іона. При зменшенні порядку ґратки із зростанням температури збільшується ймовірність нецентрального зіткнення, які й призводять до реалізації ефекту розпилення і зменшення фокусуємих можливостей ґратки.

Таблиця 3.7 Коефіцієнт розпилення і генерація дефектів у Cu (100) іонами 100 еВ Ag при температурах 0 К, 300 К, 500 К

	Y	N _{ad}	N _{in}	N _v
0 К	0,22	1,23	0,43	1,88 (1,52) ^a
300 К	0,37	1,5	0,33	2,3 (2,04) ^a
500 К	0,41	1,8	0,13	2,42 (2,08) ^a

Примітка. ()^a – генерація поверхневих вакансій

3.5.3. *Генерація дефектів в Cu (100) іонами 100 еВ Ar.* Кінетики генерації адсорбованих і розпиленних атомів у кристалі Cu (100) при рівноважних температурах 0 К, 300 К або 500 К і бомбардуванні іонами Ag з енергією 100 еВ наведені на рис. 3.20. Стабільність ад-атомів досягається через $\sim 1,5$ пс з початку розвитку каскаду. Максимуми кількості ад-атомів при усіх розглянутих температурах знаходяться в інтервалі часу 0,1–0,3 пс, а саме, в інтервалі часу розвитку стадії зіткнень каскаду. При цьому, спостерігається зростання максимальної кількості генерованих ад-атомів і зміщення максимуму генерації ад-атомів у бік більшого часу із зростанням рівноважної температури кристала. Як видно з даних таблиці 3.7, кількість стабільних ад-атомів також зростає з температурою. У випадку температури кристала 500 К, крім першого піку є також другий локальний пік, який виникає в момент часу $\sim 1,0$ пс. Природа його виникнення залишається нез'ясованою. Процес розпилення поверхні іонами Ag протікає за час розвитку стадії зіткнень атомних каскадів і, практично, закінчується за перші 0,5 пс незалежно від рівноважної температури кристала.

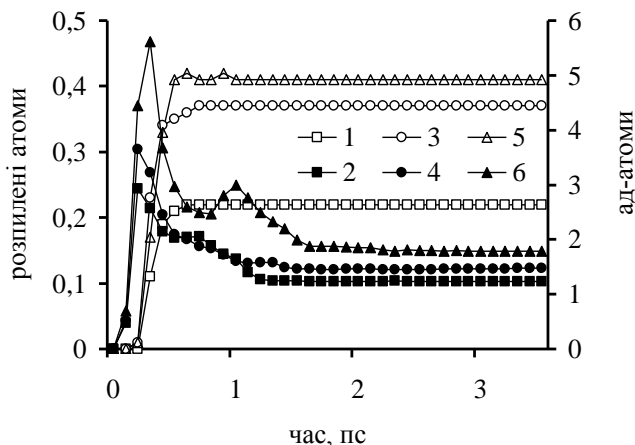


Рис. 3.20. Кінетики генерації адсорбованих і розпиленних атомів у кристалі Cu (100), який має рівноважну температуру 0 К, 300 К або 500 К і бомбардується іонами Ag з енергією 100 еВ. Кристал описується багаточастинковим потенціалом [94]. 1 – розпилені атоми при 0 К; 2 – ад-атоми при 0 К; 3 – розпилені атоми при 300 К; 4 – ад-атоми при 300 К; 5 – розпилені атоми при 500 К; 6 – ад-атоми при 500 К [247]

На рис. 3.21 (а, б) наведені кінетики генерації вакансій в кристалі Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ при температурах кристала 0 К і 500 К. Максимум кількості генерованих вакансій при 0 К має місце в інтервалі часу 0,1–0,2 пс, тоді як при температурі 500 К – в інтервалі 0,1–0,4 пс. У цілому, кількість стабільних вакансій при температурах 300 К і 500 К згідно з даними таблиці 3.7 більша, ніж при температурі 0 К завдяки збільшенню кількості ад-атомів та коефіцієнта розпилення (див. табл. 3.7 і рис. 3.19). Кількість об'ємних вакансій теж змінюється з температурою, але ця зміна не має чіткої температурної залежності. Кількість поверхневих стабільних вакансій складає 80–88% від загальної кількості вакансій, і їх відносна кількість збільшується із зростанням температури. Рис. 3.21 показує, що із збільшенням температури зростає також кількість генерованих на стадії зіткнень вакансій і ефективність їх рекомбінації. При температурі 0 К максимальна кількість вакансій дорівнює ~ 5,0 вакансій/іон, а при 500 К ~ 8,0 вакансій/іон. При цьому, після виходу вакансій на стадію стабільності, при температурі 0 К залишається ~ 38% від максимальної

кількості вакансій, тоді як при температурі 500 К \sim 31%. Час виходу кількості генерованих вакансій на рівень стабільності також неістотно збільшується з температурою: при 0 К – 1,2 пс, а при 500 К – 1,5 пс. Стабільні вакансії у випадку температури 0 К знаходяться в 1–3-му атомних прошарках, тоді як при 500 К – у 1–5-му прошарках. Слід, однак, зазначити, що при температурі 500 К відносно значна кількість стабільних вакансій генерується тільки у 1–3-му атомних прошарках, хоч на початку каскаду нестабільні вакансії генеруються в кристалі уздовж всього каскаду зіткнень незалежно від температури.

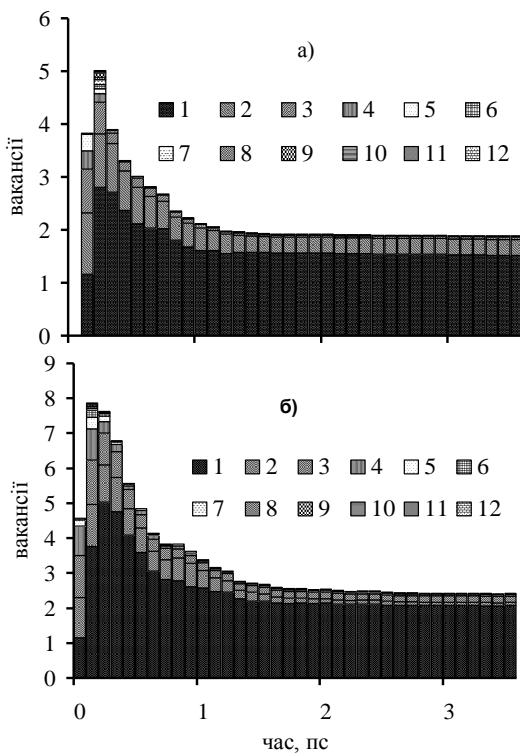


Рис. 3.21. Кінетика генерації вакансій в кристалі Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ при температурах а) 0 К і б) 500 К. Кристал описується багаточастинковим потенціалом [94]. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошаркам, в яких генеруються вакансії [247]

На рис. 3.22 (а, б) наведені залежності кількості генерованих міжвузлових атомів від часу еволюції каскаду у випадку нормального бомбардування кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ при температурах 0 К і 500 К. В обох випадках чіткий максимум концентрації міжвузлових атомів спостерігається в інтервалі 0,1–0,2 пс. У цьому інтервалі часу міжвузлові атоми генеруються уздовж всього каскаду зіткнень. Максимум кількості генерованих міжвузлових атомів при температурі 500 К є більшим у 1,5 рази порівняно з максимумом при 0 К. При температурі 500 К, як видно з рис. 3.22 (б), близько 0,2 міжвузлових нестабільних атомів у інтервалі 0,3–0,7 пс виникають у першому атомному прошарку. Така значна кількість міжвузлових нестабільних атомів у першому атомному прошарку не спостерігається при температурі 0 К. Після 1 пс еволюції каскаду міжвузлові атоми не спостерігаються в першому атомному прошарку при 500 К. При температурі 500 К залишається тільки ~ 5% від їх максимальної кількості, тоді як у випадку 0 К залишається ~ 30% міжвузлових атомів, які являються стабільними. У цілому, відносна стабілізація міжвузлових атомів настає після 1,5–2,0 пс. Однак, коливання їх кількості мають місце навіть після 4 пс еволюції каскаду при обох температурах кристала. У кінці каскаду кількість стабільних міжвузлових атомів при температурі 0 К перевищує їх кількість при 500 К у 3,3 рази. В обох випадках стабільні міжвузлові атоми займають прошарки з 4-го по 11-й. Для більш ретельного вивчення залежності розподілу міжвузлових атомів у кристалі від його температури необхідна значно більша статистика випробувань. Зменшення кількості стабільних міжвузлових атомів із зростанням рівноважної температури є наслідком двох причин. Перша з них – це збільшення мобільності точкових дефектів і, в першу чергу, міжвузлових атомів, які мають низьку енергію активації переміщення (~ 0,1–0,15 еВ [373]), що підвищує ймовірність їх рекомбінації з вакансіями. Моделювання показало, що останні 2 пс еволюції каскаду при підвищених температурах спостерігається переміщення міжвузлових атомів з глибини кристала до поверхні, де кількість вакансій і, відповідно, ймовірність їх рекомбінації з міжвузловими атомами стає значною. Інша причина – скорочення довжини і ймовірності генерації послідовностей атомних зіткнень заміщення із зростанням температури [433], оскільки послідовності зіткнень заміщення при низьких енергіях є головним механізмом генерації стабільних пар дефектів [15, 131, 420, 421]. Відстань між вакансією і відповідним міжвузловим атомом, таким чином, теж скорочується, що збільшує ймовірність рекомбінації.

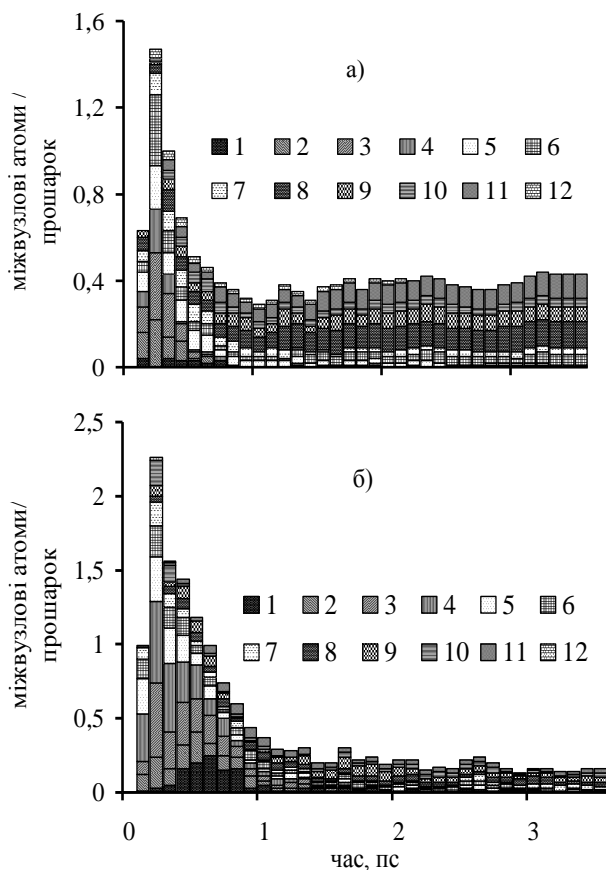


Рис. 3.22. Залежності кількості генерованих міжвузлових атомів від часу еволюції каскаду у випадку нормального бомбардування кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ при температурах а) 0 К і б) 500 К. Вказані на рисунку номери відповідають атомним прошаркам, в яких генеруються міжвузлові атоми [247]

3.5.4. Вплив типу і енергії іона на генерацію дефектів в Cu (100). У [434] було проведено моделювання нормального бомбардування кристала Cu (100) іонами Ag і Xe з енергіями 25–50 еВ при температурі 300 К. На рис. 3.23 (а–г) наведені криві кінетики утворення вакансій за глибиною кристала міді в залежності від часу каскаду для випадків бомбардування модельного кристала міді іонами Ag і Xe з енергіями 25 і

50 еВ. У випадку іонів Ag утворюється значно більше число стабільних вакансій (після 4 пс еволюції каскаду) в першому прошарку, ніж у випадку іонів Хе. В об'ємі кристала глибше першого атомного прошарку кількість стабільних вакансій є більшою у випадку іонів Хе, що показано для енергії 50 еВ, проте справедливо і для енергії 40 еВ. Дані моделювання для обох іонів наведені в таблиці 3.8:

Таблиця 3.8 Кількість точкових дефектів, генерованих в Cu (100) за один каскад

Енергія, еВ	Тип	N_{ad}	N_{in}	$N_{v,s}$	$N_{v,v}$
50	Ag	0,6	0,33	0,88	0,1
40		0,41	0,14	0,5	0,08
25		0,25	0,0	0,25	0,0
50	Xe	0,25	0,1	0,22	0,14
40		0,13	0,08	0,16	0,1
25		0,1	0,04	0,04	0,09
15		0,14	0,0	0,13	0,01

При енергії 25 еВ, у випадку іонів Хе, вакансії залишалися в першому і другому атомних прошарках, тоді як у випадку іонів Ag вакансії були тільки в першому прошарку. Як видно з рис. 3.23, розподіли вакансій за глибиною стабілізуються після 1 пс еволюції каскадів для іонів Ag і після 2,5 пс еволюції каскадів у випадку іонів Хе. Відношення кількості поверхневих вакансій після 4 пс еволюції каскаду $N_{v,s}$ до відповідного максимального значення ($\sim 0,2-0,5$ пс) $N_{v,s}/N_{v,s}(\max)$ зменшується зі зниженням енергії іонів, тоді як відношення $N_{v,v}/N_{v,v}(\max)$ для об'ємних вакансій не показує зниження. Як видно з рис. 3.23, у випадках енергії іонів 25 і 50 еВ, хоч та ж тенденція справедлива і для енергії іонів 40 еВ, відношення $N_{v,s}/N_{v,s}(\max)$ є більшим при бомбардуванні іонами Ag, тоді як відношення $N_{v,v}/N_{v,v}(\max)$ більше у випадку іонів Хе.

При енергії іонів Хе 15 еВ вакансії в першому прошарку утворюються тільки за рахунок переміщення атомів з першого прошарку в ад-прошарок, тоді як більшість переміщень між першим і другим прошарками має обмінний характер. При енергії 25 еВ у випадку іонів Ag має місце ідентичний механізм утворення поверхневих вакансій, а у випадку іонів Хе з енергією 25 еВ утворення поверхневих вакансій зменшується завдяки незначному переміщенню атомів з другого атомного прошарку. При цьому, вакансії в першому прошарку виникають також за рахунок переміщень атомів з першого прошарку в третій (0,07 вакансій/іон).

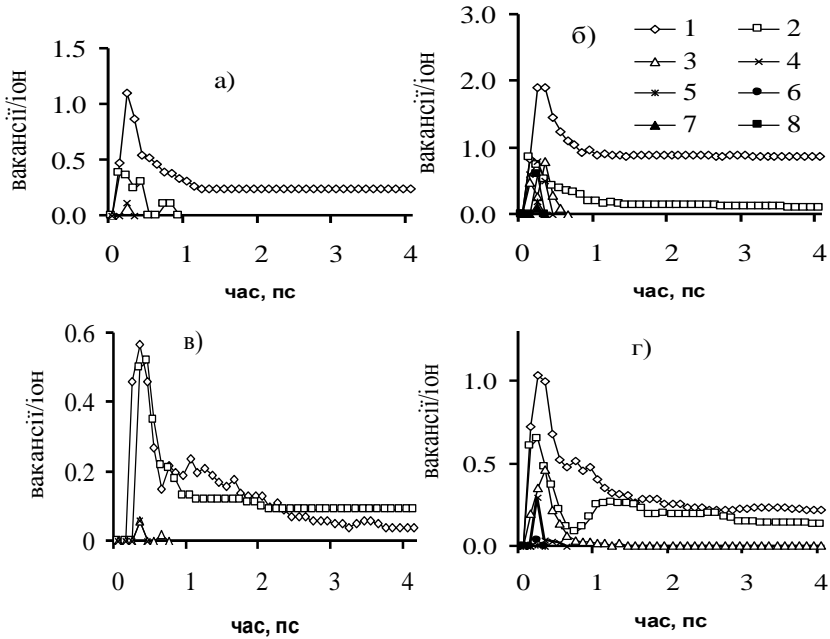


Рис. 3.23. Кінетика генерації вакансій за глибиною кристала Cu (100) у випадках бомбардування іонами Ar: а) 25 еВ, б) 50 еВ і Хе: в) 25 еВ, г) 50 еВ при температурі 300 К. Номери кривих на рисунку (б) відповідають номерам атомних прошарків на рисунках (а-г). Наприклад, крива 1 – поверхневі вакансії [434]

При енергії іонів 40 еВ, як і при енергії 25 еВ, у випадку іонів Хе, вакансії утворюються в результаті переміщень атомів у просторі між ад-прошарком і 3-м атомним прошарком. Інтенсивність переміщень з першого атомного прошарку в третій зростає майже у два рази (0,16 переміщень/іон) у порівнянні з випадком початкової енергії іона 25 еВ. При бомбардуванні іонами Ar з енергією 40 еВ, переміщення атомів між першим і другим атомними прошарками були взаємно компенсованими, і поверхневі вакансії утворювалися, головним чином, за рахунок переміщень атомів віддачі з першого атомного прошарку в ад-прошарок (0,4 вакансії/іон), а також, у незначній мірі, за рахунок переміщень у третій атомний прошарок (0,1 вакансії/іон).

У випадку іонів Хе з енергією 50 еВ зберігається провідна роль тих самих механізмів, що мають місце і при енергії іона 40 еВ, тоді як для

іонів Ag переміщення атомів з першого атомного прошарку в другий не компенсуються цілком зворотними переміщеннями. У цьому випадку поверхневі вакансії утворюються за рахунок переміщень атомів у ад-прошарок (0,59 вакансій/іон), комбінації переміщень атомів між першим і другим прошарками (0,11 вакансій/іон), а також за рахунок переміщень атомів у третій атомний прошарок (0,17 вакансій/іон).

В області кристала від поверхні до третього атомного прошарку не було зареєстровано жодного міжвузлового атома після 4 пс еволюції каскаду. Цей результат пояснюється тим, що всі переміщення атомів поблизу поверхні призводять до утворення ад-атомів обмінним переміщенням атомів у ґратці і генерації послідовностей атомних зіткнень заміщення, які, зокрема, можуть закінчуватися утворенням стабільних міжвузлових атомів у глибині кристала при низьких енергіях бомбардування. При цьому, у приповерхневій області залишаються вакансії. За рахунок розпилення утворення вакансій було незначним порівняно з іншими механізмами і спостерігалось тільки для іонів Ag з енергією 50 еВ (0,03 вакансій/іон). Як видно з таблиці 3.8, при енергіях бомбардування 40 і 50 еВ іони Ag створюють значно більше стабільних міжвузлових атомів N_{in} у порівнянні з іонами Хе.

На рис. 3.24 (а–г) наведені криві кінетики кількості міжвузлових атомів у кожному атомному прошарку при енергіях іонів Ag і Хе 25 і 50 еВ. У випадку бомбардування кристала міді іонами Ag з енергією 25 еВ, міжвузлові атоми спостерігалися тільки протягом перших 0,7 пс з початку розвитку каскаду. В інших випадках, міжвузлові атоми після 4 пс залишалися в 4–9-му атомних прошарках. Відношення кількості міжвузлових атомів (після 4 пс) до їх максимальної кількості в процесі розвитку каскаду $N_{in}/N_{in(max)}$ було помітно більшим у випадку бомбардування мішені іонами Ag з енергією 50 еВ (0,37, див. рис. 3.24) і 40 еВ (0,21) у порівнянні з бомбардуванням іонами Хе (відповідно, 0,077 і 0,12), що якісно узгоджується з характером зміни аналогічних параметрів для поверхневих вакансій. З рис. 3.24 у випадках початкової енергії іонів 25 і 50 еВ, що, однак, справедливо і при енергії іонів 40 еВ, випливає, що стабілізація кількості міжвузлових атомів відбувається за 1,0–1,5 пс з початку розвитку каскаду в усіх аналізованих випадках. Врахування теплових коливань атомів ґратки призводить до нестабільності розподілу міжвузлових атомів (див. рис. 3.24 (в)) навіть після 4 пс при температурі кристала 300 К, на відміну від моделювання при температурі кристала 0 К, де після 4 пс спостерігається відносно повна стабілізація розподілу радіаційних дефектів. При цьому, міжвузлові атоми продовжують здійснювати низькоенергетичні переміщення, що призводить до деякого коливання їх кількості [424].

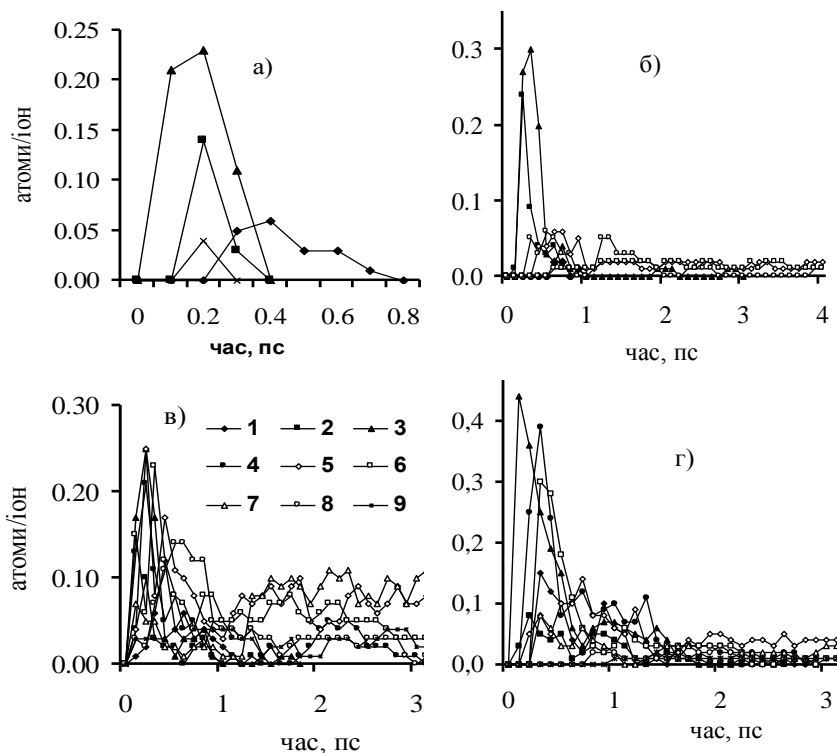


Рис. 3.24. Кінетика генерації міжвузлових атомів у кожному атомному прошарку кристала Cu (100) при температурі 300 К за час каскаду (на рисунку а) 0,8 пс, б) 4 пс, в) і г) 3,2 пс) при енергії іонів 25 еВ: а) Ag і б) Хе, а також 50 еВ: в) Ag і г) Хе. Криві 1–9 на рисунку в) відповідають номерам атомних прошарків, в яких знаходяться міжвузлові атоми, на рисунках а) – г). Наприклад, крива 1 – кількість міжвузлових атомів, що знаходяться в поверхневому (першому) атомному прошарку кристала [434]

На рис. 3.25 (а, б) наведені залежності кількості ад-атомів, що утворюються на поверхні, від часу при бомбардуванні кристала міді іонами Ag (а) і Хе (б). У випадку іонів Ag спостерігається чітка релаксація кількості ад-атомів після 1 пс еволюції каскаду. Для іонів Хе моделювання показує значно більшу нестабільність, а саме, у інтервалі до 2,5 пс відбуваються навіть тимчасові збільшення, а на інтервалі до 0,7 пс – падіння до нуля кількості ад-атомів, що є наслідком значних

порушень кристалічного порядку на поверхні, а також зворотного переміщення іонів Хе до поверхні завдяки колективному відбиттю іона Хе від глибоко розташованих атомних прошарків у кристалі міді і пов'язаного з цим утворення ад-атомів, про що докладніше буде сказано в п. 3.7.2 і п. 4.5.3 на прикладі Al.

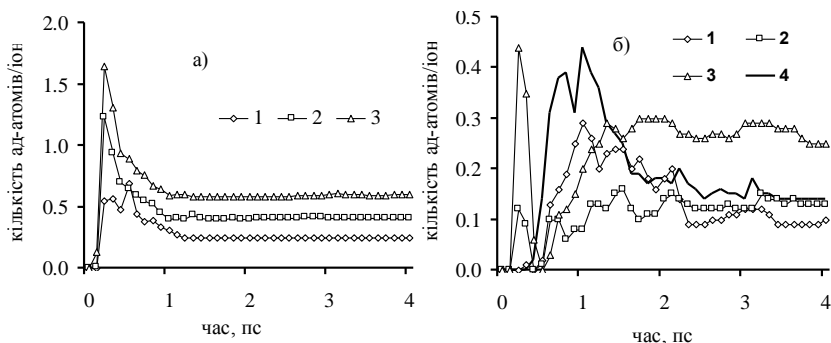


Рис. 3.25. Кінетика генерації ад-атомів при бомбардуванні кристала Cu (1 0 0) іонами а) Ag і б) Хе з енергіями 25 еВ (крива 1), 40 еВ (крива 2), 50 еВ (крива 3) і 15 еВ (крива 4) при температурі кристала 300 К [434]

Наведені в таблиці 3.8 дані показують, що кількість стабільних ад-атомів N_{ad} , що утворюються іонами Ag, в 2,5–3 рази більша, ніж кількість ад-атомів, що утворюються іонами Хе. Це, як показує моделювання, пов'язано з малою часткою енергії, що втрачається іонами Хе в першому прошарку. У середньому, це становить 1–5% при енергії іона 25–50 еВ, тоді як іони Ag втрачають у першому прошарку до 70% своєї початкової енергії. Ці результати збігаються з даними [426], де були розглянуті результати молекулярно-динамічного моделювання ад-атомів на поверхні Pt (111) під дією падаючих з енергіями більше 100 еВ іонів Ne, Ag, Хе, а також з експериментом [427], де використовувався тунельний мікроскоп. При енергії 100 еВ у [426] спостерігалось зменшення утворення ад-атомів із зростанням розходження між масами атомів мішені та іона, що якісно узгоджується з наведеними модельними результатами, а також з даними [428]. Різниця мас взаємодіючих частинок віддзеркалюється на значеннях енергії, яка передається важким іоном атомам мішені, і, в результаті, на пружних втратах іонів в атомних прошарках. Різниця в пружних втратах у першому прошарку пов'язана також з ефектом «очистки шляху»

(«clearing the way») для важких іонів, що на прикладі інших МД моделей було встановлено в [416]. Крім того, великий переріз зіткнень іонів Хе порівняно з іонами Аг сприяє генерації атомів віддачі у випадку Хе з переважним імпульсом у напрямку бомбардуючого пучка, що також зменшує ймовірність утворення ад-атомів у кристалі Су.

3.6. Генерація дефектів у кристалі Ni при підвищених температурах

3.6.1. *Бомбардування іонами Ar з енергією 100 eV і 300 K.* Моделювання показує, що при температурі кристала 300 K іони Ar з енергією 100 eV не проникають у кристал Ni (100) глибше першого атомного прошарку. Отриманий коефіцієнт розпилення кристала Ni (100) становить 0,22 атома/іон, що добре збігається з результатами експериментів ~ 0,28 атомів/іон [2, 22].

Усі розпилені атоми були початково розташовані в першому атомному прошарку. Як видно з рис. 3.26 (а), генерація ад-атомів на поверхні Ni (100) відбувається за час ~ 1,0–1,2 пс з початку розвитку каскаду. Протягом перших ~ 0,3 пс спостерігається максимум кількості ад-атомів. Після 4 пс еволюції каскаду на поверхні кристала залишаються тільки ад-атоми, що були генеровані з першого атомного прошарку. Слід зазначити, що модельний кристал Ni (100) демонструє високу стабільність і кількість ад-атомів залишається незмінною протягом останніх 3 пс еволюції каскаду.

Кількість поверхневих вакансій (див. рис. 3.26 (а)), генерація яких, у значній мірі, залежить від генерації ад-атомів, що відповідає модельним уявленням [425], як і кількість ад-атомів, має максимум в інтервалі 0,1–0,4 пс з початку каскаду і досягає стабільності приблизно за 1,0 пс. Максимальна кількість ад-атомів, при цьому, є значно меншою за максимальну кількість поверхневих вакансій, що підтверджує ідею про значний потік атомів віддачі з поверхні в глибину кристала Ni (100) на початку розвитку каскаду. При цьому, тут і надалі моделювання кінетики дефектів пов'язано зі значними труднощами ідентифікації точкових дефектів у далекому від стану рівноваги кристалі. За таких умов доцільно обговорювати тільки якісні закономірності розвитку кінетики дефектів. Радіаційні вакансії генеруються до 9–10-го атомних прошарків протягом перших 0,2–0,4 пс, хоч їх кількість починаючи з 5-го прошарку і глибше є незначною. Після 1 пс вони розподілені в інтервалі з першого по третій прошарок, і їх більшість знаходиться в першому атомному прошарку. Після 4 пс еволюції каскаду загальна кількість вакансій в кристалі Ni (100) була 2,05 вакансій/іон, у тому числі поверхневих вакансій – 1,92 вакансій/іон.

Кінетика міжвузлових атомів наведена на рис. 3.26 (б), з якого видно, що після 4 пс еволюції каскаду міжвузлові атоми залишаються розташованими в об'ємі кристала з 5-го по 11-й атомних прошарках. Їх сумарна кількість становить 0,49 атомів/іон. На початковій стадії каскаду міжвузлові атоми знаходилися також і в приповерхневих атомних прошарках, однак у цій області вони рекомбінують з вакансіями. Максимальна кількість міжвузлових атомів має місце в перші 0,2 пс з початку розвитку каскаду зіткнень. Як видно з рис. 3.26 (б), незначні зміни розподілу міжвузлових атомів за глибиною кристала продовжуються до кінця четвертої пікосекунди, хоч, у цілому, стабілізація встановлюється після двох пікосекунд еволюції каскаду.

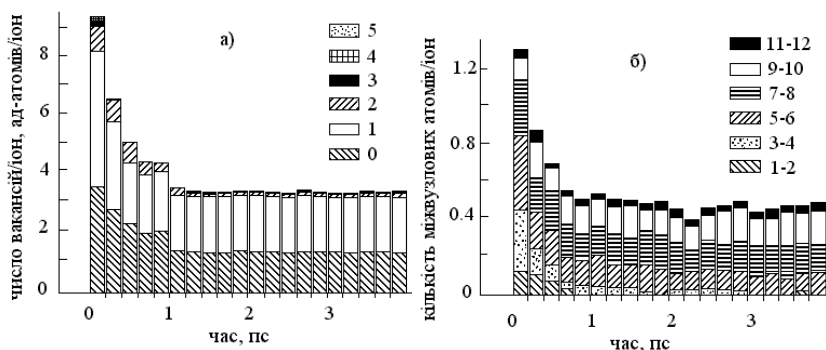


Рис. 3.26. Кінетика генерації а) ад-атомів і поверхневих вакансій, б) міжвузлових атомів на поверхні кристала Ni (100) при температурі 300 К і енергії іонів Ar 100 еВ. Номери на рисунку вказують номери атомних прошарків, де генеруються дефекти. 0 – прошарок ад-атомів. У момент часу 0,2 пс кількість неврахованих на рисунку вакансій в прошарках з 6-го по 12-й складало менше 3% від їх загальної кількості [310]

3.6.2. Бомбардування іонами Ar з енергією 100 еВ і 750 К. Як видно, з таблиць 3.9 та 3.3, де наведені дані для порівняння кількості стабільних точкових дефектів при температурах кристала Ni (100) 0 К, 300 К і 750 К у випадку бомбардування іонами Ar з енергією 100 еВ, коефіцієнт розпилення не показує значних змін із зростанням температури. При цьому енергетичні пружні втрати у першому атомному прошарку і перед ним становлять приблизно 90% початкової енергії іона також незалежно від температури. Сміт (Smith) з колегами [248] отримали досить сильно занижений порівняно з даними експерименту [2] коефіцієнт розпилення, що складав 0,06 атомів/іон при

молекулярно-динамічному моделюванні бомбардування кристала Ni (100) іонами Ag з енергією 100 eV при 0 K. Це, можливо, було пов'язано з особливостями потенціалу [429], який був модифікований в їх роботі [248] порівняно з [428].

Таблиця 3.9 Генерація дефектів іонами 100 eV Ag в Ni (100) при 300 K і 750 K

Температура, K	Y	N_{in}	N_v	N_{ad}
300	0,205	0,38	2,12	1,455
500	0,19	0,18	2,06	1,655

Нами були отримані наступні особливості генерації радіаційних дефектів у кристалі Ni (100) при температурі 750 K порівняно з кімнатною температурою:

- генерація вакансій повільно зростає від 0 K до 300 K і, практично, залишається сталою при зростанні температури кристала від 300 K до 750 K.

- Генерація ад-атомів швидко зростає зі збільшенням температури кристала.

- Генерація міжвузлових атомів значно зменшується зі зростанням температури кристала.

Значне зменшення генерації міжвузлових атомів із зростанням температури пов'язано з рекомбінацією мобільних міжвузлових атомів з приповерхневими вакансіями при підвищених температурах. Аналогічні особливості генерації міжвузлових атомів вже моделювалися в [247] на кристалі Cu (100) за таких самих умов бомбардування і при рівноважних температурах кристала від 0 K до 500 K. Аналогічна тенденція в генерації міжвузлових атомів у каскадах зіткнень із зростанням температури кристала моделювалася також при більших енергіях без урахування впливу поверхні кристала в [313, 435]. У випадку, що розглядається, не спостерігалось відповідного зменшення кількості генерованих стабільних вакансій із зростанням температури, оскільки кількість вакансій, в значній мірі, визначається кількістю генерованих ад-атомів, кількість яких, в свою чергу, зростає зі збільшенням температури. Інша причина зменшення кількості стабільних міжвузлових атомів пов'язана зі зменшенням кількості та довжини послідовностей атомних зіткнень заміщення зі зростанням температури кристала, що було вперше досліджено шляхом молекулярно-динамічного моделювання в роботі [420] для такого самого потенціалу, як і в цій роботі. Далі в наступному розділі 4 буде показано, що при 750 K зовсім не було ідентифіковано послідовностей

атомних зіткнень заміщення в кристалі Ni в напрямку $[1\ 0\ 0]$ при 750 K, тоді як вони мали місце при температурах кристала Ni 0 K та 300 K. У роботі [248] була також розглянута генерація міжвузлових атомів (1,8 атом/іон) та ад-атомів (1,2 атомів/іон) у кристалі Ni при температурі 0 K. Кількість генерованих ад-атомів непогано збігається з результатами, наведеними в таблиці 3.9. Кількість міжвузлових атомів приблизно в три рази більша, ніж та, що була отримана шляхом нашого моделювання при 0 K, результати якого наведені в таблиці 3.3. Це може бути пов'язано з тією ж причиною, що і різниця коефіцієнтів розпилення, про що вже говорилося.

Як видно з даних, наведених у таблиці 3.9, закон збереження маси для радіаційних дефектів у відповідності до алгоритму [101], що використовується в авторській комп'ютерній програмі, виконується з похибкою не більше 2% після 4 пс еволюції каскаду. Стабільні вакансії залишилися в кристалі Ni при 750 K на глибині до шостого атомного прошарку, тоді як міжвузлові атоми були розташовані між п'ятим та одинадцятим атомними прошарками, як видно з рис. 3.27 (а, б). При цьому, радіаційні об'ємні вакансії і міжвузлові атоми мають чіткі максимуми генерації в третьому і восьмому атомних прошарках. З цих рисунків видно, що кількість вакансій є значно більшою, ніж кількість міжвузлових атомів. Таке співвідношення має місце завдяки тому, що приблизно 96% від загальної кількості вакансій – поверхневі вакансії, генерація яких, у значній мірі, пов'язана з генерацією ад-атомів. Іонне бомбардування генерує приблизно в два рази більше міжвузлових атомів порівняно з кількістю об'ємних вакансій, що пов'язано з генерацією послідовностей зіткнень заміщення атомів на поверхні кристалу і їх розповсюдженням у глибину мішені.

Поверхневі вакансії можуть бути генеровані згідно трьох механізмів: генерації радіаційно-адсорбованих атомів, розпилення атомів з поверхні кристала та потоку атомів віддачі з першого атомного прошарку в глибину кристала. Домінуючим механізмом є генерація радіаційно-адсорбованих атомів, тоді як розпилення атомів з поверхні кристала і потік атомів віддачі в глибину кристала роблять, практично, ідентичні внески у загальну генерацію поверхневих вакансій, які, однак, значно менші, ніж внесок за рахунок утворення ад-атомів. Більшість стабільних вакансій формується протягом перших 4 пс, коли близько 65% поверхневих вакансій, 97% об'ємних вакансій, 65% радіаційно-адсорбованих ад-атомів і 90% міжвузлових атомів відпалюються. При цьому, тільки 10% від кількості зміщених зі своїх початкових позицій атомів віддачі повертаються назад у початкові позиції в кристалі Ni при температурі 750 K, що значно менше, ніж при 0 K, де відсоток становив

~ 25%. Це пов'язано з тепловими коливаннями атомів ґратки, які призводять до випадкових порушень ґратки і зменшують зворотні міжатомні сили релаксації кристала.

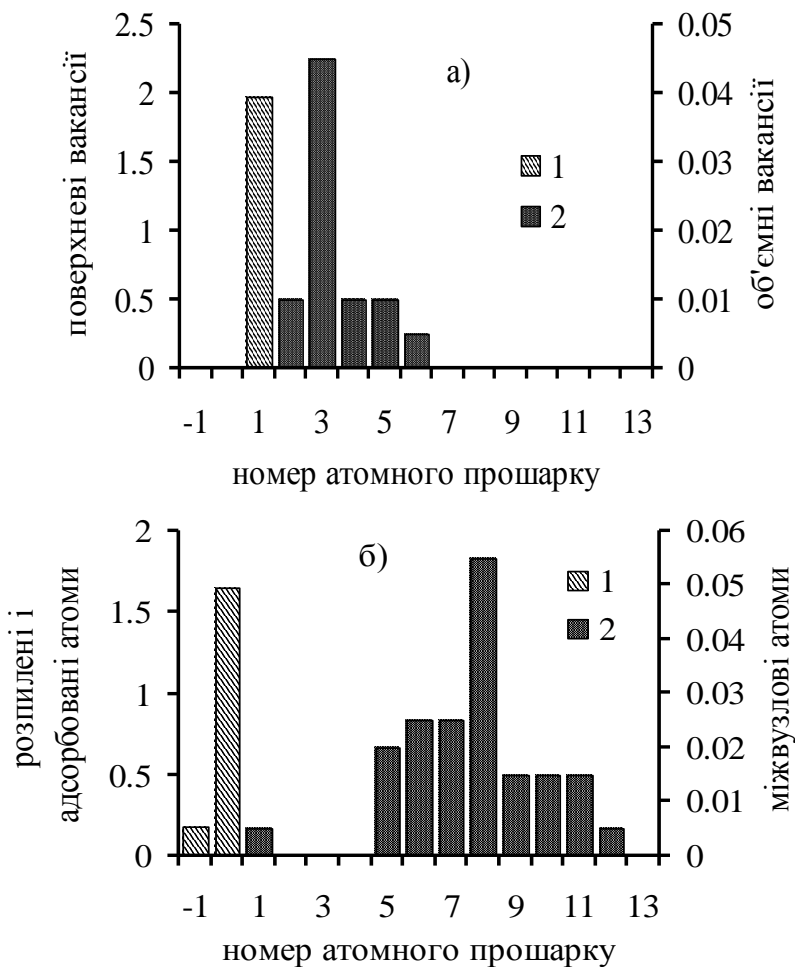


Рис. 3.27. Розподіл генерації стабільних а) вакансій: поверхневих (1) і об'ємних (2), а також б) атомів: адсорбованих/розпилених (1) і міжвузлових (2) у кристалі Ni(100) при 750 К. Енергія іонів Ar – 100 eV [380]

3.7. Генерація точкових дефектів у кристалі Al при 300 К

3.7.1. *Взаємодія Al (100) з іонами Ar з енергією 100 еВ.* У кристалі Al основні енергетичні пружні втрати бомбардуючих іонів Ar мають місце в 2–3-му атомних прошарках, хоч, як показує моделювання, при енергії 100 еВ іони Ar можуть переміщуватися в глибину кристала Al аж до п'ятого атомного прошарку. На відміну від кристала Ni (100), енергетичні пружні втрати у ад-прошарку над поверхнею кристала Al (100), практично, відсутні при температурі 300 К, як і при температурі 0 К. Отриманий коефіцієнт розпилення (0,038 атомів/іон) краще, ніж модельний коефіцієнт розпилення при 0 К, співвідноситься з відомими експериментальними результатами (0,11 атомів/іон) [2], хоч різниця залишається істотною. У таблиці 3.10 представлені дані генерації стабільних дефектів в Al іонами Ar з енергією 100 еВ при 300 К.

Таблиця 3.10 Генерація дефектів іонами 100 еВ Ar у кристалі Al (100) при 300 К

Температура	Υ	N_{in}	N_v	N_{ad}
300 К	0,035	0,71	2,9 (1,6) ^a	2,0

Порівняння з результатами моделювання при температурі 0 К і аналогічних умовах бомбардування, що наведені в таблиці 3.3 (п. 3.2.4), показує, що коефіцієнт розпилення Al, як і слід чекати, практично не змінюється зі зростанням температури в інтервалі 0 К–300 К. Цей результат також було підтверджено виконанням спеціального моделювання коефіцієнта розпилення, яке відрізнялося від стандартного алгоритму часом розрахунку каскадів зіткнень (1 пс) і кількістю виконаних випробувань – 500 модельних каскадів зіткнень для кожної температури: 0 К, 100 К, 200 К, 300 К, 400 К і 500 К [436]. У таблиці 3.11 наведені результати цих випробувань для різних температур. Коефіцієнт розпилення змінюється тільки завдяки статистичним коливанням і не проявляє ніякої температурної залежності.

Таблиця 3.11 Коефіцієнт розпилення Al (100) іонами 100 еВ Ar при різних температурах

Температура, К	0	100	200	300	400	500
Υ (атом/іон)	0,038	0,04	0,028	0,042	0,046	0,036

Дані таблиць 3.3 і 3.10 показують також безумовне зниження генерації стабільних міжвузлових атомів з температурою в інтервалі від 0 К до 300 К, що пов'язано зі зниженням кількості та довжини

послідовностей атомних зіткнень заміщення, які, можливо, відіграють у кристалі Al особливо визначну роль у генерації міжвузлових атомів, якщо врахувати низьку порогову енергію генерації послідовностей в напрямку [110] – 6 еВ (таблиця 3.4, п. 3.2.4). Видно також деяке зростання кількості поверхневих вакансій, що, однак, не пов'язано з генерацією ад-атомів, кількість яких залишається, практично, без зміни. Загальна кількість вакансій, при цьому, трохи знижується за рахунок об'ємних вакансій. Слід зазначити, що розподіл і кількість об'ємних вакансій в кристалі Al критично відрізняється від аналогічного розподілу в кристалі Ni (100), де майже всі вакансії зосереджені в першому атомному прошарку. У кристалі Al (100), як видно з таблиці 3.10, близько 45% вакансій – об'ємні вакансії, що якісно співпадає з даними для кристала Al у випадку температури 0 К. При цьому, кількості вакансій в третьому і четвертому атомних прошарках, практично, не відрізняються одна від одної і становлять ~ 0,4 вакансій/прошарок.

Стабілізація кількості ад-атомів настає через 1,4 пс з початку каскаду, що видно з рис. 3.28 (а), і після 4 пс еволюції каскаду їх кількість дорівнює 2,25 атомів/іон. Як видно з рис. 3.28 (б), стабілізація розподілу міжвузлових атомів за глибиною кристала настає приблизно після 2,5 пс з початку каскаду, хоч незначні зміни у розподілі при температурі 300 К мають місце до кінця розрахунку каскаду, що пов'язано з низькою енергією активації переміщення міжвузлового атома. Динаміка генерації міжвузлових атомів показує, що максимум їх кількості має місце в інтервалі до 0,1 пс з початку каскаду, а найбільш активна стадія їх формування закінчується після 0,6 пс. Після 4 пс еволюції каскаду міжвузлові атоми зберігаються тільки в об'ємі кристала з четвертого по дванадцятий атомні прошарки (0,66 атомів/іон), тоді як протягом перших 2,5 пс значна їх кількість знаходиться також поблизу поверхні. Їх стаціонарна кількість становить ~ 15–20 % від їх початкової кількості. Очевидно, значна кількість нестабільних міжвузлових атомів біля поверхні утворюється в процесі випадкових зіткнень на початку каскаду, і при цьому вакансія і міжвузловий атом не розділяються настільки, щоб утворити стабільну пару точкових дефектів. У глибині кристалу зберігаються переважно міжвузлові атоми, що були утворені в процесі розвитку послідовності атомних зіткнень заміщення від поверхні в кристал.

На рис. 3.28 (а) видно, що, практично, повна стабілізація вакансій настає через 2 пс з початку каскаду. Максимум кількості поверхневих вакансій, а також максимум кількості ад-атомів розташовані в часовому інтервалі до кінця першої пікосекунди, хоч максимальна кількість

поверхневих вакансій ($\sim 3,5$ вакансій/іон при $0,2-0,25$ пс) є значно меншою, ніж максимальна кількість ад-атомів ($\sim 8,0$ ад-атомів/іон при $0,8$ пс), що говорить про утворення значної кількості нестабільних ад-атомів у процесі розвитку каскаду з атомів другого атомного прошарку кристала. При цьому, максимум кількості ад-атомів утворює гострий пік, тоді як близька до максимальної кількість поверхневих вакансій утримується незмінною в інтервалі з $0,2$ пс до $0,9$ пс з початку каскаду, що також можна пояснити різною мобільністю цих дефектів.

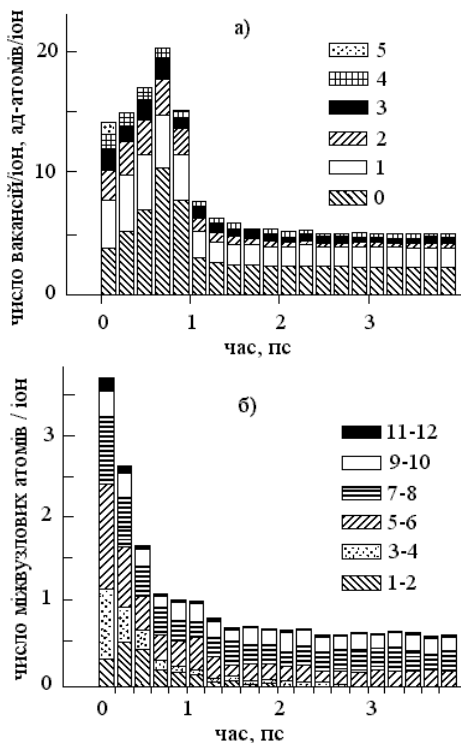


Рис. 3.28. Кінетика генерації а) ад-атомів, вакансій, б) міжвузлових атомів у кристалі Al (100) при 300 К і енергії іонів Ag – 100 еВ. На рисунку вказані номери атомних прошарків, де генеруються дефекти.

0 – прошарок ад-атомів. У момент часу $0,2$ пс в інтервалі 6–12 прошарках кількість неврахованих на рисунку вакансій максимальна (18% від їх загальної кількості), з яких 70% неврахованих вакансій знаходилися в 6–7-му прошарках [310]

Після 4 пс, однак, роль другого і більш глибоко розташованих атомних прошарків у генерації ад-атомів є незначною. Тільки приблизно 1/9 частина всіх ад-атомів утворена з атомів другого прошарку до кінця четвертої пікосекунди. На відміну від кристала Ni, у кристалі Al приблизно 50% усіх стабільних вакансій – об'ємні вакансії, що пов'язано з більш глибоким проникненням іона Ag в кристал Al порівняно з кристалом Ni. Глибоке проникнення іонів Ag в Al, в значній мірі, пов'язано з ефектом «очищення шляху» [416], про що вже говорилося в п. 3.5.4, оскільки Ag для Al – важкий іон. Їх профіль концентрації після 4 пс еволюції каскаду розподіляється за глибиною в інтервалі з першого по шостий атомних прошарках. У початковий період каскаду вакансії розподілялися також і в глибині кристала, хоч їх кількість глибше шостого атомного прошарку була незначною. Після релаксації каскаду кількість стабільних вакансій складала приблизно 30% від їх максимальної кількості. Теж саме можна сказати про ад-атоми, які разом з вакансіями досягають максимального значення своєї кількості після 0,3–0,4 пс з початку каскаду.

3.7.2. *Взаємодія Al з іонами Ar і Xe з енергіями 25, 40, 50 eV.* У роботах [437, 438] було виконано молекулярно-динамічне моделювання атомних каскадів зіткнень, що ініціюються нормально падаючими на поверхню кристала Al (100) іонами Ag і Xe з енергіями 25, 40 і 50 eV при рівноважній температурі 300 K.

3.7.2.1. *Пружні втрати енергії іонів.* На рис. 3.29 наведені розподіли пружних втрат енергії іона за глибиною кристала Al. Відбитими іонами Ag і Xe з кристала виноситься, в середньому, 1–3 eV енергії в розрахунку на один іон. Коефіцієнт відбиття іонів Ag при усіх енергіях іонів дорівнює одиниці, тоді як для іонів Xe він зменшувався зі зростанням початкової енергії (0,96 – 25 eV, 0,73 – 40 eV і 0,44 – 50 eV), чим пояснюється незначне зростання енергії, що виноситься відбитими іонами Ag, тоді як для іонів Xe має місце зворотня тенденція. Із зростанням енергії іонів знижуються пружні втрати енергії обох іонів у прошарку ад-атомів над поверхнею кристала. Як видно з рис. 3.29, іони Xe проникають у кристал глибше, ніж іони Ag, які при початкових енергіях 40 і 50 eV втрачають ~ 90% енергії в першому і другому атомних прошарках, включаючи прошарок ад-атомів. Іони Xe з тими ж енергіями залишають ~ 60% початкової енергії в третьому і четвертому атомних прошарках, що також частково пояснюється роллю ефекту «очищення шляху» [416] перед важким іоном у кристалі легких атомів.

Зміна знаку нормальної до поверхні складової швидкості іона Xe в інтервалі 0,2–0,4 пс з початку каскаду відбувається в результаті

одночасної взаємодії іона з 2–3 вибитими ним з положень рівноваги атомами, що взаємодіють також з більш глибоко розташованими прошарками атомів. Колективне гальмування з наступним відбиттям важкого іона одночасно великою кількістю легких атомів ґратки може розглядатися, як завершення процесу «очищення шляху» легкими атомами мішені перед важким іоном, що моделювалося раніше у [416] для більш високих енергій. У випадку Ag має місце аналогічний механізм відбиття іона, хоч він проявляє себе дещо раніше в інтервалі 0,1–0,2 пс і ближче до поверхні.

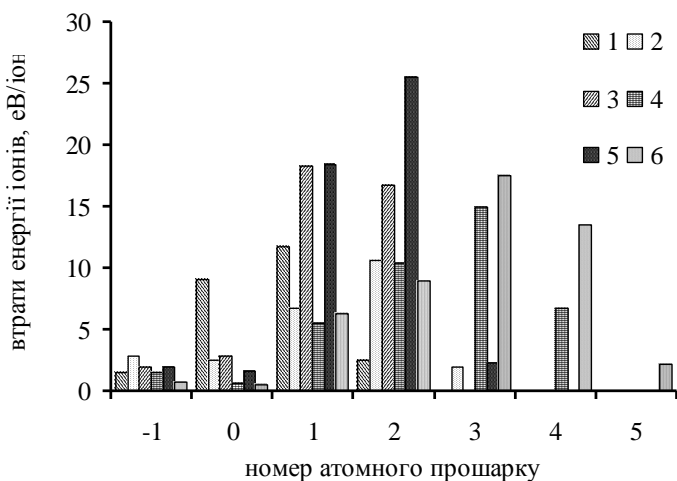


Рис. 3.29. Розподіл пружних втрат енергії іонів за глибиною кристала Al (100) при 300 К у випадках: 1 – 25 еВ, Ag; 2 – 25 еВ, Хе; 3 – 40 еВ, Ag; 4 – 40 еВ, Хе; 5 – 50 еВ, Ag; 6 – 50 еВ, Хе. Прошарки: -1 – енергія, яку уносять іони, що залишають кристал, 0 – ад-прошарок, 1–поверхневий прошарок кристала [437]

3.7.2.2. *Радіаційно-адсорбовані і міжвузлові атоми.* На рис. 3.30 (а) показано, що іони Хе (тут і далі в п. 3.6.2. – криві з темними маркерами) генерують більше стабільних ад-атомів, ніж іони Ag (криві зі світлими маркерами) у всіх випадках. У випадку іонів Хе максимум кількості ад-атомів N_{ad} у каскаді досягається пізніше ($\sim 0,8$ – $1,0$ пс), ніж у випадку іонів Ag ($\sim 0,2$ – $0,6$ пс). Із зростанням початкової енергії обох іонів, максимум генерації зміщується на 0,1–0,2 пс у напрямку зростання часу. Для Ag кількість стабільних ад-атомів дещо зростає зі збільшенням

енергії іонів, тоді як у випадку іонів Хе відбувається стрибок їх кількості в інтервалі енергій іона між 25 еВ і 40 еВ. Стабілізація кількості ад-атомів N_{ad} досягається після 1,1 і 1,5 пс еволюції каскаду, викликаного, відповідно, іонами Ar і Хе.

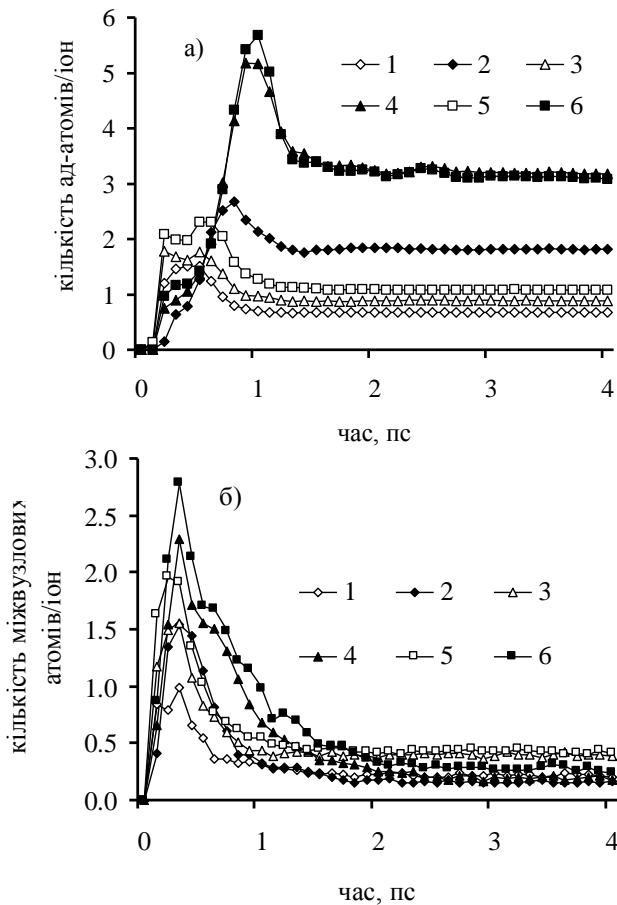


Рис. 3.30. Кінетика генерації а) ад-атомів і б) міжвузлових атомів на поверхні кристала Al (100) з температурою 300 К при бомбардуванні іонами Ar (криві зі світлими маркерами) з енергіями: 1 – 25 еВ, 3 – 40 еВ, 5 – 50 еВ і іонами Хе (криві з темними маркерами): 2 – 25 еВ, 4 – 40 еВ, 6 – 50 еВ [437]

Кількість ад-атомів N_{ad} у випадку іонів Хе при усіх початкових енергіях має область зростання з меншим нахилом у інтервалі 0,2 – 0,4 пс, що є результатом взаємодії поверхневих атомів мішені з налітаючим іоном і первинними атомами віддачі, а також, можливо, наслідком виходу криволінійних послідовностей атомних зіткнень заміщення, що утворюються на поверхні, на цю ж поверхню кристала [421]. При цьому, послідовності атомних заміщень у напрямках $\langle 110 \rangle$ можуть бути утворені в кристалі Al навіть при енергії іонів 25 еВ, оскільки відповідно до [418], про що вже говорилося, порогова енергія генерації послідовності заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ у кристалі Al з потенціалом взаємодії [429] дорівнює ~ 6 еВ. Ці механізми утворення ад-атомів у тому ж часовому інтервалі більш ефективні, як видно з рис. 3.30 (а), у випадку Ag, оскільки іони Ag створюють, у цілому, первинні атоми віддачі Al з великими енергіями і великими складовими швидкостей в площині (100) відносно їх нормальних складових. Так, після 0,1 пс розвитку каскадів з початковою енергією іонів Ag і Хе 25 еВ, відношення нормальної і рівнобіжної компонентів (що в площині (100)) середньоквадратичного зміщення атомів віддачі було, відповідно, 2,9 і 8,45. З рис. 3.30 (а) видно, що утворення ад-атомів іонами Ag, практично, обмежується цими механізмами.

У випадку іонів Хе, кількість ад-атомів N_{ad} досягає максимуму в інтервалі 0,8–1,0 пс у результаті взаємодії поверхневих атомів з відбитими від більш глибоко розташованих атомних прошарків іоном і атомами віддачі. При цьому, імпульс може передаватися поверхневим атомам шляхом утворення 2–3 кроків послідовностей атомних зіткнень заміщення або фокусами в інтервалі 0,4–0,6 пс, спрямованими з об'єму до поверхні, що завершується створенням ад-атома. Іон Хе при цьому може залишатися в кристалі. У свою чергу, іони Хе, що залишають кристал, мають середню енергію 2,5–5,5 еВ, тоді як іони Ag – 1,5–2,0 еВ в залежності від початкової енергії. Тому можливість утворення ад-атома іоном Хе при виході з кристала більша, ніж іоном Ag. Середній час перебування іонів Ag у кристалі дорівнює $\sim 0,5$ пс незалежно від їх початкової енергії, тоді як іони Хе з енергіями 40 і 50 еВ перебувають у кристалі $\sim 1,2$ пс, а з енергією 25 еВ $\sim 0,7$ пс, що узгоджується з характерним часом досягнення максимумів кількості ад-атомів N_{ad} .

Як видно з рис. 3.30 (б), стабілізація кількості міжвузлових атомів у випадку іонів Ag настає після 1,0–1,6 пс розвитку каскаду, тоді як у випадку іонів Хе – після 1,7–2,5 пс. Іони Хе генерують більше міжвузлових атомів у інтервалі $\sim 0,2$ –1,5 пс. У випадку іона Ag, після 2 пс еволюції каскаду, в кристалі залишається неістотно більше

міжвузлових атомів, що, очевидно, пов'язано з більшою ймовірністю утворення послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ іонами Ag на стадії зіткнень. Ще одним механізмом утворення міжвузлових атомів у кристалі Al можуть бути переміщення атомів віддачі Al всередину кристала на 1,5–2,0 сталих ґратки [311, 312, 431]. У випадку іонів Ag і Xe з енергією 50 еВ таких переміщень виникає $\sim 0,35$ переміщень/іон. Час появи максимуму числа міжвузлових атомів N_{in} ($\sim 0,2$ – $0,3$ пс) не залежить від енергії і типу іона і збігається з характерним часом утворення ад-атомів на стадії зіткнень каскаду, що говорить про однотипність механізмів утворення цих дефектів на інтервалі 0,2–0,5 пс.

3.7.2.3. *Поверхневі і об'ємні вакансії.* Як показано на рис. 3.31(а), максимум числа поверхневих вакансій $N_{v,s}$ (вакансій в першому атомному прошарку) знаходиться в інтервалі 0,2–0,3 пс незалежно від початкової енергії іонів Ag. Стабілізація поверхневих вакансій $N_{v,s}$ настає після 1,2–1,6 пс з початку каскаду. У випадку іонів Xe, мають місце два максимуми числа поверхневих вакансій $N_{v,s}$. Перший максимум виникає в тому ж часовому інтервалі, що і у випадку іонів Ag при усіх початкових енергіях іонів. Час виникнення другого максимуму кількості поверхневих вакансій залежить від початкової енергії іона, оскільки при енергії іонів 25 еВ він з'являється в інтервалі 0,6–0,7 пс, а при енергіях іонів 40 і 50 еВ – у інтервалі 1,0–1,1 пс. Другий максимум кількості поверхневих вакансій $N_{v,s}$ утворюється тими іонами Xe, що неглибоко (1–3 атомних прошарки) проникають у кристал і мають достатню енергію, для того щоб, залишаючи мішень або просто змінюючи швидкість руху в напрямку [100] на протилежну, утворити ад-атом і поверхневу вакансію. Стабілізація поверхневих вакансій у випадку іонів Xe настає після 1,7–2,5 пс з початку каскаду. Число стабільних поверхневих вакансій при енергіях 25 і 40 еВ більше у випадку іонів Xe, тоді як при енергії 50 еВ після 2,3 пс еволюції каскаду кількість поверхневих вакансій неістотно більша у випадку іонів Ag.

З рис. 3.31 (б) видно, що максимуми числа об'ємних вакансій $N_{v,b}$ при різних енергіях іонів Ag і Xe виникають у тих же часових інтервалах, що і максимуми поверхневих вакансій $N_{v,s}$, внаслідок однотипності механізмів їх генерації. Іони Xe генерують помітно більше стабільних об'ємних вакансій, ніж іони Ag, що пов'язано з більш глибоким проникненням важких іонів у кристал і відповідними переміщеннями атомів з об'єму до поверхні. Як і для поверхневих вакансій, існує стрибок кількості стабільних об'ємних вакансій в інтервалі між 25 і 40 еВ енергії іонів Xe. При початковій енергії іонів

25 еВ після 4 пс розвитку каскаду має місце просторове розділення вакансій і міжвузлових атомів, які знаходяться, відповідно, в 1–3-му і 4–12-му атомних прошарках, тоді як при енергіях 40 і 50 еВ спостерігається перекриття їх профілів генерації в 4–6-му атомних прошарках.

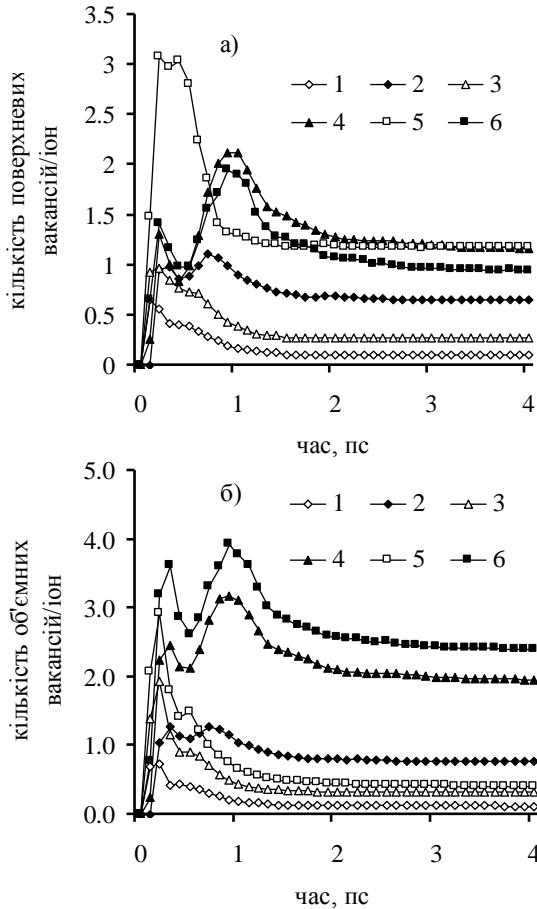


Рис.3.31. Кінетика генерації а) поверхневих, б) об'ємних вакансій на поверхні кристала Al(100) при бомбардуванні іонами Ar і Xe з енергіями: 1 – 25 еВ, 3 – 40 еВ, 5 – 50 еВ і іонами Хе: 2 – 25 еВ, 4 – 40 еВ, 6 – 50 еВ [437]

3.8. Генерація точкових дефектів у кристалі Al/Ni при 300 К

3.8.1. *Взаємодія Al/Ni з іонами Ar з енергією 100 eV.* У двошаровому кристалі Al/Ni основні енергетичні пружні втрати іонів Ar мають місце в першому атомному прошарку. Модельний коефіцієнт розпилення цього кристала, як видно з таблиці 3.12, дорівнює 0,33 атома/іон і визначається тільки атомами Al, що залишають перший атомний прошарок.

На рис. 3.32 (а) значні зміни кількості ад-атомів Al на поверхні кристала Al/Ni мають місце навіть після 2 пс з початку каскаду. При цьому, максимальна кількість ад-атомів Al генерується протягом першої пікосекунди, а на початку другої пікосекунди має місце значне зниження кількості ад-атомів, що пов'язано зі структурними релаксаційними змінами на поверхні двошарового кристала Al/Ni. Кількість ад-атомів Al на поверхні кристала Al/Ni після 4 пс еволюції каскаду, як видно з таблиці 3.12, сягає 3,47 атомів/іон, що дорівнює ~ 40% від їх максимальної кількості, тоді як генерація ад-атомів Ni з матриці незначна і нестабільна. Після закінчення розрахунку каскаду на поверхні залишається тільки 0,04 атомів/іон з матриці Ni.

Таблиця 3.12 Генерація дефектів у кристалі Al/Ni іонами 100 eV Ar при 300 К

Мішень	Y	N_{in}	N_v	N_{ad}
Al	0,33	0,01	4,6	3,4
Ni	-	0,19	0,12	0,04

Як видно з рис. 3.32 (б), протягом першої пікосекунди міжвузлові атоми Ni розподіляються по всій області атомного каскаду, однак, після 2 пс еволюції каскаду, значна їх частина залишається тільки у глибині кристала завдяки рекомбінації приповерхневих міжвузлових атомів з вакансіями, більша частина яких знаходиться біля поверхні кристала. Після 4 пс еволюції каскаду, стабільні міжвузлові атоми Ni залишаються тільки у 6–11-му атомних прошарках (0,2 атомів/іон, як видно з таблиці 3.12). Більша їх частина, однак, зосереджена в 8–9-му атомних прошарках. При цьому, мають місце слабкі зміни кількості міжвузлових атомів у прошарках аж до кінця моделювання каскаду. Разом з тим, незначна кількість нестабільних міжвузлових атомів Ni знаходиться в першому атомному прошарку до кінця четвертої пікосекунди. Як видно з рис. 3.32 (б), протягом 4 пс незначна кількість міжвузлових атомів Al (0,005 атомів/іон після 4 пс) також була ідентифікована комп'ютерною програмою в першому атомному прошарку кристала Al/Ni. У цілому ж, стабільні міжвузлові атоми в

Al/Ni складають близько 12% від їх загальної максимальної кількості, яка досягається в перші 0,2 пс з початку каскаду.

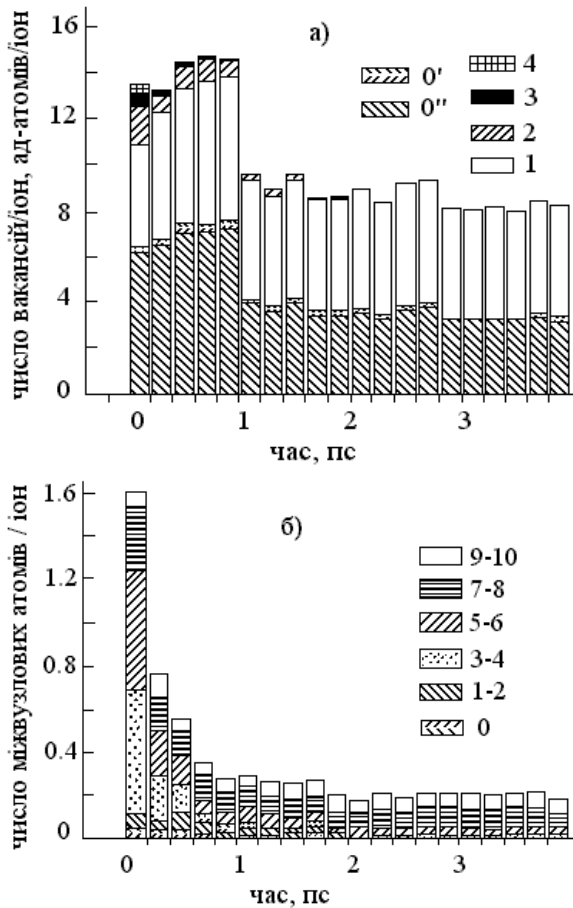


Рис. 3.32. Кінетика генерації а) ад-атомів і вакансій, б) міжвузлових атомів на поверхні кристала Al/Ni (100) при температурі 300 К і енергії іонів Ar 100 еВ. 0' – ад-атоми Ni, 0'' – ад-атоми Al. На рисунку а) в момент часу 0,2 пс у інтервалі з 5-го по 9-й прошарках кількість неврахованих вакансій була максимальна і дорівнювала 0,6% від їх загальної кількості. На рисунку б) 0 – міжвузлові атоми Al у першому прошарку кристала Al/Ni [310]

Як видно з рис. 3.32(а), розподіл вакансій за глибиною двошарового кристала Al/Ni стає відносно стабільним після 2,0–2,5 пс еволюції каскаду. Максимум кількості поверхневих вакансій досягається, в цілому, в той самий час, що і максимум кількості ад-атомів. Після 4 пс еволюції каскаду, 5,1 стабільних вакансій, з яких більшість – 5,02 вакансій/іон – поверхневі вакансії, розташовуються в двошаровому кристалі Al/Ni в 1–4-му атомних прошарках. Як видно з рис. 3.32 (а), поверхневі вакансії демонструють дуже незначну релаксацію, і їх стабільна кількість у кінці каскаду мало відрізняється від їх максимальної кількості. Це пов'язано з реструктуризацією поверхні завдяки присутності вакансій в першому атомному прошарку, що призводить до стану, в якому немає поверхневих зворотних міжатомних сил, які б могли повернути систему до початкового стану. Вакансії в об'ємі двошарового кристала Al/Ni, практично, повністю рекомбінують з міжвузловими атомами в перші 2,0–2,5 пс розвитку каскаду. Як і в кристалі Ni, в кристалі Al/Ni має місце розділення за глибиною кристала стабільних міжвузлових атомів і вакансій, що залишилися після релаксації каскаду.

З порівняння балансів міжшарових атомних переміщень у кристалах Al, Ni та Al/Ni для першого атомного прошарку видно, що кількість поверхневих вакансій в монокристалах Al і Ni визначається тільки міжшаровими переміщеннями атомів і розпиленням, тоді як у випадку кристала Al/Ni кількість поверхневих вакансій перевищує кількість поверхневих вакансій, що визначається цими механізмами, на 0,86 вакансій/іон. Це пов'язано, принаймні частково, з релаксацією пружних напруг в першому атомному прошарку двошарового кристала Al/Ni, які призводять до переміщення атомів Al уздовж межі розподілу компонентів у області падіння іона, не залишаючи перший прошарок. Зміщення атомів може супроводжуватися, як показує моделювання, реєстрацією комп'ютерною програмою додаткових поверхневих вакансій, утворення яких не пов'язано безпосередньо з виходом атомів Al з першого атомного прошарку.

3.8.2. *Порівняння генерації дефектів у кристалах Al/Ni, Al і Ni при бомбардуванні іонами Ar з енергією 100 eV.* Закон збереження маси відносно радіаційних дефектів у Al/Ni виконується з відхиленням ~ 16%, тоді як для кристалів Al і Ni ця величина значно менша, про що вже говорилося. Головна причина значного відхилення пов'язана з локальною реструктуризацією Al поверхні кристала Al/Ni в області падіння іона завдяки різниці сталих ґратки кристалів Al і Ni.

Генерація поверхневих вакансій в усіх трьох системах відбувається завдяки генерації ад-атомів, а також, в незначній мірі, завдяки розпиленню. У доповнення до цього, потік атомів віддачі між першим атомним прошарком та об'ємом кристала Al/Ni також впливає на кількість поверхневих вакансій, а саме, зменшує їх кількість у кристалі Al, однак, збільшує кількість вакансій в кристалі Ni і двошаровому кристалі Al/Ni. Кількість стабільних поверхневих вакансій в Al, Ni і Al/Ni при температурі кристалів 300 K на 10–20% більша ніж при температурі кристала 0 K. Кількість об'ємних стабільних вакансій трохи зменшується з температурою в кристалах Ni і Al завдяки зростанню ймовірності рекомбінації об'ємних дефектів із збільшенням температури [313]. У випадку монокристала Al, де кількість стабільних об'ємних вакансій складає ~ 50% від їх загальної кількості, кількість об'ємних вакансій при 300 K на ~ 25% нижче порівняно з їх кількістю при температурі 0 K. У двошаровому кристалі Al/Ni спостерігаються тільки незначні зміни у кількості об'ємних вакансій при температурі 300 K порівняно з випадком температури кристала 0 K.

Розподіли вакансій за глибиною при температурі 300 K в кристалах Al, Ni і Al/Ni представлені на рис. 3.33 (а). Як видно з рисунку, вакансії в підкладинці Ni двошарового кристала Al/Ni при 0 K і 300 K розподілені аж до шостого атомного прошарку включно. Загальна кількість вакансій в кристалі Al/Ni є найбільшою. Близько 25% всіх вакансій в кристалах Al і 35% вакансій в кристалах Ni зберігаються після 4 пс еволюції каскаду. Максимальні кількості вакансій в Al і Ni на початку розвитку каскаду були більші на 80% і 15%, відповідно, при температурі 300 K порівняно з випадком температури 0 K. Різний характер змін кількості вакансій в Al і Ni пов'язаний з більшими значеннями енергії когезії та порогової енергії переміщення атомів у кристалі Ni [418, 432]. Подібна тенденція має місце також і для ад-атомів. Час релаксації вакансій і ад-атомів становить близько 1 пс в Ni і 2 пс в Al. У кристалі Al/Ni максимальна кількість поверхневих вакансій формується після 0,9 пс. Вона на 20% вища при температурі 300 K порівняно з максимальною кількістю поверхневих вакансій при температурі кристала 0 K. При 300 K 80% від максимальної кількості поверхневих вакансій (5,7 вакансій/іон після 1 пс) і тільки 4% від максимальної кількості об'ємних вакансій (3,2 вакансій/іон після 0,1 пс) зберігаються після 4 пс еволюції каскаду. Частково, низьке відпалювання поверхневих вакансій в Al/Ni пов'язується з реструктуризацією поверхні, про що вже говорилося. Відпалювання вакансій підкладинки істотніше у двошаровому кристалі Al/Ni порівняно з кристалом Ni, де 8% від максимальної кількості внутрішніх

вакансій (1,6 вакансій/іон) залишається після 4 пс еволюції каскаду. Однак, абсолютні кількості внутрішніх стабільних вакансій в кристалах Al/Ni і Ni, практично, однакові, що видно з таблиць 3.9 і 3.12.

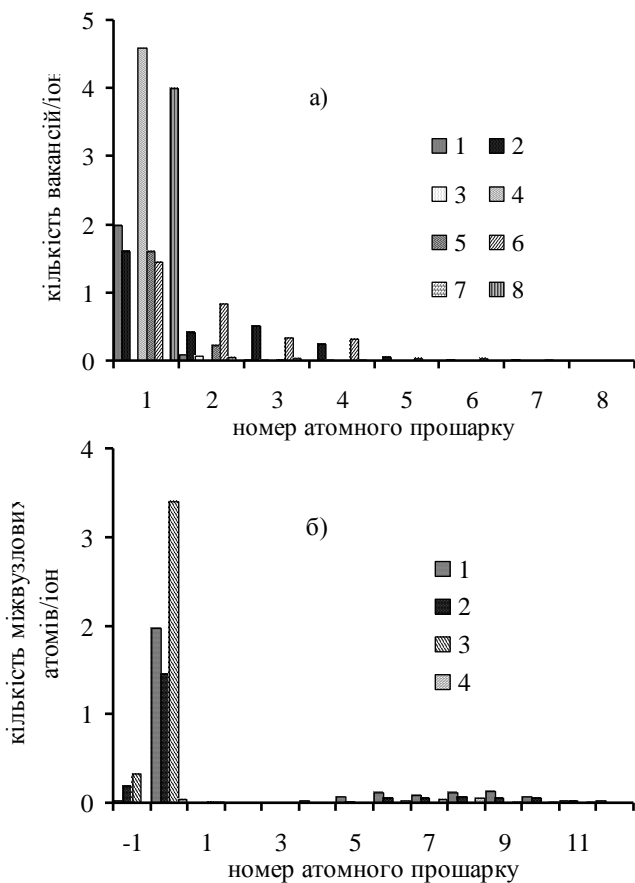


Рис. 3.33. а) Вакансії, б) міжвузлові атоми у кристалах Al, Ni, Al/Ni при енергії іонів Ar 100 еВ. а) 1 – Ni (300 K), 2 – Al (300 K), 3 – вакансії в Ni матриці Al/Ni (300 K), 4 – вакансії в прошарку Al кристала Al/Ni (300 K), 5 – Ni (0 K), 6 – Al (0 K), 7 – вакансії в Ni матриці Al/Ni (0 K), 8 – вакансії в прошарку Al кристала Al/Ni (0 K). б) 1 – Al (300 K), 2 – Ni (300 K), 3 – міжвузлові атоми Al в Al/Ni, 4 – міжвузлові атоми Ni в Al/Ni (300 K) [312]

Кількість стабільних міжвузлових атомів при температурі 300 К складає тільки 60% від аналогічної кількості при температурі 0 К для обох монокристалів Ni і Al. У двошаровому кристалі Al/Ni кількість об'ємних міжвузлових атомів ідентична при температурах 0 К і 300 К. Це пов'язано з низькою кількістю об'ємних міжвузлових атомів і об'ємних вакансій в кристалі Al/Ni при обох температурах 0 К і 300 К. Кінцевий розподіл міжвузлових атомів при температурі 300 К після 4 пс еволюції каскаду наводиться на рис. 3.33 (б). Стабільні міжвузлові атоми у кристалах Al і Ni становлять, відповідно, 18% і 27% від їх максимальної кількості. У всіх випадках розподіли міжвузлових атомів за глибиною кристалів стають стабільними після 2,0–2.5 пс еволюції каскаду.

Кількість ад-атомів у кристалі Ni при температурі 300 К на 40% більша, ніж при 0 К, тоді як у випадках кристала Al і двошарового кристала Al/Ni вплив температури незначний. У випадку кристала Ni усі ад-атоми були породжені з атомів першого атомного прошарку, тоді як у випадку монокристала Al близько 10% ад-атомів (8% при 0 К) були породжені атомами, що були початково розташовані в другому атомному прошарку. У двошаровому кристалі Al/Ni, практично, усі ад-атоми – атоми Al, а внеском атомів Ni у генерацію ад-атомів можна знехтувати. Релаксації кількості ад-атомів і поверхневих вакансій мають подібні часові залежності, оскільки головна частина вакансій генерується в першому атомному прошарку завдяки генерації ад-атомів. Деяка різниця в кінетиках цих типів дефектів виникає завдяки втручанням інших механізмів генерації вакансій, як наприклад, розпиленню та атомним переміщенням між першим атомним прошарком та об'ємом кристала, а також локальній реструктуризації поверхні у випадку кристала Al/Ni. Після 4 пс еволюції каскаду стабільні ад-атоми на поверхнях кристалів Ni, Al та Al/Ni складають, відповідно, 40%, 25% та 62% від їх максимальних кількостей в процесі еволюції каскадів. Максимальні кількості ад-атомів при температурі 300 К на 10–20% більші, ніж при температурі 0 К для всіх трьох типів кристалів.

У кристалах Ni та Al/Ni кінцеві розподіли вакансій і об'ємних міжвузлових атомів за глибиною демонструють чітке просторове розділення, тоді як у кристалі Al існує слабе перекриття розподілів цих дефектів за глибиною. Значно більша генерація об'ємних вакансій і міжвузлових атомів у кристалі Al порівняно з кристалами Ni та Al/Ni може бути пояснена сумісним внеском довгих атомних переміщень (більше, ніж через два атомних прошарки) та послідовностями атомних зіткнень заміщення. Детальний аналіз даних, отриманих за допомогою

молекулярно-динамічного моделювання показує, що довгі атомні переміщення можуть бути відповідальними за генерацію $\sim 0,5$ пар відповідних дефектів за один атомний каскад за обох температур 0 К і 300 К.

3.8.3. *Генерація дефектів у Al/Ni іонами Ar і Xe з енергіями 25–50 eV.* У роботі [439] було розглянуто випадок бомбардування двошарового кристала Al/Ni іонами Ar і Xe з енергіями 25–50 eV при рівноважній температурі кристала 300 К. У таблицях 3.13 і 3.14 наведені дані про усереднені за числом випробувань кількості поверхневих $N_{v,s}$ і об'ємних $N_{v,v}$ вакансій, міжвузлових N_{in} і радіаційно-адсорбованих N_{ad} атомів, а також атомів, що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца N_{ws} , відповідно, в кристалах Al/Ni і Ni після 4 пс еволюції каскаду. Дані в чисельнику комірок таблиці 3.13, відносяться до прошарку атомів Al, а в знаменнику – до підкладинки Ni двошарового кристала Al/Ni.

Таблиця 3.13 Генерація дефектів у двошаровому кристалі Al/Ni за один каскад

Al/Ni		N_{ws}	$N_{v,s}$	$N_{v,v}$	N_{in}	N_{ad}
Ar	25 eV	2,15 / 0,34	1,02	0,0	0,0	0,95 / 0,0
	50 eV	8,59 / 3,14	2,57	0,02	0,025 / 0,06	2,19 / 0,01
Xe	25 eV	2,47 / 0,6	1,06	0,01	0,0	0,95 / 0,0
	50 eV	10,6 / 3,37	3,04	0,06	0,005 / 0,015	2,89 / 0,025

Таблиця 3.14 Генерація дефектів у монокристалі Ni за один каскад

Ni		N_{ws}	$N_{v,s}$	$N_{v,v}$	N_{in}	N_{ad}
Ar	25 eV	0,39	0,13	0,0	0,0	0,125
	50 eV	2,88	0,63	0,05	0,12	0,52
Xe	25 eV	0,81	0,25	0,01	0,0	0,255
	50 eV	3,32	0,71	0,0	0,21	0,48

З таблиці видно, що кількість переміщень атомів N_{ws} у нікелевій підкладинці двошарового кристала Al/Ni і в кристалі Ni відрізняються неістотно, тоді як кількість переміщень атомів Al у кристалі Al/Ni за таких самих умов бомбардування в 2–6 разів більша в залежності від енергії і типу іона. Виходячи зі значень N_{ad} і N_{ws} , що наведені в таблиці 3.13, а також з огляду на результати модельних розрахунків переходів атомів Al до підкладинки кристала Al/Ni, кількості переміщень атомів Al за межі своїх комірок Вігнера – Зейтца уздовж поверхневого прошарку без переходу до підкладинки або до ад-прошарку складали 0,91 і 5,25 переміщень/іон для іонів Ar і 1,02 і 6,2 переміщень/іон для іонів Xe при енергіях іонів, відповідно, 25 і 50 eV. Дані таблиці 3.14

показують, що в монокристалі Ni кількість таких переміщень каскадних атомів у декілька разів менша, оскільки загальне число переміщень атомів N_{ws} є малим порівняно з двошаровим кристалом Al/Ni.

Тип іона неістотно впливає на число переміщень атомів Al у першому прошарку двошарового кристала Al/Ni, тому що механізм цих переміщень визначається факторами, які не залежать від типу іона. Вивчення поверхні модельного кристала Al/Ni після загасання каскаду показало, що в першому прошарку в області падіння іона, відбувається локальна перебудова атомної структури, що супроводжується значним числом переміщень атомів Al, і це обумовлено розходженням сталих ґратки кристалів Al (0,405 нм) і Ni (0,352 нм). Така локальна перебудова поверхневого прошарку стає можливою завдяки вільному простору, що утворюють 1–3 поверхневі вакансії, які виникають у першому прошарку протягом одного каскаду. При цьому, крайові ряди атомів Al по периметру першого прошарку двошарового кристала Al/Ni не змінювалися. У кристалі Ni такий ефект не спостерігався, що підтверджується малими значеннями N_{ws} і $N_{v,s}$ у таблиці 3.14.

На рис. 3.34 і рис.3. 35 наведені усереднені за числом випробувань залежності кількості дефектів від часу розвитку каскадів у кристалах Ni і Al/Ni при енергії іонів 50 еВ. Очевидно, що кількість дефектів різних типів у монокристалі Ni і в підкладинці двошарового кристала Al/Ni зменшується в два і більше разів після 0,5–0,7 пс еволюції каскаду. Кількості поверхневих вакансій і Al ад-атомів у двошаровому кристалі Al/Ni, як видно з рис. 3.35, досягаючи максимального значення протягом першої пікосекунди, неістотно зменшуються за час релаксації каскаду. При цьому, поверхневі вакансії в двошаровому кристалі Al/Ni, незалежно від типу іона, показують коливальну нестабільність після 1 пс, що свідчить про існування низькоенергетичного процесу проходження атомів Al поблизу вузлів початкової ґратки. Якісно такі ж часові залежності утворення Al ад-атомів і поверхневих вакансій в кристалі Al/Ni спостерігалися і при енергії іонів 25 еВ. Різний характер залежностей кількості поверхневих дефектів від часу розвитку каскаду в кристалі Al/Ni з одного боку і об'ємних дефектів в підкладинці кристала Al/Ni, а також дефектів у монокристалі Ni з іншого боку, також пов'язується з локальними змінами атомної структури поверхневого прошарку Al в кристалі Al/Ni. Цей процес не супроводжується появою додаткових зворотних міжатомних сил, які змогли б повернути систему до початкової атомної структури поверхні і не призводить до ефективної рекомбінації поверхневих вакансій і ад-атомів в кристалі Al/Ni. Слід відзначити, що в кристалі Ni кінетика генерації поверхневих і об'ємних вакансій демонструє тільки один пік, тоді як у випадку

кристала Al спостерігалось два піки кількості генерованих поверхневих і об'ємних вакансій.

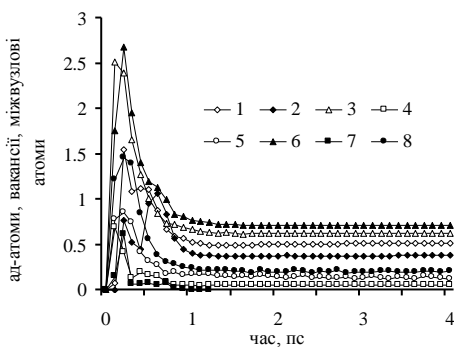


Рис. 3.34. Залежність генерації ад-атомів (криві 1, 2), поверхневих (криві 3, 6) і об'ємних (криві 4, 7) вакансій, міжвузлових атомів (криві 5, 8) у кристалі Ni від часу розвитку каскаду при енергії бомбардування іонів Ag (криві зі світлими маркерами) і Хе (криві з темними маркерами) – 50 еВ і температурі 300 К [439]

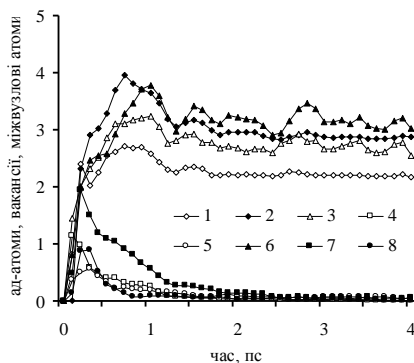


Рис. 3.35. Залежність генерації ад-атомів Al (криві 1, 2), поверхневих (у монопрошарку Al, криві 3, 6) і об'ємних (у підкладинці Ni, криві 4, 7) вакансій, міжвузлових атомів Ni (криві 5, 8) у двошаровому кристалі Al/Ni від часу розвитку каскаду при енергії бомбардування іонів Ag (криві зі світлими маркерами) і Хе (криві з темними маркерами) – 50 еВ і температурі кристала 300 К [439]

Моделювання також показало, що в кристалі Al/Ni утворюється в 4–10 разів менше міжвузлових атомів у порівнянні з кристалом Ni при енергії іонів 50 еВ, як і при енергії іонів 100 еВ, про що вже говорилося в п. 3.4.3 і 3.8.1. Очевидно, прошарок атомів Al на нікелевій підкладинці, утруднюючи передачу енергії всередину зразка внаслідок розходження атомних мас компонентів, знижує можливість виникнення послідовностей атомних зіткнень заміщення, що є основним механізмом утворення стабільних міжвузлових атомів і призводить, до утворення взаємно компенсованих атомних переміщень. Крім того, зниження кількості виникаючих послідовностей атомних зіткнень заміщення з поверхні в глибину кристала пов'язується також з низькою ймовірністю входження атома Al, що має великий розмір, у ґратку підкладинки Ni. При цьому, ймовірність виникнення послідовності атомних зіткнень у напрямку $\langle 110 \rangle$ є більшою, оскільки у цьому напрямку відстань між атомами поперек напрямку більша, ніж у випадку напрямку $[100]$. Цим пояснюється зменшення кількості послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямку $[100]$ двошарової системи Al/Ni. Цей ефект може бути основою для створення нових матеріалів з підвищеною радіаційною стійкістю по відношенню до низькоенергетичного іонного бомбардування. У тих випадках, коли після 4 пс еволюції каскадів у Ni і Al/Ni залишалися об'ємні вакансії і міжвузлові атоми Ni, спостерігався їх розподіл за глибиною, а саме, вони розташовувалися, відповідно, в 2–3-му і 5–10-му прошарках. Міжвузлові атоми Al у кристалі Al/Ni після 4 пс спостерігалися тільки у 1–2-му прошарках.

При бомбардуванні іонами Ar з енергією 50 еВ кількість ад-атомів була більшою в двошаровому кристалі Al/Ni у порівнянні з кристалом Ni у 4,3 рази, а при енергії 25 еВ – у 7,5 разів. Для іонів Xe з енергіями 50 еВ і 25 еВ кількість ад-атомів була більшою в кристалі Al/Ni, відповідно, в 6,0 і 3,7 разів. У жодному випадку при енергії 50 еВ, кількість ад-атомів, генерованих з другого прошарку, не перевищувала 5% від їх загального числа, а при енергії 25 еВ ад-атоми, що вийшли з другого прошарку, не спостерігалися. Великій кількості ад-атомів на поверхні двошарового кристала Al/Ni сприяє, в першу чергу, невелика енергія зв'язку поверхневих атомів Al. Так, при температурі 0 К, різниця потенціальних енергій ідеального кристала Al/Ni і кристала без одного поверхневого атома і без врахування релаксації ґратки становила 3,9 еВ, тоді як для кристала Ni – 5,2 еВ [310–312]. Про роль поверхневих енергій зв'язку говорить також те, що модельний коефіцієнт розпилення двошарового кристала Al/Ni іонами Ar з енергією 50 еВ був 0,06 атомів/іон, тоді як розпилення кристала Ni не спостерігалось.

Ефект розпилення кристалів іонами Хе не був виявлений в жодному з модельних випадків.

Кінетика генерації ад-атомів, виникаючих у кристалі Ni під дією бомбардуючих іонів Хе при енергії 50 еВ, як і у випадку кристала Al, призводить до утворення двох піків кількості ад-атомів у межах $\sim 0,2$ пс і $\sim 0,6$ пс із початку каскаду, тоді як у випадку іонів Ag єдиний максимум досягається через $\sim 0,2$ пс з початку каскаду. Іони Ag і Хе генерують, практично, однакову кількість стабільних ад-атомів при енергії 50 еВ (0,52 і 0,48 ад-атомів/іон), тоді як при енергії 25 еВ іони Хе генерують майже у два рази більше ад-атомів, ніж іони Ag (0,225 і 0,125 ад-атомів/іон). В інтервалі 0,1 – 0,3 пс генерація ад-атомів здійснюється за рахунок взаємодії іона, що налітає, і первинних атомів віддачі з поверхневими атомами. Утворення ад-атомів іонами Ag, практично, обмежується цими механізмами, які в інтервалі 0,1 – 0,5 пс більш ефективні у випадку Ag. Це підтверджується кількістю ад-атомів на початковому етапі каскаду і пов'язано з ефективністю передачі енергії атомам кристала Ni іонами Ag і Хе.

Висновки до глави 3

Результати, отримані на кристалі Cu (100) при енергії іонів Ag 100 еВ з використанням багаточастинкового та парного атомних потенціалів показали, що застосування парних потенціалів для розрахунків усього каскаду є недоцільним, оскільки вони призводять до значних похибок у законах збереження маси і енергії (до 25%).

Модельний коефіцієнт розпилення кристала Cu (100) іонами Ag з енергією 100 еВ неістотно відрізняється при температурах 300 К і 500 К, тоді як при 0 К розпилення було вдвічі меншим. Коефіцієнт розпилення кристала Al/Ni залишався сталим при температурах 0 К і 300 К. У Ni і Al розпилення не змінювалося істотно при температурах моделювання, відповідно, 0 К–750 К і 0 К–500 К. Коефіцієнти розпилення Cu і Ni при енергії іонів Ag 100 еВ добре відповідають експериментальним даним [2], тоді як коефіцієнт розпилення Al був у три рази менший ніж очікувалося.

Генерація міжвузлових атомів у кристалах Cu, Ni і Al зменшується з температурою завдяки рекомбінації з вакансіями, тоді як генерація поверхневих вакансій збільшується. У Cu і Ni збільшення кількості поверхневих вакансій відбувається завдяки зростанню генерації ад-атомів. У Al кількість ад-атомів неістотно зростає з температурою. У Ni кількість вакансій збільшується незначним чином в інтервалі температур 0 К–750 К, що пов'язано зі значними енергіями зв'язку між

атомами у цьому кристалі. Об'ємні вакансії не демонструють певної залежності від температури у Cu, що є наслідком недостатньої статистики випробувань, тоді як у Al і Ni кількість об'ємних вакансій зменшується зі зростанням температури, що пов'язується з двома факторами: зростанням активності атомних переміщень у каскадах і, відповідно, ймовірності рекомбінації з міжвузловим атомом та скороченням довжини послідовностей атомних зіткнень заміщення зі зростанням температури. У Al/Ni не спостерігалось значної різниці у кількості дефектів при температурах 0 K і 300 K. Для Al/Ni спостерігається якісна аналогія з кристалами Al і Ni для, відповідно, поверхневих і об'ємних дефектів. У Al/Ni значна кількість переміщень атомів пов'язується зі взаємним розчиненням компонентів і тому неістотно залежить від температури.

У кристалі Al генерується значно більше вакансій, міжвузлових атомів та ад-атомів, ніж у Ni. Іони Ag з енергією 100 eV втрачають, практично, всю енергію в першому атомному прошарку кристала Ni, тоді як у Al глибина розподілу енергії іона сягає п'яти атомних прошарків. Це пов'язується з каналюванням іонів атомів Ag у напрямках $\langle 110 \rangle$ у кристалі Al (100), а також з неможливістю відбиття Ag на значні кути при однократному зіткненні з атомом Al. Значну роль у зниженні втрат енергії важких іонів біля поверхні легких атомів відіграє також ефект «очищення шляху», який вперше моделювався в [416] у межах інших МД моделей.

Іони Ag створюють більше ад-атомів і поверхневих вакансій в Cu (100) при енергії 40 eV і 50 eV і температурах кристала 0 K і 300 K, тоді як іони Xe – більше вакансій глибше першого атомного прошарку. Це пов'язано з розходженням у розподілах пружних втрат енергії іонів за глибиною кристала Cu і напрямках переважного руху атомів віддачі. При цьому, максимум втрат енергії іонів Xe припадає на другий атомний прошарок, тоді як іонів Ag – на перший прошарок.

У розглянутих кристалах має місце розділення стабільних вакансій і міжвузлових атомів за глибиною, що пов'язується зі значним внеском послідовностей атомних зіткнень заміщення в утворення пар стабільних дефектів. При цьому генерація поверхневих вакансій домінує над генерацією об'ємних вакансій, за винятком Al (100), у якому кількості генерованих об'ємних і поверхневих вакансій приблизно однакові. У всіх випадках значна кількість поверхневих вакансій пов'язана також з генерацією ад-атомів. У Al (100) значним виявився потік атомів віддачі з об'єму до першого атомного прошарку, що зменшує кількість поверхневих вакансій і збільшує кількість об'ємних вакансій.

У кристалах Al/Ni і Ni/Al спостерігається значна генерація ад-атомів. У Ni/Al істотна частка ад-атомів генерується не тільки завдяки атомам першого прошарку, але й другого і навіть третього прошарків. У кристалах Al/Ni і Ni/Al істотна кількість поверхневих вакансій реєструється завдяки локальній перебудові поверхневого прошарку. Навіть після 4 пс еволюції каскаду в першому прошарку цих кристалів продовжуються процеси перебудови ґратки, що пов'язано з різницею сталих ґратки Al і Ni. Релаксація каскаду неістотно змінює кількість поверхневих вакансій і ад-атомів, оскільки на поверхнях Al/Ni і Ni/Al завдяки ґратковим змінам практично відсутні зворотні релаксаційні сили, тоді як міжвузлові атоми і об'ємні вакансії ефективно відпалюються в Al/Ni і Ni/Al. У підкладинці кристала Al/Ni утворюється в 1,5–5 разів менше міжвузлових атомів у порівнянні з кристалом Ni при енергіях іонів 100 і 50 еВ. Прошарок атомів Al на нікелевій підкладинці утруднює передачу енергії всередину мішені внаслідок розходження атомних мас і розмірів атомів компонентів і знижує ймовірність виникнення послідовностей атомних зіткнень заміщення.

При бомбардуванні Al іонами Хе з енергіями 25, 40 і 50 еВ, часові залежності поверхневих і об'ємних вакансій мають два максимуми в інтервалах часу 0,2–0,3 пс і 0,8–1,0 пс. Перший максимум виникає при взаємодії Хе з поверхнею кристала і визначається утворенням ад-атомів і міжвузлових атомів на стадії зіткнень, тоді як другий максимум – рухом відбитого іона і супутніх атомів з об'єму кристала до поверхні, що також супроводжується утворенням ад-атомів. Генерація ад-атомів у Al не розділяється на два піки, оскільки поверхнева релаксація кристала Al не встигає за рухом іона Хе у кристалі. У випадку Ag виникає один максимум кількості поверхневих і об'ємних вакансій в інтервалі часу 0,2–0,3 пс. У Ni і Cu спостерігаються два максимуми генерації ад-атомів при бомбардуванні іонами Хе, оскільки поверхневі енергії зв'язку є більшими порівняно з кристалом Al, і один максимум у випадку Ag. У Cu другий максимум генерації ад-атомів не показує різкого спадання заднього фронту на відміну від кристалів Al і Ni, що не має задовільного пояснення.

Оцінки довірчого інтервалу зміни величин генерації дефектів та коефіцієнтів розпилення становлять у більшості випадків менше $\pm 25\%$ від їх середніх значень і тільки для відносних значень величин $\sim 0,01$ довірчий інтервал має однаковий порядок з середніми значеннями для випадку ймовірності 0,95, що однак не суперечить зробленим у главі 3 якісним фізичним висновкам.

Авторські результати, що наведені у главі 3, були надруковані в роботах [246, 247, 310 – 312, 380, 424, 434, 436 – 439].

ГЛАВА 4. ПЕРЕМІЩЕННЯ АТОМІВ У КАСКАДАХ ЗІТКНЕНЬ ТА ІОННЕ ПЕРЕМІШУВАННЯ

4.1. Вступ до глави 4

У роботі [283], де розглядалося перемішування при низьких енергіях бомбардування іонами інертних газів з врахуванням розпилення поверхні шляхом розв'язання дифузійноподібного рівняння іонного перемішування, використовувалися три зовнішні параметри, значення яких оцінювалися на основі теоретичних уявлень, які виходили за межі дифузійної моделі іонного перемішування, а також шляхом безпосереднього порівняння кінетики атомних концентрацій з результатами експерименту з наступною корекцією головних параметрів моделі: коефіцієнта перемішування, розміру області перемішування та коефіцієнта розпилення. Робота [283] показала, що підбираючи ці параметри, можна отримати задовільну відповідність дифузійної моделі з експериментом навіть для такого складного випадку, як пошаровий профіль концентрації компонентів у початково однорідному силіциді CoSi_2 при миттєвій зміні енергії бомбардування іонами Ar: 1 keV – 4 keV – 1 keV. Однак, відносно вільне трактування числових значень параметрів моделі призводить до значної втрати її кількісної цінності, залишаючи незаперечними тільки якісні результати. Зараз, коли напівякісні моделі докладно тестовані та обґрунтовані, інтерес викликають тільки внутрішньо самодостатні моделі з мінімумом добре верифікованих зовнішніх параметрів, які описують елементарні якості твердого тіла. У главі 2 вже розглядалася можливість використання молекулярної динаміки для моделювання, в комплексі з транспортними рівняннями, внеску стадії зіткнень каскадів у низькоенергетичне іонне перемішування. Були розглянуті двовимірні та тривимірні квазістабільні молекулярно-динамічні моделі з чисто відштовхуючими атомними потенціалами взаємодії, а також стабільна молекулярно-динамічна модель з багаточастинковим атомним потенціалом, який включає складову притягання. Ці моделі дозволяють отримувати в комплексі з розв'язанням рівняння перемішування результуючі параметри іонного перемішування. У главі 3 докладно розглянуто використання стабільних молекулярно-динамічних моделей з багаточастинковими потенціалами для моделювання генерації радіаційних точкових дефектів. При цьому, молекулярно-динамічна модель була застосована для розгляду атомного каскаду, практично, до стадії рівноваги каскадної області з навколишнім середовищем. Розглядалися часи еволюції каскаду 4 та 7 пс, що дозволило

модельовати низькоенергетичні процеси переміщення атомів віддачі на термічній стадії каскаду.

У главі 4 обговорюється двоетапне моделювання, яке включає стабільну молекулярно-динамічну модель з багаточастинковим потенціалом і рівняння іонного перемішування. При цьому, атомні каскади моделюються протягом 4 пс, що надає можливість враховувати внески низькоенергетичних переміщень атомів у перемішування. Розглядалася система тонких псевдопрошарків у металевих кристалах Cu (100) і Ni (100) при різних температурах кристалів і низькій енергії бомбардування іонами Ag – 100 еВ. Моделюються також атомні переміщення і їх вплив на коефіцієнт перемішування, швидкість дрейфу атомів віддачі та релокаційну функцію.

Розглядаються також атомні переміщення у кристалах Al, Ni, Cu при низьких енергіях бомбардування 15–50 еВ. Моделюється вплив важких іонів Xe у порівнянні з іонами Ag на кінетику атомних переміщень у каскадах. Особливо очевидно різниця між іонами Xe і Ag проявилася в кристалі Al.

Вплив взаємної розчинності елементів на інтенсивність атомних переміщень через межу розподілу компонентів під дією енергетичних іонів розглядається на двошарових системах Al/Ni і Ni/Al при 0 K і 300°K. Моделюються іони 100 еВ Ar, а також 25, 40 і 50 еВ Ag і Xe.

4.2. Атомні каскадні переміщення в кристалі Cu

4.2.1. *Переміщення атомів віддачі при температурі 0 K.* На рис. 4.1 (а–в) представлені середньоквадратичні зміщення атомів віддачі (СКЗ) та кількості атомів віддачі, що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца в кристалі Cu (100) при його нормальному бомбардуванні іонами Ag і Xe з енергією 100 еВ. У випадках а) і в) використовувався багаточастинковий атомний потенціал [94], приєднаний до відштовхуючого потенціалу Борна – Майера (Гібсон 2) [98]. У випадку б) використовувався потенціал Морзе [119], приєднаний до такого ж потенціалу Борна – Майера. Деталі потенціалів, включаючи числові значення їх параметрів для міді, вже обговорювалися в п. 1.4.2, 1.4.3, 2.3.9, 3.1.1. Середньоквадратичне зміщення атомів у каскадах:

$$R^2 = \sum_{i=1}^{N_{ws}} \left[(x_{0i} - x_i)^2 + (y_{0i} - y_i)^2 + (z_{0i} - z_i)^2 \right], \quad (4.1)$$

де x_{0i} , y_{0i} , z_{0i} – початкові координати атомів;

x_i , y_i , z_i – координати атомів в залежності від розвитку каскаду;

N_{ws} – кількість атомів, що залишили свої комірки Вігнера–Зейтца.

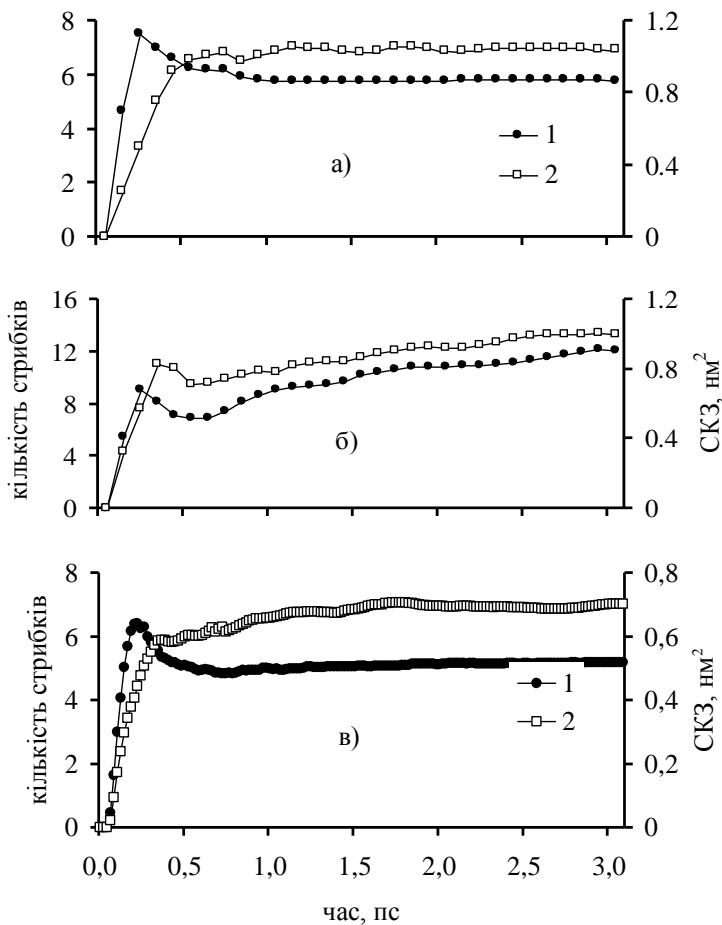


Рис. 4.1. Середньоквадратичне зміщення атомів віддачі та кількість атомів віддачі, що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца в кристалі Cu (100) при енергії іонів Ag і Xe – 100 eV і температурі 0 K. У випадках а) і в) використовувався багаточастинковий потенціал [94], поєднаний з відштовхуючим потенціалом Борна – Майєра (Гібсон 2). У випадку б) використовувався потенціал Морзе [119], приєднаний до потенціалу Борна – Майєра.

Кінетики N_{ws} і середньоквадратичного зміщення атомів віддачі на рис. 4.1 демонструють три стадії розвитку каскаду. Перша стадія (до 0,2 пс) – стадія зіткнень, коли каскад розвивається, і виникає велика кількість дефектів за рахунок зміщення атомів зі своїх комірок Вігнера – Зейтца. Функції часу N_{ws} і R^2 істотно зростають на цій стадії каскаду. Друга стадія розвитку каскаду (0,2–1,0 пс) характеризується рекомбінацією нестабільних дефектів усередині кристала і на його поверхні. Як результат, функція N_{ws} зменшується протягом цього часового інтервалу. Середньоквадратичне зміщення атомів у каскаді продовжує збільшуватися на цій стадії для випадку багаточастинкового атомного потенціалу, тоді як у випадку атомного потенціалу Морзе, середньоквадратичне зміщення атомів має мінімум у момент часу $\sim 0,7$ пс. Різниця між кінетиками N_{ws} і R^2 пояснюється особливостями їх побудови. Якщо декілька міжвузлових атомів або ад-атомів рекомбінують з їх особистими вакансіями, функція N_{ws} зменшується, тоді як функція R^2 буде продовжувати збільшуватися за рахунок атомів, що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца і віддаляються від своїх початкових положень у кристалі. Таким чином, мінімум, що спостерігається у випадку атомного потенціалу Морзе може бути частково пояснений змаганням цих двох механізмів.

Природа зменшення N_{ws} підтверджується результатами моделювання кінетики ад-атомів і розпилених атомів, що представлені на рис. 3.11. Зменшення N_{ws} у випадку бомбардування іонами Ag і використання багаточастинкового атомного потенціалу пов'язано з рекомбінацією поверхневих вакансій і ад-атомів. Зменшення N_{ws} за час ~ 1 пс, практично, збігається зі зменшенням кількості ад-атомів. Рекомбінація внутрішніх дефектів також робить свій внесок у зменшення N_{ws} , але вона не є, в цьому випадку, домінуючим механізмом. У випадку бомбардування іонами Xe має місце аналогічна природа зменшення N_{ws} , але внесок внутрішніх рекомбінацій в кристалі є істотнішим, що видно з порівняння з даними, наведеними на рис. 3.13.

Третя стадія (після 1,0–1,5 пс) характеризується сталими значеннями N_{ws} і R^2 у випадку багаточастинкового атомного потенціалу. Каскад охолоджується, нові дефекти не виникають. Для атомного потенціалу Морзе, стадія насичення, однак, не була досягнута навіть після 3 пс еволюції каскаду і обидві функції N_{ws} і R^2 для цього потенціалу продовжували зростати. Порівняння результатів для багаточастинкового і парного потенціалів дає подібні стабільні значення R^2 , однак кількість атомних переміщень N_{ws} виявляється значно більшою у випадку парного потенціалу, що видно з даних таблиці 4.1. Це говорить про значно більше значення ($\sim 1,4$ рази) середніх

елементарних переміщень атомів віддачі у каскаді з багаточастинковим потенціалом [94] порівняно з каскадом, що описується потенціалом Морзе [98].

Таблиця 4.1 Зміщення атомів у Cu (100) при бомбардуванні іонами 100 еВ Ar і 0 К

Тип іона і потенціалу	Y, ат./іон	СКЗ, нм ²	N _{ws}	N _{ws,x} <100>
Ar, багаточастинковий	0,22	1,0	5,8	4,7
Xe, багаточастинковий	0,04	0,7	5,2	4,7
Ar, Морзе	0,53	1,0	9,5	5,2

Порівняння N_{ws} і $N_{ws,x}$ (кількість атомних переміщень атомів, що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца, уздовж напрямку [100]) показує, що значення $N_{ws,x}$ для багаточастинкового і парного атомних потенціалів мало відрізняються одне від одного, тоді як значення N_{ws} для цих потенціалів істотно відрізняються. Це говорить про значну кількість бічних, по відношенню до напрямку [100], переміщень атомів у кристалі, який моделювався потенціалом Морзе. Це також співпадає з даними про значну нестабільність поверхневих вакансій після 3 пс еволюції каскаду і є одним з показників процесів перенесення атомів на поверхні, що описується потенціалом Морзе. Це може бути також пов'язано з особливостями поверхневих атомних зв'язків кожного з потенціалів, що використовувалися [94, 98, 422].

Для багаточастинкового атомного потенціалу, величини середньоквадратичного зміщення атомів Cu у каскаді становлять 1,0 нм² і 0,7 нм², відповідно, для іонів Ar і Xe. Аналітична теорія теплових піків Ліконена (Likonen), Копонена (Koronen) і Хаутали (Hautala) [321–323] у інтерпретації Б. В. Кінга (B. V. King, університет Ньюкасла, Австралія) дає середньоквадратичне зміщення атомів у випадку субкаскаду з енергією 100 еВ \sim 4,0 нм² для міді, що в чотири рази більше, ніж результати нашого молекулярно-динамічного моделювання (див. таблицю 4.1). Така значна різниця може бути наслідком положень теорії ЛКХ [321–323] про сферичну симетрію субкаскаду в наближенні термічних піків, що виконується тільки в ідеальному випадку, а також знаходження речовини у каскаді в формі рідини – розплаву, що також залишається нез'ясованим, якщо взяти до уваги проблемні роботи Келлі і Міотелло [17, 326, 327]. Крім того, обидва ці ствердження є сумнівними при таких низьких енергіях, що і могло спричинити значні розбіжності даних теорії ЛКХ з результатами молекулярно-динамічного моделювання.

Необхідність врахування термічної стадії каскаду, зокрема, в цьому моделюванні, добре видно з рис. 4.1. Врахування тільки стадії зіткнень у випадку бомбардування кристала Си іонами Аг з енергією 100 еВ, де максимальна енергія атомів віддачі не перевищувала 2–5 еВ, призводить до зменшення середньоквадратичного зміщення атомів у 1,5–4,0 рази, хоч ця оцінка може бути перебільшеною. При цьому, відповідні часи для розвитку стадії зіткнень оцінювалися як 0,1–0,25 пс. Для бомбардування кристала Си іонами Хе з такою самою енергією неврахування термічної стадії каскаду давало, відповідно, зменшення середньоквадратичного зміщення атомів віддачі в $\sim 3,5$ рази, якщо розрахунок каскаду припинявся після 0,1 пс еволюції каскаду, коли максимальна енергія каскадних атомів становила не більше 2 еВ.

4.2.2. *Коефіцієнт перемішування, середня швидкість дрейфу атомів віддачі та релокаційна функція при бомбардуванні Си (100) іонами Аг і Хе з енергією 100 еВ і температурі кристала 0 К.* Залежності коефіцієнта іонного перемішування, середньої швидкості дрейфу атомів віддачі та релокаційної функції від глибини кристала були отримані на основі молекулярно-динамічного моделювання атомних переміщень у каскадах, а також рівнянь (1.38), (1.39) і (2.3), які є елементами каскадної теорії перемішування [3–6] і представлені на рис. 4.2 для густини току бомбардуючих іонів 200 мкА/см². Використовуючи багаточастинковий атомний потенціал [94], отримано, що іони Аг генерують приблизно вдвічі більше вакансій і ад-атомів на поверхні кристала Си порівняно з іонами Хе, що видно зі значень функції релокації поблизу поверхні. З іншого боку, кількість стабільних міжвузлових атомів у середині кристала виявляється трохи більшою у випадку бомбардування іонами Хе. Від'ємне значення середньої швидкості дрейфу атомів віддачі в першому атомному прошарку у випадку іонів Аг пов'язується з великою кількістю атомних стрибків з першого атомного прошарку до ад-прошарку. Більш повільне зменшення коефіцієнта іонного перемішування з глибиною модельного кристала для іонів Хе пояснюється більш глибоким проникненням іонів Хе до кристала Си і значно меншим коефіцієнтом зворотного розсіювання порівняно з іонами Аг. Використання атомного потенціалу Морзе показало якісну кореляцію результатів з даними, що були отримані з багаточастинковим атомним потенціалом. Цей збіг пояснюється ідентичністю атомних потенціалів взаємодії для енергій зіткнень вище декількох електрон-вольт. Істотна різниця з даними, отриманими для чистого потенціалу Борна – Майєра (Гібсон 2), у першу чергу, стосується відсутності ад-прошарку, якого немає на поверхні

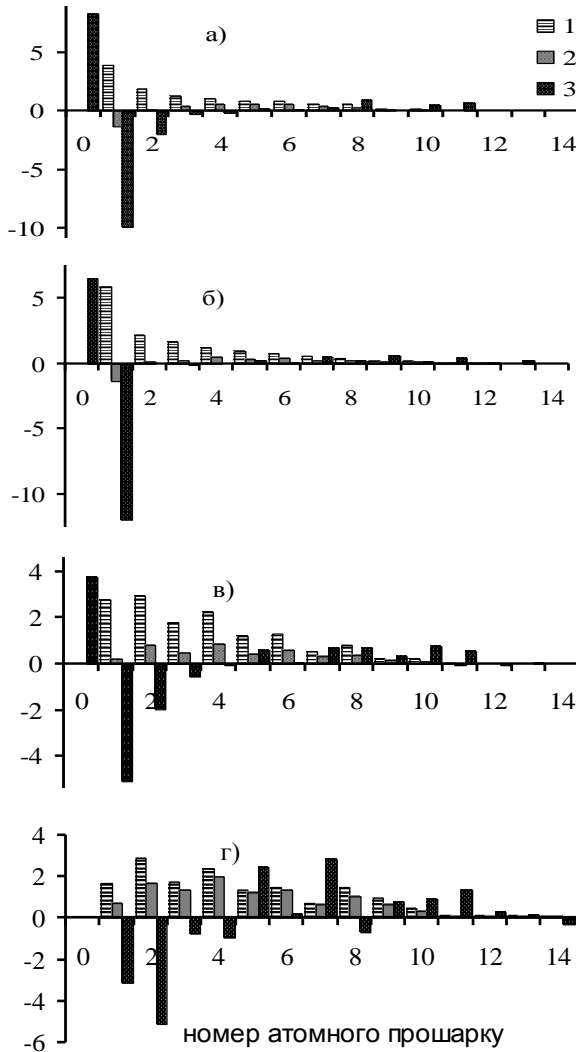


Рис. 4.2. Коефіцієнт іонного перемішування (1), середня швидкість дрейфу атомів віддачі (2) та релокаційна функція (3) при бомбардуванні Cu (100) іонами Ar і Xe з енергією 100 eV і температурі 0 K. а) Ar, багаточастинковий потенціал [94], б) Ar, потенціал Морзе [119], в) Xe, потенціал [94], г) Ar, потенціал Борн – Майер (Гібсон 2). Густина току іонів 200 мкА/см² [246]

модельного кристала у випадку атомних потенціалів без частини притягання.

4.2.3. *Моделювання пошарового іонного профілювання.* Пошарові профілі концентрації псевдомаркера, який на початку розпилення був розташований на дальній межі області перемішування, отримані шляхом розв'язання інтегро-диференціального рівняння іонного перемішування (2.2)–(2.4) з функціями переміщень атомів $F(x, z)$, які моделювалися молекулярно-динамічним методом. Спеціально модифікована функція атомних переміщень $F(x, z)$ без урахування переходів атомів у прошарок ад-атомів використовувалася для розв'язання рівняння іонного перемішування. Було припущено, що поверхневі дефекти матеріалів, що, аналогічно міді, мають високу мобільність поверхневих атомів, відпалюються швидше, ніж наступний іон потрапить у цю область поверхні [97]. Як результат, у межах такої моделі, ад-атоми не приймають участі в атомних переміщеннях у напрямку [100]. На рис. 4.3 показані результати пошарових профілів $C(0, V_f t)$ відносної концентрації псевдомаркера для різних потенціалів

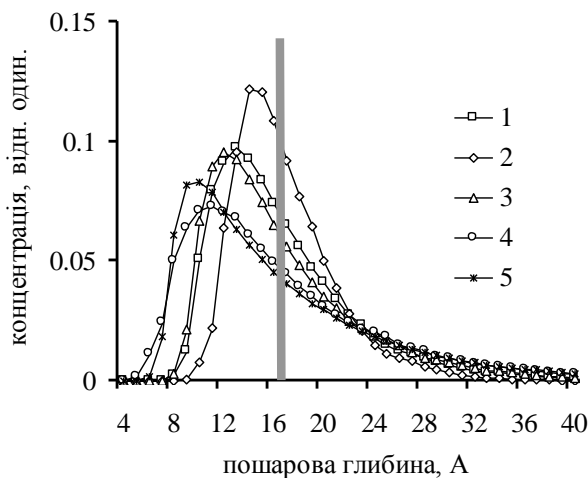


Рис. 4.3. Пошарові профілі $C(0, V_f t)$ для різних потенціалів взаємодії при бомбардуванні кристала Cu (100) іонами Ar і Xe з енергією 100 еВ і при температурі кристала 0 К [246]. Криві: 1 – Ar–Cu, багаточастинковий потенціал [92], 2 – Ar–Cu, потенціал Морзе, 3 – Xe–Cu, $Y = Y(\text{Ar})$, багаточастинковий потенціал [94], 4 – Ar–Cu, потенціал Борна-Майера (Гібсон 2), Xe–Cu, багаточастинковий потенціал [94]

взаємодії при температурі кристала 0 К (у випадку потенціалів із складовою притягання).

Більше перекручення псевдомаркера іонами Хе порівняно з іонами Аг пов'язано з малим коефіцієнтом розпилення для іонів Хе (див. таблицю 4.1). Якщо коефіцієнт розпилення міді іонами Хе замінити на більший коефіцієнт розпилення міді іонами Аг у матриці атомних переміщень $F(x, z)$, то можна порівнювати розбіжності пошарових профілів, що пов'язані тільки з об'ємними атомними переміщеннями у напрямку [100], ініційованими іонами Аг і Хе. Як видно з рис. 4.3, ці пошарові профілі є, практично, ідентичними. Профілі, що були отримані для атомних потенціалів Морзе (коефіцієнт розпилення див. таблицю 4.1) та Гібсон 2, також представлені на рис. 4.3. Профілі концентрації у випадку потенціалу Гібсон 2 (коефіцієнт розпилення 0,17 атомів/іон) демонструє значне перекручення початкового псевдомаркера, незважаючи на те, що для цього моделювання була обрана велика енергія зупинки розрахунку найбільш енергетичного іона – 5 еВ. Швидкості розпилення (2.4) не відрізняються істотно одна від одної. Отже, у випадку використання окремого потенціалу Гібсон 2 має місце занадто висока інтенсивність внутрішніх переміщень атомів у каскадах. Причиною такої значної інтенсивності є відсутність складової притягання в атомному потенціалі взаємодії і, відповідно, сил, які б могли частково повернути каскадні атоми до своїх початкових положень (див. главу 2). Таким чином, багаточастинковий атомний потенціал є найбільш вдалим для розгляду таких задач порівняно з іншими розглянутими атомними потенціалами, як з точки зору стабільності кристала, так і адекватності отриманих результатів з урахуванням закону збереження енергії.

4.2.4. Каскадні переміщення атомів при підвищених температурах.

Розрахунки залежностей середньоквадратичного зміщення атомів і кількості атомних переміщень з однієї комірки Вігнера – Зейтца в іншу від часу при температурах кристала Си 0 К, 300 К і 500 К під дією бомбардуючих іонів Аг з енергією 100 еВ наведені на рис. 4.4. Подібно до результатів, отриманих при температурі кристала 0 К, перша стадія каскаду (до 0,3 пс) складається із зіткнень атомів, що мають значну енергію, і генерації значної кількості нестабільних дефектів (вакансій, міжвузлових атомів, ад-атомів). При цьому, значення функцій N_{ws} і R^2 значно збільшуються, що видно також з даних, наведених у таблиці 4.2. Із зростанням рівноважної температури кристала час досягнення максимумів обох функцій N_{ws} і R^2 збільшується, хоч середньоквадратичне зміщення атомів не має чітко окресленого

абсолютного максимуму. Друга стадія розвитку каскаду (0,3–1,0 пс) характеризується рекомбінацією найбільш нестабільних дефектів всередині кристала і на його поверхні. Як результат, N_{ws} і кількості різних дефектів зменшуються на цій стадії, тоді як середньоквадратичне зміщення атомів віддачі продовжує збільшуватися. Третя стадія каскаду (після 1,0–1,5 пс) характеризується, практично, сталими значеннями N_{ws} і R^2 . Каскад охолоджується, нові дефекти більше не генеруються, і тільки незначні переміщення атомів у кристалі мають місце, за винятком поверхневих ад-атомів, які залишаються досить мобільними навіть на стадії охолодження каскаду. На цій стадії спостерігається також просторовий розподіл стабільних дефектів за глибиною кристала.

Таблиця 4.2 Переміщення атомів у каскадах при 0 К, 300 К, 500 К

Параметри	0 К	300 К	500 К
N_{ws}	5,76	9,0	11,0
$N_{ws,x}$	4,76 (3,53) ^a	7,2 (5,72) ^a	7,9 (6,1) ^a
$N_{x, long}$	1,11	1,19	0,42
N_x/N	0,83 (0,61) ^a	0,8 (0,64) ^a	0,72 (0,55) ^a
$L, нм$	1,805	1,805	1,26
$\sigma_{CST}^2, нм^2$	0,88	0,74	0,5
$\sigma_{diff}^2, нм^2$	0,72	0,54	0,35
$\sigma_{int}^2, нм^2$	1,1	0,9	0,51
$D_m/V_f, нм$	0,29	0,234	0,243
$R^2, нм^2$	1,04	1,18	1,9
$R_x^2, нм^2$	0,265 (0,224) ^a	0,351 (0,302) ^a	0,3 (0,24) ^a
$R_{yz}^2, нм^2$	0,775	0,85	1,6
k	2,0	2,1	1,8

Примітка. ()^a – якщо внесок ад-атомів не брався до уваги.

Як видно з рис. 4.4, середньоквадратичне зміщення атомів і N_{ws} збільшуються зі зростанням температури. Функція N_{ws} демонструє тенденцію до незначного збільшення навіть на третій стадії каскаду при температурах 300 К і 500 К, що є наслідком термічно активованих переміщень внутрішніх міжвузлових атомів до поверхні, а також ад-атомів по поверхні, що бомбардується. При цьому, однак, середньоквадратичне зміщення атомів у каскаді не збільшується, а при температурі кристала 300 К навіть трохи зменшується. Іншим наслідком врахування температури кристала є збільшення кількості зворотних

переміщень атомів зі зростанням температури. Переміщення атомів у зворотному напрямку до поверхні, що бомбардується, мають значно більшу інтенсивність при підвищених температурах, що видно на рис. 4.5, де порівнюються атомні переміщення в каскадах при температурах 0 К і 300 К. Це проявляється в збільшенні від'ємних значень середньої швидкості дрейфу атомів віддачі в першому атомному прошарку та появою від'ємних значень у другому і третьому прошарках. Ми пояснюємо цей температурний ефект збільшенням перекручення ґратки кристала, пригніченням послідовностей атомних зіткнень заміщення від поверхні в глибину кристала, а також збільшенням випадковості у розвитку каскаду зі зростанням температури.

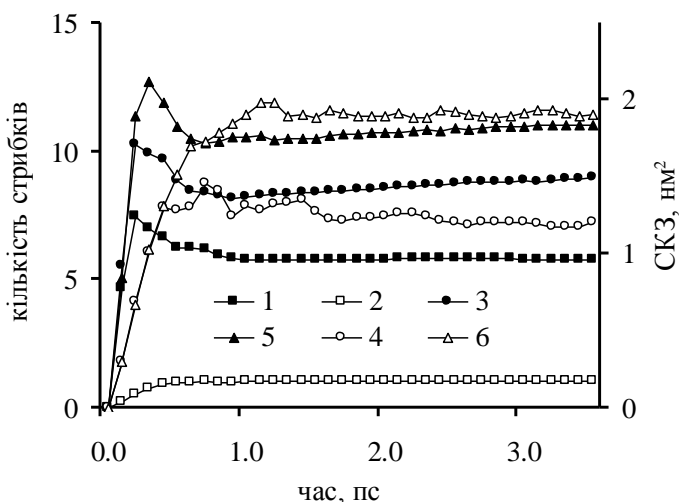


Рис. 4.4. Залежності СКЗ і кількості атомних переміщень з однієї комірки Вігнера – Зейтца до іншої N_{ws} від часу при температурах кристала Cu (100) 0 К, 300 К і 500 К під дією бомбардуючих іонів Ar з енергією 100 еВ. Криві: 1 – N_{ws} при 0 К, 2 – СКЗ атомів при 0 К, 3 – N_{ws} при 300 К, 4 – СКЗ атомів при 300 К, 5 – N_{ws} при 500 К, 6 – СКЗ атомів при 500 К [247]

На рис. 4.5 добре видно збільшення кількості зворотних переміщень атомів у 1–4-му атомних прошарках і появу їх значної кількості в 5-му прошарку, а також у 6–9-му атомних прошарках. При цьому, добре видно зменшення кількості довгих атомних переміщень $N_{x, long}$ з прошарку n в прошарок $n + 2$ у напрямку [100], що також може

бути інтерпретовано, як результат збільшення фактору випадковості під час розвитку каскаду у температурному кристалі.

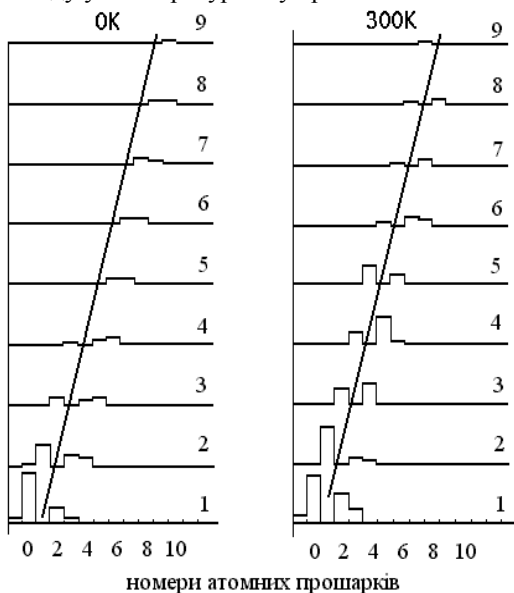


Рис. 4.5. Атомні каскадні переміщення в кристалі Cu (100) уздовж напрямку [100] з прошарку в прошарок, що викликані іонами Ag з енергією 100 еВ при температурі кристала 0 К і 300 К [312]. По вертикалі показані номери атомних прошарків, з яких переміщуються атоми.

4.2.5. *Поширення псевдомаркера в Си при перемішуванні.* Становить інтерес розгляд і порівняння розв'язань інтегро-диференціального рівняння іонного перемішування (2.2) – (2.4) і його дифузійного наближення (2.5) у випадку псевдоізотопної двокомпонентної системи, коли балістичні якості атомів різних компонентів не відрізняються у випадку низьких енергій бомбардування. Використовуючи результати молекулярно-динамічного моделювання атомних переміщень у каскадах для чисельного розв'язання рівнянь (2.2) і (2.5), були отримані профілі $C(0, V_f t)$ концентрації псевдомішки, яка в початковий момент розпилення, у вигляді псевдомаркера товщиною в один атомний прошарок, знаходилася в 17-му прошарку. Густина потоку іонів Ag, що падали нормально на поверхню Cu(100) з енергією 100 еВ, була

$1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/(см² · с). Профілі розраховувалися для температур 0 К, 300 К і 500 К.

Атомні переміщення в ад-прошарок не були взяті до уваги при розв'язанні рівнянь перемішування внаслідок причин, які вже обговорювалися в п. 4.2.3. У випадку іонного бомбардування поверхні Pt (111) експериментально було встановлено, що ад-атоми з поверхневими вакансіями відпалюються при температурах вище 550 К. На кристалі Cu з набагато меншою температурою плавлення і у випадку обмеженої кількості модельних випробувань з часом одного випробування 100 пс вже при 300 К спостерігалось відпалювання поверхневих дефектів [440].

Як видно з рис. 4.6 при усіх температурах, що розглядалися, розв'язання рівняння іонного перемішування в дифузійному наближенні (2.5) давало менше перекручення псевдомаркера порівняно з розв'язанням повного інтегро-диференціального рівняння іонного перемішування (2.2), оскільки дифузійне наближення бере до уваги тільки перші два члени розкладання правої частини рівняння (2.2) в ряд по малому параметру z/x , де z – довжина переміщення атома віддачі в каскаді, x – характерний розмір області перемішування. Оцінка параметра z/x :

$$\frac{z}{x} \approx \sqrt{\frac{R_T^2}{N_{\text{вз},x} L^2}}, \quad (4.2)$$

з врахуванням даних таблиці 4.2 дає 0,12–0,2. Таке значення параметра z/x не повністю відповідає умові $z/x \ll 1$, яка гарантує достовірність дифузійного наближення. Таким чином, при таких низьких енергіях бомбардування, застосовність дифузійного наближення для опису іонного перемішування знаходиться на межі своєї достовірності.

Було встановлено, що дифузійні пошарові профілі при кожній температурі стають ідентичними точним профілям глибини, що були отримані з розв'язання інтегро-диференціального рівняння (2.2), якщо у коефіцієнті іонного перемішування $D(x)$ (1.38) врахувати фактор k , значення якого для кожної температури наведені в таблиці 4.2 і приблизно дорівнюють 2 незалежно від температури кристала Cu. При цьому, дифузійне рівняння дає точний пошаровий профіль концентрації з коефіцієнтом перемішування $k \cdot D(x)$ за тих саме умов бомбардування.

Також було встановлено, що при таких значеннях k профілі концентрації співпадають не тільки для тонких псевдомаркерів, але й для товстих псевдопрошарків. Розрахунки виконувалися згідно розв'язання інтегро-диференціального рівняння перемішування (рис. 4.6 (а)) і його дифузійного наближення (рис. 4.6 (б)) [247]. Ми не

встановлювали загальної закономірності, наскільки ця залежність має фундаментальну основу і проявляється в інших випадках.

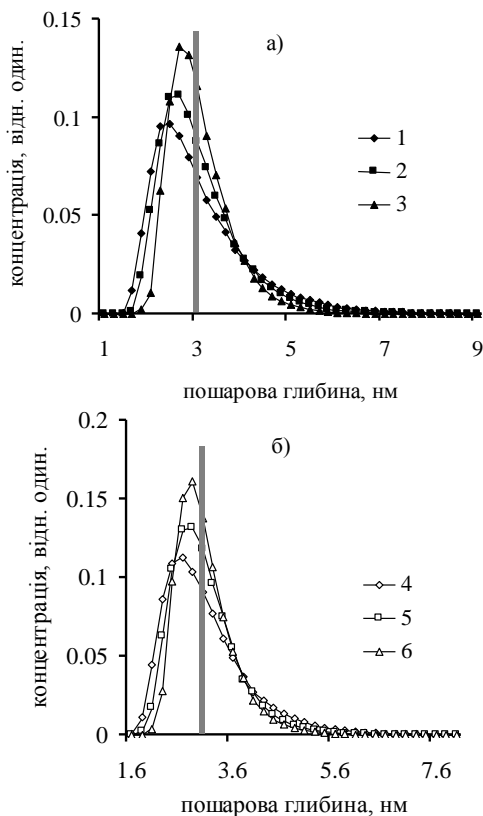


Рис. 4.6. Розрахунок пошарового профілювання у випадку однокомпонентної системи Cu (100) з псевдоізотопним прошарком товщиною в один моноатомний прошарок при бомбардуванні іонами Ag з енергією 100 еВ і температурами 0, 300 і 500 К (відповідно, криві 1, 2, 3 і 4, 5, 6). а) Інтегро-диференціальне рівняння ІІІ; б) дифузійне наближення

Поширення пошарових профілів концентрації σ_{int}^2 і σ_{dif}^2 псевдомаркера при різних температурах були отримані згідно формул часових моментів (2.6)–(2.8), де функції $C_{dif,int}(0, Vt)$ були розраховані,

відповідно, за результатами розв'язання інтегро-диференціального рівняння іонного перемішування та його дифузійного наближення.

Поширення псевдомаркера $\sigma_{\text{сст}}^2$, який являвся дельта-функцією на початку бомбардування і був розташований на дальній межі області перемішування, може бути оцінено згідно «сходинкового» наближення для значення коефіцієнта іонного перемішування (1.37) [261]. У формулі (1.37) однорідний коефіцієнт іонного перемішування оцінювався згідно середньоарифметичного значення пошарових коефіцієнтів перемішування $D_i(x_i)$ (2.9), що моделювалися методом молекулярної динаміки у всій області перемішування L , значення якої також наведені в таблиці 4.2. Кількість пошарових значень $D_i(x_i)$, що враховувалися у виразі (2.9) оцінювалася згідно критерія значення $D_i(x_i)$ по відношенню до максимального значення пошарового коефіцієнта іонного перемішування $D_{\text{max}}/D(L + d) < 10$. Слід зазначити, що головний терм $2LD/V_f$ у рівнянні (1.37) не залежить від кількості прошарків, що беруть участь у розрахунку однорідного коефіцієнта перемішування D . Результати обчислення поширень $\sigma_{\text{сст}}^2$, σ_{int}^2 і σ_{dif}^2 надані для порівняння в таблиці 4.2. Розрахункові значення $\sigma_{\text{сст}}^2$ і σ_{dif}^2 є подібними і показують зменшення поширення псевдомаркера з температурою кристала. Така ж тенденція має місце і для σ_{int}^2 , хоч ці величини є значно більшими. Задовільна взаємна відповідність значень $\sigma_{\text{сст}}^2$ і σ_{dif}^2 дає можливість пояснити якісно зменшення поширення профілю концентрації псевдомаркера з температурою.

Значне зменшення поширення профілю σ^2 при температурі 300 К порівняно з випадком моделювання при температурі 0 К відбувається завдяки зростанню коефіцієнта розпилення Y (див. таблицю 3.7) і, відповідно, швидкості поверхні V_f , що розпилюється, практично, в два рази, незважаючи, при цьому, на деяке незначне збільшення коефіцієнта іонного перемішування D і середньоквадратичного зміщення атомів у напрямку $[100]$ R_x^2 із зростанням температури (див. таблицю 4.2). Додаткове зменшення поширення профілю σ^2 при температурі 500 К порівняно з 300 К пов'язане, головним чином, зі зменшенням області перемішування L (див. таблицю 4.2) і значним зменшенням коефіцієнтів D_i з глибиною кристала при 500 К. Коефіцієнти розпилення і, відповідно, швидкість V_f також значно змінюються. Сильне зростання загального середньоквадратичного зміщення атомів R^2 відбувається за рахунок збільшення значення бічного компонента середньоквадратичного зміщення R_{yz}^2 , але не за рахунок збільшення R_x^2 . Зростання R_{yz}^2 відбувається також завдяки значним переміщенням ад-атомів по поверхні, що бомбардується, при підвищених температурах кристала.

У розділі 2.3.8 наведена оцінка поширення псевдомаркера в Cu згідно формули Андерсена (2.10). Різні варіації параметрів при різних температурах і енергії іонів Ar 100 eV дають верхню межу оцінки (2.10) – 1.47 нм² при кількості атомів віддачі $N_A = 2,2$ атомів/іон згідно з формулою Кінчина – Піза [15]. Коефіцієнт розпилення був оцінений як 0,5 атомів/іон. Така оцінка, згідно з формулою Андерсена, непогано описує порядок, але, в цілому, значно більша, порівняно з нашими оцінками, що були отримані шляхом молекулярно-динамічного моделювання. Слід, однак, зазначити, що оцінка Андерсеном середнього переміщення каскадного атома R_A^2 виглядає дещо завищеною ([232] ~ 1,0 нм для усіх металів), зокрема, в низькоенергетичних каскадах.

Інша аналітична оцінка поширення профілю для нормального бомбардування була запропонована Залмом (Zalm) і Вріземою (Vriezema) [441]:

$$\sigma_{ZV}^2 = \frac{HN^{1/3}U_0E}{\langle \Delta H_{coh} \rangle^2}, \quad (4.3)$$

де H – стала порядку декількох \AA^3 ;

N – атомна густина (\AA^{-3});

E – енергія іона (eV) і висота поверхневого бар'єру U_0 .

У випадку кристала Cu, $U_0 = H_{coh}$, де $H_{coh} = 3,5$ eV. Оцінка поширення дельта-профілю згідно з [441] дорівнює $\sigma_{zv}^2 = 30\text{--}60 \text{\AA}^2$, що трохи менше ніж σ_{int}^2 при температурі 300 K. Таким чином, результати молекулярно-динамічного моделювання досить добре відповідають аналітичним чисельним оцінкам згідно з формулами Андерсена, а також Залма і Врізема, між якими вони знаходяться.

Середньоквадратичне зміщення атомів у каскадах незначним чином збільшується зі зростанням температури від 0 K до 300 K, але в інтервалі температур між 300 K і 500 K спостерігається значне збільшення, що видно з даних таблиці 4.2. Збільшення середньоквадратичного зміщення на ~ 15% від 0 K до 300 K може бути віднесене за рахунок зростання активності переміщень вакансій в металах зі збільшенням температури [15]. Значне зростання середньоквадратичного зміщення при температурі 500 K супроводжується зменшенням кількості стабільних міжвузлових атомів (див. таблицю 3.7 і п. 3.4.3), оскільки вони рекомбінують з вакансіями завдяки зростанню їх мобільності і критичному зменшенню довжини послідовностей атомних зіткнень заміщення при температурі 500 K. Крім того, зростання кількості ад-атомів і середньоквадратичного

зміщення атомів може бути пов'язане зі збільшенням компонента середньоквадратичного зміщення в бічних напрямках R_{yz}^2 за рахунок переміщення ад-атомів по поверхні твердого тіла, що може бути інтерпретовано, як внесок елементарних актів поверхневої дифузії ад-атомів при високій температурі. З іншого боку, зростання бічних переміщень R_{yz}^2 не впливає безпосередньо на ефект перемішування в напрямку [100].

4.2.6. Каскадні переміщення в Cu біля порогу розпилення

4.2.6.1. *Переміщення при температурі кристала 0 К.* У роботі [424] були розглянуті атомні переміщення в кристалі Cu (100) при нормальному бомбардуванні іонами Ag з енергіями 25, 40 і 50 еВ і нульовій температурі кристала. На рис. 4.7 подані часові залежності кількості атомів, що залишили свої початкові комірки Вігнера – Зейтца N_{ws} в процесі еволюції каскаду.

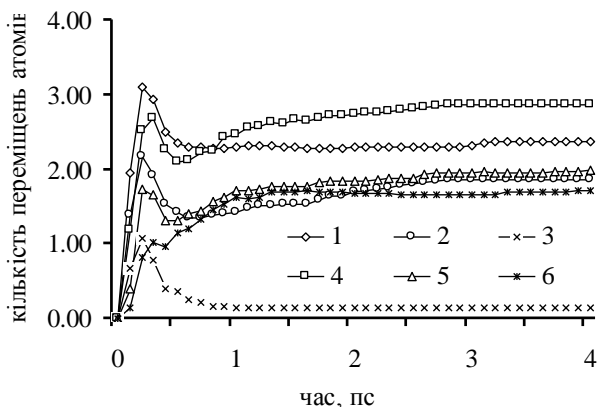


Рис. 4.7. Залежність кількості атомів, що залишили свої початкові комірки Вігнера – Зейтца в кристалі Cu (100) при температурі 0 К, від часу еволюції каскаду при бомбардуванні іонами Ag і Xe з енергіями 25, 40 і 50 еВ: 1 – 50 еВ (Ag), 2 – 40 еВ (Ag), 3 – 25 еВ (Ag), 4 – 50 еВ (Xe), 5 – 40 еВ (Xe), 6 – 25 еВ (Xe) [424]

Видно, що випадкам бомбардування міді іонами Ag і Xe відповідають два різновиди кривих. При бомбардуванні кристала міді іонами Ag, максимуми N_{ws} у момент часу $\sim 0,25$ пс були помітно більшими, ніж значення функції N_{ws} до початку стадії охолодження

каскаду (~ 2 пс), порівняно з випадком бомбардування кристала іонами Хе. Це пов'язано зі значною різницею мас іона Хе і атома Си, що в процесі гальмування іона спричиняє передачу енергії від іона Хе більшому числу атомів мішені, ніж у випадку бомбардування іонами Аг. Як наслідок, менше число атомів Си при бомбардуванні кристала іонами Хе одержують необхідну енергію для переміщення в сусідні комірки у початковий період розвитку каскаду. У випадку бомбардування іонами Хе з енергією 25 еВ, локальний максимум в області $\sim 0,25$ пс, практично, відсутній, і майже монотонне зростання (крім незначного максимуму в інтервалі 1–2 пс) функції N_{ws} спостерігається аж до її виходу на насичення після 2 пс еволюції каскаду. Для обох типів іонів має місце зростання кількості переміщень атомів у каскадах зі збільшенням енергії бомбардування, принаймні до стадії охолодження каскаду. При цьому, різниця між випадками бомбардування мішені іонами з різними енергіями може бути незначною. Так, наприклад, при бомбардуванні міді іонами Хе з енергіями 25 і 40 еВ різниця в значеннях функції N_{ws} на стадії охолодження каскаду становить $\sim 0,25$ переміщень/іон. Слід зазначити, що у випадку енергії 25 еВ, іони Хе викликають значно більше переміщень атомів у каскаді, ніж іони Аг. При цьому, значна їх частина відбувається всередині кристала, тоді як іони Аг викликають переміщення атомів тільки з першого атомного прошарку в ад-прошарок.

У таблиці 4.3 наведені значення усереднених за кількістю випробувань компонентів середньоквадратичного зміщення атомів у каскадах після 4 пс еволюції за різних умов бомбардування. У цілому, середньоквадратичне зміщення атомів у каскадах R^2 , ініційованих іонами Аг з енергіями 40 і 50 еВ в 1,6–1,8 разів більше, ніж у каскадах, ініційованих іонами Хе, тоді як при енергії 25 еВ спостерігається протилежна залежність. Це пов'язано з генерацією іонами Аг з енергією 25 еВ тільки атомних переміщень з першого атомного прошарку в ад-прошарок і повною відсутністю переміщень атомів всередині кристала, які, в свою чергу, спостерігалися при бомбардуванні міді іонами Хе з такою самою енергією. З цієї ж причини, середньоквадратичне зміщення атомів у напрямку $[100]$ R_x^2 при енергії 25 еВ було значно більшим для іонів Хе, тоді як при енергії 40 і 50 еВ розходження в значеннях R_x^2 виявилися менш значними. Істотні розходження між переміщеннями атомів у каскадах ініційованих іонами Аг і Хе, як видно з таблиці 4.3, мають місце також для бічних зміщень ад-атомів $R_{yz,ad}^2$ відносно напрямку $[100]$, що неможливо пояснити меншою кількістю ад-атомів, які генеруються іонами Хе, оскільки розходження в бічних

зміщеннях занадто значне. Для початкової енергії іонів 25 еВ, кількості ад-атомів, що генеруються іонами Ag і Xe, практично, однакові. Очевидно, у випадку бомбардування міді іонами Xe, ад-атоми одержують меншу енергію у порівнянні з випадком бомбардування мішені іонами Ag. Це також може бути викликане тим, що ксенон, практично, не втрачає енергію в ад-прошарку на відміну від аргону. Переміщення ж атомів всередині кристала в бічних напрямках без урахування переміщень ад-атомів відрізняються неістотно, за винятком випадку енергії іонів 25 еВ.

Таблиця 4.3 СКЗ атомів віддачі в кристалі Cu (100) іонами Ag і Xe при 0 К

Енергія іона, еВ		R^2 , нм ²	$R^2_{x,y}$, нм ²	$R^2_{x,adb}$, нм ²	$R^2_{y,z,adb}$, нм ²
50	Ag	0,43	0,15	0,012	0,191
40		0,268	0,093	0,008	0,136
25		0,036	0,004	0,004	0,03
50	Xe	0,236	0,17	0,007	0,006
40		0,167	0,123	0,003	0,0024
25		0,137	0,106	0,003	0,0047

У таблиці 4.4 наведені значення сумарних переміщень атомів у x -напрямку після 4 пс еволюції каскаду в розрахунку на один іон. Дані таблиці 4.4 показують, що іон Xe створює більший ефект перемішування уздовж початкового напрямку іонного потоку при усіх енергіях бомбардування порівняно з Ag. У випадку Ag, зниження енергії іонів з 50 еВ до 40 еВ призводить до зменшення кількості довгих переміщень атомів типу 2 майже в два рази, тоді як кількість коротких переміщень типу 1 залишається, практично, без зміни. Несподіваним виявилось значне збільшення кількості зворотних коротких переміщень атомів до поверхні зі зниженням енергії іонів Ag від 50 до 40 еВ, що може бути пов'язано зі зниженням ймовірності виникнення послідовності атомних зіткнень заміщення від поверхні в глибину кристала. У випадку бомбардування іонами Xe, кількість коротких і довгих переміщень при енергіях 40 еВ і 25 еВ залишається, практично, без зміни. При енергії іонів Xe 50 еВ, кількості коротких і довгих переміщень, а також зворотних переміщень до поверхні кристала, помітно більші в порівнянні з випадками енергій іонів 40 і 25 еВ.

Наведені в таблиці 4.4 дані про глибину поширення каскадів у кристалі міді показують, що у випадку бомбардування мідної мішені іонами Xe, глибини поширення каскаду, а отже і перемішування є більшими, ніж у випадку бомбардування іонами Ag. Зі зменшенням

енергії іонів ця різниця зростає. При цьому, атомні переміщення можуть бути результатом як випадкових зіткнень, так і фрагментами послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ і $[100]$, що супроводжувались випадковими або спрямованими коливаннями атомів ґратки [311, 428, 442]. Отримані дані про глибину розвитку каскадів зіткнень при таких низьких енергіях бомбардування непогано якісно узгоджуються з іншими результатами молекулярно-динамічного моделювання, наприклад для кристалів кремнію та германію [171, 204, 209, 210], що бомбардуються іонами Ar з енергіями 25–200 еВ.

Таблиця 4.4 Кількість атомних переміщень уздовж напрямку $[100]$

Тип (eV)	Ar			Xe		
	50	40	25	50	40	25
1	1,11	1,15	0,0	1,64	1,16	1,07
2	0,75	0,38	0,0	0,86	0,65	0,57
1(зв)	0,38	0,69	0,0	1,03	0,62	0,52
2(зв)	0,02	0,0	0,0	0,04	0,01	0,01
L_{eff}	9	7	0	11	11	9

Примітки:

1. Переміщення з прошарку n в $n + 1$ (або $n - 1$) довжиною $d/2$.
2. Переміщення з прошарку n в $n + 2$ (або $n - 2$) довжиною d .
3. 1(зв) – переміщення з прошарку n в $n - 1$ (до поверхні) довжиною $d/2$.
4. 2(зв) – переміщення з прошарку n в $n - 2$ (до поверхні) довжиною d .
5. L_{eff} – ефективний розмір каскаду (в прошарках $d/2$ у напрямку $[100]$).

4.2.6.2. *Переміщення в кристалі Si при температурі 300 К.* У роботі [434] були розглянуті атомні переміщення в кристалі Si (100) при нормальному бомбардуванні іонами Ar з енергією 25–50 еВ і температурі кристала 300 К. На рис. 4.8 наведені залежності кількості атомів N_{ws} , що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца, від часу розвитку каскаду. Різниця між кривими N_{ws} для Ar і Xe детермінується співвідношенням висоти максимуму, розташованого в інтервалі часу до 1 пс і значень функції N_{ws} після 2,5 пс. У випадку іона Ar, висота максимуму є помітно більше значень функції в області насичення, тоді як для іона Xe ці величини відрізняються неістотно. Падаючий на поверхню кристала іон Xe передає енергію атомам Si меншими частками у порівнянні з іоном Ar. Тому, у випадку Ar ймовірність

первинному атому віддачі залишити свою комірку вище, ніж у випадку іона Хе, з чим і пов'язане розходження форм кривих N_{ws} .

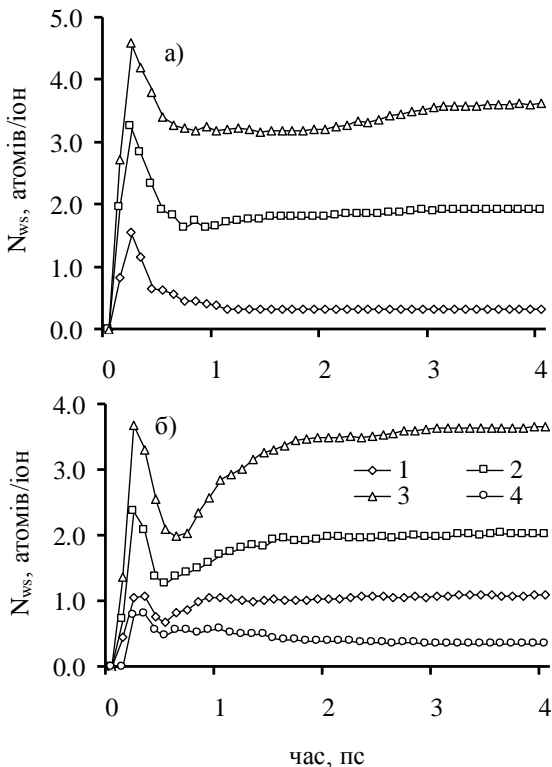


Рис. 4.8. Залежність кількості атомів, що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца в кристалі Cu (100) при температурі 300 К, від часу розвитку каскаду при бомбардуванні іонами а) Ar, б) Хе з енергіями 1 – 25, 2 – 40, 3 – 50 і 4 – 15 еВ [434]

Як видно з таблиці 4.5, кількість атомів, що залишили свої комірки після 4 пс еволюції каскадів, не залежить від типу іона для енергій 40 і 50 еВ. При 25 еВ, відношення значень функції N_{ws} для іонів Ar і Хе $N_{ws}(\text{Xe})/N_{ws}(\text{Ar}) \approx 3,5$, що є наслідком відсутності переміщень атомів у об'ємі кристала при його бомбардуванні іонами Ar.

У таблиці 4.5 наведені компоненти середньоквадратичного зміщення атомів уздовж напрямку [100] з урахуванням ад-атомів – R_x^2 , тільки ад-атомів – $R_{x,ad}^2$, а також зміщень ад-атомів у бічних напрямках

відносно напрямку [100] – $R_{yz,ad}^2$. Видно, що R^2 більше у випадку іонів Ag при енергіях 40 і 50 еВ. При енергії іонів 25 еВ, різниця між величинами R^2 для іонів Ag і Хе є незначною. Коефіцієнт перемішування $D \sim R_x^2 - R_{x,ad}^2$ у напрямку [100], в 1,2–1,4 рази більший для іонів Хе, за винятком випадку енергії іона 25 еВ. Розходження між значеннями $R_{x,ad}^2$ для іонів Ag і Хе визначаються кількістю ад-атомів, яких, як видно з таблиці 3.8 (див. підрозділ 3.4.4), більше у випадку іонів Ag. Дані таблиці 4.5 також показують значну різницю між значеннями $R_{yz,ad}^2$ для іонів Ag і Хе, яка пов'язана з різною ефективністю передачі енергії від іона атомам мішені, а також з меншими пружними втратами енергії іонів Хе у першому прошарку, якщо враховувати втрати енергії в ад-прошарку, як частину втрат в першому прошарку. При падінні іона Хе, атоми Су, переходячи до ад-прошарку, одержують меншу енергію і демонструють, відповідно, менший розкид по поверхні.

Таблиця 4.5 СКЗ (нм²) атомів у каскаді і кількість переміщень атомів N_{ws}

Тип іона	Енергія іона	R^2	R_x^2	$R_{x,ad}^2$	$R_{yz,ad}^2$	N_{ws}
Ag	50 еВ	0,45	0,162	0,016	0,193	0,036
Хе		0,29	0,183	0,008	0,013	0,037
Ag	40 еВ	0,23	0,087	0,012	0,106	0,019
Хе		0,16	0,109	0,003	0,006	0,020
Ag	25 еВ	0,06	0,007	0,007	0,048	0,003
Хе		0,084	0,052	0,003	0,004	0,011
Хе	15 еВ	0,029	0,011	0,003	0,011	0,004

Після 0,2–0,3 пс з початку каскаду, максимальна кінетична енергія атомів віддачі стає меншою за 1 еВ. При цьому, для обох іонів з енергіями 40 і 50 еВ протягом термічної стадії ((0,2–4,0 пс) [424] відбувається зростання R^2 в 1,1–1,4 рази, тоді як R_x^2 залишалося незмінним або зменшувалося. Нормальні переміщення ад-атомів $R_{x,ad}^2$ зменшуються в 2–4 рази у випадку іонів Ag і зростають у 3–6 разів у випадку іонів Хе, що пов'язано з різною швидкістю розвитку початкової стадії каскаду. Бічні зміщення $R_{yz,ad}^2$ зростають для обох іонів у 2–10 разів. Зростання середньоквадратичного зміщення атомів на цьому етапі відбувається, головним чином, за рахунок бічних зміщень ад-атомів для випадку іонів Ag, а також бічних і нормальних зміщень ад-атомів для іонів Хе. У випадках іонів Ag з енергією 25 еВ і Хе з енергією 15 еВ на термічній стадії каскаду середньоквадратичне зміщення атомів майже не змінюється через взаємну компенсацію R_x^2 , що зменшується в 6 разів для іонів Ag і в 2,5 рази для іонів Хе (релаксація кристалу) і відповідного збільшення $R_{yz,ad}^2$ (ад-атоми продовжують віддалятися від

місця народження). Компонент $R_{x,ad}^2$ зменшується у випадку іонів Ag і зростає у випадку іонів Xe. Для іонів Xe з енергією 25 еВ зміщення R^2 зростає в 1,2 рази за рахунок збільшення компонента ад-атомів $R_{yz,ad}^2$, тоді як компонент R_x^2 мало змінюється.

У таблиці 4.6 наведені кількості коротких, довжиною $d/2$ (1), і довгих, довжиною d (2), переміщень атомів у каскадах уздовж напрямку [100], за винятком переміщення з об'єму кристала до його поверхні в розрахунку на один іон, а також кількості коротких (1 (зв)) і довгих (2 (зв)) переміщень атомів з об'єму кристала до поверхні після 4 пс еволюції каскаду. Переміщення атомів до ад-прошарку в таблиці 4.6 не враховувалися. При усіх енергіях у каскадах, викликаних іонами Хе, відбувається більша кількість переміщень атомів уздовж напрямку [100], що пов'язано з більшим перерізом зіткнень іона Хе порівняно з іоном Ag. Виняток складає тип переміщень 2 (зв), що має недостатню для аналізу статистику, і тип 2 при енергії іона 50 еВ, для якого іони Ag і Хе показали майже ідентичні результати. Внесок переміщень типу 2 в іонне перемішування у випадку іонів Ag є більшим, ніж внесок переміщень типу 1. Для іонів Хе внески обох типів переміщень у перемішування приблизно однакові при енергіях 40 еВ і 50 еВ, тоді як при енергії іона 25 еВ домінують переміщення типу 1. При енергії іонів 15 еВ спостерігалися тільки взаємні переміщення типу 1 між першим і другим атомними прошарками. Іони Хе викликають у 2–3 рази більше переміщень атомів типу 1 (зв) при енергіях 40 і 50 еВ у порівнянні з іонами Ag, що пов'язується з більш глибоким проникненням іонів Хе у кристал Cu і його зворотним рухом у кристалі до поверхні. Порівняння кількості переміщень з прошарку в прошарок у напрямку [100] з відповідними значеннями функції N_{ws} показує, що для іонів Ag, кількість чисто бічних переміщень атомів відносно напрямку [100] без врахування ад-атомів складає 18% при 50 еВ, 10% при 40 еВ і 7% при 25 еВ від загальної кількості переміщень атомів, тоді як для Хе ці величини дорівнюють, відповідно, 4%, 1% і менше 1%, що пов'язано з більшим перерізом зіткнення іона Хе порівняно з іоном Ag. Цей результат також є непрямым поясненням причини утворення більшої кількості ад-атомів у випадку іонів Ag, оскільки чисто бічні приповерхневі переміщення можуть викликати наступні переміщення атомів з першого прошарку до ад-прошарку (див. п. 3.5.4). При енергії іонів 15 еВ (випадок Хе) не спостерігалось переміщень атомів у чисто бічних напрямках. Для енергій іонів 40–50 еВ, послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямку [100], які порівняно з послідовностями у напрямках $\langle 110 \rangle$ є енергетично більш вигідними в кристалах Cu [432, 433, 435], роблять тільки 1–2 кроки і другий крок є в 3–5 разів менш

ймовірний ніж перший. Не зважаючи на енергетичні міркування, частіше, як показало моделювання в Cu, переміщення атомів, включаючи окремі атомні переміщення, відбуваються в напрямках типу $\langle 110 \rangle$, що свідчить про існування в каскаді, поряд з послідовностями зіткнень заміщення, значного відсотку переміщень згідно інших механізмів.

Таблиця 4.6 Кількість переміщень атомів у каскаді уздовж напрямку $[100]$

Тип переміщення	Енергія іона Ag, eB			Енергія іона Xe, eB			
	50	40	25	50	40	25	15
1	1,83	1,02	0,0	2,63	1,4	0,85	0,21
2	0,64	0,32	0,0	0,66	0,45	0,14	0,0
1(зв)	0,56	0,42	0,0	1,59	0,83	0,5	0,11
2(зв)	0,02	0,01	0,0	0,07	0,04	0,01	0,0
L_{eff}	9	9	0,0	8	8	6	2

4.3. Атомні каскадні переміщення в Ni і Al при температурі 0 K

Середньоквадратичне зміщення атомів віддачі в кристалах Al і Ni в різних напрямках наведено у таблиці 4.7. Як видно з приведених даних, середньоквадратичне зміщення атомів віддачі в кристалі Ni виявилося приблизно в три рази меншим ніж у кристалі Al, а також трохи меншим ніж при аналогічних умовах бомбардування в кристалі Cu (див. підрозділ 4.2.1 і таблицю 4.1). Кількість атомних переміщень N_{ws} демонструє якісно таку ж тенденцію: функція N_{ws} в кристалі Ni, практично, в два рази менша ніж у кристалі Al. Менша активність переміщень атомів у кристалі Ni порівняно з кристалом Al добре корелює з величинами відповідних енергій когезії (3,32 eB для Al і 4,38 eB для Ni, що знаходиться у відповідності до відомих літературних даних [2]) [311, 312]. Зменшення перемішування і генерації дефектів зі зростанням енергії когезії обговорювалося і раніше, наприклад у [16, 443], для значно більших енергій бомбардування. Однак, з іншого боку, енергія когезії Cu – 3,42 eB – є ближчою до енергії когезії кристала Al ніж Ni. У випадку кристала Cu, модельовані значення середньоквадратичного зміщення атомів були більш близькими до випадку кристала Ni, ніж до кристала Al. Таким чином, зокрема для кристалів Cu, Ni і Al, нема кореляції з енергіями когезії при низьких енергіях бомбардування, про що раніше повідомлялося в [16] на основі експериментальних даних. Це підтверджує версію про відсутність термічних піків у каскадах при таких низьких енергіях бомбардування,

зокрема в Ni. Додаткові моделювання для мішені псевдо-Al з масою атомів, що дорівнює атомній масі Ni, показують середньоквадратичні зміщення, які є близькими до реального кристала Al, демонструючи, таким чином, практичну незалежність цього параметра від маси атомів мішені.

Таблиця 4.7 СКЗ (нм²) у Al і Ni при бомбардуванні іонами 100 eV Ag і 0 K

Кристали	R^2	R_x^2	$R_{x, ad}^2$	$R_{yz, ad}^2$	N_{ws}
Ni	0,71	0,3	0,03	0,27	6,2
Al	2,15	1,07	0,085	0,32	12,9

Абсолютний внесок ад-атомів у загальне середньоквадратичне зміщення атомів віддачі є неістотно більшим у кристалі Al порівняно з Ni, але відносний внесок ад-атомів у загальне середньоквадратичне зміщення атомів є в два рази більшим у кристалі Ni (відповідно, 42% і 19%, див. таблицю 4.7). Бічний компонент $R_{yz, ad}^2$ ад-атомів не дуже відрізняється в кристалах Ni і Al, тоді як нормальний компонент середньоквадратичного зміщення $R_{x, ad}^2$ ад-атомів Al значно більший ніж $R_{x, ad}^2$ для кристала Ni, завдяки більшій кількості ад-атомів і тому, що атоми з більших глибин кристала Al можуть стати ад-атомами. У кристалі Ni бічні зміщення атомів віддачі без урахування внеску ад-атомів складають 20% від загального середньоквадратичного зміщення атомів у каскаді, тоді як у Al це значення складає ~ 40%. Таким чином, у кристалі Ni головний внесок у внутрішню частку середньоквадратичного зміщення атомів віддачі вносять нормальні до поверхні зміщення атомів, тоді як у кристалі Al внески бічних і нормальних до поверхні внутрішніх переміщень мало відрізняються між собою і є домінуючими.

Часові залежності різних компонентів загального середньоквадратичного зміщення, а також N_{ws} для Ni і Al наведені на рис. 4.9 (а, б). Повна релаксація обох кристалів Al і Ni настає після 1,5–2,0 пс еволюції каскаду. Максимальні значення середньоквадратичного зміщення атомів віддачі для обох кристалів на ранніх стадіях еволюції каскаду тільки неістотно (~ 6%) більші ніж кінцеві відповідно стабільні значення загального середньоквадратичного зміщення. Максимум еволюції кількості атомних стрибків N_{ws} має місце після 0,2 пс у кристалі Ni і після 0,5 пс у кристалі Al. 70% атомів Ni і 90% атомів Al, що залишили свої початкові комірки у кристалах, не повертаються до них після закінчення каскаду. Таким чином, у Ni проявляється сильніша тенденція повернення атомів до своїх початкових комірок, що збігається

з більшою енергією зв'язку атомів у кристалі Ni. При цьому, загальне значення середньоквадратичного зміщення атомів віддачі не демонструє значного зменшення величин, показуючи, що зменшення N_{ws} компенсується додатковими зміщеннями ад-атомів.

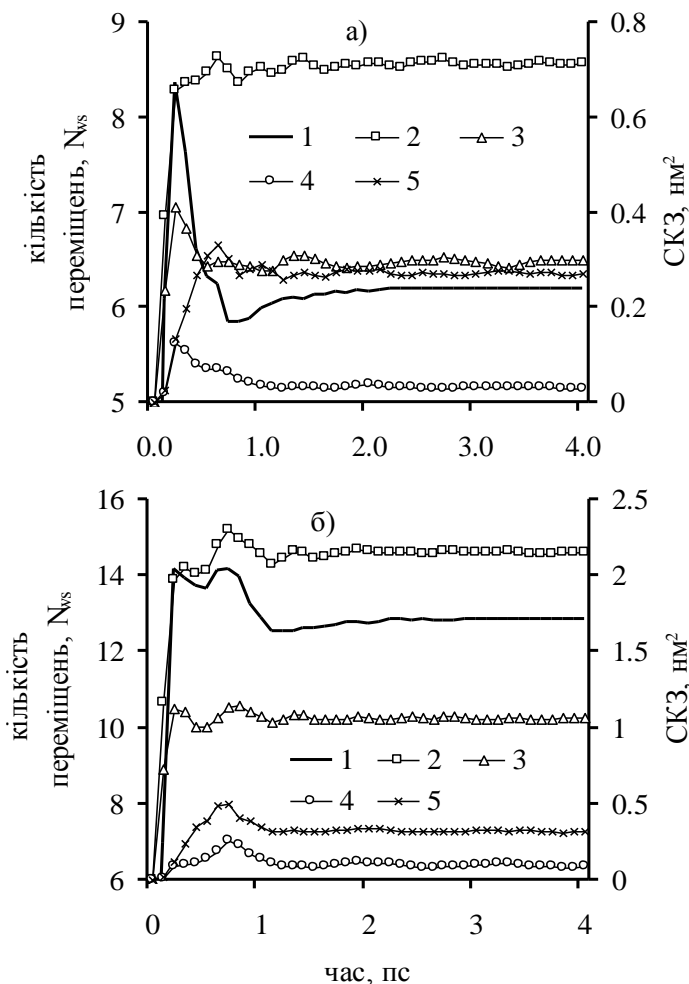


Рис. 4.9. Залежності компонентів СКЗ, а також кількості атомних переміщень N_{ws} у каскадах для кристалів а) Ni і б) Al від часу розвитку каскаду. Криві: 1 – кількість стрибків N_{ws} , 2 – СКЗ, 3 – СКЗ у напрямку [100], 4 – СКЗ ад-атомів у напрямку [100], 5 – СКЗ ад-атомів у бічних напрямках. Енергія іонів Ar – 100 еВ, температура кристала 0 К [311]

Як уже зауважувалось вище, при енергіях бомбардуючих іонів 100 еВ і менше, послідовності атомних зіткнень заміщення є головним транспортним механізмом перенесення маси і енергії в низькоенергетичних атомних каскадах. Для кристалів Al і Ni існує суттєва різниця в реалізації цього механізму. На рис. 4.10 (а, б) наведені усереднені переміщення атомів у кристалах Ni і Al у напрямках «до поверхні» і «від поверхні» з одного атомного прошарку в інший. Послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ навколо напрямку [100] характеризуються атомними переміщеннями з прошарку n в прошарок $n + 1$ у кожному атомному прошарку n . Такі переміщення спостерігаються в обох кристалах Al і Ni і показані лінією на рис. 4.10. Послідовності атомних зіткнень заміщення у напрямку [100] характеризуються переміщеннями з атомного прошарку n до прошарку $n + 2$. Відповідні атомні переміщення, що проявляються як зміна високих і низьких елементів діаграми від прошарку до прошарку, також показані на рис. 4.10. Послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямку [111] в Ni повинні проявлятися аналогічним чином, але ймовірність їх появи значно менша ніж послідовностей в напрямку [100] завдяки значній пороговій енергії зміщення E_d в напрямку [111] для кристала Ni (див. таблицю 3.4 в підрозділі 3.2.4). Ці висновки також мають оціночний характер, оскільки у нашій молекулярно-динамічній програмі послідовності атомних зіткнень заміщення спеціально не ідентифікувалися відносно напрямку розповсюдження, і, таким чином, не кожний атомний стрибок, обов'язково повинен був бути складовою частиною послідовності атомних зіткнень заміщення. Однак, ці заключення підтримуються даними для середньоквадратичних зміщень атомів віддачі, оскільки було встановлено, що нормальний до поверхні компонент зміщень R_x^2 без врахування внеску ад-атомів у кристалі Ni дає $\sim 35\text{--}40\%$ внеску в загальне середньоквадратичне зміщення атомів віддачі. У цілому ж, дані, приведені на рис. 4.10, підтверджують значно більшу активність переміщень атомів віддачі в Al порівняно з Ni.

Порівняння атомних переміщень у кристалах Al і Ni на рис. 4.10 показує, що ймовірність зворотних переміщень у напрямку до поверхні протягом атомного каскаду значно більша в кристалі Al, ніж у кристалі Ni. Велика кількість зворотних переміщень у Al може забезпечуватися гвинтовими послідовностями атомних зіткнень заміщення, що мали початковий напрямок $\langle 110 \rangle$ [421]. Послідовності атомних зіткнень заміщення можуть бути також причиною атомних переміщень з глибини кристала до її поверхні. Цей механізм виглядає реалістичним в Al, оскільки порогова енергія зміщення атома E_d в напрямку $\langle 110 \rangle$ дорівнює 6 еВ (див. таблицю 3.4 в підрозділі 3.2.4).

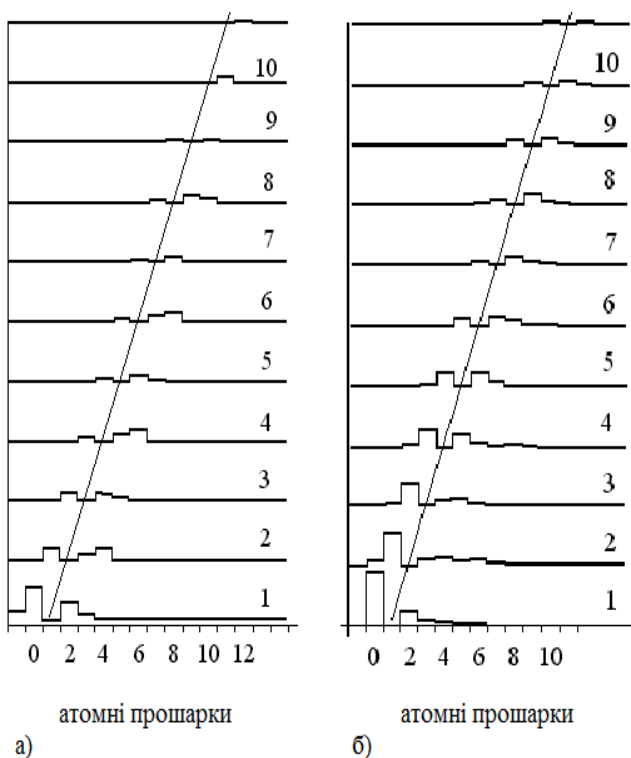


Рис. 4.10. Переміщення атомів у кристалах а) Ni і б) Al у напрямку $[100]$ з прошарку в прошарок. Енергія бомбардуючих іонів Ag – 100 eВ, температура кристала 0 К. По вертикалі показані номери атомних прошарків, з яких переміщуються атоми $[311]$

Для енергій, що розглядаються, області перемішування є більшими, ніж відповідні глибини проникнення іонів у кристал, що видно з рис. 4.10 і рис. 3.15. Особливо це стосується кристала Ni. На значну різницю між областями проникнення іонів і іонного перемішування при низьких енергіях іонів було звернуто також увагу в роботі [444]. З рис. 4.10 видно також, що в Al кількість атомних переміщень з першого атомного прошарку в глибину кристала менша, ніж навпаки (різниця дорівнює 0,35 атомів/іон), тоді як у кристалі Ni має місце протилежна залежність (різниця кількості переміщених атомів складає 0,33 атоми/іон). Ця різниця в приповерхневих переміщеннях у Ni і Al найбільш ймовірно пов'язана з більш глибоким проникненням іонів Ag у кристал Al, ніж у

кристал Ni (підрозділ 3.2.4) і тим, що приблизно 20% бомбардуючих іонів зупиняються в кристалі Al в 4–5-му атомних прошарках, тоді як більшість іонів Ag відбиваються від поверхні кристала Ni. При цьому, іони Ag в Al можуть бути причиною додаткової напруженості ґратки, що і призводить до виникнення потоку атомів з об'єму кристала Al до його поверхні в процесі розвитку каскаду.

4.4. Каскадні переміщення атомів в Ni/Al і Al/Ni при температурі 0 К

4.4.1. *Двошарова система Al/Ni.* Матриця атомних переміщень у двошаровій системі Al/Ni при бомбардуванні іонами Ag з енергією 100 еВ наведена на рис. 3.19 (а). Сума атомних переміщень з першого атомного (Al) прошарку в підкладинку (Ni), в ад-прошарок, а також атомів, що були розпилені за один каскад, дорівнює 5,5 переміщень/іон. З іншого боку, $N_{\text{вс}}$ атомів Al становить 12,9 переміщень/іон, що наведено в таблиці 4.8. Таким чином, значна кількість атомних переміщень з однієї комірки Вігнера – Зейтца до іншої повинна відбуватися в першому атомному прошарку паралельно поверхні, що бомбардується. Приблизно два атоми Al за один каскад переміщуються до підкладинки. Аналогічна величина в однокомпонентних матеріалах і псевдоізотопних системах в 2,0–2,5 рази менше, за винятком тільки двошарової системи Ni/Al, що видно на рис. 3.19 (б). Кількість переміщень з першого атомного прошарку до ад-прошарку в Al/Ni дорівнює 3,2 атомів/іон, що є найвищим значенням для кількості атомних переміщень у ад-прошарок серед усіх розглянутих у цій роботі систем. У псевдоізотопній системі Al/Ni(Ni) спостерігалися значно менші величини атомних переміщень. Таким чином, велика активність переміщень атомів Al у системі Al/Ni не може бути пояснена тільки різницею атомних мас Al і Ni.

Процедура розрахунку загальної потенціальної енергії кристала для різного атомного оточення, що була раніше виконана в [306] для двошарової системи Cu/Pb, була використана для пояснення високої активності переміщення приповерхневих атомів у двошаровій системі Al/Ni [311]. Потенціальна енергія ідеального кристала (без дефектів) була порівняна з потенціальною енергією системи, де n поверхневих найближчих сусідніх атомів з першого атомного прошарку взаємно замінені n найближчими сусідніми атомами з другого атомного прошарку. Розрахунки були виконані для $n = 1, 2, 3$ без урахування релаксації ґратки. Була отримана наступна різниця потенціальних енергій кристалів, відповідно: – 0,6, – 1,09 і – 1,65 еВ. Ці результати показали, що обмін атомами першого прошарку (Al) з атомами

підкладинки (Ni) є енергетично вигідним для двошарової системи Al/Ni. У свою чергу, бомбардуючі іони активізують цей обмінний процес загального зниження потенціальної енергії двошарової системи за рахунок привнесеної ними енергії.

Таблиця 4.8 СКЗ (нм²) в Al/Ni, Ni/Al, Al/Ni (Ni), Ni/Al (Al), 100 eV Ag, 0 K

Системи	R^2	R_x^2	$R_{x,ad}^2$	$R_{yz,ad}^2$	N_{ws}
Al/Ni					
Al	1,1	0,22	0,12	0,41	12,9
Ni	0,37	0,17	0,005	0,003	5,9
Al/Ni (Ni)					
Al	0,41	0,071	0,034	0,034	2,57
Ni	0,29	0,18	0,0024	0,0013	3,87
Ni/Al					
Ni	1,15	0,48	0,0103	0,104	8,9
Al	2,09	1,11	0,235	0,082	19,1
Ni/Al (Al)					
Ni	1,05	0,328	0,054	0,48	3,41
Al	1,48	0,83	0,016	0,0104	10,1

Велика кількість ад-атомів у Al/Ni (3,2 ад-атомів/іон, таблиця 3.6) формується завдяки низькій поверхневій енергії зв'язку і значним енергетичним втратам іонів Ag у першому прошарку двошарової системи Al/Ni. Інша причина полягає в тому, що атоми Al розташовані на поверхні кристала Ni з відносно важкими атомами [311]. Значна генерація ад-атомів спостерігалася також в однокомпонентному Al (див. таблицю 3.3) завдяки низькій поверхневій енергії, але максимум енергетичних втрат у кристалі Al був розташований в другому атомному прошарку, що впливає таким чином, що кількість ад-атомів у кристалі Al все ж менша, ніж у двошаровій системі Al/Ni. Пряма залежність генерації ад-атомів від поверхневої енергії зв'язку і енергетичних втрат іона в першому прошарку підтверджується додатковими модельними розрахунками, що були виконані для псевдоізотопної системи Al/Ni (Al). У цьому випадку, кристал описувався потенціалом Al, але атоми підкладинки мали масу атомів Ni. Знову було встановлено великий вихід ад-атомів (2,7 ад-атомів/іон, див. таблицю 4.8) завдяки низькій поверхневій енергії зв'язку і великим втратам енергії в першому атомному прошарку (атоми великого розміру з малою масою на поверхні підкладинки з великою атомною масою і малим розміром).

Додатковий вплив на активність переміщень атомів у кристалі Al/Ni має механічна напруженість у двошаровому кристалі, що є наслідком різниці сталих ґратки Al і Ni. Вона також сприяє більш значним змінам у двошаровому кристалі порівняно з однокомпонентними і псевдоізотопними кристалами, однак ці зміни відбуваються, головним чином, уздовж поверхні кристала.

4.4.2. *Двошарова система Ni/Al.* Матриця атомних каскадних переміщень у Ni/Al, що наведена на рис. 3.19 (б), показує значну різницю атомних переміщень порівняно з двошаровою системою Al/Ni. Сума атомних переміщень атомів Ni за межі першого атомного прошарку в двошаровому кристалі Ni/Al дорівнює 7,2 атомів/іон (як видно з матриці атомних переміщень, див. рис. 3.19 (б)), тоді як N_{ws} атомів першого атомного прошарку становить 8,9 переміщень/іон. Таким чином, кількість атомних переміщень з однієї комірки в іншу в межах першого атомного прошарку становить 1,7 переміщень/іон. Отже, основний потік каскадних атомів Ni спрямовується до ад-прошарку і підкладинки. Для порівняння N_{ws} для атомів першого атомного прошарку в псевдоізотопній системі Ni/Al (Al) становить тільки 3,4 переміщень/іон. Таким чином, значна величина N_{ws} і значна кількість атомних переміщень з першого атомного прошарку Ni всередину двошарового кристала Ni/Al не є наслідком різниці атомних мас компонентів, про що вже говорилося на прикладі двошарової системи Al/Ni.

Кількість переміщень атомів Ni до ад-прошарку (N_{ad} для Ni) неістотно відрізняється від N_{ad} у однокомпонентному кристалі Ni (див. таблиці 4.8, 3.6 і 3.3). Однак, як видно з рис. 3.19 (б), поверхневі атоми Ni у двошаровому кристалі Ni/Al проявляють сильнішу тенденцію до переміщення в Al підкладинку, порівняно з іншими системами, що розглядаються. Спостерігається також значний потік атомів віддачі Al з другого атомного прошарку (Al) в перший (Ni).

Як і у випадку двошарового кристала Al/Ni, були виконані аналогічні розрахунки потенціальної енергії ідеального кристала і кристала зі взаємно переставленими найближчими сусідніми атомами у першому і другому атомних прошарках. Модельні розрахунки були виконані для $n = 1-5$ атомів найближчих сусідів з одного прошарку. Знову було виявлено зменшення потенціальної енергії від -0,197 eV ($n = 1$) до -1,9 eV ($n = 5$). Таким чином, велика кількість атомних переміщень атомів між першим і другим атомними прошарками у двошаровій системі Ni/Al також є енергетично вигідним процесом і

спричиняється за рахунок енергії, що привноситься до системи бомбардуючими іонами.

4.4.3. *Атомні переміщення у кристалах Al/Ni і Ni/Al.* З усього сказаного вище видно, що для обох двошарових систем обмін між атомами першого атомного прошарку і підкладинкою є енергетично вигідним. Більша інтенсивність обміну була показана системою Ni/Al завдяки більш низькій енергії переміщення [166], як наслідок більшої сталої ґратки Al порівняно зі сталою ґратки Ni [429, 432]. Більше того, потенціальна енергія, що була розрахована для двошарової системи Ni/Al, показує, що обмінні переміщення зв'язаних груп поверхневих сусідніх атомів Ni з відповідними атомами Al з другого атомного прошарку є енергетично більш вигідним процесом, ніж обмін між першим і другим атомними прошарками такої самої кількості окремих атомів Ni і Al. У випадку двошарової системи Al/Ni має місце протилежна тенденція.

Іншою особливістю системи Ni/Al є критично велика кількість атомних переміщень атомів Al з підкладинки до ад-прошарку (див. таблицю 3.6). Цей ефект, ймовірно за все, пов'язаний з деградацією поверхневого потенціального бар'єру завдяки значній кількості приповерхневих атомних переміщень. Мала величина $R_{yz,ad}^2/N_{ad}$ (див. таблицю 3.6) для атомів Al показує, що ад-атоми Al розташовуються дуже близько до точки, де вони вийшли з поверхневого прошарку на поверхню кристала. Аналогічну тенденцію демонструють ад-атоми, що вийшли з підкладинки в псевдоізотопних системах Al/Ni(Ni) і Ni/Al(Al), що видно з даних розрахунків, наведених у таблиці 4.8.

Непрямі свідчення утворення послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ навколо напрямку [100] в обох двошарових кристалах наведені на рис. 3.19. Послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямку [100] не були помічені в кристалах Al/Ni і Ni/Al, незважаючи на те, що вони генеруються в однокомпонентному кристалі Ni. Ідея домінуючої ролі послідовності атомних зіткнень у напрямках $\langle 110 \rangle$ навколо напрямку [100] підтримується тим, що різниця компонентів $R_x^2 - R_{x,ad}^2$ (нормальний до поверхні внутрішній компонент загального середньоквадратичного зміщення атомів віддачі) і $R^2 - R_x^2 - R_{yz,ad}^2$ (бічний внутрішній компонент середньоквадратичного зміщення) є, практично, ідентичними між собою як у випадку системи Al/Ni, так і у випадку системи Ni/Al, що можна бачити з даних, наведених у таблиці 4.8. У кристалі Al/Ni послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямку [100], як і в однокомпонентному кристалі Al, не мали домінуючого характеру. Навпаки, у випадку кристала Ni послідовність у напрямку [100] мала домінуючий характер.

Однією з можливих причин зменшення ймовірності утворення послідовності зіткнень заміщення атомів з поверхні двошарового кристала Al/Ni до підкладинки є великий розмір атома Al порівняно з атомом Ni. При цьому, в ГЦК кристалі геометрично вигідніше атому Al переміщуватися в напрямку $\langle 110 \rangle$, ніж у напрямку [100]. Таке переміщення може супроводжуватися виникненням ад-атома Al, яким стає один з найближчих сусідніх атомів Al на поверхні. Атомні переміщення з глибини кристала до поверхні обмежені у випадку кристала Al/Ni 2–4-м атомними прошарками і 2–8-м атомними прошарками у кристалі Ni/Al. Цей останній результат співпадає з даними для однокомпонентних кристалів, що наведені на рис. 4.10.

Часові залежності середньоквадратичного зміщення атомів віддачі і їх компонентів для двошарових кристалів Al/Ni і Ni/Al наведені на рис. 4.11 (а, б). Стабільність двошарової системи Al/Ni досягається після 1,3–1,5 пс еволюції каскаду, а системи Ni/Al – після 2–3 пс. Однак, деякі флуктуації зберігаються в двошаровому кристалі Ni/Al до кінця розрахунку каскаду. У двошаровому кристалі Ni/Al для функцій N_{ws} атомів Ni і Al з'являється слабкий максимум у момент часу ~ 1 пс, тоді як у випадку кристала Al/Ni такий максимум, практично, не спостерігається. У кристалі Ni/Al бічні і нормальні внутрішні компоненти середньоквадратичного зміщення атомів віддачі обох типів атомів роблять головний внесок у загальне значення зміщення атомів віддачі. У кристалі Al/Ni головний внесок роблять бічний і нормальний до поверхні компоненти середньоквадратичного зміщення атомів Ni, а також бічний внутрішній компонент зміщень і бічний компонент зміщень Al ад-атомів.

Середньоквадратичні зміщення атомів віддачі компонентів у Al/Ni і Ni/Al зростають від моменту часу 0,2 пс до кінця розрахунку каскаду в 1,4–2,8 рази, тоді як у однокомпонентних металах Al і Ni або в псевдоізотопних двошарових системах середньоквадратичне зміщення атомів неістотно зростає на цьому етапі розвитку каскаду. У Al/Ni зміщення атомів віддачі зростає, головним чином, завдяки значному зростанню бічної внутрішньої і ад-атомної компонентів зміщення атомів Al, а також завдяки зростанню бічного компонента зміщення атомів підкладинки (Ni), що видно з рис. 4.11 (а). У Ni/Al середньоквадратичне зміщення зростає завдяки збільшенню внутрішнього бічного компонента зміщення Ni атомів, а також зростанню бічного і нормального компонентів зміщення атомів Al, що видно з рис. 4.11 (б). Нами було запропоновано, що переважне зростання бічного компонента середньоквадратичного зміщення на термічній стадії каскаду в обох кристалах пов'язано з довгоіснуючими

низькоенергетичними процесами релаксації міжатомних латеральних напруженостей в кристалах, викликаних розбіжностями сталих ґратки Al і Ni. Таким чином, хімічні сили взаємного розчинення, а також різниця сталей ґратки, що є наслідком різних міжатомних потенціалів,

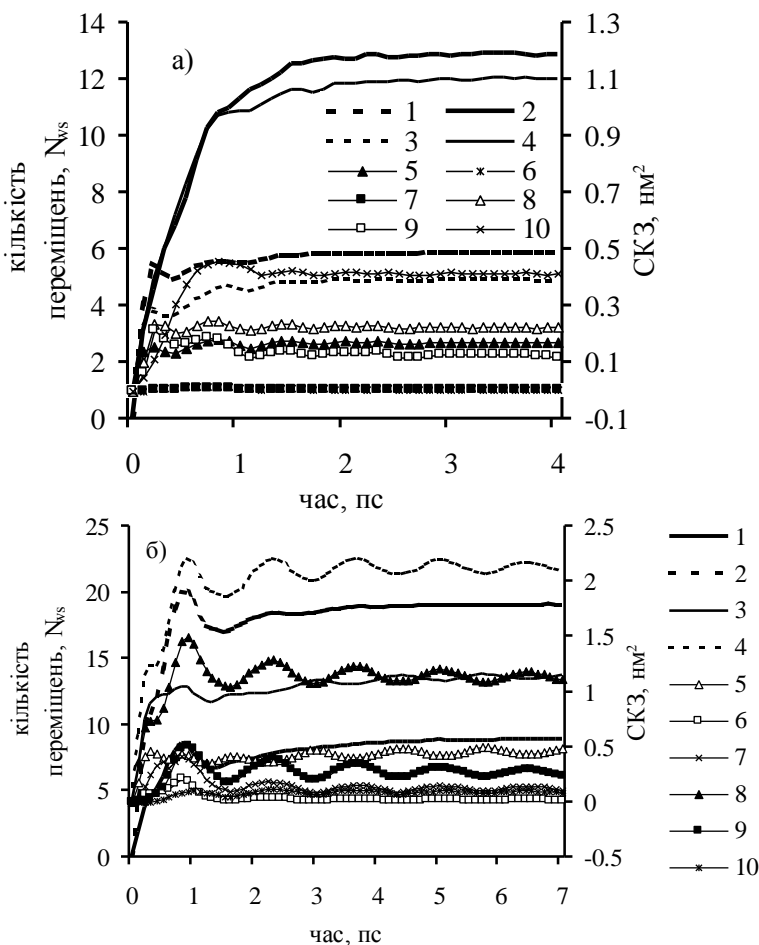


Рис. 4.11. Залежність компонентів СКЗ для а) Al/Ni і б) Ni/Al при Ar – 100 eV і 0 K. 1 і 2 – переміщення атомів N_{Ni} , відповідно, Ni і Al; 3 і 4 – СКЗ атомів Ni і Al; 5 – СКЗ [100] атомів Ni, 6 – СКЗ [100] ад-атомів Ni, 7 – СКЗ ад-атомів Ni у бічних напрямках, 8 – СКЗ [100] атомів Al, 9 – СКЗ [100] ад-атомів Al, 10 – СКЗ ад-атомів Al у бічних напрямках [310]

інтенсифікують атомні транспортні процеси протягом термічних стадій каскадів, що відмічалось в [166] для інших двошарових систем.

Кількість атомних переміщень атомів підкладки у напрямку [100], а також відповідні середньоквадратичні зміщення і $N_{\text{вс}}$ атомів віддачі в підкладинці виявляються більшими у Ni/Al порівняно з Al/Ni. Цей результат співпадає з даними для однокомпонентних кристалів Al і Ni і відбиває залежність кількості переміщених атомів від енергії зв'язку атомів у матеріалі [307–310]. У доповнення, обидві двошарові системи Al/Ni і Ni/Al показують значно більшу активність переміщень поблизу поверхні порівняно з відповідними псевдоізотопними двошаровими системами або чистими металами, що виглядає цілком природно виходячи з вищесказаного.

4.4.4. *Особливості охолодження каскадів.* Існують деякі особливості процесу охолодження каскадів, які відрізняють модельні кристали один від одного. Найнижчий максимум кінетичної енергії частинок у каскадах після 4 пс еволюції каскадів має місце в кристалах з ґраткою Ni (однокомпонентний Ni і Al/Ni (Ni)). У системах з ґраткою Al (однокомпонентний Al і Ni/Al (Al)) найбільш енергетична частинка після 4 пс еволюції каскаду має істотно більшу кінетичну енергію. Це добре корелює з ідеєю різної швидкості охолодження каскаду в матеріалах з різними якостями когезії і пружності ґратки [314, 315]. Було виконано також додаткове моделювання для псевдоізотопних систем Al/Ni (Al) і Ni/Al (Ni) з метою з'ясування залежності процесів перенесення енергії в кристалі від маси атомів компонентів. Ці моделювання виявили значну роль потенціалу по відношенню до швидкості охолодження каскаду. Енергія когезії і відповідна модельна температура плавлення кристала, яка залежить прямо пропорційно від енергії когезії [315, 317], є меншими у кристалі Al порівняно з кристалом Ni. Відповідно, порушення в ґратці Al після 4 пс еволюції каскаду будуть значно більшими, ніж у ґратці Ni завдяки більш низькій температурі плавлення, а також меншій швидкості охолодження. Порівняння рис. 4.11 (а) і рис. 4.11 (б) ясно показує, що для двошарового кристала Ni/Al осциляції існують навіть після 7 пс еволюції каскаду, що говорить про те, що система не досягла стадії рівноваги з навколишнім середовищем порівняно з двошаровою системою Al/Ni. Подібне порівняння було також виконано для стадій охолодження каскадів з початковою енергією 5 кеВ у кристалах Cu і Ni [314].

4.5. Каскадні переміщення атомів в Al, Ni і Al/Ni при 300 К

4.5.1. *Переміщення атомів віддачі при 0 К і 300 К.* Кількості атомних переміщень з одної комірки Вігнера – Зейтца до іншої N_{ws} при 0 К і 300 К у кристалах Al, Ni і Al/Ni наведені в таблицях 4.7, 4.8 і 4.9. Як видно з таблиць, N_{ws} демонструє зростання на 20–40% з підвищенням температури від 0 К до 300 К. Збільшення на 10–40% також справедливо для компонентів середньоквадратичного зміщення атомів віддачі, за виключенням значення внутрішнього зміщення атомів віддачі в нормальному до поверхні напрямку: $R_x^2 - R_{x,ad}^2$, яке залишається незмінним. Найбільше зростання на 40–60% має місце в усіх випадках для внутрішнього бічного компонента середньоквадратичного зміщення: $R^2 - R_x^2 - R_{yz,ad}^2$. Рис. 4.12 (а, б) надає інформацію про атомні переміщення в кристалах Al і Ni при 0 К.

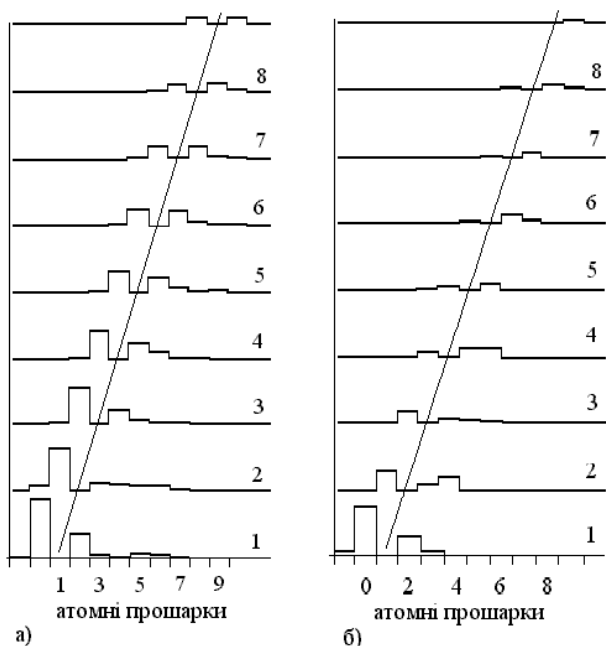


Рис. 4.12. Переміщення атомів у кристалах а) Al і б) Ni уздовж напрямку [100]. Енергія іонів Ar – 100 еВ, температура 300 К. По вертикалі показані номери атомних прошарків, з яких переміщуються атоми віддачі [312]

Видно, що послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ генеруються в обох кристалах, тоді як послідовності зіткнень заміщення в напрямку $[100]$ мають переважне значення тільки у кристалі Ni. Вони також були ідентифіковані в двошаровому кристалі Al/Ni при температурі 300 К. Ці результати якісно співпадають з аналогічними результатами при температурі 0 К. Однак, порівняння з моделюванням при 0 К показує, що довжина послідовності зіткнень заміщення в напрямку $[100]$ в кристалі Ni значно зменшується із зростанням температури, що співпадає з температурним впливом на каскади зіткнень, що моделювався в [313, 433].

Таблиця 4.9 СКЗ атомів віддачі в Al, Ni і Al/Ni, 300 К, енергія іонів Ar 100 eV

Кристали	R^2	R_x^2	$R_{x,ad}^2$	$R_{yz,ad}^2$	N_{ws}
Ni	0,92	0,314	0,045	0,386	7,7
Al	2,79	1,26	0,09	0,375	17,6
Al/Ni[Al]	1,5	0,27	0,146	0,54	16,0
Al/Ni[Ni]	0,52	0,23	0,005	0,0043	7,3

Примітка. [] – СКЗ або N_{ws} якого компонента системи приведено.

Взагалі, спостерігається зростання активності перемішування атомів зі зростанням температури. Кількість внутрішніх зворотних атомних переміщень у напрямку до поверхні також більша на $\sim 60\%$ для обох кристалів Al і Ni при температурі 300 К порівняно з температурою 0 К, що пов'язано із загальним зростанням інтенсивності зворотного розсіювання атомів віддачі на термічно активованих неоднорідностях кристалічної ґратки. Для двошарового кристала Al/Ni це зростання становило тільки $\sim 20\%$. Порівнюючи кристали Al і Ni було встановлено, що загальна кількість внутрішніх зворотних атомних переміщень у кристалі Al була в 4,5 рази більшою ніж в Ni при обох температурах 0 К і 300 К. Це пов'язано з різницею енергій когезії кристалів Al і Ni [311]. Більша частина коротких зворотних (з атомного прошарку n в прошарок $n - 1$) переміщень атомів віддачі в двошаровому кристалі Al/Ni має місце на межі розподілу компонентів Al–Ni і пов'язана з внеском хімічної складової в ефект перемішування. Подібні внутрішні зворотні атомні переміщення в Ni підкладинці в системі Al/Ni відбуваються поблизу поверхні в другому і третьому атомних прошарках і їх кількість значно більша, ніж у кристалі Ni. Це зростання в кристалі Al/Ni, порівняно з кристалом Ni є, практично, температурно-незалежним, оскільки, головним чином, пов'язано з впливом взаємного розчинення компонентів двошарового кристала.

Різниця кількостей атомних переміщень у кристалах Al і Ni з першого атомного прошарку в глибину кристала і навпаки з глибини кристала до першого атомного прошарку при температурі 300 К становить +0,46 атомів/іон у кристалі Al і -0,68 атомів/іон – у кристалі Ni. Якісно аналогічні залежності мають місце також при температурі кристалів 0 К. Таким чином, потік атомів між поверхневим прошарком і об'ємом зменшує кількість поверхневих вакансій у кристалі Al і збільшує їх кількість у кристалі Ni. Відповідний потік атомів віддачі в двошаровому кристалі Al/Ni є відносно малим і лише неістотно збільшує кількість поверхневих вакансій.

4.5.2. *Каскади в Ni і Al/Ni при 300 К для іонів Ar і Xe 25 і 50 еВ.* У роботі [445] були розглянуті каскадні переміщення атомів через межу розподілу в кристалі Al/Ni при його нормальному бомбардуванні іонами Ar і Xe з енергіям 25, 40 і 50 еВ і температурі кристала 300 К. Як видно з таблиці 4.10 і таблиці 4.11, кількість переміщень атомів з першого прошарку (Al) до підкладки (Ni) і навпаки у двошаровій системі Al/Ni, відповідно в 2,5 і 3,2 рази більше, ніж у монокристалі Ni для іонів Ar з енергією 50 еВ. Переміщення в кристалах Ni і Al/Ni з першого прошарку в об'єм, компенсуються послідовностями атомних зіткнень заміщення, що призводить до зворотних переміщень атомів з об'єму кристала в перший прошарок, включаючи обмінні переміщення атомів між першим і другим прошарками. Ці переміщення склали, відповідно, 74% і 95%, у тому числі, обмінні переміщення між першим і другим прошарками склали 67% і 83% від загального числа переміщень з першого прошарку в об'єм кристала. При бомбардуванні іонами Xe з енергією 50 еВ, кількість переміщень атомів Al до Ni підкладки і навпаки у двошаровій системі Al/Ni, була, відповідно, в 2,7 і 4,5 разів більшою, ніж у відповідних прошарках монокристала Ni. При цьому, атоми Al у двошаровому кристалі Al/Ni і атоми першого прошарку в монокристалі Ni перетинали межу між першим і другим прошарками, відповідно, в 98% і 60% випадків у результаті компенсованих переміщень атомів різних типів, у тому числі, в 85% і 57% випадків у результаті обмінних атомних переміщень.

Таблиця 4.10 Обмінні переміщення атомів між 1-м і 2-м прошарками, переміщення між 1-м прошарком і об'ємом кристала в Ni

Ni		1-й ↔ 2-й	1-й → об'єм	1-й ← об'єм
Ar	50 еВ	0,31	0,46	0,34
	25 еВ	0,13	0,13	0,13
Xe	50 еВ	0,32	0,56	0,33
	25 еВ	0,26	0,26	0,27

Бомбардування монокристалу Ni іонами Хе з енергією 25 еВ призводило до утворення в два рази більшої кількості переміщень атомів між першим і другим прошарками, 96% яких були обмінними, у порівнянні з іонами Аг, для яких усі переміщення атомів у кристалі Ni – обмінні. У двошаровому кристалі Al/Ni при такій енергії іонів Аг також спостерігалися тільки обмінні переміщення атомів між першим і другим прошарками, кількість яких перевищувала кількість аналогічних переміщень у монокристалі Ni більш ніж у 2 рази. Для іонів Хе крім обмінних переміщень атомів у двошаровому кристалі Al/Ni між прошарком Al і підкладкою Ni, кількість яких була в 2 рази більшою, ніж кількість відповідних переміщень при бомбардуванні кристалу Ni іонами Хе і кристалу Al/Ni іонами Аг, спостерігалось ~ 0,05 переміщень/іон у самій підкладці.

Таблиця 4.11 Обмінні переміщення атомів між 1-м і 2-м прошарками, переміщення між 1-м прошарком і підкладкою в Al/Ni

Al/Ni		1-й ↔ 2-й	1-й → об'єм	1-й ← об'єм
Аг	50 еВ	0,955	1,145	1,085
	25 еВ	0,295	0,295	0,295
Хе	50 еВ	1,29	1,51	1,5
	25 еВ	0,495	0,505	0,515

Для обох іонів з енергією 50 еВ з 3–6-го атомних прошарків двошарової системи Al/Ni утворювалося в 3,7–4,0 рази більше зворотних переміщень атомів Ni до поверхні в порівнянні з переміщеннями атомів у кристалі Ni. Така різниця в кількості зворотних переміщень атомів всередині кристалів пов'язана зі значною кількістю необмінних приповерхневих переміщень атомів у кристалі Al/Ni, що спричиняють атомні переміщення у більш глибоких атомних прошарках кристалу.

Модельний розрахунок середньоквадратичного зміщення атомів зі своїх комірок Вігнера-Зейтца говорить про значні переміщення атомів Al у межах першого атомного прошарку кристалу Al/Ni. У випадку бомбардування Al/Ni іонами Аг і Хе з енергією 25 еВ, середньоквадратичне зміщення каскадних атомів Al у першому прошарку складало 0,053 нм² і 0,054 нм², тоді як бічні зміщення атомів у площині (100) в усьому кристалі Ni без урахування ад-атомів при такій самій енергії іонів дорівнювали, відповідно, 0,0093 нм² і 0,018 нм². Бічні зміщення, як і відповідні кількості атомних переміщень N_{ws} , у монокристалі Ni і в Ni підкладці двошарового кристалу Al/Ni

відрізнялися неістотно. При енергії іонів Ar і Xe–50 eV, середньоквадратичне зміщення атомів Al у межах першого атомного прошарку кристала Al/Ni дорівнювало, відповідно, 0,287 нм² і 0,342 нм². У монокристалі Ni бічні зміщення атомів у каскаді без врахування переміщень ад-атомів були, відповідно, 0,079 нм² і 0,09 нм².

У всіх розглянутих випадках зворотно-розсіяні іони виносили ~ 10% енергії при початковій енергії іонів 50 eV і ~ 20% при енергії 25 eV, крім випадку бомбардування монокристала Ni іонами Ar, в якому енергія, що виноситься, становила, відповідно, ~ 20% і 40%. При цьому, іони не проникали у кристали глибше першого атомного прошарку, крім іонів Хе з енергією 50 eV, які залишали у другому прошарку, в середньому, ~ 8,5 eV початкової енергії. Таким чином, розходження в розподілах пружних втрат енергії іонів у кристалах Ni і Al/Ni можуть тільки незначним чином, як наприклад у випадку іонів Ar і кристала Ni, впливати на результуючу різницю в кількості переміщень атомів. З іншого боку, моделювання двошарової системи Al/Ni при температурі 0 K показало, що взаємний обмін однієї пари атомів Al і Ni місцями у першому – другому прошарках призводить до зниження потенціальної енергії двошарового кристала Al/Ni на 0,6 eV, про що докладніше говорилося в п. 4.4.1 [311]. Це якісно узгоджується з від'ємним значенням теплоти перемішування для системи Al-Ni [17, 305]. Таким чином, активований іонами з енергіями поблизу від порогу розпилення процес обмінних і взаємно компенсованих переміщень атомів Al і Ni між першим і другим прошарками у Al/Ni є енергетично вигідним, що сприяє загальному зростанню кількості переміщень атомів з першого прошарку Al в підкладинку і навпаки. При цьому, обмінні та компенсовані переміщення в двошаровому кристалі Al/Ni складають більш значну частку від загальної кількості переміщень з першого атомного прошарку в підкладинку в порівнянні з аналогічними переміщеннями в монокристалі Ni при енергії іонів 50 eV, що якісно узгоджується з результатами, отриманими завдяки молекулярно-динамічному моделюванню двошарової системи Ni/Au [14], а також з нашими результатами для енергії іонів Ar 100 eV.

У розглянутих умовах, іони Хе генерують, звичайно, більше ад-атомів і атомних переміщень у кристалах Ni і Al/Ni, ніж іони Ar. Це, значною мірою, є результатом ушкоджень атомної ґратки, які утворюються іонами Хе на початковій стадії каскадів і призводять до локального, протягом ~0,5 пс, зниження потенціальних бар'єрів на шляху міграції атомів у каскадах зіткнень.

4.5.3. *Переміщення атомів при бомбардуванні Al іонами Хе.* У роботах [437, 438] був розглянутий випадок нормального

бомбардування кристала Al (100) іонами Ar і Xe з енергіями 25–50 eV при температурі кристала 300 K. На рис. 4.13 подані кількості атомів N_{ws} , що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца за час розвитку каскаду. Кількість переміщень атомів на стадії релаксації каскаду була більшою у випадку іонів Xe при усіх енергіях бомбардування. Для іонів Ar стабілізація N_{ws} досягається через 0,9–1,3 пс, тоді як у випадку Xe – через 1,5–2,0 пс. У каскадах, ініційованих іонами Xe, спостерігаються два максимуми N_{ws} , тоді як у каскадах, ініційованих іонами Ar – один. Моменти досягнення максимальних значень N_{ws} збігаються з моментами досягнення максимумів кількості поверхневих і об'ємних вакансій $N_{v,s}$ і $N_{v,b}$ на рис. 3.31 (а, б) (див. п. 3.6.2.3). Перший максимум N_{ws} визначається переміщеннями атомів на стадії зіткнень каскаду, коли іон входить у кристал, тоді як другий – зворотним рухом іона Xe і пов'язаним з цим колективним переміщенням атомів до поверхні. У випадку іонів Ar, обидва етапи руху іона в кристалі відрізняються за часом на $\sim 0,1$ пс, що призводить до появи одного максимуму величини N_{ws} , оскільки гратка не встигає релаксувати в інтервалі часу між роботою цих двох механізмів. При цьому, ймовірність переміщень атомів, пов'язаних з рухом іона Ar з кристала є меншою у порівнянні з ймовірністю аналогічного процесу у випадку іонів Xe по енергетичним міркуванням, наведеним у п. 3.6.2, а також завдяки тому, що іони Ar, практично, не проникають усередину кристала. Так, при енергії іонів

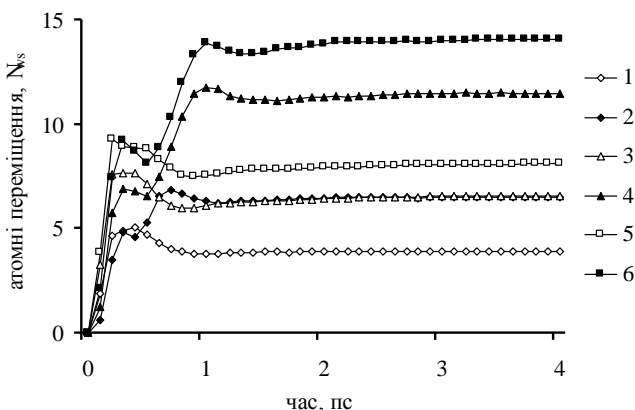


Рис. 4.13. Кількість атомів N_{ws} , що залишили свої комірки Вігнера-Зейтца в кристалі Al (100) за час розвитку каскаду при енергії іонів Ar (криві 1, 3, 5) і Xe (криві 2, 4, 6) з енергіями, відповідно, 25, 40 і 50 eV і 300 K [437, 438]

50 еВ, кількість атомних переміщень з прошарку в прошарок у напрямку [100] всередину кристала Al становить $\sim 3,2$ переміщень/іон для обох іонів, тоді як кількість зворотних переміщень до поверхні становить 5,85 і 1,82 переміщень/іон, відповідно, для іонів Xe і Ag.

Залежності компонентів середньоквадратичного зміщення атомів віддачі від часу розвитку каскаду при бомбардуванні іонами Ag і Xe з енергією 50 еВ на рис. 4.14 (а, б) ілюструють зроблені вище висновки відносно атомних переміщень. У випадку іонів Ag в перші 0,2 пс відбувається різке збільшення компонентів середньоквадратичного зміщення атомів віддачі в напрямку [100] R_x^2 і в площині (100) R_{yz}^2 всередині кристала. Зміщення ад-атомів $R_{yz,ad}^2$ на поверхні (100) зростають після 0,1 пс з початку каскаду і досягають максимального значення протягом $\sim 0,5$ пс, тоді як нормальні до поверхні зміщення ад-атомів $R_{x,ad}^2$ не мають помітного впливу на R^2 . На рис. 4.14 (б) слабкі максимуми R_x^2 і R_{yz}^2 мають місце в інтервалі часу 0,3–0,4 пс у випадку іонів Xe і відповідають за часом першим максимумам $N_{v,s}$ і $N_{v,b}$ на рис. 3.31 (а, б) і максимуму міжвузлових атомів N_{in} на рис. 3.30 (б). Внесок ад-атомів у середньоквадратичне зміщення R^2 за перші 0,5 пс розвитку каскаду є неістотним, хоч і зростає, починаючи з 0,1 пс. Друге різке зростання R^2 на рис. 4.14 (б) відбувається в інтервалі 0,5–1,0 пс завдяки, у першу чергу, зростанню компонентів $R_{x,ad}^2$ і $R_{yz,ad}^2$ для ад-атомів, хоч середньоквадратичні зміщення R_x^2 і R_{yz}^2 також зростають у цьому інтервалі часу.

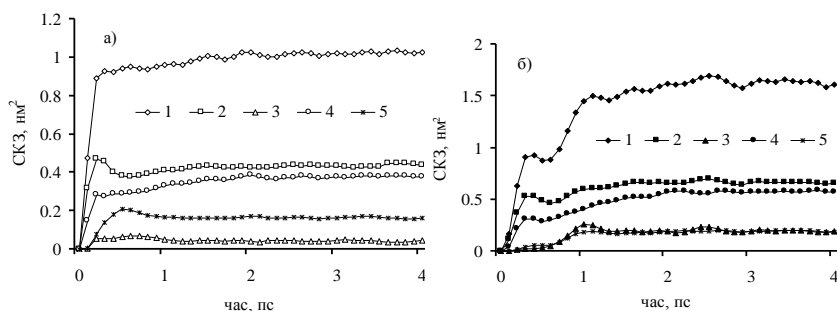


Рис. 4.14. Залежність компонентів СКЗ атомів віддачі в кристалі Al (100) від часу розвитку каскаду при бомбардуванні іонами а) Ag і б) Xe з енергією 50 еВ: 1 – R^2 , 2 – R_x^2 ; 3 – $R_{x,ad}^2$; 4 – R_{yz}^2 ; 5 – $R_{yz,ad}^2$. Температура кристала 300 K [437, 438]

При бомбардуванні іонами Хе з енергією 25 еВ, головний внесок у зростання зміщення R^2 за перші 0,3 пс роблять компоненти R_x^2 і R_{yz}^2 , тоді як внесок зміщень ад-атомів є незначним. В інтервалі часу 0,5–1,0 пс домінуючий внесок у зростання R^2 роблять зміщення ад-атомів ($R_{x,ad}^2 + R_{yz,ad}^2 \sim 17\text{Å}^2$), тоді як компоненти R_x^2 і R_{yz}^2 складають, відповідно, тільки 2Å^2 і 4Å^2 . Середньоквадратичне зміщення атомів у випадку іонів Аг з енергією 25 еВ досягає свого єдиного максимуму за час $\sim 0,5$ пс. При енергії іонів Аг і Хе 40 еВ компоненти середньоквадратичного зміщення атомів якісно повторюють результати, що були отримані при початковій енергії іонів 50 еВ.

4.5.4. *Переміщення атомів у Al на стадії зіткнень каскаду при температурах від 0 К до 500 К.* У роботі [436] виконано молекулярно-динамічне моделювання каскадів, викликаних нормальним падінням іонів Аг з енергією 100 еВ на поверхню кристала Al (100) при температурах кристала від 0 К до 500 К через кожні 100 К з метою розгляду температурної залежності кількості каскадних переміщень атомів. У всіх випадках було проведено по 500 розрахунків каскадів зіткнень, кожен з яких моделювався в початковому кристалі 1 пс.

На рис. 4.15 (а, б) наведені діаграми атомних переміщень при температурах кристала а) 0 К і б) 500 К після 1 пс еволюції каскаду. Діаграми показують значне зростання кількості зворотно-розсіяних атомів у каскадах зі збільшенням температури, що співпадає з результатами, отриманими при температурах 100 К–400 К. Таке зростання є наслідком термічних порушень кристалічної ґратки, які призводять до зменшення її фокусуємих можливостей відносно послідовностей атомних зіткнень заміщення і до зростання розсіювання атомів у каскадах, що узгоджується зі скороченням послідовностей зіткнень заміщення атомів при зростанні температури [433]. Кількість атомних переміщень з першого прошарку в прошарок ад-атомів протягом 1 пс зростає в 6,5 разів при збільшенні температури від 0 К до 500 К, тоді як коефіцієнт розпилення кристала Al (100) залишається, практично, сталим ($\sim 0,3\text{--}0,45$ атомів/іон), що співпадає з іншими даними про його температурну незалежність [2].

Найбільша кількість атомних переміщень у глибину кристала (додатних) відбувається з другого атомного прошарку незалежно від температури. При зростанні температури від 0 К до 500 К сумарна кількість додатних атомних переміщень зростає в 1,3 рази, тоді як кількість зворотних переміщень до поверхні (від'ємних) без урахування переміщень до прошарку ад-атомів – у 5,9 рази. Пошарова кількість від'ємних атомних переміщень монотонно зменшується з глибиною,

тоді як пошарова кількість додатних переміщень при низьких температурах в інтервалі 0 К–300 К має періодичний характер у залежності від номера прошарку, що пов'язано зі внеском послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямку [100] на фоні поступового зменшення кількості атомних переміщень уздовж 6–10-го

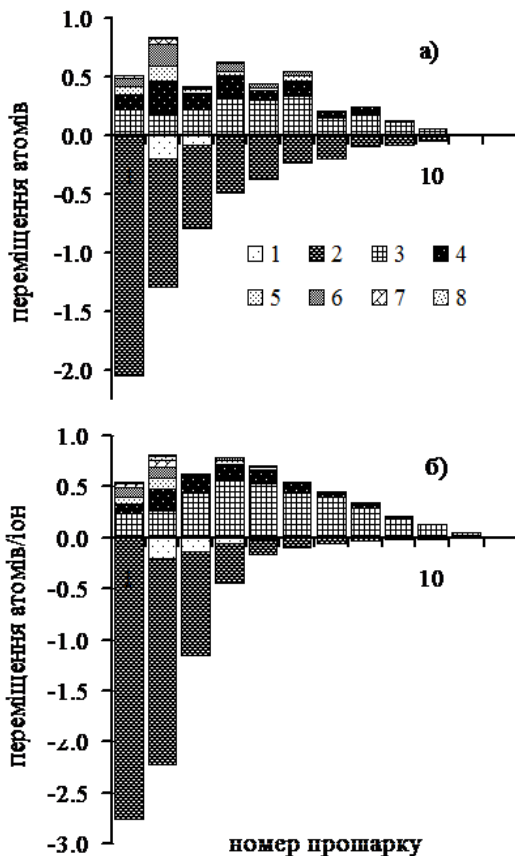


Рис. 4.15. Пошарова кількість атомних переміщень з кожного прошарку уздовж напрямку [100] у каскаді зіткнень при температурі кристала Al а) 0 К і б) 500 К і енергії бомбардуючих іонів Ag 100 еВ. Штриховкою позначені від'ємні та додатні переміщення атомів на -2 атомні прошарки (1), -1 (2), 1 (3), 2 (4), 3 (5), 4 (6), 5 (7), 6 (8). Від'ємні переміщення на рисунку б) зменшені в 5 разів порівняно з отриманими модельними результатами [436]

атомних прошарків [311]. При температурі 500 К періодичність кількості додатних переміщень стає менш виразною і зберігається уздовж перших 4 атомних прошарків, що відповідає температурній залежності послідовностей заміщення [380, 433].

4.5.5. *Атоми віддачі в Ni при енергії іонів Ar 100 eV і температурі 750 K.* На рис. 4.16 наведені атомні переміщення в кристалі Ni при температурі 750 К, які були викликані бомбардуючими з енергією 100 eV іонами Ar [380]. На рисунку не було зареєстровано послідовностей атомних зіткнень заміщення [100] при температурі 750 К, тоді як вони були чітко ідентифіковані при температурах 0 К і 300 К [311, 312]. Як і при 300 К, при температурі 750 К було

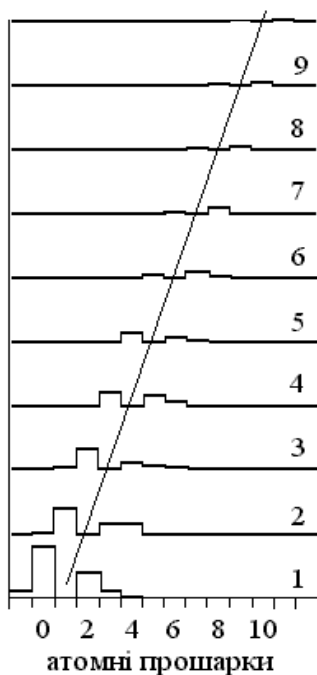


Рис. 4.16. Переміщення атомів у кристалі Ni уздовж напрямку [100] з прошарку в прошарок при енергії іонів Ar – 100 eV і температурі кристала 750 К. По вертикалі показані номери атомних прошарків, з яких переміщуються атоми віддачі [380]

встановлено збільшення кількості атомних переміщень N_{ws} від 6 до 11 переміщень/іон зі зростанням температури від 0 К до 750 К.

Середньоквадратичне зміщення атомів віддачі також показує, практично, подвійне зростання в цьому температурному інтервалі, що видно з таблиць 4.12, 4.9, 4.8. Детальний аналіз показав, що компонент середньоквадратичного зміщення атомів віддачі в напрямку нормалі до поверхні, що бомбардується, R_x^2 тільки незначним чином залежить від температури завдяки генерації ад-атомів, тоді як внутрішній нормальний до поверхні компонент $R_x^2 - R_{x, ad}^2$ залишається незалежним від температури. У цілому, для атомних переміщень у напрямку [100] було отримано, що кількість, так званих, «довгих атомних переміщень» з прошарку n до прошарку $n + 2$ або $n - 2$ зменшується зі зростанням температури від 0 К до 750 К майже у два рази, що може бути інтерпретовано, як зменшення довжини і кількості послідовностей атомних зіткнень заміщення [100] зі зростанням температури [420]. Кількість так званих «коротких атомних переміщень» з атомного прошарку n до прошарку $n + 1$ або $n - 1$ зростає в два рази зі збільшенням температури, але при температурі 750 К послідовності зіткнень заміщення атомів, ймовірно за все, складаються тільки з одного кроку. Це зростання має місце завдяки збільшенню кількості зворотних атомних переміщень до поверхні кристала майже у три рази.

Для загальної кількості внутрішніх переміщень у напрямку [100] без врахування переміщень атомів у ад-прошарок, було отримано зростання кількості переміщень з 4,2 переміщень/іон при температурі 0 К до 5,7 переміщень/іон при температурі 750 К. Це зростання є значно меншим, ніж збільшення значення величини N_{ws} , яка наведена в таблиці 4.12, що може бути віднесено за рахунок значного збільшення кількості бічних внутрішніх атомних переміщень. Цей висновок підтверджується відповідним значенням компонента середньоквадратичного зміщення атомів віддачі $R^2 - R_x^2 - R_{yz, ad}^2$, який зростає в 3,6 рази у температурному інтервалі від 0 К до 750 К. Зростання бічного середньоквадратичного зміщення атомів віддачі відбувається завдяки збільшенню ефективності розсіювання атомів віддачі на термічно утворених неоднорідностях атомної ґратки кристала Ni або, іншими словами, завдяки скороченню довжини послідовностей атомних зіткнень заміщення, особливо в напрямку [100].

Таблиця 4.12 СКЗ (нм²) атомів віддачі при температурі Ni 750 К і енергії іонів Ar 100 eV

Температура	R^2	R_x^2	$R_{x, ad}^2$	$R_{yz, ad}^2$	N_{ws}
750 К	1,3	0,33	0,05	0,47	11,3

4.5.6. *Перемішування в кристалі Ni при енергії іонів Ar 100 eV і температурі 750 K. З використанням матриці атомних переміщень (див. рис. 4.16), були розраховані коефіцієнт іонного перемішування*

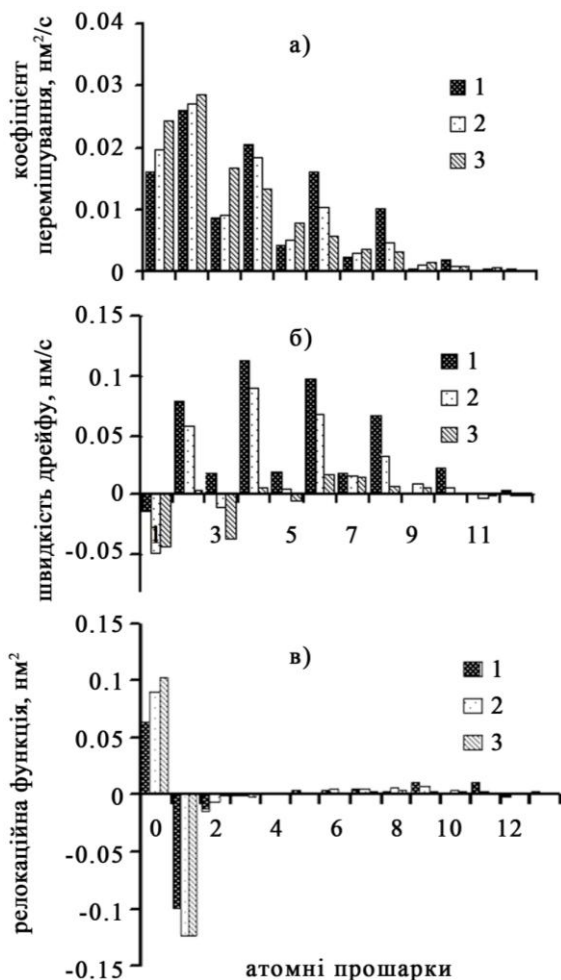


Рис. 4.17. Залежність а) коефіцієнта іонного перемішування, б) середньої швидкості дрейфу атомів віддачі та в) релокаційної функції від глибини кристала Ni (100) при 0 K (1), 300 K (2), 750 K (3) і енергії іонів Ar – 100 eV. Густина потоку іонів – $1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/ $(\text{см}^2 \cdot \text{с})$ [380]

(1.38), середня швидкість дрейфу атомів віддачі (1.39) та релокаційна функція (2.3) для однокомпонентних матеріалів. Результати наведені на рис. 4.17 (а–в) для температур 0 К, 300 К і 750 К. При температурах 0 К і 300 К коефіцієнт іонного перемішування і середня швидкість дрейфу атомів віддачі демонструють значні осциляції на фоні поступового зменшення своїх значень з глибиною кристала.

Ці осциляції пов'язуються з довгими атомними переміщеннями атомів віддачі в напрямку [100]. При 750 К, осциляції коефіцієнта іонного перемішування зникають, і спостерігається тільки монотонне зменшення коефіцієнта з глибиною. Причиною відсутності осциляцій є низька ймовірність виникнення послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямку [100] при температурі 750 К. У випадку середньої швидкості дрейфу атомів віддачі, осциляції також значно зменшуються, але не зникають при 750 К.

Положення максимуму коефіцієнта перемішування не змінювалося з температурою. Від'ємна величина швидкості дрейфу атомів віддачі в третьому атомному прошарку при температурі 300 К і, особливо, при температурі 750 К демонструє зростання кількості зворотних переміщень атомів до поверхні зі збільшенням температури. Від'ємна величина швидкості дрейфу атомів віддачі в першому атомному прошарку показує домінуючу роль атомних переміщень з першого прошарку до ад-прошарку. Для всього температурного інтервалу спостерігається збіднення атомами трьох поверхневих прошарків кристала, а також збагачення поверхневими атомами об'єму кристала (див. рис. 4.17 (в)).

Рівняння іонного перемішування (2.2)–(2.4) було розв'язане чисельно з використанням функцій атомних переміщень $F(x, z)$ при температурах 0 К, 300 К і 750 К, що наведені на рис. 4.10 (а), 4.12 (а) і 4.16. На рис. 4.18 порівнюються результати розрахунку пошарового аналізу псевдомаркера, що був початково розміщений у 17-му атомному прошарку кристала Ni, за межами області перемішування. Додатково були також розраховані пошарові профілі в дифузійному наближенні (2.5). Виходячи з числових значень пошарових профілів, були отримані поширення профілів концентрації у дифузійному наближенні σ_{dif}^2 та в наближенні транспортного рівняння іонного перемішування σ_{int}^2 , результати яких наведені в таблиці 4.13.

Таблиця 4.13 Поширення псевдомаркера завдяки перемішуванню

Температура	$V(\text{нм/с})$	$\sigma_{\text{dif}}^2 (\text{нм}^2)$	$\sigma_{\text{int}}^2 (\text{нм}^2)$
0 К	0,034	0,81	1,24
300 К	0,028	0,8	1,18
750 К	0,025	0,83	1,05

Як видно з таблиці 4.13, при всіх температурах поширення σ_{int}^2 більше, ніж σ_{dif}^2 на 25–40%. Це збігається з результатами, наведеними у п. 4.2.4 і таблиці 4.2 для міді за аналогічних умов бомбардування і температурах 0 К–500 К. Для випадку температури 750 К, коефіцієнт $k = 1,44$ (див. п. 4.2.4). При цьому значенні k пошаровий профіль концентрації, обчислений в дифузійному наближенні (2.5), співпадає з розв’язанням повного інтегро-диференціального рівняння (2.2) (див. п. 2.2.2).

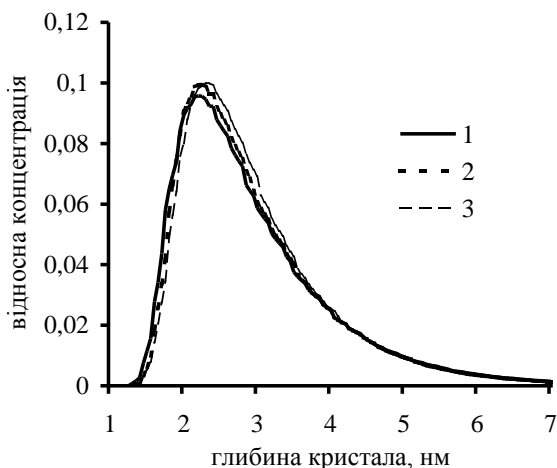


Рис. 4.18. Результати розрахунку пошарового профілю псевдомаркера, що був початково розміщений у 17-му атомному прошарку (початково, за межами області перемішування) кристала Ni (100), при температурах 0 К (1), 300 К (2) і 750 К (3). Густина потоку іонів Ag з енергією 100 еВ – $1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/(см² · с) [380]

Результати також показують, що поширення псевдомаркера в дифузійному наближенні не залежить від температури, тоді як поширення псевдомаркера σ_{int}^2 показує слабку залежність від температури (див. таблицю 4.13). Така ж температурна тенденція була отримана для поширення профілю концентрації у випадку Cu (див. п. 4.2.5). Таке співвідношення поширення в дифузійному наближенні та у випадку розв’язання повного інтегро-диференціального рівняння іонного перемішування витікає з врахування дифузійним наближенням тільки дифузійно-подібних каскадних процесів, які мають, у

середньому, ізотропний характер. З цього видно, що широко розповсюджена думка про неістотність рекойлового іонного перемішування, яка наводилася в п. 1.5.1, що має анізотропний характер і не враховується дифузійним наближенням, не завжди відповідає дійсності при низьких енергіях іонного бомбардування.

Порівняння отриманих результатів поширення псевдомаркера непогано відповідає аналітичним оцінкам згідно з формулою Андерсена (2.10). У формулі (2.10) величина атомних переміщень складає 1,0 нм згідно з [232]. Кількість атомів віддачі оцінюється згідно з формулою Кінчіна – Піза $N_A = 0,42 E/E_{d,eff}$, де $E_{d,eff} = 40$ eВ з використанням оцінки $E_{d,eff} = 1,67 E_{d,min}$ ($E_{d,min} = 24$ eВ) [232]. Коефіцієнт розпилення Ні приблизно дорівнює 0,2–0,3 атомів/іон, що видно з даних [2] і наших молекулярно-динамічних розрахунків. Таким чином, поширення псевдомаркера в кристалі Ні згідно з формулою (2.10) складає 1,2–1,6 нм², що задовільно відповідає нашим модельним результатам, хоч оцінка Андерсена відносно середнього значення атомних переміщень виглядає дещо завищеною, що вже вказувалось при розрахунках поширення для псевдопрошарку в Сu.

Висновки до глави 4

Розроблено двоетапний метод обчислення низькоенергетичного іонного перемішування з використанням молекулярно-динамічного моделювання в межах стабільних моделей для опису переміщень атомів віддачі в каскадах зіткнень з наступним використанням результатів моделювання в розв'язанні рівнянь іонного перемішування.

Поширення пошарового профілю концентрації псевдомаркера в кристалі Сu зменшується зі зростанням температури при бомбардуванні іонами Аg з енергією 100 eВ, що пов'язано зі структурними змінами каскадів зіткнень, викликаних тепловими коливаннями атомів ґратки. Розв'язання транспортного рівняння перемішування для Ні дає аналогічну залежність. Поширення профілю в дифузійному наближенні для Ні є температурно незалежним.

Поширення псевдомаркера, як розв'язання транспортного рівняння перемішування σ_{int}^2 і в дифузійному наближенні σ_{dif}^2 , співвідносяться як $\sigma_{int}^2 = (1,3 - 1,7) \cdot \sigma_{dif}^2$ при нормальному бомбардуванні кристала Сu (100) і Ні (100) іонами Аg з енергією 100 eВ завдяки врахуванню в дифузійному наближенні тільки ізотропних складових каскадних переміщень атомів.

Кількість атомів віддачі та їх середньоквадратичне зміщення в кристалах Сu, Al і Ні зростають зі збільшенням температури. Значне зростання переміщення атомів зі збільшенням температури в бічних

напрямок по відношенню до напрямку [100] пов'язується з інтенсифікацією розсіювання атомів віддачі на термічних порушеннях порядку ґратки, а також з утворенням ад-атомів. Спостерігається переважно зростання кількості атомів віддачі з глибини кристала до поверхні, а також зменшення кількості атомних переміщень з прошарків n до прошарків $n+2$, що також пов'язано з тепловими коливаннями атомів кристалу.

Встановлено, що область перемішування більша, ніж область розподілу втрат енергії іонів при енергії 100 еВ і менше. Істотніше ця різниця проявляється в Ni. У Al активність каскадних переміщень атомів виявляється значно вищою, ніж в Ni і Cu. Інтенсивність зворотних переміщень атомів до поверхні в Al і Ni/Al значно вища, ніж в Ni і Al/Ni. Різниця інтенсивностей атомних переміщень в різних кристалах, в значній мірі, пояснюється різницею енергій зв'язку атомів цих кристалах.

Кристали Ni і Al/Ni демонструють вищу швидкість охолодження каскаду порівняно з Al і Ni/Al. Швидкість охолодження каскаду істотно залежить від енергії когезії і, практично, не залежить від маси атомів.

Нормальний до поверхні внутрішній і бічний компоненти середньоквадратичного зміщення ад-атомів дають головний внесок у загальне зміщення атомів віддачі в кристалі Ni. У кристалі Al бічна і нормальна внутрішні компоненти середньоквадратичного зміщення складають головний внесок у загальне зміщення атомів віддачі. Ці результати підтримуються існуванням послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках [100] і $\langle 110 \rangle$ у Ni і в напрямках $\langle 110 \rangle$ у Al. У підкладках кристалів Al/Ni і Ni/Al були зафіксовані тільки послідовності в напрямках $\langle 110 \rangle$. Зміщення $R_x^2 - R_{x,ad}^2$ і $R^2 - R_x^2 - R_{y,z,ad}^2$, практично, ідентичні в підкладках як Al/Ni, так і Ni/Al.

Кристали Al/Ni і Ni/Al демонструють значно більшу активність обмінних переміщень каскадних атомів між першим атомним прошарком і підкладкою, а саме другим прошарком, ніж кристали Al і Ni при енергіях іонів 25–100 еВ. Показано, що такі обмінні переміщення атомів різних типів є енергетично вигідними. Взаємне розчинення компонентів інтенсифікує атомні переміщення через межу розподілу компонентів.

Середньоквадратичне зміщення атомів у Al/Ni зростає в часовому інтервалі 0,2 – 4,0 пс і в Ni/Al в інтервалі 0,2 – 7,0 пс в 2,2 і 1,7 рази, відповідно, тоді як у кристалах Al, Ni і Cu зростання дорівнює 1,1 – 1,4 рази. У двошарових кристалах значне зростання зміщення атомів у бічних напрямках уздовж поверхні на термічній стадії каскаду

відбувається завдяки структурній низькоенергетичній перебудові поверхневого прошарку в області падіння іона.

Коефіцієнт іонного перемішування і середня швидкість дрейфу атомів віддачі в кристалі Ni в інтервалі температур 0–300 К показують періодичні зміни значень з глибиною кристала від прошарку до прошарку, тоді як при температурі 750 К спостерігається тільки монотонне зменшення коефіцієнта перемішування, а коливання швидкості дрейфу атомів віддачі мають місце у незначній мірі. Це пов'язується зі зменшенням у два рази кількості, так званих, “довгих” атомних переміщень із зростанням температури від 0 К до 750 К. Коливання швидкості дрейфу при температурі 750 К і, в меншій мірі, при 0 К пов'язані з внеском зворотних переміщень атомів до поверхні кристала. У цілому, періодичність цих параметрів з глибиною пов'язується з періодичністю ґратки кристалу.

При енергіях 25 – 50 еВ іони Хе генерують, як правило, більше атомних переміщень у кристалах Cu, Al, Ni і Al/Ni, ніж іони Ag, що є наслідком передачі іонами Хе енергії атомам мішені меншими частками, які виявляються все ж достатніми для переміщення атомів. При початковій енергії 25 еВ в кристалі Cu, іони Хе викликають переміщення атомів всередині кристала, тоді як іони Ag – тільки з першого прошарку до ад-прошарку, що пов'язано з більш глибоким проникненням іонів Хе у кристал Al при таких енергіях. При енергії 40 – 50 еВ іони Хе ініціюють неістотно більший ефект перемішування у порівнянні з Ag. Бічні зміщення ад-атомів уздовж поверхні є більшими при бомбардуванні Cu іонами Ag ніж Хе. Ці результати пов'язуються з різними ефективностями передачі енергії від іонів атомам мішені та перерізами зіткнень іонів Ag і Хе.

При енергіях 25 – 50 еВ у каскадах, ініційованих іонами Хе у кристалі Al, спостерігаються два максимуми N_{ws} , тоді як у каскадах, ініційованих Ag – один. Моменти досягнення максимумів N_{ws} збігаються з моментами досягнення максимумів кількості поверхневих і об'ємних вакансій. Перший максимум N_{ws} визначається переміщеннями атомів на стадії зіткнень каскаду, а другий – оберненим рухом іона Хе і супутніх атомів віддачі до поверхні. У випадку Ag обидва етапи руху іона в кристалі відрізняються за часом на $\sim 0,1$ пс, що призводить до виникнення одного максимуму N_{ws} . Кінетика середньоквадратичного зміщення атомів віддачі корелює з цими результатами.

Авторські результати, що наведені і обговорюються у главі 4, надруковані в статтях [246, 247, 310 – 312, 379, 380, 424, 434, 436 – 439].

ГЛАВА 5. КОМБІНОВАНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РАДІАЦІЙНО-ПРИСКОРЕНОЇ ДИФУЗІЇ

5.1. Вступ до глави 5

Перемішування, ініційоване низькоенергетичними бомбардуючими іонами в деяких випадках моделювалося методом молекулярної динаміки або методом Монте-Карло з наступним розв'язанням рівняння іонного перемішування в межах, так званих, двокрокових алгоритмів [101, 235, 236, 239, 241–248]. На основі цього підходу Корніч, Бетц, Бажин і Кінг виконали розрахунки пошарових профілів концентрації псевдомаркерів у кристалі Cu при різних температурах в інтервалі 0 K–500 K і Ni в інтервалі 0 K–750 K. Енергія бомбардуючих іонів Ag була 100 eV [246, 247, 379, 380]. У роботі [245] Конопльовим і Грас-Марті з колегами наведені розрахунки іонного перемішування при різних температурах у кристалі Si. Однак, для коректного розв'язання проблеми опису перекручення псевдомаркера енергетичними іонами при високих температурах кристала, додатково слід врахувати можливий внесок радіаційно-прискореної дифузії (РПД) (див. п. 1.6 і роботи [341–354]) у перенесення маси. При високих енергіях бомбардування проблема врахування радіаційно-прискореної дифузії була розв'язана шляхом використання однорідного розподілу генерації дефектів за глибиною мішені [342, 346, 364]. У випадку низькоенергетичного іонного бомбардування незмінна з глибиною кристала генерація дефектів (вакансій і міжвузлових атомів) не відповідає реаліям процесів, що відбуваються при цьому. Проблему складають також і абсолютні пошарові значення генерації дефектів за різних умов бомбардування і температур кристала. У цій главі розглянуто використання молекулярно-динамічних модельних результатів генерації вакансій і міжвузлових атомів у кристалах Cu при температурі 500 K і Ni при температурі 750 K для врахування внеску радіаційно-прискореної дифузії в перенесення маси в кристалах і пов'язане з цим перекручення псевдопрошарку. Порівнюються внески іонного перемішування і радіаційно-прискореної дифузії в перекручення псевдомаркера з початковою товщиною в один атомний прошарок. Обговорюються можливі значення зовнішніх параметрів моделі.

Ефективність поверхні як стоку дефектів [446] і її вплив на перекручення пошарових профілів концентрації під час низькоенергетичного іонного бомбардування за підвищених температур також є актуальною проблемою і обговорюється в главі 5. Для цього,

так звані, швидко-обмежуючі параметри для вакансій і міжвузлових атомів були включені до крайових умов для дефектів на поверхні, яка бомбардується. Ці параметри задають, у якій мірі існує бар'єр для анігіляції точкових дефектів на поверхні. При цьому, зараз не існує можливості обчислити кількісно точно значення швидко-обмежуючого параметра. Тому було розглянуто декілька можливих реалістичних випадків, починаючи з випадку ідеального стоку дефектів з нескінченною ефективністю на поверхні, коли поверхнева концентрація дефектів дорівнювала нулю. Вплив об'ємної рекомбінації пар дефектів вакансія – міжвузловий атом, а також внутрішніх нерухомих стоків дефектів на перекручення профілів псевдомаркерів також розглядається в главі 5.

5.2. Модель радіаційно-прискореної дифузії і перемішування

Радіаційно-прискорена дифузія описується системою рівнянь, які враховують перенесення маси по дефектах кристалічної ґратки [342, 351, 361] і в загальному вигляді наводилися в підпункті 1.6.3. Розподіли генерації вакансій і міжвузлових атомів за глибиною кристала були отримані шляхом молекулярно-динамічного моделювання дефектів після 4 пс еволюції атомного каскаду. У випадку низькоенергетичного іонного бомбардування потоки вакансій і міжвузлових атомів не є еквівалентними, особливо, поблизу поверхні, завдяки різниці в розподілах інтенсивностей генерацій вакансій і міжвузлових атомів за глибиною кристала. У свою чергу, ця різниця обумовлена розпиленням і просторовим розділенням вакансій і міжвузлових атомів у каскаді, що і призводить до неоднорідності генерації дефектів з глибиною модельного кристала (див. п. 3.4.3). Розподіли генерованих за один каскад стабільних вакансій і міжвузлових атомів з глибиною кристала Cu при температурі 500 K і енергії іонів Ag 100 eV наведені на рис. 5.1 (а, б). Як видно з рис. 5.1, максимуми модельованих генерацій радіаційних вакансій і міжвузлових атомів знаходяться, відповідно, в першому і дев'ятому атомних прошарках. Для утримання сталою загальної концентрації атомів у модельному кристалі при розрахунку радіаційно-прискореної дифузії у випадку нееквівалентних потоків вакансій і міжвузлових атомів, була застосована методика “колективних токів”, що аналогічна тій, яка використовується в дифузійно-подібних рівняннях іонного перемішування [14, 259]. У межах такого формалізму швидкість розпилення поверхні дорівнює різниці потоків вакансій і міжвузлових атомів на поверхні, що розпилюється.

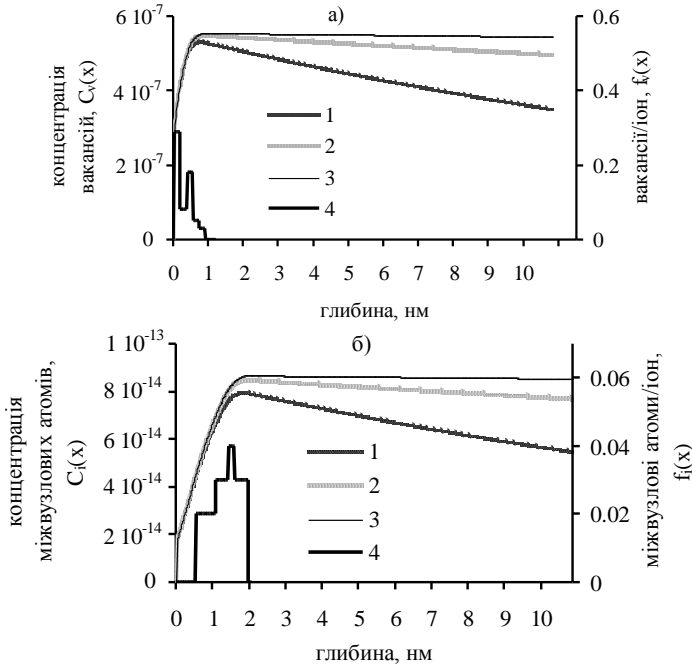


Рис. 5.1. а) Стационарні профілі вакансій $C_v(x)$, б) міжвузлових атомів $C_i(x)$ з урахуванням РПД у кристалі Cu (100) при 500 К і енергії іонів Ag 100 еВ. Параметри моделі: $1/\mu_0 = d$, $\alpha_{is} = 2 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $\alpha_{vs} = 3,4 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$. Крива 1: $C_s = 5 \cdot 10^{-6}$, $\alpha_{iv} = 2 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$; крива 2: $C_s = 0$, $\alpha_{iv} = 2 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$; крива 3: $C_s = 5 \cdot 10^{-8}$, $\alpha_{iv} = 0$. МД модельовані розподіли генерованих за один каскад стабільних вакансій (а) і міжвузлових атомів (б) за глибиною кристала показані кривою 4 [379]

Відповідно підходу [342], а також формалізму, описаному в п. 1.6.3, у термінах відносних концентрацій для системи двох компонентів 1 і 2 маємо наступні загальні рівняння для потоків вакансій, міжвузлових атомів і компонентів:

$$J_v = (D_{1v} - D_{2v}) \cdot C_v \alpha \nabla C_1 - D_{v,eff} \nabla C_v, \quad (5.1)$$

$$J_i = -(D_{1i} - D_{2i}) \cdot C_i \alpha \nabla C_1 - D_{i,eff} \nabla C_i, \quad (5.2)$$

$$J_{1,2} = -D_{1,2,eff} \alpha \nabla C_{1,2} - C_{1,2} \cdot (D_{1,2i} \nabla C_i - D_{1,2v} \nabla C_v) - C_{1,2} \cdot J_{col}, \quad (5.3)$$

$$J_{col} = J_1 + J_2, \quad (5.4)$$

де J_b , J_v , $J_{1,2}$ – потоки, відповідно, міжвузлових атомів, вакансій і компонентів 1 і 2;

J_{col} – колективний потік;

α – термодинамічний фактор, який у випадку ідеального розчину дорівнює одиниці;

$C_{i,v}$ – відносні концентрації вакансій (v) і міжвузлових атомів (i);

$C_{1,2}$ – відносні атомні концентрації компонентів 1 і 2 ($C_1 + C_2 = 1$);

$D_{1,2v}$, $D_{1,2i}$ – коефіцієнти дифузії вакансій і міжвузлових атомів по атомах типу 1 і 2.

Ефективні коефіцієнти дифузії компонентів і дефектів (вакансій і міжвузлових атомів): $D_{1,2eff} = D_{1,2v} C_v + D_{1,2i} C_i$, $D_{i,v,eff} = D_{1i,v} C_1 + D_{2i,v} C_2$.

У випадку балістичної еквівалентності компонентів 1 і 2 (однокомпонентна мішень), коефіцієнти дифузії різних типів атомів, а також дефектів за різними типами атомів дорівнюють один одному. Зі включенням ефекту іонного перемішування, рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів, анігіляції дефектів на нерухомих стоках і генерації дефектів бомбардуючими іонами, система нестационарних рівнянь дифузії виглядає наступним чином:

$$\frac{\partial C_{i,v}(x,t)}{\partial t} = D_{i,v} \frac{\partial^2 C_{i,v}(x,t)}{\partial x^2} - \alpha_{i,v} C_v(x,t) C_i(x,t) - \alpha_{i,vs} C_s C_{i,v}(x,t) + A f_{i,v}(x), \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial C_1(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_{mix}(x) + D_{red,eff}(x)) \frac{\partial C_1(x,t)}{\partial x} \right] + V_f \frac{\partial C_1(x,t)}{\partial x}, \quad (5.6)$$

$$C_2(x,t) = 1 - C_1(x,t)?, \quad (5.7)$$

де $C_{i,v}(x, t)$ – відносні концентрації вакансій (v) і міжвузлових атомів (i) як функції координати x і часу t .

Концентрації вакансій і міжвузлових атомів припускалися істотно нижчими за концентрації атомів компонентів 1 і 2. Коефіцієнти дифузії вакансій і міжвузлових атомів були записані в наступному вигляді [342]:

$$D_{i,v} = a^2 v_{i,v} \exp(-H_{i,v}/kT), \quad (5.8)$$

де a – величина атомного стрибка ($a = 0,361$ нм, дорівнює сталій ґратки Cu);

$v_{i,v}$ – частотний фактор ($v_{i,v} = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$);

$H_{i,v}$ – ефективні ентальпії міграції вакансій і міжвузлових атомів у кристалі Cu ($H_i = 0,1 \text{ eB}$, $H_v = 0,77 \text{ eB}$);

k – стала Больцмана [341, 345];

α_{iv} , α_{vs} , α_{is} – швидкісні коефіцієнти взаємної рекомбінації дефектів і їх анігіляції на зовнішніх стоках дефектів (s).

Під зовнішніми стоками розумілися дислокації і межі зерен, які передбачалися нерухомими і розподіленими випадковим чином з однорідною густиною C_s . Величини $\alpha_{iv} = 2 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$, $\alpha_{is} = 2 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$, $\alpha_{vs} = 3,4 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$ оцінювалися згідно з формулами, наведеними у [346], а також у п. 1.6.3.

Функція $f_{i,v}(x)$ є доданком генерації вакансій і міжвузлових атомів у кристалі та моделювалася методом молекулярної динаміки в розрахунку на один налітаючий іон (див. пп. 3.4.3). Поверхневі вакансії, що генеруються на поверхні за рахунок утворення ад-атомів, не були враховані, оскільки передбачалося, що вони рекомбінують швидше, ніж у цю область поверхні потрапить новий бомбардуючий іон. Це положення видається досить реалістичним при кімнатних і, тим більше, при підвищених температурах металевих кристалів [97]. Співмножник $A = 2I\tau/\alpha$, де τ – атомний об'єм, I – густина іонного пучка (у роботі використовувалася густина пучка $I = 1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/($\text{cm}^2 \cdot \text{c}$)). Функції $C_{i,2}(x, t)$ є відносні безрозмірні атомні концентрації, відповідно, псевдомаркера (1) або матриці (2), як функції координати і часу, що нормувалися на загальну густина атомів ґратки. Коефіцієнт іонного перемішування $D_{mix}(x)$ був отриманий шляхом молекулярно-динамічного моделювання, як другий момент функції атомних переміщень (див. формулу (1.38)) під час бомбардування іонами Ag з енергією 100 eB (див. пп. 4.2.4 і 4.2.5). Співмножник $D_{red,eff}(x) = D_i C_i(x, t) + D_v C_v(x, t)$ – ефективний коефіцієнт радіаційно-прискореної дифузії [345].

Швидкість поверхні, що розпилюється, V_f була оцінена як різниця потоків вакансій і міжвузлових атомів на вільній поверхні ($x=0$):

$$V_f = D_v \left. \frac{\partial C_v(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} - D_i \left. \frac{\partial C_i(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0}, \quad (5.9)$$

Крайові умови для концентрацій точкових дефектів при $x = 0$:

$$\left. \frac{\partial C_{i,v}(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = \mu_{i,v} C_{i,v}(0,t), \quad (5.10)$$

$$C_{i,v}(\infty, t) = 0, \quad (5.11)$$

де $1/\mu_{i,v}$ – швидкісно-обмежуючий параметр, що описує ефективність стоку дефектів на поверхні.

Мерфі (Murphy) [446] вперше використав швидкісно-обмежуючі крайові умови для опису перенесення маси у сплавах на основі Ni при іонному бомбардуванні і високих температурах. У випадку, коли поверхня розглядалася як ідеальний сток точкових дефектів, $1/\mu_{i,v} = 0$. У випадку вільної поверхні, коли ймовірність останнього стрибка точкового дефекту на поверхню така ж, як і інших стрибків, у [446] було запропоновано використовувати значення $1/\mu_{i,v} = d/\sqrt{2}$. Для оксидів Мерфі використовував більші значення параметра $1/\mu_{i,v}$ на межах зерен або поверхні. У цій моделі для чистої металевої поверхні використовувалися значення параметра $1/\mu_{i,v}$ в інтервалі від 0 до d . Однак, для порівняння були розглянуті і більші значення швидкісно-обмежуючого параметра $1/\mu_{i,v}$. У межах моделі вважалося, що $\mu_i = \mu_v = \mu_0$. У випадку поверхні як ідеального стоку дефектів ($1/\mu_{i,v} = 0$), використовувалися межові умови для дефектів у наступному вигляді (5.12):

$$C_{i,v}(0, t) = 0. \quad (5.12)$$

Така умова на межі кристала давала змогу уникнути проблем, пов'язаних з необмеженим зростанням градієнту концентрації дефектів на поверхні кристала в (5.10) у випадку нульової поверхневої концентрації вакансій і міжвузлових атомів. Концентрації термічних вакансій і міжвузлових атомів є значно меншими при температурах кристалів Cu і Ni, відповідно, 500 K і 750 K порівняно з концентраціями радіаційних дефектів і тому не враховувалися в моделі [346].

Крайова умова для компонента 1 мала наступний вигляд:

$$C_1(\infty, t) = 0, \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial C_1(0, t)}{\partial t} = \frac{1}{\Delta x} \left[\left(D_{mix}(x) + D_{red,eff}(x) \right) \frac{\partial C_1(x, t)}{\partial x} + V \cdot C_1(x, t) - Y \tau C_1(x, t) \right]_{x=0}, \quad (5.14)$$

де Y – коефіцієнт розпилення, який був отриманий шляхом молекулярно-динамічного моделювання;
 $\Delta x \approx d/2$.

Крайова умова (5.14) дозволяла коректно враховувати часову залежність відносної концентрації компонента псевдомаркера під час пошарового профілювання.

5.3. Концентраційні профілі дефектів

На рис. 5.1 (а, б) наведені стаціонарні концентраційні профілі $C_{i,v}(x,t)$ вакансій і міжвузлових атомів, які були розраховані з використанням рівняння (5.5). Розрахунки рівняння (5.5) з доданком $V_f[\partial C_{i,v}(x,t)/\partial x]$ показали, що концентрації $C_{i,v}(x,t)$ не залежать від швидкості розпилення поверхні V_f завдяки умові $D_{i,v} \gg V_f d$, яка добре виконується при температурі кристала 500 К (див. рівняння (5.8)). Таким чином, були отримані достатні підстави не включати доданок $V_f[\partial C_{i,v}(x,t)/\partial x]$ до рівняння (5.1) і до його однокомпонентної версії (5.5). За цих умов, рівняння (5.9) для швидкості поверхні, що розпилюється, має закінчений вигляд. Характерні часи релаксації $t_{i,v}$ для еволюції профілів вакансій і міжвузлових атомів мають порядок: $L^2/D_{i,v} \ll d/V_f \sim d^2/D_{red,eff}$, де L – характеристична глибина перекрученого пошарового профілю псевдомаркера, де головні зміни концентраційного профілю псевдомаркера протікають в області ~ 10 нм. У нашому випадку, час $t_{i,v}$ виявляється набагато меншим, ніж час розпилення одного атомного прошарку d/V_f , а також меншим за характерний час радіаційно-прискореної дифузії $d^2/D_{red,eff}$. Таким чином, стаціонарні концентраційні профілі дефектів $C_{i,v}(x)$, що були отримані як розв'язання рівняння (5.5), можуть бути використані для чисельного розв'язання дифузійних рівнянь для компонентів 1 і 2 (5.6) і (5.7).

Як впливає з рівняння (5.5), за умови стаціонарності концентраційних профілів вакансій і міжвузлових атомів, вираз $D_v C_v(x,t) - D_i C_i(x,t)$ не залежить від взаємної рекомбінації дефектів, що було також показано в [447, 448], але істотно залежить від різниці доданків генерації дефектів $f_{i,v}(x)$ і їх розподілів за глибиною. Аналогічно [447], а також враховуючи (1.59) і (1.60), можна покласти $\alpha_{i,v} D_v = \alpha_{v,i} D_i$ і, використовуючи лінійні аналітичні методи [414], з рівнянь (5.5), (5.6) і (5.7) отримати наступні вирази:

$$D_v C_v(x) - D_i C_i(x) = \frac{A}{2b} \int_0^\infty [f_v(x') - f_i(x')] \left(\exp(-b|x-x'|) + \frac{b-\mu_0}{b+\mu_0} \exp(-b(x+x')) \right) dx', \quad (5.15)$$

$$b = \left(\frac{\alpha_{i,v} C_s}{D_{i,v}} \right)^{1/2}. \quad (5.16)$$

Як видно з рівнянь (5.5), (5.9) і (5.15), швидкість руху поверхні, що розпилюється, не залежить від взаємної рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів:

$$V_f = \frac{A\mu_0}{b+\mu_0} \int_0^{\infty} (f_v(x') - f_i(x')) \exp(-bx') dx', \quad (5.17)$$

де відбувається перехід до класичної формули $V_f = I\tau$ при нульовій концентрації внутрішніх стоків дефектів $C_s = 0$. У загальному випадку, швидкість поверхні V_f незначним чином залежить від C_s і μ_0 . Наприклад, зміна значення швидкості V_f не перевищує 2% при зміні відносної концентрації стоків дефектів C_s від 0 до $5 \cdot 10^{-6}$ у випадку $l/\mu_0 \leq d$, і 7% за умови $l/\mu_0 \leq 10 \cdot d$.

Якщо доданок взаємної рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів виявляється малим порівняно з доданком анігіляції вакансій і міжвузлових атомів на внутрішніх стоках, то стаціонарне розв'язання $C_{i,v}(x)$ рівняння (5.5) може бути отримано аналітично подібно до розв'язання рівняння (5.15). Це розв'язання може бути отримано за умов $C_s = C_i(x)D_i/D_v$ і $C_s \gg C_v(x)$, що виконується для $C_s \geq 5 \cdot 10^{-6}$ (висока густина внутрішніх стоків дефектів) і $l/\mu_0 \leq d$.

Розв'язання рівнянь (5.5) для вакансій і міжвузлових атомів, включаючи доданки взаємної рекомбінації, були отримані для стаціонарного стану, використовуючи рівняння (5.15) і чисельні методи відповідно до крайових умов (5.10) і (5.11). Аналітичні вирази для окремого випадку опису концентрацій вакансій і міжвузлових атомів без врахування взаємної рекомбінації, як вже обговорювалося, використовувалися для отримання нульового наближення початкової поверхневої концентрації дефектів $C_{i,v}^{(0)}(0)$ у випадку загального чисельного розв'язання рівняння (5.5). Аналогічно з (5.15), отримано аналітичний вираз для стаціонарних профілів концентрацій вакансій і міжвузлових атомів з крайовими умовами (5.10) і (5.11) у випадку відсутності взаємної рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів:

$$C_{v,i}(x) = \frac{A}{2bd} \int_{v,i}^{\infty} f_{v,i}(x') \left(\exp(-b|x-x'|) + \frac{b-\mu_0}{b+\mu_0} \exp(-b(x+x')) \right) dx'. \quad (5.18)$$

Оскільки крайові умови (5.10) завдяки похідній включають дві приповерхневі точки, то нульове наближення концентрації дефектів $C_{i,v}^{(0)}(\Delta x)$ у точці $x = \Delta x$ обчислюється з рівняння (5.10), де Δx – крок інтегрування за координатою. Таким чином, концентрації вакансій і міжвузлових атомів у сусідніх точках на поверхні і біля неї $C_{i,v}^{(0)}(0)$ і $C_{i,v}^{(0)}(\Delta x)$ однозначно пов'язані між собою на всіх кроках чисельного

ітераційного процесу. У цілому було встановлено, що аналітичне розв'язання на поверхні для такого окремого випадку (5.18) знаходиться у добрій відповідності з загальним чисельним розв'язанням з урахуванням взаємної рекомбінації відповідних дефектів поблизу поверхні. Далі значення $C_{i,v}^{(0)}(0)$ і $C_{i,v}^{(0)}(\Delta x)$ підставлялися в перетворене рівняння (5.5) і обчислювалися всі значення концентрацій профілю дефектів протягом $\sim 10\text{--}15$ нм у глибину кристала. При цьому значення $C_{i,v}^{(n)}(0)$ і $C_{i,v}^{(n)}(\Delta x)$ коректувалися відповідно до наступного критерію: на дальній межі, у глибині кристала профіль концентрації відповідних дефектів повинен асимптотично наближатися до нуля, хоч у реальності це рідко досягалось. Реально, задовільною припускалася точність, коли зміна знаку кінцевого значення концентрації в глибині кристала з «+» на «-» не викликала зміни значень концентрації дефектів поблизу поверхні в межах області перемішування більше ніж на 1%. У протилежному випадку, проводилася корекція приповерхневих концентрацій дефектів $C_{i,v}^{(n)}(0)$ і $C_{i,v}^{(n)}(\Delta x)$ і процедура обчислення профілю дефектів у глибину кристала відповідно до (5.5) повторювалася. Типова кількість ітерацій обчислення профілю дефектів, що дозволяла отримувати необхідну точність розрахунку, дорівнювала $\sim 10\text{--}20$, однак, для сильного загасання профілю концентрації дефектів цей показник іноді дорівнює 3–5.

На рис. 5.1(а,б) показані залежності від глибини стаціонарних концентрацій вакансій і міжвузлових атомів $C_{i,v}(x)$ з урахуванням взаємної рекомбінації (криві 1 і 2), а також без урахування взаємної рекомбінації (крива 3) і для різних концентрацій стоків дефектів C_s . Розподіли генерації вакансій і міжвузлових атомів $f_{i,v}(x)$ також наведені на рис. 5.1. Обидві концентрації вакансій і міжвузлових атомів збільшуються від поверхні, що бомбардується, відповідно, до п'ятого або одинадцятого атомних прошарків. Як видно на рис. 5.1, стаціонарні концентрації вакансій і міжвузлових атомів $C_{i,v}(x)$ зменшуються із зростанням глибини кристала, а також завдяки зростанню концентрації внутрішніх стоків для вакансій і міжвузлових атомів C_s .

Інші чисельні розрахунки рівняння (5.5) з крайовими умовами (5.10) і (5.11) показують, що взаємна рекомбінація вакансій і міжвузлових атомів грає домінуючу роль у зменшенні концентрації цих дефектів з глибиною кристала у випадку низьких густин внутрішніх стоків дефектів ($C_s \leq 10^{-8}$) і для всіх можливих значень μ_0 , у той час як при $C_s > 5 \cdot 10^{-6}$ взаємна рекомбінація вакансій і міжвузлових атомів відіграє незначну роль зі зростанням значення величини $1/\mu_0$ ($1/\mu_0 \geq 10 \cdot d$) завдяки значному збільшенню концентрації точкових дефектів обох типів.

Концентрація вакансій зростає значно сильніше порівняно з концентрацією міжвузлових атомів зі збільшенням величини $1/\mu_0$ завдяки різниці членів генерації вакансій і міжвузлових атомів, а також значній мобільності міжвузлових атомів порівняно з вакансіями. Наприклад, у приповерхневій області було отримано, що якщо концентрація вакансій зростає в ~ 10 разів, то концентрація міжвузлових атомів – тільки у 3–4 рази при збільшенні $1/\mu_0$ від 0 до $10 \cdot d$. Таким чином, зі збільшенням параметра $1/\mu_0$, відносна роль вакансійного механізму в радіаційно-прискореній дифузії зростає переважно в порівнянні з роллю міжвузлового механізму.

5.4. Пошарове профілювання з врахуванням РПД при 500 К в Cu

Псевдомаркер був початково розташований у 12-му атомному прошарку і являв собою маркер з атомами, балістичні якості яких не відрізнялися від балістичних якостей атомів матриці. Глибина розташування псевдомаркера відповідала максимально можливому розміру області іонного перемішування в кристалі Cu при його бомбардуванні іонами Ag з енергією 100 eV, як було встановлено в [247]. Таким чином, радіаційно-прискорена дифузія і іонне перемішування перекручували початковий псевдомаркер протягом одного і того ж часу. На рис. 5.2 (а) пошарові профілі першого компонента $C_{I(0, V_f)}$, які є чисельними розв'язаннями рівнянь (5.5) і (5.6), показують перекручення початкового псевдомаркера завдяки радіаційно-прискореній дифузії і іонному перемішуванню (крива 1 на рис. 5.2 (а)) і завдяки тільки іонному перемішуванню (крива 4 на рис. 5.2 (а)) для випадку ідеального стоку точкових дефектів на поверхні, що бомбардується, при $1/\mu_0 = 0$. Як видно з рисунку, радіаційно-прискорена дифузія перекручує пошаровий профіль псевдомаркера значно сильніше порівняно зі впливом, який спроможне здійснити іонне перемішування. Це пояснюється порівнянням величин коефіцієнта іонного перемішування $D_{mix(x)}$ і коефіцієнта радіаційно-прискореної дифузії $D_{red, eff(x)}$ на рис. 5.3.

Коефіцієнт іонного перемішування значно менший, ніж коефіцієнт радіаційно-прискореної дифузії з урахуванням обох механізмів перенесення маси по вакансіях і міжвузлових атомах у всій області перемішування за винятком трьох поверхневих атомних прошарків для ідеального стоку дефектів на поверхні, що бомбардується. Сильніше окресленим перекрученням є перекручення з урахуванням крайової умови зі швидкоісно-обмежуючим параметром $1/\mu_0 = d$ на поверхні, що показано на рис. 5.2 (б). Причина більш істотного перекручення

псевдомаркера при $1/\mu_0 = d$, як вже обговорювалося в підрозділі 5.3, полягає в тому, що концентрація дефектів збільшується зі зростанням значення параметра $1/\mu_0$. Таким чином, незначне зменшення поширення пошарового профілю концентрації псевдомаркера з температурою, яке обговорювалося в п. 4.2.4 (таблиця 4.2) [247], маскується значним збільшенням поширення завдяки радіаційно-прискореній дифузії при підвищених температурах і не може бути встановлене у разі прямого експерименту.

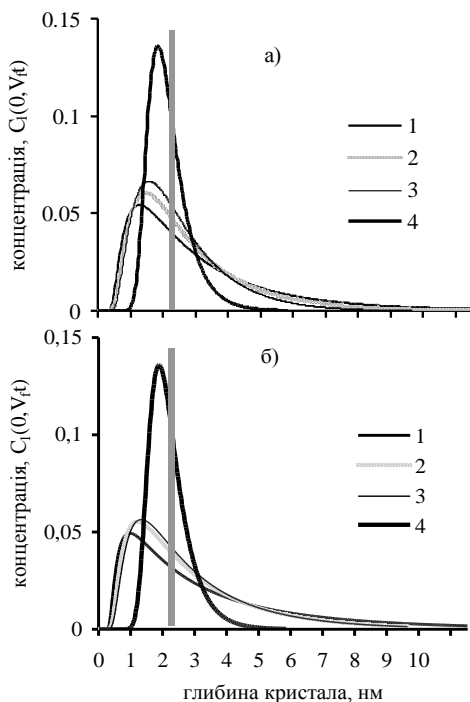


Рис. 5.2. Пошарові профілі глибини псевдомаркера $C_I(0, V_f)$ при енергії іонів Ag – 100 еВ і температурі кристала 500 К. Псевдопрошарок був розташований в 12-му прошарку. Концентрація внутрішніх стоків дефектів $C_s = 5 \cdot 10^{-6}$. а) Ідеальний поверхневий сток дефектів ($1/\mu_0 = 0$); б) неідеальний поверхневий сток дефектів ($1/\mu_0 = d$). Крива 1 – РПД по вакансіях і міжвузлових атомах і перемішування, 2 – РПД по міжвузлових атомах і перемішування, 3 – РПД по вакансіях і перемішування, 4 – перемішування [379]

Із зростанням значень швидкісно-обмежуючого параметра l/μ_0 обидві концентрації дефектів вакансій і міжвузлових атомів, зростають, але концентрація вакансій зростає істотніше. Це змінює відносні внески механізмів перенесення маси по вакансіях і міжвузлових атомах, а також змінює перекинуття пошарового профілю концентрації псевдомаркера. На рис. 5.3 наведені залежності загального коефіцієнта радіаційно-прискореної дифузії від глибини кристала i , окремо, його вакансійного і міжвузлового компонентів при $l/\mu_0 = 0$ і $l/\mu_0 = d$. Розрахункові пошарові профілі, які враховують тільки один з двох механізмів, наведені на рис. 5.3. Коефіцієнт радіаційно-прискореної дифузії по вакансіях значно менший, ніж коефіцієнт радіаційно-прискореної дифузії по міжвузлових атомах при $l/\mu_0 = 0$, тоді як при $l/\mu_0 = d$ вони, практично, однакові. Таким чином, внески механізмів перенесення маси по вакансіях і міжвузлових атомах перекинують пошаровий профіль псевдомаркера, практично, однаково при $l/\mu_0 = d$, що підтверджують криві 2 і 3 на рис. 5.2 (б). У разі подальшого збільшення швидкісно-обмежуючого параметра l/μ_0 , дифузійний коефіцієнт по вакансіях стає більшим, ніж коефіцієнт по міжвузлових атомах у приповерхневій області (≈ 10 нм), а при $l/\mu_0 = 10 \cdot d$ він буде вже в два рази більший. Максимум пошарового профілю псевдомаркера при $l/\mu_0 = 10 \cdot d$ переміщується до поверхні впритул і демонструє тільки монотонне зменшення з глибиною кристала, що може бути кваліфіковано як, практично, повну деградацію початкового псевдомаркера з втратою початкової форми. Більші значення параметра l/μ_0 не розглядалися в роботі, оскільки вони не реалістичні для чистої металевій поверхні [446]. Необхідно відзначити, що відносний внесок механізму перенесення маси по міжвузлових атомах у перекинуття псевдомаркера може бути перебільшений, оскільки реальні механізми переміщення міжвузлових атомів залишаються до кінця не з'ясованими у кількісному відношенні [15, 342].

Розрахункові пошарові профілі концентрації $C_I(0, V_f t)$ псевдомаркера для обох межових значень швидкісно-обмежуючого параметра ($l/\mu_0=0$, $l/\mu_0=d$) є, практично, незалежними від густини внутрішніх стоків C_s в області значень $C_s \leq 5 \cdot 10^{-6}$ і від взаємної рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів. Це пов'язане з відносно малими змінами в концентраціях дефектів зі зміною концентрації внутрішніх стоків C_s (15 – 20% при зміні C_s у межах від 0 до $5 \cdot 10^{-6}$) в інтервалі глибин до 5,0 нм (див. рис. 5.1), який є найбільш активним інтервалом перекинуття псевдомаркера за даних умов бомбардування і при даній температурі кристала. Вплив взаємної рекомбінації вакансій і

міжвузлових атомів становить ще менше значення за виконання умови $1/\mu_0 \leq 10 \cdot d$.

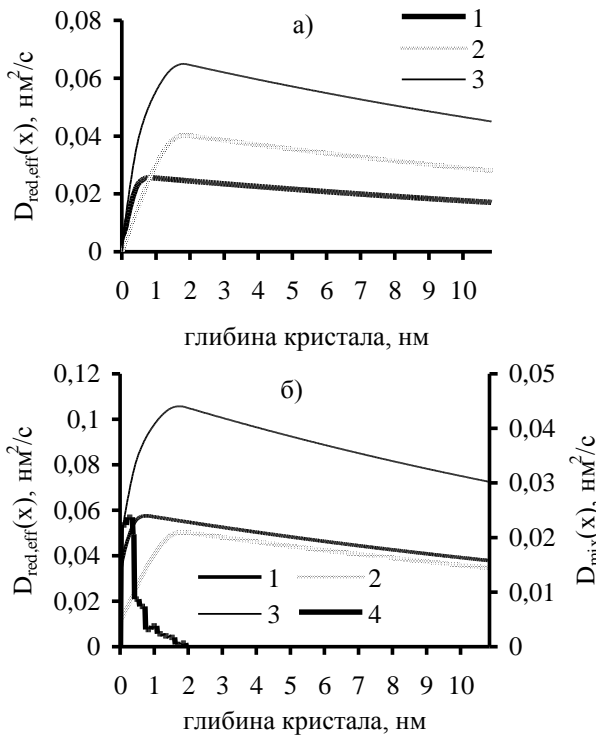


Рис. 5.3. Залежності коефіцієнтів РПД $D_{red,eff}(x)$ від глибини кристала Cu (100) при температурі 500 К для іонів Ag з енергією 100 еВ [379].

Концентрація внутрішніх стоків $C_s = 5 \cdot 10^{-6}$. а) Ідеальний сток на поверхні ($1/\mu = 0$); б) неідеальний сток на поверхні ($1/\mu = d$).

Коефіцієнти дифузії: крива 1 – по вакансіях $D_v C_v(x)$; 2 – по міжвузлових атомах $D_i C_i(x)$; 3 – по вакансіях і міжвузлових атомах $D_v C_v(x) + D_i C_i(x)$. У випадку б) (крива 4) показано коефіцієнт іонного перемішування, що був розрахований в [247]

Усі наведені вище результати свідчать, що параметр $1/\mu_0$ сильно впливає на відносні внески механізмів перенесення маси по вакансіях і міжвузлових атомах у загальне перекручення профілю псевдомаркера при високих температурах мішені. З іншого боку, усі розрахунки зі

швидкісно-обмежуючим параметром можуть розглядатися тільки як оцінювальні, оскільки не існує достатніх відомостей про числові значення параметра μ_0 [446]. Однак, випадок ідеального поверхневого стоку вакансій і міжвузлових атомів ($I/\mu_0 = 0$) може використовуватися для напівкількісної оцінки мінімально можливого перекручення псевдомаркера. Слід зазначити, що істотна роль поверхневих стоків дефектів при низькоенергетичному іонному бомбардуванні і високих температурах мішені відзначалася раніше в експериментальній роботі з поширового аналізу під дією іонного бомбардування [304].

5.5. Пошарове профілювання з врахуванням РПД при 750 К в Ni

У цьому параграфі розглядається застосування моделі РПД з молекулярно-динамічним моделюванням функцій просторових розподілів вакансій і міжвузлових атомів для опису поширення пошарових профілів псевдомаркера в кристалі Ni при бомбардуванні іонами Ar з енергією 100 еВ і температурі кристала 750 К.

5.5.1. *Особливості моделі у випадку кристала Ni.* Ефективні ентальпії міграції вакансій і міжвузлових атомів у кристалі Ni: $H_i = 0,15$ еВ, $H_v = 1,28$ еВ. Частотні фактори у формулі (5.4) : $\nu_i = \nu_v = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ [342, 346] і $\nu_i = \nu_v = 10^{13} \text{ c}^{-1}$ [364, 368]. Коефіцієнти взаємної рекомбінації дефектів і їх анігіляції на внутрішніх стоках (s), відповідно до оціночної формули, що наведена в [346]: $\alpha_{iv} \approx \alpha_{is} = 3,93 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, $\alpha_{vs} = 9,68 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$ для $\nu_{i,v} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$ і $\alpha_{iv} \approx \alpha_{is} = 1,97 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$, $\alpha_{vs} = 4,84 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$ для $\nu_{i,v} = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$. У випадку неідеального стоку дефектів на поверхні, що розпилюється, значення швидкісно-обмежуючого параметра I/μ_0 було обрано $d/\sqrt{2}$ у відповідності з [446].

5.5.2. *Основні результати для кристала Ni.* У попередньому підрозділі 5.4 було показано, що концентрація дефектів не залежить від швидкості розпилення поверхні, оскільки $D_{i,v} \gg V_f d$. Ця умова є наслідком розрахунків, що були виконані для молекулярно-динамічного моделювання швидкостей розпилення поверхні і наведені у таблиці 4.13.

Більше того, для розв'язування рівняння (5.5) достатньо стаціонарних концентраційних профілів $C_{i,v}(x,t)$, які були одержані шляхом розв'язання рівняння (5.1), оскільки при 750 К у кристалі Ni виконуються співвідношення $a^2/D_{i,v} \ll a/V_f \sim a^2/D_{red,eff}$, які вже обговорювалися у випадку кристала Cu при 500 К і за аналогічних умов бомбардування в п. 5.3. Таким чином, у випадку кристала Ni при температурі 750 К, як і у випадку кристала Cu при температурі 500 К,

радіаційно-прискорена дифузія виявляється значно повільнішим процесом у порівнянні з еволюцією профілю дефектів.

Стационарні профілі концентрації вакансій і міжвузлових атомів у кристалі Ni при температурі кристала 750 K і нормальному бомбардуванні іонами Ag з енергією 100 eV, представлені на рис. 5.4 (а, б). Вони були отримані шляхом аналітичного розв'язання рівняння (5.5) для випадку нульової взаємної рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів ($\alpha_{i,v} = 0$), а також чисельними методами, у випадку врахування їх взаємної рекомбінації. Профілі дефектів, у свою чергу, отримані з використанням крайових умов (5.10)–(5.12). Результати показують, що взаємна рекомбінація вакансій і міжвузлових атомів має тільки незначний вплив на стационарні профілі концентрації цих дефектів у випадку значної концентрації внутрішніх нерухомих стоків ($C_s = 5 \cdot 10^{-6}$) і великого частотного фактору ($v_{i,v} = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$). Цей результат аналогічний результату, отриманому для кристала Cu при 500 K і за таких же умов бомбардування, що вже обговорювалося в п. 5.3. У випадку кристала Ni було встановлено, що для обох типів дефектів, стационарна концентрація істотно зростає зі зменшенням частотного фактору, що видно з рис. 5.4. Як і у випадку кристала Cu, максимум концентрації вакансій розташовується значно ближче до поверхні, що розпилюється, порівняно з максимумом концентрації міжвузлових атомів, що, в цілому, співпадає з особливостями розподілів генерації точкових дефектів за глибиною. Для частотного фактору $v_{i,v} = 10^{13} \text{ c}^{-1}$ взаємна рекомбінація вакансій і міжвузлових атомів має значно більший вплив на зменшення концентрації цих дефектів з глибиною. Очевидно, зростання впливу взаємної рекомбінації пов'язано зі значно більшою концентрацією дефектів при цьому значенні $v_{i,v}$, порівняно з його більшими значеннями.

Поверхневі концентрації вакансій і міжвузлових атомів не дорівнюють нулю (нуль поверхневої концентрації дефектів може бути тільки у випадку ідеального стоку дефектів на поверхні) завдяки обмеженій величині параметра μ_0 , що вже було показано для випадку Cu в п. 5.3. Для кристала Ni, як і для Cu, спостерігається вплив швидко-обмежуючого параметра μ_0 на пошаровий профіль концентрації псевдомаркера через його вплив на концентрацію точкових дефектів порівняно з випадком ідеального стоку на поверхні. З використанням рівняння (5.7) і математичного виразу для $D_{red,eff}(x)$ була отримана залежність коефіцієнта радіаційно-прискореної дифузії за глибиною кристала, яка наведена на рис. 5.5. Поблизу поверхні, що розпилюється, в області приблизно 2,5 нм, різниця коефіцієнтів радіаційно-прискореної дифузії при різних $v_{i,v}$ виявляється незначною,

але вона збільшується з глибиною кристала. Коефіцієнт радіаційно-прискореної дифузії при менших $v_{i,v}$ швидше зменшується з глибиною кристала. Це справедливо для обох складових коефіцієнта радіаційно-прискореної дифузії – по вакансіях і міжвузлових атомах. Рис. 5.5 також показує, що при температурі 750 К у межах цієї моделі, внесок дифузії по міжвузлових атомах у перенесення маси є більшим порівняно з внеском дифузії по вакансіях. Відношення коефіцієнтів дифузії по міжвузлових атомах і вакансіях становить $D_i C_i(x)/(D_v C_v(x)) \approx 1,5-2,0$, принаймні, в приповерхневій області кристала (див. рис. 5.5).

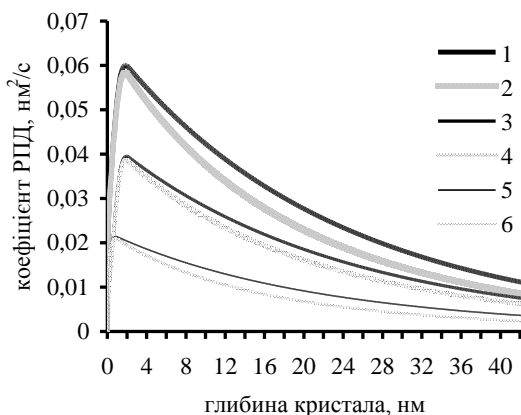


Рис. 5.5. Залежність РПД від глибини кристала Ni (100) при 750 К. Концентрація внутрішніх стоків $C_s = 5 \cdot 10^{-6}$. Коефіцієнт РПД по вакансіях і міжвузлових атомах ($v_{v,i} = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$) (1); вакансіях і міжвузлових атомах ($v_{v,i} = 1 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$) (2); 3: міжвузлових атомах ($v_i = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$) (3); 4: міжвузлових атомах ($v_i = 10^{13} \text{ c}^{-1}$) (4); вакансіях ($v_v = 5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$) (5); вакансіях ($v_v = 10^{13} \text{ c}^{-1}$) (6) [380]

Кінцевий пошаровий профіль псевдомаркера, який був розрахований згідно з рівняннями (5.6)–(5.14) з отриманими коефіцієнтами радіаційно-прискореної дифузії (див. рис. 5.5) і коефіцієнтами іонного перемішування (див. пп. 4.5.5 і 4.5.6, рис. 4.19), наводиться на рис. 5.6. Пошарові профілі концентрації підтверджують висновок про те, що вакансійний механізм дифузії менш ефективний, ніж механізм міжвузлових атомів у кристалі Ni при температурі 750 К. Перекручення псевдомаркера при температурі 750 К навіть при низьких енергіях бомбардування має місце, головним чином, завдяки радіаційно-прискореній дифузії. Іонне перемішування робить тільки

мінімальний внесок у перекручення псевдопрошарку порівняно з внеском цього типу дифузії. Було встановлено, що глибина затухання λ хвоста профілю ($C(x) \sim \exp(-x/\lambda)$) дорівнює $\lambda \approx 1,0$ нм при температурі 0 К для перемішування з урахуванням тільки каскадів зіткнень, однак, цей параметр зростає в чотири рази при 750 К, де радіаційно-прискорена дифузія домінує. Поширення псевдомаркера в Ni при температурі 750 К було в 20 разів більше (з урахуванням радіаційно-прискореної дифузії), ніж при врахуванні тільки іонного перемішування. Було також встановлено, що зміна значень частотного фактору $v_{i,v}$, практично, не має ніякого впливу на пошарові профілі концентрації псевдомаркера в приповерхневій області кристала Ni при температурі 750 К.

Наведені розрахунки якісно показують таку ж тенденцію, як і експериментальні дані Махта (Macht) [368], де поширення маркера ізотопу ^{63}Ni в матриці Ni зростає приблизно на один порядок зі збільшенням температури від кімнатної до 625 К при бомбардуванні кристала Ni іонами O_2^+ з енергією 4 кеВ. Глибина затухання λ профілю ^{63}Ni зростає при цьому в 3–4 рази [368], що добре відповідає наведеним модельним розрахункам.

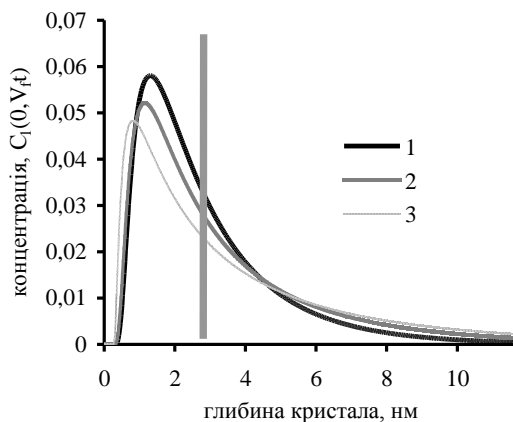


Рис. 5.6. Пошарові профілі для псевдомаркера з початковою відносною концентрацією, що дорівнювала одиниці, в 17-му атомному прошарку кристала Ni (100) при 750 К і щільність потоку іонів $1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/(см² · с). Крива 1: дифузія по вакансіях; крива 2: дифузія по міжвузлових атомах; крива 3: дифузія по вакансіях і міжвузлових атомах з урахуванням іонного перемішування [380]

Висновки до глави 5

Розвинута модель РПД у випадку низьких енергій іонів, що бомбардують, шляхом використання МД моделювання для обчислення розподілу утворених в атомних каскадах стабільних вакансій і міжвузлових атомів при високих рівноважних температурах кристалів. Розподіли дефектів використовувалися в розв'язанні рівнянь РПД.

Перекручення пошарового профілю концентрації псевдомаркера завдяки впливу радіаційно-прискореної дифузії домінує порівняно із впливом іонного перемішування в обох кристалах Cu і Ni при температурах, відповідно, 500 К і 750 К. Незначне зменшення поширення псевдомаркера зі зростанням температури, що було отримано при розгляді впливу температури на іонне перемішування (див. главу 4), маскується значно більшим поширенням пошарового профілю концентрації завдяки радіаційно-прискореній дифузії при температурі 500 К у кристалі Cu і при 750 К у кристалі Ni. Докладніше, поширення псевдомаркера в Ni з урахуванням радіаційно-прискореної дифузії при температурі 750 К більше поширення завдяки тільки іонному перемішуванню в ~ 20 разів, а глибина затухання в ~ 4 рази, що оціночно співпадає з відомими експериментальними даними для ^{63}Ni в матриці Ni [368].

Швидкісно-обмежуючий параметр μ_0 , а разом з ним і стан поверхні з точки зору ефективності стоку дефектів, має значний вплив на пошаровий профіль концентрації. Зі зростанням величини $1/\mu_0$, перекручення концентраційного профілю стає істотнішим, зміщуючи максимум концентрації псевдомаркера до поверхні. Значення швидкісно-обмежуючого параметра $1/\mu_0$ залишається визначеним тільки приблизно в інтервалі від 0 до d . Пошаровий профіль неістотно залежить від взаємної рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів, а також їх анігіляції на внутрішніх нерухомих стоках у випадку $C_s \leq 5 \cdot 10^{-6}$ і $1/\mu_0 < d$.

Опис моделі РПД та отримані результати разом з їх обговоренням, що наведені у главі 5, надруковані в [379, 380].

ГЛАВА 6. ПЕРЕМІШУВАННЯ І ГЕНЕРАЦІЯ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛІ Ni З НИЗЬКОЮ КОНЦЕНТРАЦІЄЮ ДОМІШКИ Al

6.1. Вступ до глави 6

Наразі двоетапний підхід до розв'язання проблеми низькоенергетичного іонного перемішування з використанням на першому етапі методу молекулярної динаміки для моделювання функції атомних переміщень у каскадах застосовувався у випадках однокомпонентних кристалів Cu, Si і Ni [101, 241–248, 380]. Метою цих розрахунків було обчислення параметрів перемішування, а саме, коефіцієнтів іонного перемішування, середньоквадратичної швидкості дрейфу атомів віддачі, ефективності іонного перемішування, тощо [3–6, 14–16, 257, 258, 287]. Завдяки молекулярно-динамічному підходу до моделювання каскадів ці комбіновані розрахунки дають можливість коректно і послідовно врахувати внесок низькоенергетичних зіткнень в перемішування, а також релаксацію кристала на стадії охолодження каскаду. З використанням молекулярно-динамічного моделювання, була розрахована початкова стадія перемішування двокомпонентної багатошарової системи α -MoSi₂, у якій атомний прошарок Mo і два прошарки атомів Si мінялися по черзі від поверхні в глибину кристала. Модельний кристал розглядався в умовах бомбардування іонами Ag з енергією 1 кеВ при температурі кристала 0 К [449]. Порівняно з проблемою розрахунку початкової стадії бомбардування двокомпонентної системи або пошарового профілю концентрації псевдоізотопної системи, яка реально також є однокомпонентною системою в межах двоетапного підходу, розв'язання пошарової проблеми двокомпонентної багатошарової системи цим методом потребує значно більше комп'ютерного часу. Причина цього полягає в тому, що для кожного нового часового кроку при чисельному розрахунку рівняння іонного перемішування в двокомпонентній системі, необхідно розраховувати нові функції атомних переміщень, оскільки вони залежать від концентрацій компонентів у даний момент пошарового профілювання. Крім того, сам алгоритм такого розрахунку залишається нерозробленим.

Наведені в главі 6 розрахунки [450–452] були виконані для проміжного випадку розбавленого розчину заміщення домішкових атомів Al у кристалічній матриці Ni, коли домішкові атоми не взаємодіють один з одним безпосередньо. У цьому випадку, ймовірність атомних переміщень з одного атомного прошарку до іншого не залежить від концентрації домішки і, таким чином, побудова загальної функції атомних переміщень атомів домішки у всій області

перемішування можлива шляхом підсумовування локальних функцій атомних переміщень для кожного атомного прошарку. В межах моделі, тільки один домішковий атом був розташований в кожному відповідному кристалі. Умова низької домішкової концентрації дає можливість розрахувати концентраційні пошарові профілі, використовуючи рівняння перемішування з незалежними від часу коефіцієнтами іонного перемішування і середніми швидкостями дрейфу атомів віддачі протягом усього часу пошарового профілювання. Різниця балістичних якостей атомів Al і Ni дозволяє оцінити внески швидкостей дрейфу атомів віддачі обох типів (домішки і матриці), а також градієнта різниці коефіцієнтів іонного перемішування в конвективний потік домішкових атомів віддачі, який дорівнює нулю в однокомпонентних системах. Вплив конвективного потоку домішкових атомів віддачі на пошаровий концентраційний профіль маркера Al обговорюється в главі 6 на основі результатів чисельного розв'язання двокомпонентного рівняння іонного перемішування в дифузійному наближенні.

6.2. Особливості молекулярно-динамічної моделі

У роботі використовувався молекулярно-динамічний алгоритм, який був розроблений для кристалів Al, Ni та їх двошарових систем (див. глави 3 і 4, а також [310, 311]). У цій главі розглядається випадок нормального бомбардування кристала Ni (100) іонами Ag з енергією 100 еВ при температурі кристала 300 К. У моделі було використано вісім різних кристалів Ni, що склалися з 4032 атомів, розташованих у 14 атомних прошарках з одним атомом Al у одному з прошарків з 1-го по 8-ий. Атом Al займав позицію у вузлі ґратки всередині відповідного атомного прошарку замість одного з атомів Ni, що показано на рис. 6.1. Усі кристали з одним заміщеним атомом Al у відповідному атомному прошарку стабілізувалися без взаємодії з бомбардуючим іоном протягом 6 пс при температурі 300 К з використанням формалізму «зануреного у термічну ванну» кристала (див. п. 1.4.1, [1, 100]).

На рис. 6.1 показані елементарні області бомбардування, для яких було виконано по 200 і 400 випробувань, відповідно, в областях 1–3 і 4–6. Рис. 6.1 показує області бомбардування для випадку знаходження атома Al в одному з атомних прошарків 1, 3, 5, 7. Для випадку знаходження атома Al в одному з атомних прошарків 2, 4, 6, 8 усі області бомбардування були зміщені на $d/2$, як показано стрілкою на рис. 6.1. Таким чином, у всіх випадках атом Al знаходився в лівому куті області бомбардування 1. Для кожної області поверхні точки падіння іонів вибиралися за законом випадкових чисел. Максимальний час руху іона до поверхні не перевищував середнього часу 1–2 термічних

коливань атома на поверхні кристала. У кожному випадку час руху вибирався в цьому інтервалі за законом випадкових чисел. Таким чином, у кожному новому випробуванні іон взаємодіяв з новою локальною конфігурацією атомів на поверхні кристала Ni, що виникала внаслідок термічних коливань атомів ґратки. Додатково, чотири кристали Ni були побудовані для врахування переміщення атома Al в напрямках $\langle 110 \rangle$ у складі відповідних послідовностей атомних зіткнень заміщення. Кожен з цих чотирьох кристалів мав по чотири атоми Al в одному з атомних прошарків з 5-го по 8-ий, які були розташовані в напрямках $\langle 110 \rangle$ відповідно до трьох областей бомбардування: 1, 2 і 4 (див. рис. 6.1). Однокомпонентний кристал Ni без атомів Al використовувався для моделювання переміщень матричних атомів Ni.

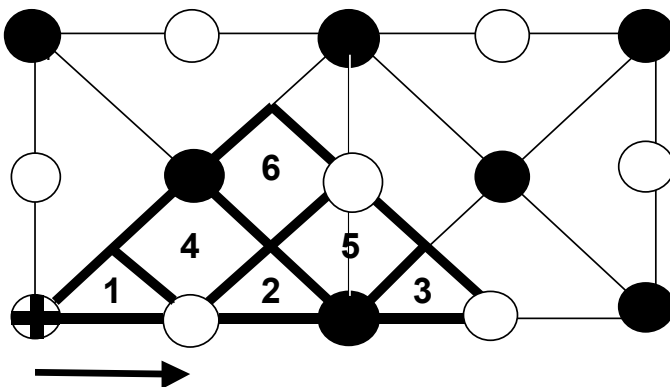


Рис. 6.1. Розташування домішкового атома Al у кристалі Ni. У площині (100) наведені елементарні області бомбардування 1–6. Атом Al, показаний хрестом, займає позицію у вузлі ґратки всередині відповідного атомного прошарку замість одного з атомів Ni. Темні маркери – атоми першого прошарку, світлі – другого

6.3. Дифузійне наближення в двокомпонентному випадку

Рівняння іонного перемішування в дифузійному наближенні [257, 258] було застосовано для розрахунку пошарового профілю концентрації домішкового маркера Al в кристалі Ni. Для цього розраховувалися відповідні коефіцієнти іонного перемішування і середні швидкості дрейфу домішкових (Al) і матричних (Ni) атомів віддачі. Дифузійне наближення може бути отримано шляхом розкладання правої частини загального інтегро-диференціального

рівняння іонного перемішування зі складовою частиною ґраткової релаксації [3–6] за малим параметром z/x [258], де z – величина стрибка атома в каскаді, x – координата області перемішування, яка визначається від поверхні в глибину кристала:

$$\frac{\partial C_1(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left[(1 - C_1(x,t)) D_1(x) + C_1(x,t) D_2(x) \right] \frac{\partial C_1(x,t)}{\partial x} + C_1(x,t) (U(x) + V_f) \right\}, \quad (6.1)$$

де $U(x)$ – ефективна швидкість атомів домішки Al у каскадах зіткнень, яка дорівнює нулю в однокомпонентних системах:

$$U(x) = (1 - C_1(x,t)) \left(\frac{d}{dx} (D_1(x) - D_2(x)) + V_2(x) - V_1(x) \right), \quad (6.2)$$

де коефіцієнти іонного перемішування $D_{1,2}(x)$ (1.38), швидкості дрейфу атомів віддачі $V_{1,2}(x)$ (1.39) обох компонентів 1 і 2, а також швидкість руху поверхні, що розпилюється, V_f (2.4) були наведені та детально обговорювалися в п. 1.5.4 і 2.2.2.

Усі ці параметри, як видно з їх обговорень, залежать від функції атомних переміщень атомів у каскадах $F(x, z)$, яка також задається в п. 1.5.2 і 2.2.2 і розраховується в підході, що обговорюється, методом молекулярно-динамічного моделювання. Релокаційна функція $h(\zeta)$, що показує інтегральне переміщення атомів у каскадах і використовується у виразі (2.4) для розрахунку швидкості розпилення поверхні у випадку двокомпонентної системи, має наступний вигляд [257]:

$$h(\zeta) = \sum_{k=1}^m \left[\int_{-\infty}^{+\infty} C_k(\zeta - z, t) F_k(\zeta - z, z) dz - \int_{-\infty}^{+\infty} C_k(x, t) F_k(\zeta, z) dz \right]. \quad (6.3)$$

Функція $F_I(x, z)$ домішкових атомів Al була отримана як подвійна сума $F_{Iij}(x, z)$ функцій атомних переміщень, які відбуваються завдяки падінню іонів у j -у область бомбардування (див. рис. 6.1, $j = 1 - 6$) у випадку, коли атом Al початково знаходився в i -му атомному прошарку ($i = 1 - 8$):

$$F_I(x, z) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{\mu} \eta F_{Iij}(x_i, z), \quad (6.4)$$

де $\eta = 1$ для $j = 1 - 3$ і $\eta = 2$ для $j = 4 - 6$, $\mu = 6$, $n = 8$ (див. рис. 6.1).

Для елементарних областей бомбардування 4–6 параметр η дорівнює 2, оскільки області 4–6 в два рази більші за площею порівняно

з областями 1–3 (див. рис. 6.1). Правило формування функції атомних переміщень (6.4) справедливо у випадку, коли концентрація домішкових атомів настільки мала, що вони не взаємодіють безпосередньо між собою, а тільки з матричними атомами Ni. При цьому функція $F_j(x, z)$, як видно з виразу (6.4), не залежить від концентрації домішкових атомів.

Крайові умови, що були запропоновані для розв'язання рівняння іонного перемішування (6.1), мають наступний вигляд:

$$C_1(x, t)|_{x=0} = 0, \quad (6.5)$$

$$\left. \frac{\partial C_1(x, t)}{\partial t} \right|_{x=0} = \frac{1}{\Delta x} \left[\left((1 - C_1(x, t))D_1(x) + C_1(x, t)D_2(x) \right) \left. \frac{\partial C_1(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} + C_1(0, t)(U(0) + V_f) - \tau Y_1 C_1(0, t) \right], \quad (6.6)$$

де $Y_{1,2}$ – коефіцієнти розпилення домішкової і матричної компонентів, $\Delta x \approx d/2$.

Ефективний коефіцієнт розпилення домішкових атомів алюмінію, що використовується в крайовій умові (6.6), оцінюється наступним виразом, який будується виходячи з коефіцієнтів розпилення атома Al при падінні іона у виділені на рис. 6.1 елементарні області:

$$Y_1 = \sum_{j=1}^{\mu} \eta Y_{1j}, \quad (6.7)$$

де індекс j і параметр η мають такий же сенс як і в рівнянні (6.4). Коефіцієнт розпилення Y_2 і функція атомних переміщень атомів Ni $F_2(x, z)$ моделювалися в однокомпонентному кристалі Ni без атомів Al аналогічно тому, як це описувалося в главах 2 і 4. Відносна концентрація домішкових атомів Al у початковому маркері, товщиною в один атомний прошарок, дорівнювала 10^{-3} .

6.4. Коефіцієнти розпилення і енергетичні втрати іонів

Результати молекулярно-динамічного моделювання коефіцієнта розпилення атомів Al для різних областей бомбардування (див. рис. 6.1 і таблицю 6.1) значно відрізняються один від одного і залежать від розташування області бомбардування відносно атома Al. Ефективний коефіцієнт розпилення Al (6.7) використовувався в крайовій умові (6.6), однак швидкість розпилення поверхні V_f (2.4) залежить, практично,

тільки від розпилення атомів Ni у кристалі Ni, оскільки концентрація атомів Al припускається незначною.

Таблиця 6.1 Модельні результати для домішкового атома Al в кристалі Ni

Області падіння	1	2	3	4	5	6
Y_I	0,065	0,17	0,0	0,175	0,0	0,035
N_{ad}	0,175	0,17	0,08	0,175	0,0	0,145
$N_{v(s/b^*)}$	0,67/0,135	0,36/0	0/0	0,48/0,02	0,0175/0,0	0,045/0,005
N_i	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
$N_{ws}^{**})$	2,48	0,64	0,215	0,556	0,118	0,288
$R^{2**})$	34,92	15,08	1,58	19,82	0,57	5,69
$R_x^{2**})$	16,68	1,67	0,66	0,91	0,21	0,76
$R_{x,ad}^{2**})$	0,54	0,51	0,25	0,53	0,0	0,44
$R_{vz,ad}^{2**})$	10,8	11,3	0,27	16,37	0,0	4,23

Примітки:

1. ^{*)} Загальна генерація вакансій, як результат переміщення атома Al – сума всіх генерацій вакансій для кристала Ni з атомом Al у різних прошарках.

2. ^{**)} Загальна кількість атомних переміщень з початкових комірок Вігнера – Зейтца, як сума переміщень атомів Al, розташованих у різних прошарках.

У навколodomішкoвій області, поблизу атома Al, моделювання дає значення коефіцієнта розпилення атомів Ni для різних областей бомбардування, які виявляються також різними, що видно з таблиці 6.2.

Таблиця 6.2 Модельні результати для атомів Ni

Області падіння	1	2	3	4	5	6
Y_2	0,19	0,19	0,37	0,46	0,63	0,23
N_{ad}	1,15	1,05	1,12	1,7	1,72	1,22
$N_{v(s/b)}$	1,02/*)	1,475/*)	0,0/*)	2,1/*)	2,41/*)	1,9/*)
$N_{int}^{**})$	0,34	0,37	0,4	0,19	0,19	0,38
$N_{ws}^{**})$	7,23	7,47	7,21	7,15	6,9	7,42
$R^{2**})$	84,9	85,0	88,3	99,8	96,6	87,2
$R_x^{2**})$	28,5	30,9	30,6	21,1	19,8	30,4
$R_{x,ad}^{2**})$	4,01	4,04	4,1	5,03	4,69	3,94
$R_{vz,ad}^{2**})$	34,0	31,4	31,7	53,5	52,0	34,2

Примітки:

1. *) Відповідні розподіли за глибиною об'ємних вакансій завдяки переміщенням обох типів атомів Ni і Al (див. також Таблицю 6.1) представлені на рис.6.2.

2. **) Представлені тут величини для різних областей падіння іонів є середніми величинами для випадків початкового розташування атомів Al у різних атомних прошарках.

Найбільші коефіцієнти розпилення атомів Ni були отримані для 4-ої і 5-ої областей бомбардування. Коефіцієнти розпилення для 1-ої, 2-ої і 6-ої областей були близькими до коефіцієнту розпилення однокомпонентного кристала Ni. При цьому коефіцієнти розпилення атомів Ni поблизу від домішкового атома Al при падінні іонів в області 1–6 не відіграють істотної ролі в розпиленні поверхні кристала через низьку концентрацію атомів домішки. Отриманий ефективний коефіцієнт розпилення Y_1 (див. (6.7)) домішкових атомів Al дорівнював 0,655 атомів/іон. Коефіцієнт розпилення однокомпонентного кристала Ni дорівнював 0,205 атомів/іон. Таким чином, домішковий компонент Al є легкорозпилювальним компонентом порівняно з матрицею Ni в межах цієї моделі. Цей результат якісно відповідає результатам інших моделей, наприклад, оригінальній моделі, що була заснована на чисельному розв'язанні транспортного рівняння Больцмана з фіксованою довжиною вільного пробігу каскадних атомів [254] для двокомпонентного сплаву Ni₃Al [255]. У роботі [255] було отримано, що відношення коефіцієнтів розпилення компонентів Ni і Al Y_2/Y_1 дорівнює 0,4–0,5 атомів/іон при енергії іонів Ar 100 eV.

Розподіл втрат енергії іонів за глибиною кристала при падінні іонів у 1-у область (див. рис. 6.1) розташовується глибше у кристалі порівняно з розподілом втрат енергії іонів у однокомпонентному кристалі Ni при температурі 300 K (див. п. 3.5.1 і п. 3.2.3). Енергетичні втрати становлять, відповідно, 62,5 і 44,7 eV/прошарок у ад-прошарку, а також 27,5 і 43 eV/прошарок у першому атомному прошарку однокомпонентного кристала Ni і в кристалі Ni з одним атомом Al у 1-му прошарку.

Протилежні тенденції в розподілах пружних втрат у прошарку радіаційно-адсорбованих атомів і першому атомному прошарку найбільш ймовірно були пов'язані з меншою масою атомів Al порівняно з масами атома Ni і іона Ar. Ця ідея підтримується результатом, отриманим для однокомпонентного кристала Al (див. [312] і п. 3.6.1), де розподіл енергетичних втрат іона знаходився в 2-му атомному прошарку. Енергетичні втрати іона в прошарку радіаційно-адсорбованих атомів і в першому атомному прошарку для областей

бомбардування 2–6 дорівнюють, відповідно, 52–58 еВ/прошарок і 33–39 еВ/прошарок, що непогано збігається з розподілом втрат енергії в однокомпонентному кристалі Ni [312] (див. п. 3.5.1).

6.5. Генерація дефектів у кристалі Ni з одним атомом Al

Результати генерації ад-атомів Al представлені в таблиці 6.1. При падінні іонів у 1-у, 2-у та 4-у область на поверхні кристала генерації ад-атомів являються, практично, взаємно еквівалентними і максимальними серед усіх генерацій ад-атомів для областей 1–6, оскільки області 1, 2 та 4 є найближчими до домішкового атома Al (див. рис. 6.1). Падіння іонів в область 6 викликає неочікувано велику генерацію ад-атомів, яка неістотно менша за генерацію ад-атомів при падінні іонів у 1-у, 2-у і 4-у області бомбардування. Взагалі, оцінка ефективної генерації ад-атомів для псевдоодичинної концентрації домішкових атомів з використанням такого ж правила, як і для розпиленних атомів (див. формулу (6.7)), дорівнює 1,065 ад-атомів/іон. Цей результат некритично відрізняється від генерації ад-атомів у однокомпонентному кристалі Ni при температурі 300 К, яка дорівнює 1,46 ад-атомів/іон. Жодного домішкового ад-атома Al за всі випробування не було отримано з 2-го атомного прошарку. Генерації ад-атомів Ni у 1-ій, 2-ій, 3-ій і 6-ій областях іонного бомбардування, практично, дорівнюють одна одній і мало відрізняються від ефективної генерації ад-атомів Al (див. таблицю 6.2). Генерації ад-атомів Ni для 4-ї і 5-ї областей були значно більшими, що корелює зі значним коефіцієнтом розпилення Ni для цих областей бомбардування і, найбільш ймовірно, пов'язано з локальним пружним перекрученням кристалічної ґратки Ni атомом заміщення Al, який має більший розмір, ніж атом Ni.

Модельні результати генерації поверхневих вакансій за рахунок переміщення атомів Ni або Al зі своїх початкових позицій в вузлах ґратки теж представлені в таблицях 6.1 і 6.2. У цій моделі був застосований алгоритм ідентифікації точкових дефектів (вакансій і міжвузлових атомів), запропонований в [101]. Максимальні генерації поверхневих вакансій у позиції, що займає в кристалі Ni атом Al були зафіксовані при падінні іонів у 1-у, 2-у і 4-у області бомбардування, що відповідає обговорюваним вище генераціям Al ад-атомів, а також відповідним коефіцієнтам розпилення і підтверджує пріоритет механізмів генерації поверхневих вакансій, що обговорювалися в главі 3, а також в [311] для інших кристалічних систем. Ефективна генерація поверхневих вакансій у вузлі ґратки у першому атомному прошарку, де знаходиться атом Al, була оцінена аналогічно коефіцієнту розпилення по формулі (6.7) для випадку псевдоодичинної концентрації

домішкових атомів Al і дорівнювала 2,12 вакансій/іон, що добре збігається з поверхневою генерацією вакансій в однокомпонентному кристалі Ni (~ 2,1 вакансій/іон) при температурі 300 K [312] (див. також таблицю 3.9). Генерації поверхневих вакансій у вузлах ґратки в першому атомному прошарку, де знаходяться атоми Ni, іонами, що падають у 1-у і 2-у області бомбардування менші за генерації вакансій на поверхні однокомпонентного кристала Ni, тоді як генерації вакансій за рахунок падіння іонів у області 4–6 мало відрізняються від відповідних результатів для однокомпонентного кристала Ni (див. таблицю 6.2). Зменшення генерації вакансій за рахунок переміщення атомів Ni для областей бомбардування, що торкаються атома Al, пояснюється присутністю атома Al, переміщення якого може також призвести до генерації вакансії, однак, ці вакансії будуть зафіксовані як вакансії в домішковій ґратковій позиції.

Загальна генерація об'ємних вакансій в позиції, де початково був розташований атом Al, дорівнює сумі всіх генерацій вакансій в кристалі Ni з атомом Al у різних атомних прошарках (див. таблицю 6.1). Більше того, порівняння генерацій вакансій для різних областей падіння іонів показує, що іони, які падають у 1-у область, є, практично, єдиною можливістю для генерації об'ємних вакансій (0,135 вакансій/іон) у позиції, де розташовується атом Al. Генерація об'ємних вакансій у вузлі ґратки, де знаходиться атом Al, має значно меншу продуктивність для іонів, що падають у 4-у (0,02 вакансій/іон) і 6-у області (0,005 вакансій/іон) бомбардування. Падіння іонів у 2-у, 3-ю і 5-у область зовсім не призводить до генерації об'ємних вакансій у вузлі, де знаходиться домішковий атом Al. Розподіл за глибиною генерації об'ємних вакансій, що виникають на місці, де знаходився атом Al при падінні іона в першу область, відрізняється від нуля навіть у 5-му атомному прошарку, хоч 95% вакансій генеруються в цьому випадку в 2-му і 3-му атомних прошарках. Жодної вакансії не було зафіксовано у вузлі, де був розташований атом Al, при моделюванні послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ з атомом Al у відповідній послідовності. Таким чином, практично, вся генерація вакансій у позиціях, де були атоми Al, є результатом падіння іонів у область 1 з генерацією атомних переміщень у напрямку [100], деяка частина яких може бути результатом руйнування послідовностей атомних зіткнень заміщення [100].

Результати генерації об'ємних вакансій у вузлах, які займають атоми Al і Ni у випадку падіння іона в область 1, представлені на рис. 6.2. Результати генерації вакансій у вузлах, де розташовані атоми Ni у випадку знаходження атома Al у 2-му і 3-му атомних прошарках

показує вплив присутності атома Al у гратці, оскільки генерації вакансій у вузлах гратки, де розташовані атоми Ni, сильно зменшуються у прошарках з початковим розташуванням там атома Al. При цьому, сума генерацій вакансій у деякому приповерхневому прошарку за рахунок переміщення атомів Al і Ni знаходиться у відповідності з генерацією вакансій за рахунок зміщення тільки атомів Ni, якщо атом Al був розташований в іншому прошарку. Розташування атома Al в 4-му атомному прошарку і глибше не має ніякого впливу на генерацію приповерхневих вакансій при енергії іонів 100 еВ. Генерація вакансій за рахунок зміщення атомів Ni з їх позицій у гратці для областей падіння іонів 2–6 не показує ніякої залежності, в межах статистичної похибки моделювання від розташування атома Al і добре відповідає генерації об'ємних вакансій в однокомпонентному кристалі Ni при температурі 300 К (~ 0,1 вакансій/іон (див. [312] і главу 3)). У цілому, генерація об'ємних вакансій за рахунок переміщення атомів Ni з їх початкових позицій має місце у 2–5-му прошарках, однак головний внесок роблять вакансії, що були розташовані в 2-му і 3-му атомних прошарках.

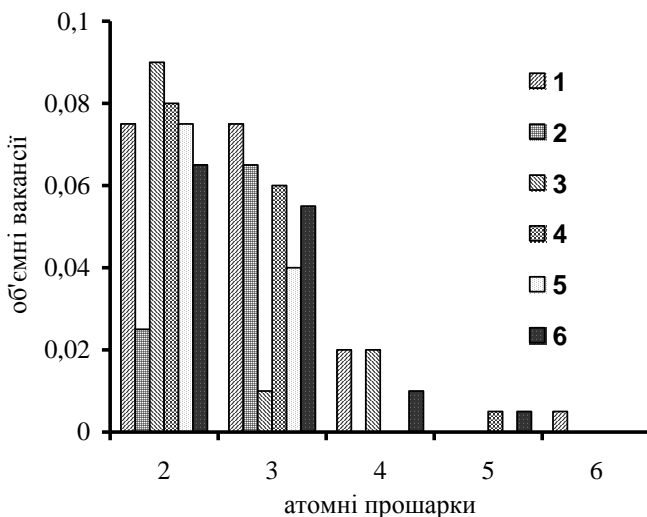


Рис. 6.2. Розподіл генерації об'ємних вакансій у вузлах гратки, що займають атоми Al і Ni у випадку падіння іона в область 1. Енергія іонів Ar – 100 еВ. Температура кристала – 300 К. Номери атомних прошарків, де був розташований атом Al, вказані номерами 1–6

Нестабільні міжвузлові атоми Al були зареєстровані в каскадах тільки протягом ранньої стадії розвитку (~ 1 пс), однак жодного міжвузлового атома Al не було зафіксовано в кристалі після 3–4 пс еволюції каскаду. Ці результати добре відповідають даним моделювання двошарової системи Al/Ni (100) [312], де жодного стабільного міжвузлового атома Al не було зареєстровано всередині кристала, і тільки незначна кількість міжвузлових атомів Al ($\sim 0,01$ міжвузлових атомів/іон) була зафіксована відразу під 1-м прошарком. У відношенні об'ємних міжвузлових атомів Al моделювання показало, що міжвузлові атоми генеруються в 1–3-й і 6-й областях падіння іонів у інтервалі 0,25–0,45 міжвузлових атомів/іон у випадку початкового розміщення атома Al у різних атомних прошарках, що аналогічно до генерації міжвузлових атомів у однокомпонентному кристалі Ni за таких же умов бомбардування ($\sim 0,38$ міжвузлових атомів/іон) [311, 312]. Генерація міжвузлових атомів Ni для 4-ї і 5-ї областей бомбардування становить $\sim 0,17$ – $0,22$ міжвузлових атомів/іон. Ніякої залежності в генерації міжвузлових атомів Ni з прошарків, де був розташований атом Al, від присутності атома Al не було отримано. Значна різниця між генераціями міжвузлових атомів Ni для областей падіння іонів пов'язана з виникненням локального переключення атомом заміщення Al ґратки кристала Ni, що вже згадувалося. У всіх модельних випадках стабільні міжвузлові атоми Ni знаходилися в 4–12-му атомних прошарках, що співпадає з даними для інших кристалів за аналогічних умов бомбардування.

6.6. Переміщення атомів Ni і Al у кристалі Ni з одним атомом Al

Сумарна кількість атомних переміщень атома Al з початкових комірок Вігнера – Зейтца з різних прошарків за їх межі $N_{ws,Al}$ в розрахунку на один бомбардуючий іон наведена в таблиці 6.1. Оцінка ефективної кількості атомних переміщень атомів Al з їх початкових комірок, як і коефіцієнт розпилення (6,7 атомів/іон), але з функцією $N_{ws,Al}$ замість матриці атомних переміщень $F(x, z)$ у формулах (6.4) і (6.7) дає 5,26 атомних переміщень/іон без врахування послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$. Внесок послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ оцінювався за допомогою додаткового молекулярно-динамічного моделювання, де розглядався кристал Ni з чотирма атомами Al, розташованими уздовж напрямків $\langle 110 \rangle$ розповсюдження відповідних атомних послідовностей заміщення. Додаткове моделювання показало, що атомні послідовності в напрямках $\langle 110 \rangle$ спроможні робити внески до переміщення атома домішки в межах $\sim 0,1$ – $0,15$ переміщень/іон. Таким чином, переміщення

атома Al в напрямку [100] дають головний внесок до загального значення $N_{ws,Al}$ для умов бомбардування, що обговорюються. З іншого боку, різниця ефективного значення $N_{ws,Al}$ і ефективної генерації Al атомів у відповідності з (6.7) дорівнює $\sim 4,4$ переміщень/іон з урахуванням послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$. Для атомів Ni цей параметр дорівнює 5,9 переміщень/іон. Ефективна кількість об'ємних атомних переміщень для атомів Al складає трохи менше значення в порівнянні з атомами Ni, що може мати місце завдяки більшому розміру атомів Al порівняно з атомами Ni. Значення параметра $N_{ws,Al}$ для розташування атома Al в різних атомних прошарках і для різних областей бомбардування представлені на рис. 6.3. Результати на рис. 6.3 показують, що головний внесок у $N_{ws,Al}$ слід пов'язувати з областю 1 падіння іонів (див. рис. 6.1). Кількість атомних переміщень для випадку падіння іонів у область 1 показує періодичну залежність від глибини кристала на фоні монотонного зменшення, починаючи з 2-го атомного прошарку. Падіння іонів у 3-ю і 5-у області створює мінімальні внески у загальну величину $N_{ws,Al}$. Параметри $N_{ws,Ni}$ для представлені системи і однокомпонентного кристала Ni (7,6 переміщень/іон [312]) є близькими у межах статистичної похибки незалежно від області бомбардування і номера атомного прошарку, де був початково розташований домішковий атом Al (див. таблицю 6.2).

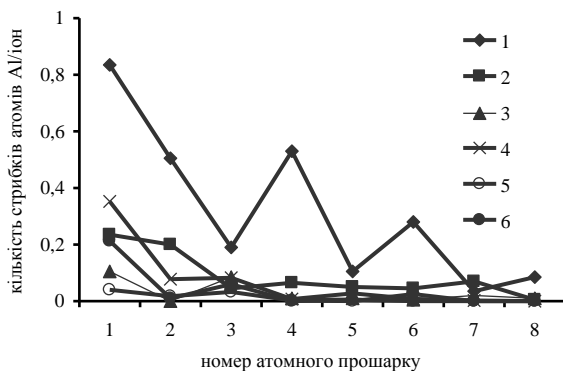


Рис. 6.3. Кількість атомних переміщень домішкових атомів Al, що залишили свої комірки Вігнера – Зейтца, у залежності від номера атомного прошарку, де початково знаходився атом Al і для областей бомбардування 1–6, номери яких показані на рисунку. Енергія іонів Ag – 100 еВ. Температура кристала – 300 К

Залежності середньоквадратичного зміщення атома Al у випадку, коли він залишав свою комірку Вігнера – Зейтца, від глибини кристала, де атом Al розташовувався на різних глибинах, представлені на рис. 6.4. Криві $N_{ws,Al}$ і середньоквадратичного зміщення атома Al на рис. 6.3 і рис. 6.4 показують, що $N_{ws,Al}$ і зміщення для першої області падіння іонів осцилюють з глибиною у відповідності одна до одної. Це пов'язується з періодичністю кристалічної ґратки.

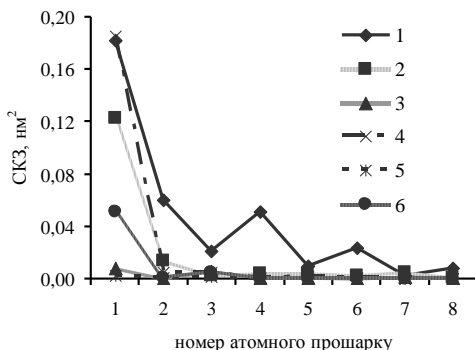


Рис. 6.4. Залежності СКЗ атомів Al у кристалі Ni, які залишили свої комірки Вігнера – Зейтца, від номера атомного прошарку, де атом Al розташовувався на початку каскаду. Области бомбардування 1–6 вказані на рисунку. Енергія іонів Ag – 100 еВ. Температура кристала – 300 К

На рис. 6.5 показано, що осциляції загального середньоквадратичного зміщення атома Al пов'язані з осциляціями компонента зміщення уздовж напрямку [100] (x-напрямок у цій моделі) R_x^2 . Прошарки 2, 4, 6 і 8 є такими прошарками, де значення R^2 , R_x^2 і $N_{ws,Al}$ мають максимуми. Матриця атомних переміщень атомів Al, що була отримана згідно правила (6.4), показує, що більшість довгих атомних переміщень атомів Al (з n -ого прошарку в $n + 2$ -й прошарок), які є результатом послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямку [100], також генеруються з цих прошарків. Таким чином, періодичність параметра R_x^2 з глибиною пов'язана з періодичністю загальної кількості атомних переміщень $N_{ws,Al}$ і періодичністю кількості довгих атомних переміщень уздовж кристалічного напрямку [100]. Компонент середньоквадратичного зміщення атомів Al уздовж бічних напрямків (паралельно поверхні, що бомбардується) R_{yz}^2 не показує ніякої явної залежності з глибиною кристала.

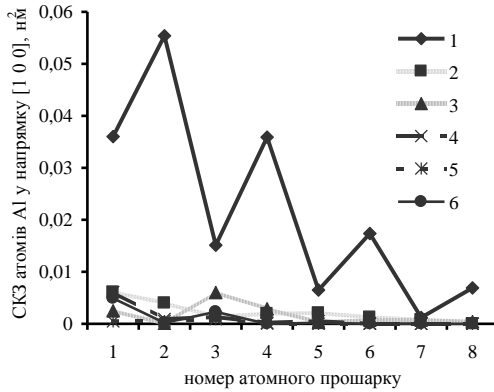


Рис. 6.5. СКЗ атомів Al уздовж напрямку [100] у кристалі Ni R_x^2 в залежності від номера атомного прошарку, де початково розташовувався атом Al. Енергія іонів Ag – 100 еВ. Температура кристала – 300 К

Як можна бачити з рис. 6.4 і 6.5, а також з таблиці 6.1, внесок бічного компонента $R_{yz,ad}^2$ ад-атомів до повного середньоквадратичного зміщення і, особливо, до зміщення атомів Al у першому прошарку виявляється значним для 1-ої і 3-ої областей бомбардування. Більше того, внесок $R_{yz,ad}^2$ до повного середньоквадратичного зміщення атомів у першому прошарку є головним для 2-ої, 4-ої і 6-ої областей бомбардування. Величини $R_{x,ad}^2$ і $R_{yz,ad}^2$ збігаються тільки для 3-ої області (див. таблицю 6.1).

Результати для R^2 , R_x^2 , $R_{x,ad}^2$, $R_{yz,ad}^2$ атомів Ni для різних областей падіння іонів, у цілому, відповідають результатам для однокомпонентного кристала Ni [312] (див. таблицю 6.2), за винятком деяких розбіжностей між 4-ою і 5-ою областями бомбардування з одного боку і іншими областями з іншого боку. Повне середньоквадратичне зміщення атомів віддачі для випадків 4-ої і 5-ої областей бомбардування в 1,1–1,2 разів більше порівняно з цими параметрами для інших областей бомбардування завдяки більшій в 1,5–1,7 разів відповідній $R_{yz,ad}^2$ бічних компонентів середньоквадратичного зміщення ад-атомів. Величини R_x^2 , що враховують нормальні до поверхні зміщення атомів, включаючи переміщення ад-атомів, виявилися в $\sim 1,5$ разів меншими у випадках 4-ої і 5-ої областей бомбардування. Величини $R_{x,ad}^2$ мало відрізняються для всіх областей бомбардування. Номер атомного прошарку, де початково знаходився

атом Al, не має, практично, ніякого закономірного впливу на компоненти середньоквадратичного зміщення матричних атомів Ni (див. таблицю 6.2).

Часові залежності компонентів середньоквадратичного зміщення атома Al, який розміщується в першому прошарку при падінні іонів у області 1 (а) і 4 (б), а також для атома Al в другому прошарку і першій області падіння (с), представлені на рис. 6.6 (а–с). Рис. 6.6 (а) показують, що бічне зміщення ад-атома Al на поверхні кристала Ni дає головний внесок до середньоквадратичного зміщення атома Al у першому прошарку, зокрема, для першої області бомбардування. Бічна і нормальна компоненти середньоквадратичного зміщення атомів віддачі без урахування ад-атомів дають, приблизно, рівні внески до загального середньоквадратичного зміщення атомів у випадку (а). Релаксація переміщення атома Al в каскаді і відповідне насичення кривих різних компонентів зміщення відбувається вже після 0,7 пс еволюції каскаду. Криві середньоквадратичного зміщення Al атомів віддачі, які залишають свої комірки Вігнера – Зейтца (крива 2) і повне середньоквадратичне зміщення для всіх атомів віддачі Al, які приймають участь у каскадних переміщеннях (крива 1), є, практично, еквівалентними. Це свідчить, що відхилення атома Al від його рівноважної позиції, що не призводить до зміни комірки Вігнера – Зейтца, є досить малим, порівняно з переміщеннями атома Al, що призводять до зміни комірки.

Рис. 6.6 (б) підтверджує висновок про головний внесок бічного компонента середньоквадратичного зміщення ад-атома Al до загального зміщення атомів віддачі Al. У той самий час, $R_{x,ad}^2$, практично, дорівнює повному R_x^2 , хоч відносні внески цих компонентів середньоквадратичного зміщення виявляються незначними порівняно з внесками інших компонентів зміщення. Таким чином, падіння іонів у 4-у область і також в інші бічні області (2-у, 3-ю і 6-у) створюють нормальні переміщення атома Al, практично, тільки до ад-прошарку, що може бути пов'язано з великим розміром атома Al порівняно з атомом Ni і його видавлюванням з ґратки кристала.

Рис. 6.6(с) показує головний внесок нормального R_x^2 атома Al у повне середньоквадратичне зміщення внутрішніх атомів Al на прикладі атома Al, розташованого в другому атомному прошарку. Подібна тенденція внесків нормального R_x^2 у загальне середньоквадратичне зміщення атома Al має місце у 1-й області бомбардування для всіх внутрішніх прошарків, особливо у прошарках, де кількість атомних переміщень атома Al уздовж напрямку [100], у відповідності з матрицею переміщень атома Al, має локальну більшість. Для інших

областей бомбардування внесок нормального R_x^2 у повне середньоквадратичне зміщення для внутрішніх атомів Al є менш важливим, однак, модельна статистика цих внутрішніх переміщень атомів залишається недостатньою для конкретніших висновків.

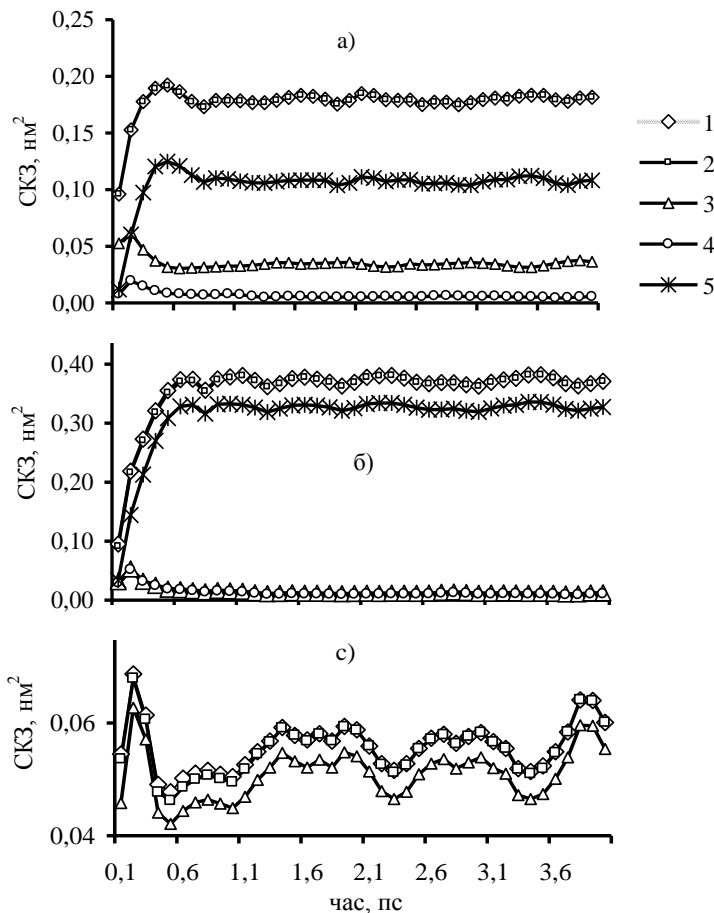


Рис. 6.6. Компоненти СКЗ атома Al, що розміщується початково в першому прошарку кристала Ni (100) при падінні іонів у області 1 (а) і 4 (б), а також для атома Al у випадку його початкового розташування в другому прошарку для області 1 (в). Енергія іонів Ar — 100 еВ. Температура кристала Ni — 300 К

У наступних підрозділах розглядається застосування отриманих молекулярно-динамічних результатів для обчислення зовнішніх параметрів моделі іонного перемішування домішки Al у кристалі Ni.

6.7. Коефіцієнти перемішування і середні швидкості дрейфу

Залежності від глибини кристала коефіцієнтів іонного перемішування компонентів 1 і 2 $D_{1,2}(x)$ (1.38) і відповідних середніх швидкостей дрейфу атомів віддачі $V_{1,2}(x)$ (1.39) були розраховані з використанням модельних функцій атомних переміщень $F_{1,2}(x,z)$ для обох домішкових і матричних атомів і представлені, відповідно, на рис. 6.7 і рис. 6.8.

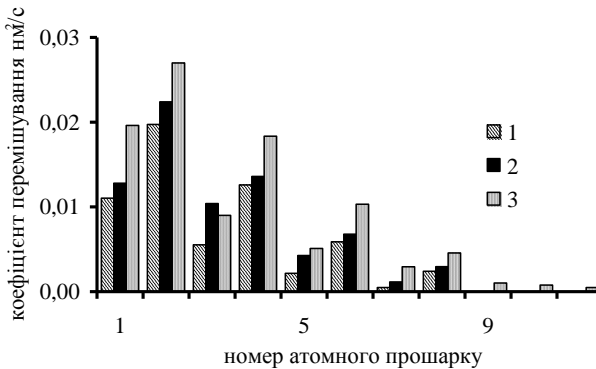


Рис. 6.7. Залежність коефіцієнтів іонного перемішування домішки Al $D_1(x)$ (діаграми 1 і 2) і матричних атомів Ni $D_2(x)$ (діаграма 3) від глибини кристала. На діаграмі 1 враховані переміщення атомів Al при падінні іона тільки у область 1, а на діаграмі 2 – в області 1–6. Стрибки атомів до ад-прошарку не були враховані

Функція атомних переміщень $F_1(x,z)$ атомів Al була сформована в двох варіантах: 1) для першої області падіння іонів у відповідності з рівнянням (6.4), але без суми за j від 1 до μ і без врахування домішкових атомних переміщень у складі послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ (див. рис. 6.7 і 6.8, діаграма 1); 2) для 1–6-ї області падіння іонів з урахуванням суми за j від 1 до μ і з включенням переміщень атомів Al у складі послідовностей зіткнень заміщення атомів у напрямках $\langle 110 \rangle$ (рис. 6.7 і 6.8, діаграма 2). Функція атомних переміщень $F_2(x,z)$ атомів Ni була розрахована з використанням

однокомпонентного кристала Ni (100) у випадку падіння іонів у область 1 (рис. 6.7 і 6.8, діаграма 3). Атомні переміщення до ад-прошарку не були взяті до уваги в обох функціях: домішкової і матричній, оскільки подібно до робіт [97, 246, 247, 379, 380] припускалося, що ад-атоми на поверхні кристала Ni при температурі 300 K відпалюються швидше, ніж наступний іон впаде у цю область. Результати, що представлені на рис. 6.7 і 6.8, були розраховані для густини іонного пучка $I = 1,25 \cdot 10^{15}$ іонів/(см² · с).

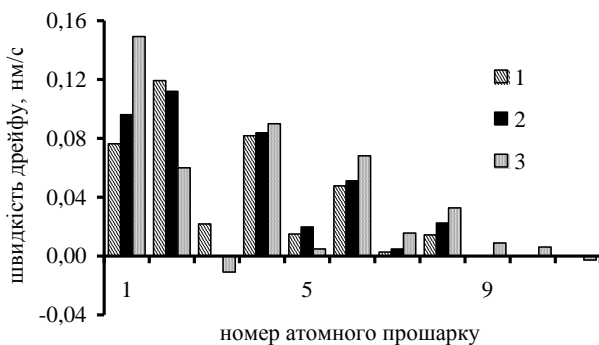


Рис. 6.8. Залежність середньої швидкості дрейфу атомів віддачі домішки Al $V_1(x)$ (діаграми 1 і 2) і матричних атомів Ni $V_2(x)$ (діаграма 3) від глибини кристала. На діаграмі 1 враховані переміщення атомів при падінні іона тільки у область 1, а на діаграмі 2 – в області 1–6. Стрибки атомів до ад-прошарку не були враховані

Як видно з рис. 6.7, обидва значення коефіцієнтів перемішування домішкових і матричних атомів однаково осцилюють у 1–8-му атомних прошарках на фоні їх поступового зменшення з глибиною від прошарку до прошарку, починаючи з другого атомного прошарку. Осциляції коефіцієнта іонного перемішування в кристалі Ni не були ідентифіковані глибше 8-го атомного прошарку, оскільки отримана статистика виявилася недостатньою. Як показано в [311] для кристала Ni при температурі 0 K і обговорювалося в п. 6.6, ці осциляції пов'язані з появою послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямку [100] і з осциляціями кількості атомних переміщень N_{ws} від прошарку до прошарку. Очевидно, в температурному кристалі послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямку [100] втрачають енергію інтенсивніше, ніж при температурі 0 K [434], і значення коефіцієнтів іонного перемішування глибше 8-го атомного прошарку недостатньо інтенсивні

при енергії іонів 100 еВ для кількісних висновків у цій області на основі отриманої статистики. Атомні переміщення, що були ініційовані падінням іонів у 1-у область, дають головний внесок у повний коефіцієнт іонного перемішування. При більш детальному вивченні, внески атомних переміщень атома Al, що виникають при падінні іонів у області 2–6, виявилися значними у 3-му, 5-му і 7-му атомних прошарках з меншими значеннями коефіцієнтів іонного перемішування. Це дає, в середньому, приблизно 50% від загального значення коефіцієнта іонного перемішування в цих атомних прошарках, у той час, як внески атомних переміщень у коефіцієнт іонного перемішування, які ініціюються падінням іонів у області 2–6 є незначними у 1-му, 2-му, 4-му, 6-му і 8-му атомних прошарках з більшими значеннями коефіцієнтів іонного перемішування (див. діаграми 1 і 2 на рис. 6.7). Ця залежність пов'язана з переважним внеском довгих атомних переміщень через два прошарки і коротких атомних переміщень до наступного атомного прошарку для коефіцієнта іонного перемішування, відповідно, в 1, 2, 4, 6, 8-му і 3, 5, 7-му атомних прошарках. Падіння іонів у області 2–6 призводять, практично, тільки до коротких атомних переміщень атома Al. Таким чином, їх внесок у значення коефіцієнта іонного перемішування не виявився значним для атомних прошарків, де довгі переміщення відіграють головну роль. Присутність атома Al в кристалі Ni істотно не перекручує осциляції коефіцієнта перемішування, що добре відповідає результатам молекулярно-динамічного моделювання [435], яке було виконане для сплаву CuAu. У [435] був отриманий висновок, що легкі атоми Cu, які брали участь у розвитку відповідної послідовності атомних зіткнень заміщення, практично, не перекручують послідовність зіткнень заміщення важких атомів Au.

Залежні від глибини кристала абсолютні значення коефіцієнта іонного перемішування домішки Al виявилися трохи меншими порівняно з відповідними значеннями для матриці, за винятком 3-го і 5-го атомних прошарків (див. рис. 6.7). Обидва типи послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках [100] і $\langle 110 \rangle$, а також випадкові переміщення поблизу поверхні були взяті до уваги у коефіцієнті іонного перемішування атомів Al. Однак, внески послідовностей атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ у повний коефіцієнт іонного перемішування для домішкових атомів Al є незначними у 6-му і 8-му атомних прошарках (~ 5% і 15%, відповідно), у той час, як відповідні внески у 5-му і 7-му прошарках становлять ~ 22% і 43% від загальної кількості переміщень. Абсолютні ж значення коефіцієнта іонного перемішування в 5-му і 7-му атомних прошарках є значно меншими порівняно зі значеннями коефіцієнта іонного

перемішування в 6-му і 8-му атомних прошарках. З іншого боку, статистика атомних переміщень атомів Al у напрямках $\langle 110 \rangle$ розвитку відповідних послідовностей зіткнень заміщення атомів (відповідно, 8, 5, 3, 6 атомних стрибків з 5-го, 6-го, 7-го і 8-го атомних прошарків), може бути використана тільки для оцінювальних висновків.

Як показано на рис. 6.8, осциляції середньої швидкості дрейфу атомів віддачі мають такий же характер, як і осциляції коефіцієнта іонного перемішування завдяки наведеним вище причинам. Осциляції швидкостей дрейфу атомів домішки і матриці в усіх трьох випадках (див. рис. 6.8) знаходяться в задовільній відповідності між собою. Внесок атомних переміщень, що виникають у разі падіння іона в області 2–6, у середню швидкість дрейфу атомів віддачі виявився незначним (див. рис. 6.8) порівняно зі внеском атомних переміщень при падінні іонів у 1-у область. Результати показують, що середня швидкість дрейфу атомів віддачі Al є додатною в усіх атомних прошарках за винятком 3-го прошарку, де швидкість дрейфу домішки дорівнює нулю (див. рис. 6.8, діаграму 2). Середня швидкість дрейфу атомів віддачі Ni є також додатною в усій області перемішування, за винятком 3-го атомного прошарку, де вона має неістотне від'ємне значення.

6.8. Конвективний потік атомів у каскаді

Ефективна швидкість домішкових атомів віддачі $U(x)$ від глибини представлена на рис. 6.9 (а, б) (див. (6.2)) для випадків падіння іонів у області 1—6 з урахуванням переміщень атомів Al у напрямках $\langle 110 \rangle$ розвитку послідовностей атомних зіткнень заміщення (а) і падіння іонів лише в область 1 без урахування переміщень домішкових атомів Al у складі послідовностей зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ (б). Швидкість розпилення поверхні не була включена до $U(x)$. Функція $U(x)$ дорівнює нулю в однокомпонентних матеріалах. Швидкість розпилення поверхні, що показана на рис. 6.9 штрихованою лінією, а також компоненти швидкості $U(x)$, що були записані як різниця похідних від коефіцієнтів перемішування компонентів 1 і 2 $((d(D_1(x) - D_2(x))/dx)$, діаграма 2 на рис. 6.9) і різниця швидкостей дрейфу атомів віддачі компонентів 1 і 2 $((V_2(x) - V_1(x))$, діаграма 3 на рис. 6.9), також представлені на рис. 6.9 (а, б) для з'ясування їх відносної ролі в $U(x)$. Моделювання показало, що залежність функції $d(D_1(x) - D_2(x))/dx$ від глибини кристала має характер регулярної зміни знаку в 2 — 6-му атомних прошарках, за винятком 1-го прошарку.

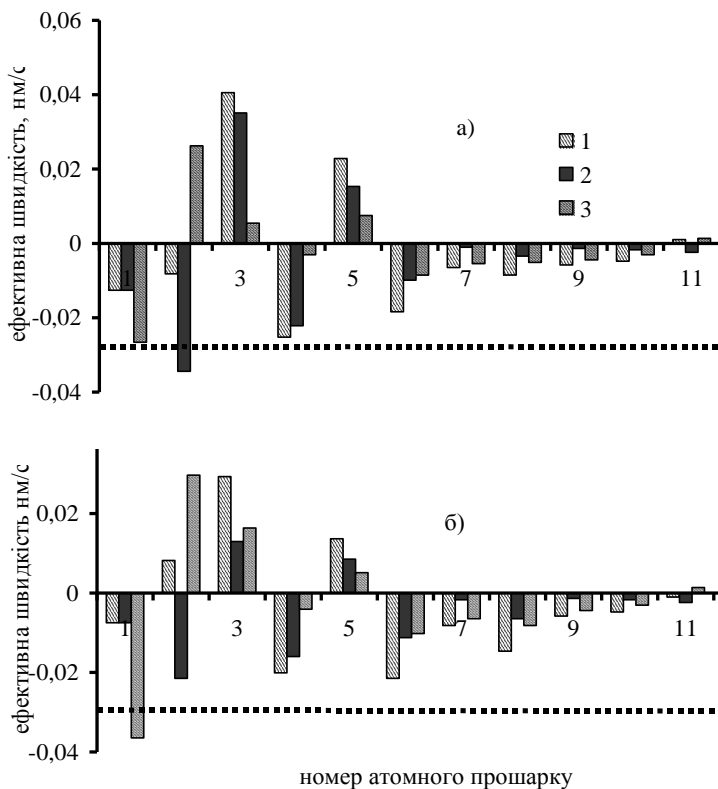


Рис. 6.9. Залежність ефективної швидкості домішкових атомів віддачі від глибини $U(x)$ для випадків падіння іонів у області а) 1-6 і б) 1. Діаграма 1: ефективна швидкість $U(x)$; діаграма 2: компонента $d(D_1(x) - D_2(x))/dx$; діаграма 3: компонента $V_2(x) - V_1(x)$. Штрихована лінія – швидкість розпилення кристала Ni (100). Стрибки атомів до ад-прошарку не враховувалися

Спостерігається також подібна регулярна залежність для різниці середніх швидкостей дрейфу атомів віддачі в 3–6-му атомних прошарках. Очевидно, періодичність цих функцій з глибиною кристала пов'язана з осциляціями коефіцієнтів іонного перемішування і середніх швидкостей дрейфу атомів віддачі, що обговорювалося вже в п. 6.7 і пов'язано з періодичністю кристалічної ґратки. Як результат, ефективна швидкість $U(x)$ також має змінно-знакову закономірність із зростанням глибини кристала в 2–6-му атомних прошарках у випадку падіння іонів у області 1–6 (див. рис. 6.9 (а)). Якісно, таку саму закономірність має

функція $U(x)$ у випадку падіння іонів тільки у 1-у область, за винятком 2-го атомного прошарку. Більше того, знаки ефективної швидкості домішкових атомів $U(x)$ і обох її компонентів виявилися однаковими у 2-му та 8-му атомних прошарках. Значення функції $U(x)$ глибше 8-го атомного прошарку не обговорюється, оскільки не моделювалася присутність атома Al на такій глибині. У першому атомному прошарку функція $U(x)$ була встановлена рівною похідній від різниці коефіцієнтів іонного перемішування, оскільки різниця середніх швидкостей дрейфу атомів віддачі була формально від'ємною, що не має фізичного сенсу з точки зору перенесення маси у перший атомний прошарок у межах моделі. Сума швидкостей $U(x) + V_f$ являється значно меншою в 3-му і 5-му атомних прошарках порівняно із сумою величин у сусідніх прошарках, хоч вона має різні знаки в цих випадках. Таким чином, перенесення маси в цих областях кристала має місце, практично, тільки завдяки дифузійному компоненту загального, викликаного бомбардуючими іонами, потоку маси.

Як видно з рис. 6.9 (а, б), поверхнєве значення функції $U(x)$ в обох випадках (для областей бомбардування 1–6 і для області 1) утворює додатковий конвективний потік домішкових атомів Al до поверхні $C_I(0,t) \cdot U(0)$, який збільшує потік маси $C_I(0,t) \cdot V_f$ до 1-го прошарку, що пов'язано із розпиленням поверхні. У випадку падіння іонів у області 1–6 цей потік є більшим, ніж для випадку бомбардування кристала іонами тільки у області 1. В обох випадках, що моделюються, додатковий потік атомів до поверхні призводить до значної зміни поверхневої домішкової концентрації і, як результат, до зміни величин пошарових профілів, які будуть обговорюватися в наступному підрозділі. У відношенні функції $U(x)$ якісна різниця між випадками падіння іонів у області 1–6 і тільки у область 1 проявляється тільки у прошарку 2, де швидкість $U(x)$ має різні знаки, але ця різниця не призводить до критичних змін пошарових профілів концентрації домішкового маркера, що буде показано в наступному підрозділі. Зростання від'ємної величини $U(0)$ у першому атомному прошарку і поява від'ємної величини $U(x)$ у другому прошарку при більш детальному моделюванні перемішень атома Al з 1-го і 2-го прошарків при падінні іонів у області 1–6, можна пояснити тим, що домішкові атоми великого «розміру», порівняно з атомами матриці, мають тенденцію переміщуватися з приповерхневих прошарків на поверхню [435]. Це справедливо для домішки Al у кристалі Ni [166, 429] і не суперечить нашим моделюванням двошарової системи прошарку Ni на поверхні матриці Al [311, 312], де було отримано значний потік атомів Al з підкладки на поверхню двошарового кристала.

В обох випадках падіння іонів розв'язання рівняння (6.1) при відсутності переважного розпилення ($Y_1 = Y_2$) показало, що від'ємне значення ефективної швидкості $U(x)$ в 1-му і 2-му (для випадків падіння іонів у області 1–6) прошарках призводить до створення локального концентраційного мінімуму в 2-му прошарку (миттєва різниця між поверхневою і мінімальною концентраціями домішки становить, приблизно, 0,01 відносної одиничної початкової концентрації маркера) в процесі пошарового профілювання маркера, починаючи з моменту часу, коли максимум концентраційного профілю достатньо близько наближається з глибини кристала до поверхні. Цей ефект проявляється після розпилення приблизно 6–7 матричних атомних прошарків (у початковий момент часу маркер був розташований в 13-му атомному прошарку, що знаходиться за межами області перемішування) і продовжується в процесі розпилення приблизно 1,0–1,5 атомних прошарків. Мінімум концентрації домішкових атомів Al добре видно завдяки незначній ролі дифузійно-подібного доданка в рівнянні (6.1). Оскільки різниця концентрацій домішкових атомів у 1–5-му атомних прошарках є незначною протягом часу існування мінімуму домішкової концентрації, дифузійний доданок не може компенсувати приповерхневі концентраційні зміни домішки, що виникають завдяки внеску ефективної швидкості атомів домішки у каскаді зіткнень $U(x)$. У випадку переважного розпилення домішкових атомів Al ($Y_1 > Y_2$), цей ефект не спостерігається завдяки його маскуванню концентраційними змінами атомів домішки біля поверхні кристала, що пов'язані з переважним розпиленням атомів Al, порівняно з матричними атомами Ni.

6.9. Профілювання домішкового маркера Al в матриці Ni

У початковому тонкому прошарку товщиною $d/2$, використаному, як початкова умова, для розв'язання рівняння іонного перемішування (6.1), відносна домішкова концентрація дорівнювала 10^{-3} . У цьому випадку дифузійний потік залежав тільки від коефіцієнта перемішування домішкового компонента $D_I(x)$, а також від ефективної швидкості домішки $U(x)$ (див. рівняння (6.2)), які не залежать від відносної концентрації домішкових атомів $C_I(x,t)$. Розрахункові концентраційні профілі домішкового маркера були перенормовані на одиницю початкової відносної концентрації для спрощення інтерпретації результатів розрахунків. Пошарові профілі концентрації були отримані шляхом чисельного розв'язання рівняння (6.1) і представлені на рис. 6.10 (а, б) для випадків падіння іонів у області 1–6 (а) і падіння іонів тільки у область 1 (б). В обох випадках, криві 1 і 2 є

результатом розрахунку при відсутності переважного розпилення $Y_1 = Y_2$, у той час, як криві 3 і 4 належать до випадку, коли переважне розпилення атомів Al враховується у відповідності з описаним у п. 6.1 молекулярно-динамічним моделюванням. Розрахунки поширення профілю пошарових концентрацій $C_I(0, V_f \cdot t)$ у відповідності до обчислювальних формул [4, 259] при $Y_1 = Y_2$ наведені в таблиці 6.3.

Таблиця 6.3 Поширення маркера Al в Ni іонами Ar з енергією 100 еВ при 300 К (нм²):

Області падіння	1	2	3	4
1–6	1,35	0,88	0,51	0,47
1	1,01	0,8	0,48	0,46

Примітка. *) випадки 1–4 знаходяться у відповідності з кривими 1–4 на рис. 6.10 (а, б).

Таким чином, врахування ефективної швидкості домішкових атомів у каскадах $U(x)$ призводить до зростання поширення концентраційного пошарового профілю в $\sim 1,55$ рази, що показано на рис. 6.10 (а), і в 1,26 рази, як показано на рис. 6.10 (б) (див. криві 1 і 2), а також до помітного зростання максимальної домішкової концентрації профілю. У випадку врахування переважного розпилення $Y_1 > Y_2$ (криві 3 і 4), більша ймовірність розпилення атомів Al є головним фактором перекидання профілю серед приповерхневих процесів перенесення маси. Вплив потоку $U(x) \cdot C_I(x, t)$ на поширення пошарових профілів глибини атомів Al виглядає в цьому випадку незначним (див. таблицю 6.3) порівняно з впливом переважного розпилення атомів Al для пунктів а) і б). Результати поширення, що наведені в таблиці 6.3 і на рис. 6.10 показують, що врахування падіння іонів у області 2–6 призводить до помітної зміни профілів глибини тільки у випадку $Y_1 = Y_2$ і $U(x) \neq 0$. Випадок відсутності переважного розпилення $Y_1 = Y_2$ при $U(x) = 0$ показує слабку реакцію результатів на врахування областей падіння іонів 2–6. Криві 3 і 4 на рис. 6.10 (а, б) теж показують слабку залежність значення поширення профілю і його форми при $Y_1 > Y_2$ від того, чи враховані області падіння 2–6. Таким чином, переміщення домішкових атомів, що ініціюються падінням іонів у області 2–6, демонструють значний вплив тільки у випадку $Y_1 = Y_2$ при $U(x) \neq 0$, хоча врахування цих областей бомбардування не призводить до появи якісно нових концентраційних ефектів.

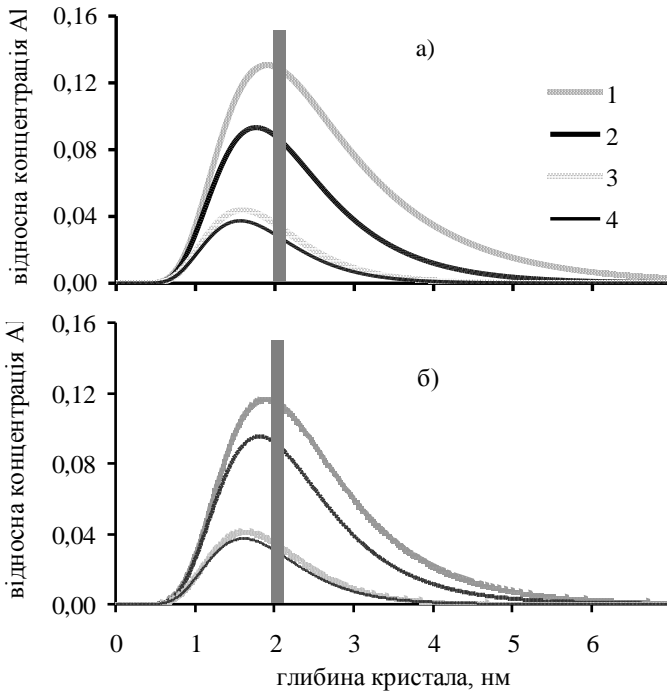


Рис. 6.10. Пошарові профілі концентрації $C_1(0, V_f t)$ домішки Al (домішковий прошарок низької концентрації початково був розташований в 13-му атомному прошарку кристала Ni) представлені для випадків падіння іонів Ag у області а) 1–6, б) 1. Крива 1 – $Y_1 = Y_2$, $U(x) \neq 0$; крива 2 – $Y_1 = Y_2$, $U(x) = 0$; крива 3 – $Y_1 \neq Y_2$, $U(x) \neq 0$; крива 4 – $Y_1 \neq Y_2$, $U(x) = 0$

У відповідності до [287], низькоконцентраційний хвіст пошарового профілю маркера має експоненціальну залежність від часу розпилення $C_1(0, V_f t) \sim \exp(-V_f t / \lambda)$, де λ - глибина загасання заднього фронту концентраційного профілю маркера. Усі представлені на рис. 6.10 профілі відповідають цій закономірності. Розрахункові глибини затухання показують таку ж залежність, як і поширення від коефіцієнта розпилення і ефективної швидкості атомів віддачі $U(x)$. При врахуванні переважного розпилення ($Y_1 > Y_2$) ефективна швидкість $U(x)$, практично, не відіграє істотної ролі у формуванні значення параметра глибини затухання ($\lambda = 0,53 - 0,55$ нм), у той час, як при $Y_1 = Y_2$ глибина

затухання збільшується в 1,45 рази при врахуванні ефективної швидкості $U(x)$ (1,2 нм і 0,84 нм). Необхідно підкреслити, що представлені розрахунки задовільно відповідають наближенню, запропонованому Кінгом, Пураніком і МакДональдом [287], а саме, при $\Phi \rightarrow \infty$, $\lambda \rightarrow R/r$, де Φ – потік іонів, R – глибина, де втрати енергії іона ефективно дорівнюють нулю і $r = Y_1/Y_2$. Насправді, у нашому випадку $r \approx 3$, а R , очевидно, однаковий для випадків $Y_1=Y_2$ і $Y_1>Y_2$. Таким чином, у відповідності до цього наближення $\lambda(r=1) / \lambda(r=3) = 3$, але наші оцінки, що засновані на розв'язанні рівняння (6.1), дають $\lambda(r=1) / \lambda(r=3) \approx 2.3$. Ми пов'язуємо розбіжність між аналітичною оцінкою і результатами молекулярно-динамічного моделювання з тим фактом, що область перемішування не співпадає з областю енергетичних іонних втрат при таких низьких енергіях іонів (~ 100 eV), що не враховується аналітичною теорією (див. [311, 444]).

В обох випадках при врахуванні переважного розпилення і без нього, ефективний конвективний потік $U(x) \cdot C_I(x,t)$ має вплив на максимальну домішкову концентрацію і на положення заднього фронту концентраційного профілю глибини. Положення переднього фронту і, особливо, його низькоконцентраційної частини, практично, незалежне від потоку домішкових атомів у каскаді $U(x) \cdot C_I(x,t)$. Різна чутливість переднього і заднього фронтів пошарового профілю концентрації до значення потоку $U(x) \cdot C_I(x,t)$ пов'язана з різними механізмами формування цих фронтів профілю. Передній фронт функції $C_I(0, V_f \cdot t)$ формується завдяки наближенню концентраційного профілю з глибини кристала переважно за рахунок розпилювання поверхні. Задній фронт профілю формується під впливом таких приповерхневих транспортних процесів перенесення маси, як розпилення і перемішування [261, 287]. Домішкова приповерхнева концентрація неістотно менша порівняно з максимальною концентрацією в часовому інтервалі, коли задній фронт функції $C_I(0, V_f \cdot t)$ ще формується. Таким чином, від'ємне значення швидкості $U(x)$ в першому прошарку призводить до зростання поверхневої домішкової концентрації (швидкість переміщення поверхні, що розпилюється, також від'ємна) і до зростання поширення завдяки переміщенню заднього концентраційного фронту в глибину мішені.

Спеціально виконані чисельні розрахунки рівняння (6.1) для випадку нульового значення функції $U(x)$ тільки у 1-му атомному прошарку за відсутністю переважного розпилення показали, практично, повний збіг спеціально отриманого профілю концентрації з концентраційним пошаровим профілем при ефективній швидкості $U(x) = 0$ в усій області перемішування. Випадок, коли ефективна швидкість домішкових атомів $U(x)$ дорівнює нулю в усьому кристалі, за

винятком тільки 1-го атомного прошарку і при відсутності переважного розпилення $Y_1 = Y_2$, дає кінцевий результат у вигляді профілю, який, практично, збігається з профілем, розрахованим у випадку $U(x) \neq 0$ в усьому кристалі. Ці результати підтверджують наведений вище висновок про критичний вплив поверхневого значення швидкості $U(x)$ на поширення і максимальну величину концентраційного профілю. Таким чином, зокрема в розріджених розчинах, врахування внеску ефективної швидкості $U(x)$ в побудову пошарового концентраційного профілю, особливо, у випадках незначного впливу переважного розпилення, може допомогти поясненню експериментальних результатів для поширення профілів і ефективності перемішування [16, 272, 276, 299, 300, 304].

Висновки до глави 6:

У главі 6 розвинуто двоетапний метод розрахунку іонного перемішування при низьких енергіях іонів з використанням МД моделювання у випадку двокомпонентної системи з низькою концентрацією домішки заміщення.

Відповідно до виразу (6.7) для ефективного коефіцієнта розпилення домішки, що будується на основі коефіцієнтів розпилення відокремленого атома Al для областей падіння іона 1–6 і коефіцієнта розпилення однокомпонентного кристала Ni, домішка Al є легкорозпилювальним компонентом порівняно з матрицею Ni в цій моделі, що співпадає з літературними даними моделювання і експерименту [254, 255].

Падіння іона в 1-у, 2-у і 4-у області (див. рис. 6.1) призводить до максимальних значень генерації ад-атомів і поверхневих вакансій. Падіння іонів у область 1 дає головний внесок у загальну генерацію об'ємних вакансій, що виникають завдяки переміщенню атома Al з його початкової позиції. Нестабільні міжвузлові атоми Al були ідентифіковані тільки на ранній стадії каскаду зіткнень (~ 1 пс).

Кількість атомних переміщень атомів Al з їх початкових комірок Вігнера – Зейтца, загальне середньоквадратичне зміщення атомів віддачі і його компонентів у напрямку [100] для випадку падіння іонів у область 1 демонструють періодичну залежність з глибиною кристала на фоні, практично, монотонного зменшення своїх значень, починаючи з другого атомного прошарку, що пов'язується з періодичністю кристалічної ґратки.

Значення обох коефіцієнтів перемішування домішкових і матричних атомів, а також відповідні середні швидкості дрейфу атомів віддачі змінюються періодично від прошарку до прошарку таким же

чином у 1–8-му атомних прошарках на фоні поступового зменшення їх значень з глибиною кристала, починаючи з 2-го атомного прошарку. Головний внесок у значення цих параметрів роблять переміщення атомів у напрямку [100], включно з послідовностями атомних зіткнень заміщення в напрямку [100], у той час, як послідовності атомних зіткнень заміщення в напрямках $\langle 110 \rangle$ створюють тільки мінімальний або порівняний з послідовностями заміщення в напрямку [100] внесок у числові залежності цих параметрів від номеру атомного прошарку.

Функція $U(x)$ утворює додатковий потік домішкових атомів до поверхні в 1-му прошарку в обох випадках падіння іонів у області 1–6 і тільки в область 1. Врахування цього потоку призводить до значного зростання поширення маркера і максимальної концентрації пошарового профілю, особливо, при відсутності переважного розпилення. Поверхнєве значення функції $U(x)$ відіграє головну роль у цьому ефекті. Вплив функції $U(x)$ на пошаровий профіль концентрації при врахуванні переважного розпилення є мінімальним, зокрема, в системі розрідженої домішки Al в кристалі Ni. Більше того, різниця між пошаровими профілями домішкового маркера Al для областей падіння іонів 1–6 і області 1 при врахуванні переважного розпилення є незначною.

Результати моделювання, а також їх обговорення і висновки, що наводяться у главі 6, надруковані в [450–452].

ЗАКЛЮЧЕННЯ

Розвиток обчислювальної техніки та атомних багаточастинкових напівемпіричних потенціалів взаємодії призвів до широкого використання методів комп'ютерного моделювання у кількісному опису процесів модифікації поверхні твердого тіла іонними пучками та відповідного перенесення маси компонентів мішені. Метод молекулярної динаміки посідає значне місце серед інших спеціальних методів комп'ютерного моделювання іонних процесів завдяки високій якості розрахунків нанопроцесів, що супроводжують атомні каскади зіткнень. У комплексі з аналітичними методами опису взаємодії іонів з твердими поверхнями цей метод дозволяє отримувати кількісні результати макроскопічних концентраційних змін, зберігаючи коректність опису всіх етапів еволюції каскадів зіткнень. Слід підкреслити, що зараз розгляд плоских поверхонь під дією іонних пучків стає все більше «класикою» наукових досліджень. Однак, навіть при аналізі результатів моделювання неоднорідних неплоских поверхонь під дією енергетичних пучків, що є одним з головних сучасних дослідницьких трендів, раніше встановлені для плоских поверхонь залежності можуть стати у пригоді. Центральною проблемою при цьому залишається накопичення необхідної статистики результатів, що пов'язано з відносно низькою розрахунковою швидкістю методу молекулярної динаміки.

Основою монографії є ідея двоетапного методу розрахунку низькоенергетичного іонного перемішування для випадку однокомпонентних кристалів. На першому етапі відбувається моделювання функції атомних переміщень та коефіцієнта розпилення, тоді як на другому – обчислення коефіцієнта іонного перемішування, середньої швидкості дрейфу атомів віддачі, а також розв'язання рівняння іонного перемішування з модельними параметрами. Також показана коректність двоетапного розрахунку низькоенергетичного іонного перемішування для кристалів з низькою концентрацією реальної домішки заміщення. Наведено алгоритм побудови модельної функції атомних переміщень домішкових атомів. Як ілюстрація можливостей цього підходу розглядається нетривіальний результат, де розв'язання транспортного рівняння іонного перемішування при температурах кристалів Cu і Ni до $\sim 0,4 T_m$ з модельною функцією атомних переміщень показує зменшення у напрямку пучка іонів поширення профілю монопрошарку атомів, які балістично ідентичні матричним атомам кристала (псевдомаркер), зі зростанням температури навколишнього середовища.

Попутно виявлена загасаюча з глибиною періодичність пошарових значень коефіцієнта іонного перемішування атомів Ni в кристалі Ni і домішкових атомів Al в кристалі Ni, а також періодичність кількості переміщень каскадних атомів з глибиною в кристалі Al при температурах до 300 К. При температурах $\sim 0,4\text{--}0,5 T_m$ періодичність коефіцієнта іонного перемішування атомів Ni в кристалі Ni не спостерігається, а періодичність переміщень атомів у кристалі Al спостерігається тільки в декількох прошарках. У випадку однокомпонентних кристалів було показано, що зростання температури супроводжується збільшенням кількості каскадних атомів, середньоквадратичного зміщення каскадних атомів та кількості стрибків атомів до поверхні. Середньоквадратичне зміщення каскадних атомів зростає переважно в напрямках, паралельних поверхні, що бомбардується.

Розвинуто метод розрахунку радіаційно-прискореної дифузії для низьких енергій іонів з моделюванням координатно-залежної функції генерації точкових дефектів. Показано, що стік дефектів на поверхні впливає на поширення пошарового профілю концентрації псевдомаркера. З позицій моделювання каскадів зіткнень розглянуто внески вакансійного і міжвузлового механізмів, а також іонного перемішування в масоперенесення поблизу поверхні в кристалах Cu і Ni при температурах $\sim 0,4 T_m$. При бомбардуванні іонами з енергіями ~ 100 eV приповерхнева область кристала (1–4 атомні прошарки) збагачується вакансіями завдяки генерації ад-атомів і послідовностей атомних зіткнень заміщення, тоді як міжвузлові атоми знаходяться на глибині, яка дорівнює середній довжині послідовностей атомних зіткнень заміщення (5-й–12-й атомні прошарки). При цьому, розмір області перемішування значно перевищує глибину розподілу пружних втрат іонів, що виправдовує застосування методу молекулярної динаміки для розрахунків параметрів моделей іонного перемішування. Було також показано, що генерації поверхневих дефектів (ад-атомів і поверхневих вакансій) є більшими, а об'ємних дефектів (міжвузлових атомів і об'ємних вакансій) – меншими в однокомпонентних кристалах при температурах $\sim 0,4 T_m$ порівняно з генераціями відповідних дефектів при нульовій температурі.

Також доведено, що кристали Al/Ni і Ni/Al, в яких поверхневий атомний прошарок складався з атомів Al або Ni, показують більшу кількість переміщень атомів через межу розподілу компонентів при іонному бомбардуванні, ніж однокомпонентні кристали Al і Ni між відповідними прошарками, що пов'язано зі зменшенням потенціальної енергії цих двошарових систем при обміну атомами різних компонентів при 0 К. Генерації поверхневих вакансій і ад-атомів у кристалах Al/Ni і

Ni/Al є більшими, ніж в кристалах Al і Ni. Кількість стабільних міжвузлових атомів у підкладинці кристала Al/Ni є значно меншою порівняно з кількістю стабільних міжвузлових атомів у кристалі Ni завдяки зниженню ймовірності утворення послідовностей атомних зіткнень заміщення.

У монографії наведено результати, де використовувалися авторські молекулярно-динамічні комп'ютерні програми, які модифікувалися у відповідності з конкретними постановками проблем, що вирішувалися, та програми чисельного розв'язання рівнянь масоперенесення.

У порівнянні з існуючими методами розрахунку масоперенесення при іонному бомбардуванні, як то чисто аналітичними методами [4–6, 14, 66, 82, 83, 225, 260–264, 271–273, 346, 347, 352–355], методами однокрокового динамічного моделювання [7, 291, 292–297], двоетапними методами із застосуванням комп'ютерного моделювання в наближенні парних взаємодій [235–237], двоетапний метод розрахунку іонного перемішування та радіаційно-прискореної дифузії з використанням молекулярно-динамічного методу дає більш коректні результати, особливо при низьких енергіях іонів, однак, вимагає значно більше часу для проведення розрахунків. Наведені в монографії розрахунки генерації дефектів і атомних переміщень у низькоенергетичних каскадах є суттєвим доповненням до існуючих даних. Частково і оціночно авторські результати порівнювалися з результатами досліджень Бетца та ін. для Cu [97], Урбасека та ін. для Cu, Pt, Si, Au, Ni та двошарових систем [94, 101, 124, 204, 308, 309, 425, 426, 449], Конопльова та ін. для Si [11, 245], Гілмора і Спраге для Cu, Ag, Au та двошарових систем [164–167], Сміта, Кінга і Беардморе для Ni [248], які виконували дослідження у тому ж напрямку.

Слід відзначити, що недостатня статистика розрахунків атомних переміщень відчувалася на великих глибинах кристалів (8–12-й атомні прошарки) при розрахунках коефіцієнта розпилення кристала Al при різних температурах і енергії іонів Ar 100 eV, а також впливала на кінцевий розподіл стабільних міжвузлових атомів за глибиною. Оціночними являються кількості точкових дефектів на початкових стадіях каскадів, оскільки модельні критерії ідентифікації точкових дефектів абсолютно точно працюють тільки в стабільному кристалі. Оціночним є також значення ефективності стоку поверхневих дефектів у моделі радіаційно-прискореної дифузії.

Таким чином, розроблені і розвинуті розрахункові методи перенесення маси при низькоенергетичному іонному бомбардуванні і різних температурах кристалів з мінімумом добре тестованих зовнішніх

параметрів дають можливість отримувати кількісно і напівкількісно достовірні результати, які можуть бути використані для опису низькоенергетичних іонних процесів, а саме, напилювання тонких плівок і пошарового аналізу домішкових нанопрошарків. Розроблені двоетапні методи можуть бути використані, як тестові програми для отримання значень зовнішніх параметрів швидких розрахункових схем перемішування, як наприклад, дифузійного наближення зі сталим в області перемішування коефіцієнтом іонного перемішування. Числові значення генерації дефектів і атомних каскадних переміщень можуть бути використані для табуляції відповідних величин і застосовані в інших розрахунках. Крім того, деякі результати моделювання, як наприклад, відпалювання точкових дефектів у каскадах у двошарових системах можуть бути корисними для розробки радіаційно-стійких матеріалів.

На завершення, автор висловлює глибоку подяку усім, хто з нами, а також тим, хто на жаль вже пішов від нас, свого часу були по-різному причетні і зробили свої значні внески до цієї роботи, а також до відповідних досліджень, дискусій та обговорень на різних заходах, а саме Бажину А.І., Бетцу Г., Корнічу В.Г., Теплому С.В., Пінчуку В.П., Кінгу Б.В., Находкіну М.Г., Горбаню О.М., Фельдману Е.П., Ченакіну С.П., Черепіну В.Т., Ковалю А.Г., Юрасовій В.Є., Машковій Є.С., Сошнікову І.П., Самойлову В.М., Шульзі В.І., Запорожченко В.І., Фаупелу Ф., Войтусику С.С., Степановій М.Г., колективам кафедр фізики твердого тіла та фізичного матеріалознавства Донецького національного університету і обчислювальної математики Запорізького національного технічного університету (зараз НУ “Запорізька політехніка”), усім фахівцям, з якими автору свого часу доводилося спілкуватися по проблемам взаємодії іонів з поверхнями твердих тіл, що наведені у роботі, а також усім, хто виявив до неї інтерес. Особливу подяку автор висловлює Потаповій Ю.А. і Широколаду Д.В., які взяли на себе важку працю щодо оформлення та детальної перевірки тексту монографії на кінцевій стадії її підготовки до друку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Atomic and ion collisions in solids and at surfaces. Theory, simulation and applications / R. Smith, M. Jakas, D. Ashworth, B. Owen, M. Bowyer, I. Chakarov, R. Webb. – Cambridge . : Cambridge University Press, 1997. – 310 p.
2. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск I: Пер. с англ. / Р. Бериш, П. Зигмунд, М. Робинсон, Х. Андерсен, Х. Бай, Х. Розендал; под. ред. Р. Бериша; М. : Мир, 1984. – 336 с.
3. **Littmark, U.** The Theory of Recoil Mixing in Solids / U. Littmark, W. O. Hofer // Thin Film and Depth Profile Analysis. – Berlin : Springer-Verlag, 1984. – P. 159–200.
4. **Sigmund, P.** Distortion of depth profiles during sputtering. I. General description of collisional mixing / P. Sigmund, A. Gras-Marti // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1980. – Vol. 168, № 1–3. – P. 389–394.
5. **Sigmund, P.** Theoretical aspects of atomic mixing by ion beams / P. Sigmund, A. Gras-Marti // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1981. – Vol. 182/183, № 1–3. – P. 25–41.
6. **Gras-Marti, A.** Distortion of depth profiles during ion bombardment. II. Mixing mechanisms / A. Gras-Marti, P. Sigmund // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1981. – Vol. 180, № 1. – P. 211–219.
7. **Экштайн, В.** Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела: Пер. с англ. / В. Экштайн. – М.: Мир. – 1995. – 320 с.
8. **Hou, M.** Comparisons between statistics of low energy collision cascades generated by full molecular dynamics and by its binary collision approximation / M. Hou, Z. Y. Pan // Radiat. Eff. and Def. in Solids. – 1997. – Vol. 142. – P. 483–495.
9. **Bergsaker, H.** A comparison of TRIM and molecular dynamics in calculating the backscattering yield of carbon incident on graphite / H. Bergsaker, F. Lama, R. Smith, R. P Webb // Vacuum. – 1993. – Vol. 44, № 3/4. – P. 341–344.
10. **Smith, R.** Computational models in atomic collision studies / R. Smith, R. P. Webb // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 67, № 1. – P. 373–383.
11. **Konoplev, V.** Bulk atomic relocations in low-energy collision cascades in silicon: molecular dynamics versus Monte Carlo simulations / V. Konoplev, M. J. Caturla, I. Abril, A. Gras-Marti // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1994. – Vol. 90, № 1–3. – P. 363–368.
12. **Dominguez-Vazquez, J.** Relaxation of metals: A model based on MD calculations / J. Dominguez-Vazquez, A. M. C. Perez-Martin,

- J. J. Jimenez-Rodriguez, A. Gras-Marti // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1998. – Vol. 135, N1. – P. 214–218.
13. **Dominguez-Vazquez, J.** Molecular dynamics study of the relaxation processes induced by defects in metals / J. Dominguez-Vazquez, E. P. Andribet, A. M. C. Perez-Martin, J. J. Jimenez-Rodriguez // Surf. and Coating Technol. – 1996. – Vol. 83. – P. 55–59.
 14. **Collins, R.** Factors determining radiation-induced mixing at interfaces / R. Collins // Radiat. Eff. – 1986. – Vol. 98. – P. 1–18.
 15. **Averback, R. S.** Fundamental aspects of ion beam mixing / R. S. Averback // Nucl. Instr. and Meth. B. Fundamental aspects of ion beam mixing 1986. – Vol. 15, N2. – P. 675–687.
 16. **Cheng, Y. – T.** Thermodynamic and fractal geometric aspects of ion-solid interactions / Y. – T. Cheng // Materials Science Reports. – 1990. – Vol. 5. – P. 45–97.
 17. **Miotello, A.** Ion-beam mixing with chemical guidance. IV. Thermodynamic effects without invoking thermal spikes / A. Miotello, R. Kelly // Surf. Sci. – 1994. – Vol. 314. – P. 275–288.
 18. **Wehner, G. K.** Sondenuntersuchungen am stabilisierten Quecksilberdampfboogen / G. K. Wehner // Annalen der Physik. – 1942. – B. 41, F. 5. – P. 501–519.
 19. **Wehner, G. K.** Sputtering at Low Ion Velocities / G. K. Wehner, G. Medicus // J. Appl. Phys. – 1954. – Vol. 25, № 6. – P. 698–704.
 20. **Wehner, G. K.** Controlled Sputtering of Metals by Low-Energy Hg Ions / G. K. Wehner // Physical Review. – 1956. – Vol. 102, № 3. – P. 690–704.
 21. **Anderson, G. S.** Atom Ejection Patterns in Single-Crystal Sputtering / G. S. Anderson, G. K. Wehner // J. Appl. Phys. – 1960. – Vol. 31, № 12. – P. 2305–2313.
 22. **Laegreid, N.** Sputtering Yield of Germanium in Rare Gases / N. Laegreid, G. K. Wehner, B. Meckel // J. Appl. Phys. – 1959. – Vol. 30, № 3. – P. 374–377.
 23. **Laegreid, N.** Sputtering Yields of Metals for Ar⁺ and Ne⁺ Ions with Energies from 50 to 600 eV / N. Laegreid, G. K. Wehner // J. Appl. Phys. – 1961. – Vol. 32, № 3. – P. 365–368.
 24. **Rosenberg, D.** Sputtering Yields for Low Energy He⁺, Kr⁺ and Xe⁺ Ion Bombardment / D. Rosenberg, G. K. Wehner // J. Appl. Phys. – 1962. – Vol. 33, № 5. – P. 1842–1845.
 25. **Wehner, G. K.** Mercury Ion Beam Sputtering of Metals at Energies 4–15 keV / G. K. Wehner, D. Rosenberg // J. Appl. Phys. – 1961. – Vol. 32, № 5. – P. 887–890.

26. **Stuart, R. V.** Sputtering Yield at Very Low Bombarding Ion Energies / R. V. Stuart, G. K. Wehner // *J. Appl. Phys.* – 1962. – Vol. 33, № 7. – P. 2345–2352.
27. **Schmitt, R. A.** Measurement of the Range of Recoil Atoms / R. A. Schmitt, R. A. Sharp // *Phys. Rev. Letters.* – 1958. – Vol. 1. – P. 12–19.
28. **Seitz, F.** On the Disordering of Solids by Action of Fast Massive Particles / F. Seitz // *Disc. Far. Soc.* – 1949. – Vol. 5. – P. 271–285.
29. **Тельковский, В. Г.** Вторично электронная эмиссия под действием положительных ионов и нейтральных частиц / В. Г. Тельковский // *Известия АН СССР, сер. Физическая.* – 1956. – Т. 20, № 10. – С. 1179–1183.
30. Я. М. Фогель. Физик. Учитель. Человек. /сост.: Н. А. Азаренков, В. В. Бобков, В. В. Грицына, Р. П. Слабоспицкий. - Харьков : Вид-во “Підручник НТУ ХПІ”, 2010.- 308 с.
31. А.Ф. Тулинов / Под ред. Е.А.Крыловой. – М.: Серия “Выдающиеся ученые физического факультета МГУ”. – Физический факультет МГУ, 2014.- 152 с.
32. **Машкова Е.С., Молчанов В.А.** Угловое распределение быстрых частиц, покидающих металлическую поверхность при облучении ее ионным пучком / Е.С. Машкова, В.А. Молчанов // *Доклады АН СССР.* – - 1962. – - Т. 146:3. – - С. 585-587.
33. **Машкова, Е. С.** Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел / Е. С. Машкова, В. А. Молчанов. – М.: Атомиздат, 1980. – 256 с.
34. **Colligon, J. S.** Ion bombardment of metal surfaces / J. S. Colligon // *Vacuum.* – 1961. – Vol. 11, № 5/6. – P. 272–281.
35. **Плешивцев, Н. В.** Распыление меди ионами водорода с энергией до 50 кэВ / Н. В. Плешивцев // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 1959. – Т. 37, Вып. 5(11). – С. 1233–1240.
36. **Плешивцев, Н. В.** Катодное распыление / Н. В. Плешивцев. – М.: Атомиздат, 1968. – 343 с.
37. **Юрасова, В. Е.** О направленном выходе частиц при распылении монокристалла меди пучками ионов с энергией до 50 кэВ / В. Е. Юрасова, Н. В. Плешивцев, И. В. Орфанов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 1959. – Т. 37, Вып. 4 (10). – С. 966–972.
38. **Арифов, У. А.** Взаимодействие атомных частиц с поверхностью металла / У. А. Арифов. – Ташкент: Из-во АН Узбекской ССР, 1961. – 329 с.

39. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск II: Пер. с англ. / Р. Бериш, Г. Бетц, Г. Венер, И. Рот, П. Таунсенд, Д. Картер, Б. Навиншек, Д. Виттон, Б. Шерцер; под ред. Р. Бериша.; М. : Мир, 1986. – 486 с.
40. Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел: Сб. науч. статей: Пер. с англ.; под ред. Е. С. Машковой. – М.: Мир, 1989. – 349 с.
41. **Betz, G.** Alloy sputtering / G. Betz // Surf. Sci. – 1980. – Vol. 92, № 1. – P. 283–309.
42. **Betz, G.** Sputtering of insulators / G. Betz, W. Husinsky // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1988. – Vol. 32, № 1. – P. 331–340.
43. **Линник, С. П.** Распыление двухкомпонентных соединений и сплавов / С. П. Линник, В. Е. Юрасова // Поверхность. – 1982. – № 3. – С. 25–37.
44. **Черепин В.Т.** Экспериментальная техника в физическом материаловедении / Киев: Техника, 1968. – 280 с.
45. **Бор, Н.** Прохождение атомных частиц через вещество: Пер. с англ. / Н. Бор. – М.: Иностранная литература, 1950. – 149 с.
46. **Lindhard, J.** Integral equations governing radiation effects / J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, P. V. Thomsen // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. – 1963. – Vol. 33, № 10. – P. 1–42.
47. **Lindhard, J.** Range concepts and heavy ion ranges / J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiott // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. – 1963. – Vol. 33, № 14. – P. 1–42.
48. **Lindhard, J.** Approximation method in classical scattering by screened coulomb fields / J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. – 1968. – V. 36, № 10. – P. 1–32.
49. **Фирсов, О. Б.** Качественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях / О. Б. Фирсов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1959. – Т. 36, Вып. 5. – С. 1517–1523.
50. **Теплова, Я. А.** Торможение многозарядных ионов в твердых и газообразных средах / Я. А. Теплова, В. С. Николаев, И. С. Дмитриев, Л. Н. Фатеева // ЖЭТФ. – 1962. – Т. 42, Вып. 1. – С. 44–60.
51. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей (теория, метод расчета, таблицы) / А. Ф. Буренков, Ф. Ф. Комаров, М. А. Кумахов, М. М. Темкин. – Минск: Изд-во БГУ им. В. И. Ленина, 1980. – 350 с.
52. **Буренков, А. Ф.** Пространственные распределения энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений в твердых телах /

- А. Ф. Буренков, Ф. Ф. Комаров, М. М. Темкин. – М. : Энергоатомиздат, 1985. – 248 с.
53. **Ziegler, J. F.** The stopping and range of ions in solids, the stopping and range of ions in matter / J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark. – New York: Pergamon, 1985. – 316 p.
 54. **Sigmund, P.** Stopping power in perspective / P. Sigmund // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1998. – Vol. 135. – P. 1–15.
 55. **Andersen, H. H.** Computer simulations of atomic collisions in solids with emphasis on sputtering / H. H. Andersen // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18, № 4–6. – P. 321–343.
 56. **Biersack, J. P.** Computer simulation of sputtering / J. P. Biersack // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 27, № 1. – P. 21–36.
 57. **Betz, G.** Energy and angular distributions of sputtered particles / G. Betz, K. Wien // International J. Mass Spectrometry and Ion Processes. – 1994. – Vol. 140. – P. 1–110.
 58. **Lehmann, C.** On the Mechanism of Sputtering / C. Lehmann, P. Sigmund // Phys. Stat. Sol. – 1966. – Vol. 16, № 2. – P. 507–511.
 59. **Sigmund, P.** Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets / P. Sigmund // Phys. Rev. B. – Vol. 184, № 2. – P. 383–416.
 60. **Sigmund, P.** Collision Theory of Displacement Damage, Ion Ranges, and Sputtering / P. Sigmund // Rev. Roum. Phys. – 1972. – Vol. 17, № 7. – P. 823–870.
 61. **Sigmund, P.** Collision Theory of Displacement Damage / P. Sigmund // Rev. Roum. Phys. – 1972. – Vol. 17, № 8. – P. 969–1000.
 62. **Sigmund, P.** Collision Theory of Displacement Damage / P. Sigmund // Rev. Roum. Phys. – 1972. – Vol. 17, № 9. – P. 1079–1106.
 63. **Kelly, R.** The surface binding energy in slow collisional sputtering / R. Kelly // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18. – P. 388–398.
 64. **Andersen, H. H.** Sputtering from atomic-collision cascades / H. H. Andersen // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1988. – Vol. 33. – P. 466–473.
 65. **Vicanek, M.** Depth of origin and angular spectrum of sputtered atoms / M. Vicanek, J. J. Jimenez-Rodriguez, P. Sigmund // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 36. – P. 124–136.
 66. **Oliva, A.** Comments on collisional sputtering theory / A. Oliva, // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 19. – P. 101–108.
 67. **Sigmund, P.** Alloy sputtering at high fluence: preferential sputtering and competing effects / P. Sigmund, A. Oliva // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1993. – Vol. 82. – P. 269–282.

68. **Urbassek, H. M.** Sputtering of molecules / H. M. Urbassek // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18. – P. 587–595.
69. **Falcone, G.** Corrections to the collisional sputtering yield / G. Falcone, R. Kelly, A. Oliva // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18. – P. 399–401.
70. **Плетнев, В. В.** Линейные ограниченные каскады в теории распыления аморфных веществ / В. В. Плетнев, Д. С. Семенов, В. Г. Тельковский // Поверхность. – 1983. – № 5. – С. 5–14.
71. **Pletnev, V. V.** On the theory of binary alloy sputtering by light ions / V. V. Pletnev, D. S. Semenov, V. G. Tel'kowsky // Radiat. Effects. – 1984. – Vol. 83. – P. 113–119.
72. **Плетнев, В. В.** Коэффициенты распыления поверхности твердых тел легкими ионами / В. В. Плетнев, В. Г. Тельковский // Атомная энергия. – 1990. – Т. 69, Вып. 2. – С. 104–106.
73. **Louis, E.** Evolution of ion beam damage in solids, and the fractal concept / E. Louis, A. Gras-Marti, F. Guinea // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18, № 1. – P. 402–406.
74. **Mahan, J. E.** A simplified collisional model of sputtering in the linear cascade regime / J. E. Mahan, A. A. Vantomme // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1997. – Vol. 15, № 4. – P. 1976–1989.
75. **Плешивцев, Н. В.** Физика воздействия ионных пучков на материалы / Н. В. Плешивцев, А. И. Бажин. – М. : Вузовская книга, 1998. – 392 с.
76. **Tsunoyama, K.** Sputtering of alloys / K. Tsunoyama // Proc. International Engineering Congress. – Kyoto (Japan). – 1983. – Vol. 3. – P. 1941–1950.
77. **Kelly, R.** On the problem of whether mass or chemical binding is more important to bombardment induced compositional changes in alloys and oxides / R. Kelly // Surf. Sci. – 1980. – Vol. 100, № 1–3. – P. 85–107.
78. **Kelly, R.** An attempt to understand preferential sputtering / R. Kelly // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1978. – Vol. 149, № 1. – P. 553–558.
79. **Kelly, R.** A summary of the theory of the preferential sputtering of alloys / R. Kelly, D. E. Harrison // Mat. Sci. and Eng. – 1985. – Vol. 69. – P. 449–455.
80. **Sigmund, P.** Mechanisms and theory of physical sputtering by particle impact / P. Sigmund // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1988. – Vol. 27, № 1. – P. 1–20.
81. **Sigmund, P.** Alloy and isotope sputtering P. Sigmund, N. Q. Lam // Proc. International Conf. on Fundamental Processes in Sputtering of Atoms and Molecules. – Copenhagen (Denmark). – 1992. – P. 255–349.

82. **Галкуте, Л. Й.** Физическая модель распыления многокомпонентных мишеней ионами низких энергий / Л. Й. Галкуте, Л. Й. Пранявичюс // Литовский физический сборник. – 1986. – Т. 26, № 5. – С. 559–566.
83. **Galkute, L.** Model of preferential sputtering of multicomponent materials induced by low energy ions / L. Galkute, L. Pranevicius, G. Zubauskas // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 21, № 1. – P. 46–48.
84. **Kang, H. J.** Monte Carlo simulation of sputtering in Au-Cu alloys simulation with formation of altered layer included / H. J. Kang, R. Shimizu // Surf. Sci. – 1986. – Vol. 169, № 2/3. – P. 337–346.
85. **Kang, H. J.** Monte Carlo simulation approach to sputtering in multi-component targets / H. J. Kang, E. Kawatoh, R. Shimizu // Japanese J. Appl. Phys. – 1985. – Vol. 24, № 11. – P. 1409–1419.
86. **Никифоров, В. И.** Моделирование распыления многокомпонентных твердых тел ионной бомбардировкой. Основные физические модели: Препр. / В. И. Никифоров, В. П. Павленко, Р. П. Слабоспицкий, И. В. Хирнов; АН УССР. ХФТИ, ЦНИИ атоминформ; N39. – М. :1987. – 10 с.
87. **Reynolds, G. W.** A model of the surface binding energy for fcc copper-nickel alloy / G. W. Reynolds // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1983. – Vol. 209–210, № 1–2. – P. 57–61.
88. **Shymonski, M.** Sputtering mechanisms of compound solids / M. Shymonski // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1982. – Vol. 194, № 1–3. – P. 523–531.
89. **Husinsky, W.** Cr atoms sputtered from different matrices / W. Husinsky, P. Wurz, B. Strehl, G. Betz // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18, № 4–6. – P. 452–457.
90. **Абрайтис, В.** Механизм образования активированных атомов на поверхности облучаемых ионами твердых тел / В. Абрайтис // Радиоэлектроника. – 1986. – Т. 22, № 2. – С. 111–122.
91. **Восилюс, И. И.** Активирующее действие ионного облучения на процесс распыления твердых тел / И. И. Восилюс, Л. Й. Пранявичюс // Поверхность. – 1986. – № 6. – С. 149–151.
92. **Мотавех, Х. А.** Влияние вакансий на поверхностный потенциальный барьер монокристалла меди / Х. А. Мотавех, М. В. Кувакин // Поверхность. – 1984. – № 11. – С. 75–77.
93. **Steinbruchel, C. A.** A simple formula for low-energy sputtering yields / C. A. Steinbruchel // Appl. Phys. A. – 1985. – Vol. 36. – P. 37–42.

94. **Gades, H.** Pair versus many-body potentials in atomic emission processes from a Cu surface H / Gades, H. M. Urbassek // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 69. – P. 232–241.
95. **Haile, J. M.** Molecular Dynamics Simulation – Elementary Methods / J. M. Haile. – New York: Wiley-Interscience, 1992. – 386 p.
96. **Reed, M. S. C.** Investigation of artifacts due to periodic boundary conditions / M. S. C. Reed, K. M. Flurchick // Computer Physics Communications. – 1996. – Vol. 95. – P. 39–46.
97. **Betz, G.** Molecular Dynamics study of sputtering of Cu (1 1 1) under Ar ion bombardment / G. Betz, R. Kirchner, W. Husinsky, F. Rudenauer H. M. Urbassek // Radiat. Eff. and Defects in Solids. – 1994. – Vol. 130–131. – P. 251–266.
98. **Harrison, D. E., Jr.** Sputtering Models – A Synoptic View / D. E. Harrison, Jr. // Radiat. Effects. – 1983. – Vol. 70. – P. 1–64.
99. Nose, S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods / S. Nose // J. Chem. Phys. – 1984. – V. 81, № 1. – P. 511–519.
100. **Berendsen, H. J. C.** Molecular dynamics with coupling to an external bath / H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. Gunsteren, A. DiNola, J. R. Naak // J. Chem. Phys. – Vol. 81, № 8. – P. 3684–3690.
101. **Karetta, F.** Molecular-dynamics simulations of bulk and surface damage production in low-energy Cu→Cu bombardment / F. Karetta, H. M. Urbassek // J. Appl. Phys. – 1992. – Vol. 71, № 11. – P. 5410–5418.
102. **Ландау, Л. Д.** Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1974. – 752 с.
103. **Ercolessi, F.** A molecular dynamics primer / F. Ercolessi // International School for Advanced Studies – Trieste (Italy). – 1997. – P. 1–51.
104. **Gibson, J. B.** Dynamics of Radiation Damage / J. B. Gibson, A. N. Goland, M. Migram, G. H. Vineyard // Phys. Rev. – 1960. – Vol. 120, № 4. – P. 1229–1253.
105. **Harrison, D. E., Jr.** Low energy ion impact phenomena on single crystal surfaces / D. E. Harrison, Jr., P. W. Kelly, B. J. Garrison, N. Winograd // Surf. Sci. – 1978. – Vol. 76. – P. 311–322.
106. **Harrison, D. E., Jr.** Computer simulation of Sputtering /, Jr., N. S. Levy, J. P. Johnson, III, H. M. Effron // Journ. Appl. Phys. – 1968. – Vol. 39, № 8. – P. 3742–3761.
107. **Garrison, B. J.** Atomic and molecular ejection from ion-bombarded reacted single-crystal surfaces / B. J. Garrison, N. Winograd, D. E. Harrison, Jr. // Phys. Rev. B. – 1978. – Vol. 18, № 11. – P. 6000–6010.

108. **Агранович, В. М.** Проблемы моделирования радиационных повреждений в кристаллах / В. М. Агранович, В. В. Кирсанов // УФН. – 1976. – Т. 118, Вып. 1. – С. 3–51.
109. **Беспалова, Н. С.** Моделирование на ЭВМ выхода атомов из поверхностных слоев кристалла Н. С. Беспалова, Л. Г. Гурвич // ДАН СССР. – 1972. – Т. 202, № 4. – С. 804–805.
110. **Eltekov, V. A.** Computer calculation of secondary particle emission near the curie point of nickel / V. A. Eltekov, V. N. Saymon, V. E. Yurasova, H. A. Motaweh // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1986. – Vol. 13, № 1–3. – P. 443–448.
111. **Самойлов, В. Н.** Моделирование распыления атомов компонент назад и на прострел при ионной бомбардировке монокристаллической и квазиаморфной двухкомпонентных мишеней / В. Н. Самойлов, В. А. Эльтеков, Б. Фритч, Н. Г. Ананьев // Вестн. Моск. Ун-та, Сер. 3, Физика. Астрономия. – 1987. – Т. 28, № 6. – С. 65–69.
112. **Самойлов, В. Н.** Эффект фокусировки распыленных атомов в поверхностном поле монокристалла. Появление эффекта для грани (1 1 1) монокристалла меди: Препр. / В. Н. Самойлов; МГУ. Физический ф-т; 41. – М.: 1987. – 5 с.
113. **Самойлов, В. Н.** К вопросу о корректности описания углового распределения распыленных атомов в рамках аналитических моделей распыления аморфных мишеней / В. Н. Самойлов // Известия АН. Серия физическая. – 1990. – Т. 54, № 7. – С. 1283–1287.
114. **Shapiro, M. H.** Simulation of isotopic mass effects in sputtering / M. H. Shapiro, P. K. Haff, T. A. Tombrello, D. E. Harrison, Jr. // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1985. – Vol. 12. – P. 137–145.
115. **Sigmund, P.** Round robin computer simulation of ejection probability in sputtering / R. Sigmund et al. // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 36, № 1 – P. 110–123.
116. **Lo, D. Y.** Theoretical studies of ion bombardment: Many-body interactions / D. Y. Lo, T. A. Tombrello, M. H. Shapiro, B. J. Garrison, N. Winograd, D. E. Harrison, Jr. // J. Vac. Sci. Tech. A. – 1988. – Vol. 6, № 3. – P. 708–711.
117. **Shapiro, M. H.** Molecular dynamics simulation of nonlinear effects in sputtering – Cu (1 0 0) targets / M. H. Shapiro, T. A. Tombrello // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1990. – Vol. 48. – P. 557–561.
118. **Smith, R.** Simulation of keV particle bombardment of covalent materials: an investigation of the yield dependence on incidence angle /

- R. Smith, D. E. Harrison, Jr., B. J. Garrison // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1990. – Vol. 46. – P. 1–11.
119. **Betz, G.** Low primary ion fluence dependence of single crystal sputtering: a molecular dynamics study / G. Betz, M. J. Pellin, J. W. Burnett, D. M. Gruen // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1991. – Vol. 58. – P. 429–437.
 120. **Shapiro, M. H.** Simulation of sputtering from liquid Cu targets / M. H. Shapiro, D. Y. Lo, P. K. Haff, T. A. Tombrello // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1986. – Vol. 13. – P. 348–352.
 121. **Samoilov, V. N.** Computer study of the surface mechanism of preferential sputtering of two-component solids. Ion beam analysis of surface composition in low dose regime / V. N. Samoilov, A. E. Tatur, V. I. Yastrzhembsky // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 118. – P. 509–516.
 122. **Samoilov, V. N.** Contribution of the surface mechanism to sputtering of (0 0 1) Ni: molecular dynamics computer simulation studies / V. N. Samoilov, A. E. Tatur, N. A. Kovaleva, A. E. Kozhanov // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1999. – Vol. 153. – P. 319–325.
 123. **Samoilov, V. N.** Computer simulation studies of preferential sputtering of Ni₄Mo (0 0 1) single crystal / V. N. Samoilov, A. E. Tatur, V. I. Yastrzhembsky // Radiat. Effects and Defects in Solids. – 1997. – Vol. 142. – P. 323–336.
 124. **Urbassek, H. M.** Molecular-dynamics simulation of sputtering / H. M. Urbassek // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 122, № 1. – P. 427–441.
 125. **Antonov, S. L.** Sputtering of Ni₄Mo single crystals: computer simulation and experiment / S. L. Antonov, I. N. Ivanov, A. A. Orlikovsky, V. Yu. Vasil'chenko, V. E. Yurasova // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1990. – Vol. 48, № 1–2. – P. 553–556.
 126. **Samoilov, V. N.** Mechanisms of focusing in sputtering: molecular dynamics computer simulation study / V. N. Samoilov, O. S. Korsakova, E. L. Rodionova, A. M. Nikitin, V. I. Bachurin // Ion beam modification of materials, edited by J. S. Williams, R. G. Elliman, M. C. Ridgway. – Amsterdam-Lausanne, Elsevier, 1996. – P. 710–714.
 127. **Shapiro, M. H.** Computer simulation of sticking and penetration of copper atoms on copper substrates / M. H. Shapiro, T. A. Tombrello // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18, № 1–2. – P. 355–359.
 128. **Biersack, J. K.** Sputtering studies with the Monte Carlo program TRIM.SP / J. K. Biersack, W. Eckstein // Appl. Phys. A. – 1984. – Vol. 34, № 2. – P. 73–94.

129. **Robinson, M. T.** Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation / M. T. Robinson, I. M. Torrens // *Phys. Rev. B.* – 1974. – Vol. 9, № 12. – P. 5008–5024.
130. **Robinson, M. T.** Binding energy effects in cascade evolution and sputtering / M. T. Robinson // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1996. – Vol. 115. – P. 549–553.
131. **Robinson, M. T.** The temporal development of collision cascades in the binary-collision approximation / M. T. Robinson // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1990. – Vol. 48. – P. 408–413.
132. **Averback, R. S.** Fundamental aspects of defect production in solids / R. S. Averback, M. Ghaly // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1997. – Vol. 127/128. – P. 1–11.
133. **Averback, R. S.** Atomic displacement processes in irradiated metals / R. S. Averback // *J. Nucl. Mater.* – 1994. – Vol. 216. – P. 49–62.
134. **Robinson, M. T.** Attractive interaction potentials and the binary collision approximation / M. T. Robinson // *Radiat. Effects and Defects in Solids.* – 1997. – Vol. 141. – P. 1–19.
135. **Caturla, M-J.** Ion-beam processing of silicon at keV energies: a molecular-dynamics study / M-J. Caturla, T. D. de la Rubia, L. A. Marques, G. H. Gilmer // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54, № 23. – P. 16683–16695.
136. **Trushin, Yu. V.** Computer simulation of the sputtering of polyatomic multilayered materials with consideration of the spatial overlapping of the collision cascades / Yu. V. Trushin, B. J. Ber, V. S. Kharlamov, E. E. Zhurkin // *J. Nucl. Mater.* – 1996. – Vol. 233–237. – P. 991–995.
137. **Ber, B. J.** Computer simulation of ion sputtering of polyatomic multilayered targets / B. J. Ber, V. S. Kharlamov, Yu. A. Kudrjavitsev, A. V. Merkulov, Yu. V. Trushin, E. E. Zhurkin // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1997. – Vol. 127/128, № 1. – P. 286–290.
138. **Ohashi, T.** Molecular dynamics simulation of non-equilibrium low energy (1–100 eV) ion beam deposition processes / T. Ohashi, K. Miyake, K. Ohashi // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1994. – Vol. 91, № 2–3. – P. 593–596.
139. **Ohashi, T.** Molecular dynamics simulations of low energy atomic collisions between an atom and a substrate: effect of incident angle and energy / T. Ohashi, K. Miyake, K. Ohashi // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1997. – Vol. 121, № 1. – P. 40–43.
140. **O'Connor, D. J.** Comparison of theoretical and empirical interatomic potentials / D. J. O'Connor, J. P. Biersack // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1986. – Vol. 15, № 2/3. – P. 14–19.

141. **Brenner, D. W.** Gas-surface reactions: molecular dynamics simulations of real systems / D. W. Brenner, B. J. Garrison // *Advances in Chemical Physics*, edited by Lawley K. P. – New York: John Wiley & Sons Ltd. – 1989. – P. 281–333.
142. **Smith, R.** Simulation of the dynamics of ion-bombarded surfaces on a desktop computer / R. Smith, D. E. Harrison, Jr. // *Computers in Physics*. – 1989. – Jul/Aug. – P. 41–48.
143. **Finnis, M. W.** A simple empirical N-body potential for transition metals / M. W. Finnis, J. E. Sinclair // *Phil. Mag. A*. – 1984. – Vol. 50. – P. 45–55.
144. **Daw, M. S.** Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals / M. S. Daw, M. I. Baskes // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – Vol. 50, № 17. – P. 1285–1288.
145. **Daw, M. S.** Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M. S. Daw, M. I. Baskes // *Phys. Rev. B*. – 1984. – Vol. 29, № 12. – P. 6443–6453.
146. **Foiles, S. M.** Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt and their alloys / S. M. Foiles, M. I. Baskes, M. S. Daw // *Phys. Rev. B*. – 1986. – Vol. 33, № 12. – P. 7983–7991.
147. **Хакен Х.** Квантовополевая теория твердого тела: Пер. с англ. / Х. Хакен. – М.: Наука, 1980. – 342 с.
148. **Tersoff, J.** New empirical model for the structural properties of silicon / J. Tersoff // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – Vol. 56, № 6. – P. 632–635.
149. **Tersoff, J.** New empirical approach for the structure and energy of covalent systems / J. Tersoff // *Phys. Rev. B*. – 1988. – Vol. 37, № 12. – P. 6991–7000.
150. **Tersoff, J.** Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties / J. Tersoff // *Phys. Rev. B*. – 1988. – Vol. 38, № 14. – P. 9902–9905.
151. **Tersoff, J.** Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon / J. Tersoff // *Rhys. Rev. Lett.* – 1988. – Vol. 61, № 25. – P. 2879–2882.
152. **Tersoff, J.** Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems / J. Tersoff // *Phys. Rev. B*. – 1989. – Vol. 39, № 8. – P. 5566–5568.
153. **Brenner, D. W.** Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films / D. W. Brenner // *Phys. Rev. B*. – 1990. – Vol. 42, № 15. – P. 9458–9471.

154. **Smith, R.** A semi-empirical many-body interatomic potential for modelling dynamical processes in gallium arsenide / R. Smith // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 67, № 2/3. – P. 335–339.
155. **Stillinger, F. H.** Computer simulation of local order in condensed phases of silicon / F. H. Stillinger, T. A. Weber // Phys. Rev. B. – 1985. – Vol. 31, № 8. – P. 5262–5271.
156. **Chatterjee, R.** Molecular dynamics simulation study of molecular ejection mechanisms: keV particle bombardment of C₆H₆/Ag {111} / R. Chatterjee, Z. Postawa, N. Winograd, B. J. Garrison // J. Phys. Chem. – 1999. – Vol. 103. – P. 151–163.
157. **Colla, T. J.** Effect of energy density on cluster formation from energized metals / T. J. Colla, H. M. Urbassek // Computational Materials Science. – 1996. – Vol. 6. – P. 7–14.
158. **Colla, T. J.** Experiment and simulation of cluster emission from 5 keV Ar → Cu / T. J. Colla, H. M. Urbassek, A. Wucher, C. Staudt, R. Heinrich, B. J. Garrison, C. Dandachi, G. Betz // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1998. – Vol. 143, № 1–3. – P. 284–297.
159. **Hartman, J. W.** The formation of clusters during large sputtering events / J. W. Hartman, M. H. Shapiro, T. A. Tombrello // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 124, № 1. – P. 31–39.
160. **Zaric, R.** Molecular dynamics simulations to explore the effect of projectile size on the ejection of organic targets from metal surfaces / R. Zaric, B. Pearson, K. D. Krantzman, B. J. Garrison // International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes. – 1998. – Vol. 174, № 1. – P. 155–166.
161. **Belykh, S. F.** Nonlinear effects in cluster emission from solids induced by molecular ion impacts / S. F. Belykh, I. S. Bitensky, D. Mullajanov, U. Kh. Rasulev // Nucl. Instr. and Meth. B – 1997. – Vol. 129, № 2–3. – P. 451–458.
162. **Chenakin, S. P.** Angular and energy effects in sputtering of hexadecanethiol monolayers self-assembled on Ag (1 1 1) / S. P. Chenakin, B. Heinz, H. Morgner // Surf. Sci. – 1999. – Vol. 436. – P. 131–140.
163. **Chenakin, S. P.** Substrate effect in sputtering of self-assembled monolayers: hexadecanethiol on Au (1 1 1) and Ag (1 1 1) / S. P. Chenakin, B. Heinz, H. Morgner // Surf. Sci. – 1999. – Vol. 421. – P. 337–352.
164. **Gilmore, C. M.** Molecular-dynamics simulation of the energetic deposition of Ag thin films / C. M. Gilmore, J. A. Sprague // Phys. Rev. B. – 1991. – Vol. 44, № 16. – P. 8950–8957.

165. **Gilmore, C. M.** Molecular-dynamics study film growth with energetic Ag atoms / C. M. Gilmore, J. A. Sprague // *J. Vac. Sci. Technol. A.* – 1992. – Vol. 10, № 4. – P. 1597–1599.
166. **Gilmore, C. M.** Molecular-dynamics simulation of film-substrate interface mixing in the energetic deposition of fcc metals / C. M. Gilmore, J. A. Sprague // *Thin Solid Films.* – 1996. – Vol. 272. – P. 244–254.
167. **Gilmore, C. M.** Computer modeling the deposition of nanoscale thin films / C. M. Gilmore, J. A. Sprague // *NanoStructured Materials.* – 1997. – Vol. 9. – P. 643–650.
168. **Kubo, M.** Molecular dynamics simulation for ultrafine gold particles deposited on metal oxides / M. Kubo, A. Stirling, R. Miura, R. Yamauchi, A. Miyamoto // *Catalysis Today.* – 1997. – Vol. 36. – P. 143–151.
169. **Zhang, Z.** Atomic Processes in the Early Stage of Thin-Film Growth / Z. Zhang, M. G. Lagally // *Science.* – 1997. – Vol. 276. – P. 377–383.
170. **Robbmond, A.** Ion-beam assisted deposition of thin molybdenum films studied by molecular dynamics simulation / A. Robbmond, B. J. Thijsse // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1997. – Vol. 127/128, № 1–2. – P. 273–277.
171. **Hensel, H.** Simulation of the influence of energetic atoms on Si homoepitaxial growth / H. Hensel, H. M. Urbassek // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58, № 4. – P. 2050–2054.
172. **Perez, A.** Cluster assembled materials: a novel class of nanostructured solids with original structures and properties / A. Perez, P. Melinon, V. Dupuis, P. Jensen, B. Prevel, J. Tuaille, L. Bardotti, C. Martet, M. Treilleux, M. Broyer, M. Pellarin, J. L. Vaille, B. Palpant, J. Lerme // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 1997. – Vol. 30. – P. 709–721.
173. **Zhou, X. W.** A molecular dynamics study of nickel vapor deposition: temperature, incident angle, and adatom energy effects / X. W. Zhou, R. A. Johnson, H. N. G. Wadley // *Acta mater.* – 1996. – Vol. 45, № 4. – P. 1513–1524.
174. **Hou, M.** A molecular dynamics evidence for enhanced cluster beam epitaxy / M. A. Hou // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1998. – Vol. 135, № 1. – P. 501–506.
175. **Childs, A. M.** Simulation of keV clusters incident on gold targets / A. M. Childs, M. H. Shapiro, T. A. Tombrello // *Nucl. Instr. and Meth. B* – 1998. – Vol. 143, № 2. – P. 298–305.
176. **Inserov, Z.** Simulation of cluster impacts on silicon surface / Z. Inserov, M. Sosnowski, I. Yamada // *Nucl. Instr. and Meth. B* – 1997. – Vol. 127/128, № 3/4. – P. 269–272.

177. **Carroll, S. J.** Energetic impact of size-selected metal cluster ions on graphite / S. J. Carroll, S. G. Hall, R. E. Palmer // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – Vol. 81, № 17. – P. 3715–3718.
178. **Min, H.** Mechanism of neutral cluster beam deposition / H. Min, W. Zhaoye, C. Pingting, Y. Shengwen, W. Guanghou // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1998. – Vol. 135, № 1. – P. 564–569.
179. **Rafii-Tabar, H.** Molecular dynamics simulation of adsorption of Ag particles on a graphite substrate / H. Rafii-Tabar, H. Kamiyama, M. Cross // *Surf. Sci.* – 1997. – Vol. 385. – P. 187–199.
180. **Nacer, B.** Surface alloying in cluster deposition experiments: Ag/Pd (1 0 0) / B. Nacer, C. Massobrio // *Computational Materials Sci.* – 1997. – Vol. 8. – P. 213–218.
181. **Mazzone, A. M.** Molecular dynamics simulation of sequential deposition of metallic superlattices / A. M. Mazzone // *Appl. Phys. A.* – 1996. – Vol. 63. – P. 217–221.
182. **Sinnott, S. B.** Atomistic simulations of the nanometer-scale indentation of amorphous-carbon thin films / S. B. Sinnott, R. J. Colton, C. T. White, O. A. Shenderova, D. W. Brenner, J. A. Harrison // *J. Vac. Sci. Technol. A.* – 1997. – Vol. 15, № 3. – P. 936–940.
183. **Qi, L.** Polymerization via cluster-solid surface impacts: molecular dynamics simulations / L. Qi, S. B. Sinnott // *J. Phys. Chem. B.* – 1997. – Vol. 101. – P. 6883–6890.
184. **Pan, Z. Y.** The scattering of low energy C60 on graphite (0 0 1) surfaces / Z. Y. Pan, Z. Y. Man, M. Hou // *Zeitschrift fur Physik. D.* – 1997. – Vol. 41. – P. 275–280.
185. **Pan, Z. Y.** Simulations of C60 in collision with diamond surfaces / Z. Y. Pan, J. Xie, Z. Y. Man // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1998. – Vol. 135, № 2–3. – P. 346–349.
186. **Pan, Z. Y.** Energy dependence of C60 – graphite surface collisions / Z. Y. Pan, Z. Y. Man, Y. K. Ho, J. Xie, Y. Yue // *J. of Appl. Phys.* – 1998. – Vol. 83, № 9. – P. 4963–4966.
187. **Smith, R.** Molecular dynamics studies of particle impacts with carbon based materials / R. Smith, K. Beardmore // *Thin Solid Films.* – 1996. – Vol. 272. – P. 255–270.
188. **Shiang, K. – D.** A molecular dynamics study of self-diffusion on metal surfaces / K. – D. Shiang, C. M. Wei, T. T. Tsong // *Surface Science.* – 1994. – Vol. 301. – P. 136–150.
189. **Shiang, K. – D.** Molecular dynamics simulation of adatom diffusion on metal surfaces / K. – D. Shiang // *J. Chem. Phys.* – 1993. – Vol. 99, N 12. – P. 9994–9999.

190. **Kallinteris, G. C.** Molecular dynamics study of the vibrational and transport properties of copper adatoms on the (1 1 1) copper surface; comparison with the (0 0 1) face / Kallinteris G. C., Evangelakis G. A., Papanicolaou N. I. // *Surf. Sci.* – 1996. – Vol. 369. – P. 185–198.
191. **Papanicolaou, N. I.** Modification of phonon spectral densities of the (0 0 1) copper surface due to copper adatoms by molecular dynamics simulation / Papanicolaou N. I., Lagaris I. E., Evangelakis G. A. // *Surf. Sci. Lett.* – 1995. – Vol. 337. – P. 819–824.
192. **Breeman, M.** Binding energy and stability of Cu-adatom clusters on Cu (1 0 0) and Cu (1 1 1) / M. Breeman, G. T. Barkema, D. O. Boerma // *Surf. Sci.* – 1995. – Vol. 323. – P. 71–80.
193. **Evangelakis, G. A.** Adatom self-diffusion processes on (0 0 1) copper surface by molecular dynamics / G. A. Evangelakis, N. I. Papanicolaou // *Surface Science.* – 1996. – Vol. 347. – P. 376–386.
194. **Papanicolaou, N. I.** Molecular dynamics description of silver ad-atom diffusion on Ag (1 0 0) and Ag (1 1 1) / N. I. Papanicolaou, G. A. Evangelakis, G. C. Kallinteris // *Computational Materials Science.* – 1998. – Vol. 10. – P. 105–110.
195. **Evangelakis, G. A.** Molecular dynamics study of gold ad-atom diffusion on low-index copper surfaces / G. A. Evangelakis, G. C. Kallinteris, N. I. Papanicolaou // *Surface Science.* – 1997. – Vol. 394. – P. 185–191.
196. **Goldby, I. M.** Diffusion and aggregation of size-selected silver clusters on a graphite surface / I. M. Goldby, L. Kuipers, B. von Issendorff, R. E. Palmer // *Appl. Phys. Lett.* – 1996. – Vol. 69, № 19. – P. 2819–2821.
197. **Sanders, D. E.** Predicted diffusion rates on fcc (0 0 1) metal surfaces for adsorbate/substrate combinations of Ni, Cu, Rh, Pd, Ag, Pt, Au / D. E. Sanders, A. E. DePristo // *Surface Science.* – 1992. – Vol. 260. – P. 116–128.
198. **Boisvert, G.** Self-diffusion of adatoms, dimers, and vacancies on Su (1 0 0) / G. Boisvert, L. J. Lewis // *Phys. Rev. B.* – 1997. – Vol. 56, № 12. – P. 7643–7655.
199. **Liem, S. Y.** Simulation study of platinum adsorption on graphite using the Sutton-Chen potential / S. Y. Liem, K. – Y. Chan // *Surf. Sci.* – 1995. – Vol. 328. – P. 119–128.
200. **Chirita, V.** Enhanced cluster mobilities on Pt (1 1 1) during film growth from the vapor phase / V. Chirita, E. P. Munger, J. – E. Sundgren, J. E. Greene // *Appl. Phys. Lett.* – 1998. – Vol. 72, № 1. – P. 127–129.
201. **Munger, E. P. Sundgren J. – E.** Adatom-induced diffusion of two-dimensional close-packed Pt₇ clusters on Pt (1 1 1) / E. P. Munger,

- V. Chirita, J. – E. Sundgren // Surf. Sci. Lett. – 1996. – Vol. 355. – P. 325–330.
202. **Kurpick, U.** Atomic processes in vacancy island motion on Ag (1 1 1) / U. Kurpick, P. Kurpick, T. S. Rahman // Surf. Sci. Lett. – 1997. – Vol. 383. – P. 713–718.
203. **Catlow, C. R. A.** Computer modelling as a technique in solid state chemistry / C. R. A. Catlow, L. Ackermann, R. G. Bell, F. Cora, D. H. Gay, M. A. Nygren, J. C. Pereira, G. Sastre, B. Slater, P. E. Sinclair // Faraday Discuss. – 1997. – Vol. 106. – P. 1–40.
204. **Hensel, H.** Implantation and damage under low-energy Si self-bombardment / H. Hensel, H. M. Urbassek // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 57, № 8. – P. 4756–4763.
205. **Miller, L. A.** Displacement-threshold energies in Si calculated by molecular dynamics / L. A. Miller, D. K. Brice, A. K. Prinja, S. T. Picraux // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 49, № 24. – P. 16953–16964.
206. **Wu, W.** Molecular-dynamics study of single-atom radiation damage in diamond / W. Wu, S. Fahy // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 49, № 5. – P. 3030–3035.
207. **Tarus, J.** Effect of surface on defect creation by self-ion bombardment of Si (0 0 1) / J. Tarus, K. Nordlund, A. Kuronen, J. Keinonen // Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 58, № 15. – P. 9907–9915.
208. **Nordlund, K.** Molecular dynamics simulation of ion range at keV energies / K. Nordlund, A. Kuronen // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 115. – P. 528–531.
209. **Hensel, H.** Preferential effects in low-energy Si bombardment of SiC / H. Hensel, H. M. Urbassek // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1998. – Vol. 142, № 2. – P. 287–294.
210. **Chey, S. J.** Surface defects created by low energy ($20 < E < 240$ eV) ion bombardment of Ge (0 0 1) / S. J. Chey, D. G. Cahill // Surf. Sci. – 1997. – Vol. 380. – P. 377–384.
211. **Helmer, B. A.** Molecular dynamics simulations of fluorosilyl species impacting fluorinated silicon surfaces with energies from 0,1 to 100 eV / B. A. Helmer, D. B. Graves // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1997. – Vol. 15, № 4. – P. 2252–2261.
212. **Kubota, N. A.** Molecular dynamics simulations of low-energy (25–200 eV) argon ion interactions with silicon surfaces: sputter yields and product formation pathways / N. A. Kubota, D. J. Economou // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol. 83, № 8. – P. 4055–4063.
213. **Yao, Y.** New molecular collision interaction effect in low-energy sputtering / Y. Yao, Z. Hargitai, M. Albert, R. G. Albridge,

- A. V. Barnes, J. M. Gilligan, B. P. Ferguson, G. Lupke, V. D. Gordon, N. H. Tolk, J. C. Tully, G. Betz, W. Husinsky // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – Vol. 81, № 3. – P. 550–553.
214. **Mazzone, A. M.** Molecular dynamics and Monte Carlo methods applied to the simulation of thin films growth / A. M. Mazzone // *International Journal of Modern Physics. C.* – 1995. – Vol. 6, № 2. – P. 211–222.
215. **Slusher, J. T.** Non-iterative constraint dynamics using velocity-explicit Verlet methods / J. T. Slusher, P. T. Cummings // *Molecular Simulation.* – 1996. – Vol. 18. – P. 213–224.
216. **Tsuruta, K.** Early stages of sintering of silicon nitride nanoclusters: a molecular-dynamics study on parallel machines / K. Tsuruta, A. Omeltchenko, R. K. Kalia, P. Vashishta // *Europhysics Letters.* – 1996. – Vol. 33, № 6. – P. 441–446.
217. **Omeltchenko, A.** Structure, mechanical properties, and thermal transport in microporous silicon nitride – molecular-dynamics simulations on a parallel machine / A. Omeltchenko, A. Nakano, R. K. Kalia, P. Vashishta // *Europhysics Letters.* – 1996. – Vol. 33, № 9. – P. 667–672.
218. **Bekker, H.** GROMACS: a parallel computer for molecular dynamics simulation H. Bekker, H. J. C. Berendsen, E. J. Dijkstra, S. Achterop, V. Drunen, D. V. Spoel, A. Sijbers, H. Keegstra, B. Reitsma, M. K. R. Renardus // *Proc. Conf. on Physics Computing.* – Singapore, New York, London: World Scientific Publishing Co. – 1993. – P. 252–256.
219. **Omeltchenko, A.** Crack front propagation and fracture in a graphite sheet: a molecular dynamics study on parallel computers / A. Omeltchenko, J. Yu, R. K. Kalia, P. Vashishta // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – Vol. 78, № 11. – P. 2148–2151.
220. **Vashishta, P.** Crack propagation and fracture in ceramic films-million atom molecular dynamics simulations on parallel computers / P. Vashishta, A. Nakano, R. K. Kalia, I. Ebbsjo // *Mater. Sci. and Engineering. B.* – 1996. – Vol. 37. – P. 56–71.
221. **Trobec, R.** Comparison of parallel Verlet and implicit Runge-Kutta methods for molecular dynamics integration / R. Trobec, D. Janezic // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* – 1995. – Vol. 35. – P. 100–105.
222. **Beazley, D. M.** Controlling the data glut in large-scale molecular-dynamics simulations / D. M. Beazley, P. S. Lomdahl // *Computers in Physics.* – 1997. – Vol. 11, № 3. – P. 230–238.
223. **Littmark, U.** Recoil Mixing in Solids by Energetic Ion Beams / U. Littmark, W. O. Hofer // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1980. – Vol. 168, № 1–3. – P. 329–342.

224. **Hofer, W. O.** A theoretical treatment of cascade mixing in depth profiling by sputtering / W. O. Hofer, U. Littmark // *Phys. Lett. A.* – 1979. – Vol. 71, № 5, 6. – P. 457–460.
225. **Gras-Marti, A.** Distortion of depth profiles during ion bombardment: Препр. / A. Gras-Marti, P. Sigmund; Fysisk Institut, Odense Universitet, Denmark; DK-5230. – Odense: 1980. – 29 p.
226. **Xia, W.** On the temperature dependence and the moving species during ion mixing / W. Xia, M. Fernandes, C. A. Hewett, S. S. Lau, D. B. Poker, J. P. Biersack // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1989. – Vol. 37/38, № 4. – P. 408–413.
227. **Nicolet, M. A.** Ion mixing processes / M. A. Nicolet, T. C. Banwell, B. M. Paine // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1984. – Vol. 27. – P. 3–11.
228. **Poker, D. B.** Dose dependence of ion beam mixing of Au on amorphous and single crystalline Si and Ge / D. B. Poker, O. W. Holland, B. R. Appleton // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1984. – Vol. 27. – P. 73–78.
229. **Banwell, T. C.** Depth dependence and chemical effects in ion mixing of Ni on SiO₂ / T. C. Banwell, M. A. Nicolet // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1984. – Vol. 27. – P. 109–114.
230. **Matteson, S.** Anisotropic transport of impurities in ion mixing / S. Matteson, J. A. Kuman, R. F. Pinizzotto // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1984. – Vol. 27. – P. 43–48.
231. **Williams, P.** Implantation and ion beam mixing in thin film analysis P. Williams, J. E. Baker // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1981. – V. 182/183, № 2. – P. 15–24.
232. **Andersen, H. H.** The depth resolution of sputter profiling / H. H. Andersen // *Appl. Phys.* – 1979. – Vol. 18. – P. 131–140.
233. **Cui, F. – Z.** Recoil implantation and interface mixing: a computer simulation study F. – Z. Cui, H. – D. Li // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1985. – Vol. 7/8. – P. 650–656.
234. **Paine, B. M.** Ion beam mixing: basic experiments / B. M. Paine, R. S. Averback // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1985. – Vol. 7/8, № 1. – P. 666–675.
235. **Ishitani, T.** Computer simulation of atomic mixing during ion bombardment / T. Ishitani, R. Shimizu // *Appl. Phys.* – 1975. – Vol. 6, № 2. – P. 241–248.
236. **Conrad, U.** Monte Carlo study of fluence dependent mixing and sputtering of isotopic targets under ion bombardment / U. Conrad, H. M. Urbassek // *Surf. Sci.* – 1992. – Vol. 278. – P. 414–426.
237. **Jimenez-Rodriguez, J. J.** Fluence dependent mixing of isotopic targets: a theoretical case study / J. J. Jimenez-Rodriguez, U. Conrad,

- Н. М. Urbassek, I. Abril, A. Gras-Marti // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 67, № 1–2. – P. 527–530.
238. **Conrad, U.** The ion-beam-induced mixing mechanism of self-tracer markers in Ni: collisional versus thermal spike mixing / U. Conrad, H. M. Urbassek // J. Phys.: Condens. Mater. Lett. – 1992. – Vol. 4. – P. 481–486.
239. **Koronen, I.** Calculation of collisional mixing / I. Koronen, M. Hautala // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1990. – Vol. 47. – P. 375–392.
240. **Hautala, M.** Dependence of collisional mixing on recoil energy M. Hautala, I. Koronen // Vacuum. – 1991. – Vol. 42, № 1/2. – P. 3–7.
241. **Корнич, Г. В.** Двухэтапное моделирование низкоэнергетического ионного перемешивания / Г. В. Корнич, В. П. Пинчук // Труды Международного совещания-семинара «Диагностика поверхности ионными пучками». – Запорожье: АТЦ ЗГУ. – 1992. – С. 27–28.
242. **Корнич, Г. В.** О моделировании процесса ионного послыонного анализа / Г. В. Корнич, В. П. Пинчук // Поверхность. – 1993. – № 12. – С. 51–60.
243. **Kornich, G. V.** Calculation of the relocation function's moments during low energy ion beam mixing / G. V. Kornich, V. P. Pintchuk // Vacuum. – 1994. – Vol. 45, № 4. – P. 487–488.
244. **Корнич, Г. В.** Об использовании МД моделирования для вычисления коэффициента перемешивания и средней скорости атомов отдачи в условиях ионной бомбардировки / Г. В. Корнич // Поверхность. – 1995. – № 2. – С. 107–109.
245. **Konoplev, V.** Effect of temperature on the bulk atomic relocation in low-energy collision cascades in silicon: a molecular dynamics study / V. Konoplev, A. Gras-Marti, E. P. Andribet, A. M. C. Perez-Martin, J. J. Jimenez-Rodriguez // Radiat. Eff. and Def. in Solids. – 1995. – Vol. 133. – P. 179–192.
246. **Kornich, G. V.** Molecular dynamics simulation of low energy ion beam mixing / G. V. Kornich, G. Betz, B. V. King // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 115, № 1–4. – P. 461–467.
247. **Kornich, G. V.** Two step simulation of low energy ion beam mixing at different temperatures / G. V. Kornich, G. Betz // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 117, № 1–2. – P. 81–89.
248. **Smith, R.** Molecular dynamics simulation of 0,1-2 keV ion bombardment of Ni {1 0 0} / R. Smith, B. V. King, K. Beardmore // Radiat. Eff. Defects in Solids. A. – 1997. – Vol. 141. – P. 425–451.
249. **Nakagawa, S. T.** Depth profiling and stoichiometric changes due to high-fluence ion bombardments / S. T. Nakagawa, Y. Yamamura // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1988. – Vol. 33, № 2–3. – P. 780–783.

250. **Littmark, U.** Theoretical concepts of ion implantation, recoil implantation and ion beam mixing / U. Littmark // *Vacuum*. – 1991. – Vol. 42, № 1/2. – P. 169–173.
251. **Кучинский, В. В.** Изменение состава приповерхностного слоя двухкомпонентного сплава при распылении ионами низких энергий В. В. Кучинский // *Поверхность*. – 1982. – № 4. – С. 93–97.
252. **Измайлов, А. М.** Исследование изменения состава приповерхностного слоя двухкомпонентного сплава под действием ионной бомбардировки / А. М. Измайлов, В. В. Кучинский // *Поверхность*. – 1985. – № 8. – С. 84–89.
253. **Manning, I.** Boltzmann approach to cascade mixing / I. Manning // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1984. – Vol. 27. – P. 91–95.
254. **Stepanova, M. G.** Master equation for atomic collision cascades with fixed path length between collisions / M. G. Stepanova // *Nucl. Instr. and Meth. B*. – 1995. – Vol. 103, № 2. – P. 33–37.
255. **Hofmann, S.** Preferential sputtering of argon ion bombarded Ni₃Al and TaSi₂ / S. Hofmann, M. G. Stepanova // *Appl. Surf. Sci.* – 1995. – Vol. 90. – P. 227–233.
256. **Nosenko, V. Yu.** Modification of elemental compositions in the near-surface region of low-alloy steels by a glow discharge plasma V. Yu. Nosenko, A. L. Pivovarov, S. P. Chenakin, V. T. Cherepin // *Nucl. Instr. and Meth. B*. – 1996. – Vol. 119. – P. 411–417.
257. **Sigmund, P.** Sputtering of multicomponent materials: elements of a theory / P. Sigmund, A. Oliva, G. Falcone // *Nucl. Instr. and Meth. B*. – 1982. – Vol. 194, № 1–3. – P. 541–548.
258. **Oliva, A.** Sputtering of multicomponent materials: the diffusion limit / A. Oliva, R. Kelly, G. Falcone // *Surf. Sci.* – 1986. – Vol. 166, № 2/3. – P. 403–418.
259. **Collins, R.** On the “collective current” concept in the Theory of atomic mixing / R. Collins // *Nucl. Instr. and Meth. B*. – 1984. – Vol. 2. – P. 809–813.
260. **Collins, R.** A first order diffusion approximation to atomic redistribution during ion bombardment of solids: I. Infinite range approximation / R. Collins, G. Carter // *Radiat. Effects*. – 1981. – Vol. 54. – P. 235–242.
261. **Carter, G.** A first order diffusion approximation to atomic redistribution during ion bombardment of solids: II. Finite range approximation / G. Carter, R. Collins, D. A. Thompson // *Radiat. Effects*. – 1981. – Vol. 55. – P. 99–110.

262. **Collins, R.** Implant diffusion with position-dependent diffusion coefficient / R. Collins // *Rad. Effects Lett.* – 1981. – Vol. 58, № 5. – P. 133–137.
263. **Jimenez-Rodriguez, J. J.** Atomic mixing of silver into a silicon substrate using a 45 keV beam of Ar ions / J. J. Jimenez-Rodriguez, N. P. Tornett, T. Marsh, R. Collins // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1984. – Vol. 2, № 2–3. – P. 792–796.
264. **Бабаев, В. П.** Радиационное перемешивание бинарных слоистых металлических систем / В. П. Бабаев, К. П. Гуров, В. Т. Заболотный // *Физика и химия обработки материалов.* – 1985. – № 2. – С. 8–2.
265. **Collins, R.** Non-linear differential equation for atomic mixing; 2. Numerical results / R. Collins, J. J. Jimenez-Rodriguez, T. Marsh // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1985. – Vol. 7/8. – P. 632–638.
266. **Буренков, А. Ф.** Искажение глубинных профилей примеси при ионном травлении / А. Ф. Буренков, У. Краузе // *Поверхность.* – 1988. – № 8. – С. 116–121.
267. **Блинов, Ю. Ф.** Диффузионная модель имплантации отдачей / Ю. Ф. Блинов, П. В. Серба // *Физика и техника полупроводников.* – 1985. – Т. 19, Вып. 10. – С. 1848–1851.
268. **Carter, G.** The diffusion approximation in modelling impurity redistribution during sputtering / G. Carter // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1996. – Vol. 115. – P. 473–477.
269. **Gras-Marti, A.** On the influence of atomic mixing on the evolution of ion-implantation profiles / A. Gras-Marti, J. J. Jimenez-Rodriguez, J. Peon-Fernandez, M. Rodriguez-Vidal // *Philosophical Magazine. A.* – 1982. – Vol. 45, № 1. – P. 191–203.
270. **King, B. V.** The effect of atomic mixing on the depth profiles of metal markers in silicon / B. V. King, D. G. Tonn, I. S. T. Tsong, J. A. Leavitt // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1984. – Vol. 27. – P. 103–108.
271. **King, B. V.** The depth resolution of sputter profiling / B. V. King, I. S. T. Tsong // *Ultramicroscopy.* – 1984. – Vol. 14. – P. 75–78.
272. **King, B. V.** A model for atomic mixing and preferential sputtering effects in SIMS depth profiling / B. V. King, I. S. T. Tsong // *J. Vac. Sci. Technol. A.* – 1984. – Vol. 2, № 4. – P. 1443–1447.
273. **King, B. V.** Temperature effects in atomic mixing of metal-silicon multilayers / B. V. King, D. G. Tonn, I. S. T. Tsong // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1985. – Vol. 7/8, № 1–3. – P. 607–615.
274. **Tonn, D. G.** SIMS analysis of thermal and ion-beam induced broadening of thin metal markers in silicon / D. G. Tonn, O. F. Sankey, I. S. T. Tsong // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1986. – Vol. 15, № 2. – P. 193–197.

275. **King, B. V.** Deconvolution of atomic mixing effects from SIMS depth profiles / B. V. King, I. S. T. Tsong // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1985. – Vol. 7/8, № 2–3. – P. 793–797.
276. **King, B. V.** Low energy ion beam mixing of metal-copper multilayers / B. V. King, S. G. Puranik, M. A. Sobhan, R. J. MacDonald // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 39, № 3. – P. 153–157.
277. **Carter, G.** The deduction of ballistic atomic mixing rates from high fluence ion implant collection depth distributions / G. Carter, M. J. Nobes, I. V. Katardjiev // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 36, № 4. – P. 404–411.
278. **Carter, G.** The deduction of specially variable effective diffusivity from ballistic atomic mixing studies / G. Carter, I. V. Katardjiev, M. J. Nobes // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 43, № 4. – P. 149–152.
279. **Nobes, M. J.** The determination of species distribution and deduction of mixing and effective diffusion parameters in the altered layer of irradiated films / M. J. Nobes, I. V. Katardjiev, G. Carter // Vacuum. – 1991. – Vol. 42, № 1/2. – P. 21–27.
280. **Hofmann, S.** Compositional depth profiling by sputtering / S. Hofmann // Progress in Surface Science. – 1991. – Vol. 36. – P. 35–87.
281. **Корнич, Г. В.** О роли ионного перемешивания при послойном анализе примесных профилей / Г. В. Корнич, Л. О. Корнилова, В. Ю. Жадько, С. В. Теплов // Поверхность. – 1991. – № 6. – С. 15–21.
282. **Корнич, Г. В.** О послойном анализе примесных профилей ионами химически активных газов / Г. В. Корнич, Л. О. Корнилова, С. В. Теплов // Поверхность. – 1992. – № 4. – С. 38–42.
283. **Войтусик, С. С.** Изменение состава приповерхностного слоя при скачкообразном изменении энергии бомбардирующих ионов / С. С. Войтусик, Г. В. Корнич, В. И. Запорожченко, С. В. Теплов // Поверхность. – 1993. – № 1. – С. 26–33.
284. **Stepanova, M. G.** Effect of ion beam mixing and compound formation on sputter depth profile of a Ta/Si multilayer thin film / M. G. Stepanova // Surface and Interface Analysis. – 1996. – Vol. 24. – P. 416–418.
285. **Naundorf, V.** Limits of depth resolution for sputter sectioning: moments of tracer depth distribution / V. Naundorf, C. Abromeit // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 43. – P. 513–519.
286. **Бажин, А. И.** О влиянии поверхностных энергий связи на процесс распыления двухкомпонентных сплавов / А. И. Бажин, Г. В. Корнич, С. В. Теплов // Поверхность. – 1988. – № 12. – С. 43–49.

287. **King, B. V.** Low energy ion beam mixing of metal-silicon multilayers / B. V. King, S. G. Puranik, R. J. MacDonald // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1988. – Vol. 33. – P. 657–660.
288. **Emery, R. G.** Low energy ion beam mixing of aluminium impurity multilayers / R. G. Emery, B. V. King, R. J. MacDonalds // Vacuum. – 1990. – Vol. 41, № 7–9. – P. 1673–1673.
289. **Carter, G.** The effect of parameter choice on predicted depth resolution in sputter profiling / G. Carter, M. J. Nobes, I. V. Katardjiev, I. Abril, J. J. Jimenez-Rodriguez, A. Gras-Marti // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 67, № 1–3. – P. 486–490.
290. **Galdikas, A.** Redistribution of atoms in the near-surface layer of multielemental solids related to variations of the ion beam parameters / A. Galdikas, L. Pranevicius // Materials Science and Engineering. – 1994. – Vol. 27, № 1. – P. 23–28.
291. **Peinador, J. A.** Collisional mixing in ion beam desorption of impurity monolayers / J. A. Peinador, I. Abril, J. J. Jimenez-Rodriguez, A. Gras-Marti // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1990. – Vol. 48, № 2. – P. 589–592.
292. **Moller, W.** TRIDYN-TRIM simulation code including dynamic composition changes / W. Moller, W. Eckstein // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1984. – Vol. 2, № 1. – P. 814–818.
293. **Biersack, J. P.** A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets / J. P. Biersack, L. G. Hagglmark // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1980. – Vol. 174, № 1–2. – P. 257–269.
294. **Roush, M. L.** EVOLVE, a time-dependent Monte Carlo code to simulate the effects of ion-beam-induced atomic mixing / M. L. Roush, T. D. Andreadis, O. F. Goktepe // Radiat. Effects. – 1981. – Vol. 55, № 1–2. – P. 119–130.
295. **Konoplev, V. M.** An effective approach for elastic scattering description in Monte Carlo simulation / V. M. Konoplev // Rad. Eff. Lett. – 1986. – Vol. 87, № 4. – P. 207–213.
296. **Konoplev, V. M.** Monte Carlo simulation of intermixed layer formation during ion plating of Cu on Al₂O₃ / V. M. Konoplev // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 42, № 1–2. – P. 229–232.
297. **Konoplev, V. M.** Influence of dose effects on depth distribution of implanted particles / V. M. Konoplev // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 43, № 3/4. – P. 159–161.
298. **Peak, D.** Influences of thermal spikes in ion beam mixing / D. Peak, R. S. Averback // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1985. – Vol. 7/8, pt. 2. – P. 561–565.
299. **Kim, S. J.** Influence of thermochemical properties on ion mixing of markers in Cu and β -Zr at 77 K with Kr / S. J. Kim, M. A. Nicolet,

- R. S. Averback // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 19/20, № 1. – P. 662–668.
300. **Cheng, Y-T.** A comparison between high- and low-energy ion mixing at different temperatures / Y-T. Cheng, S. J. Simko, M. C. Militello, A. A. Dow, G. W. Auner, M. H. Alkansi, K. R. Padmanabhan // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 64, № 4. – P. 38–47.
301. **Jaouen, C.** Ion mixing in Fe-Al and Co-Al multilayered thin films / C. Jaouen, J. P. Riviere, A. Bellara, J. Delafond // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1985. – Vol. 7/8, № 5. – P. 591–596.
302. **Battaglin, G.** Ion beam mixing effects in Au-Fe and Pt-Fe thin bilayers / G. Battaglin, A. Carnera, G. Celotti, G. Della Mea, V. N. Kulkarni, S. LoRusso, P. Mazzoidi // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. – 1984. – Vol. 27. – P. 49–54.
303. **Bhattacharya, R. S.** Ion-beam mixing of Ni-Ti binary systems / R. S. Bhattacharya, A. K. Rai // J. Appl. Phys. – 1985. – Vol. 58, № 1. – P. 248–252.
304. **Puranik, S. G.** Study of ion beam induced mixing during sputter depth profiling / S. G. Puranik, B. V. King // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1988. – Vol. 34, № 1. – P. 102–112.
305. **Miedema, A. R.** Die Bildungswarme von Legierungen / A. R. Miedema // Philips Technische Rundschau. – 1976/77. – Vol. 36, № 8. – P. 233–248.
306. **Johnson, W. L.** When is thermodynamics relevant to ion-induced rearrangements in metals? / W. L. Johnson, Y. T. Cheng, M. Van Rossum, M. A. Nicolet // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1985. – Vol. 7/8, № 3. – P. 657–665.
307. **Chladek, J.** Deposition of Cu atoms on a Pb single crystal surface / J. Chladek, G. Betz // Radiat. Effects and Defects in Solids. – 1997. – Vol. 142. – P. 51–62.
308. **Gades, H.** Model study of keV-ion mixing of metallic interfaces: Influence of materials properties and deposited energy / H. Gades, H. M. Urbassek // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 51, № 20. – P. 14559–14569.
309. **Gades, H.** Simulation of ion-induced mixing of metals / H. Gades, H. M. Urbassek // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 115, № 2. – P. 485–488.
310. **Корнич, Г. В.** Молекулярно-динамическое моделирование смещений атомов в монокристаллах Ni, Al и двухслойном кристалле Al/Ni при низкоэнергетической ионной бомбардировке / Г. В. Корнич, Г. Бетц // Известия АН. Серия физическая. – 1998. – Т. 62, № 7. – С. 1401–1409.

311. **Kornich, G. V.** MD simulation of atomic displacements in pure metals and metallic bilayers during low energy ion bombardment at 0 K / G. V. Kornich, G. Betz // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1998. – Vol. 143, № 4. – P. 455–472.
312. **Kornich, G. V.** MD simulation of atomic displacements in metals and metallic bilayers under low energy ion bombardment at 300 K / G. V. Kornich, G. Betz, A. I. Bazhin, // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1999. – Vol. 153, № 1–4. – P. 383–390.
313. **Hsieh, H.** Effect of temperature on the dynamics of energetic displacement cascades: A molecular dynamics study / H. Hsieh, T. D. de la Rubia, R. S. Averback, R. Benedek // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 40, № 14. – P. 9986–9988.
314. **De la Rubia, T. D.** Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Cu and Ni: Thermal spike behavior / T. D. de la Rubia, R. S. Averback, H. Hsieh, R. Benedek // J. Mater. Res. – 1989. – Vol. 4, № 3 – P. 579–586.
315. **Averback, R. S.** Dynamics and structure of energetic displacement cascades / R. S. Averback, T. D. de la Rubia, R. Benedek // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1988. – Vol. 33. – P. 693–700.
316. **De la Rubia, T. D.** Progress in the development of a molecular dynamics code for high-energy cascade studies / T. D. de la Rubia, M. W. Guinan // J. Nucl. Mat. – 1990. – Vol. 174. – P. 151–157.
317. **Ghaly, M.** Effect of viscous flow on ion damage near solid surfaces / M. Ghaly, R. S. Averback // Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 72, № 3. – P. 364–367.
318. **Averback, R. S.** A model for surface damage in ion-irradiated solids / R. S. Averback, M. Ghaly // J. App. Phys. – 1994. – Vol. 76, № 6. – P. 3908–3910.
319. **Averback, R. S.** MD study of the interactions of low energy particles and clusters with surfaces / R. S. Averback, M. Ghaly // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1994. – Vol. 90, № 2. – P. 191–201.
320. **Zhong, Y.** Defect production in tungsten: A comparison between field-ion microscopy and molecular-dynamics simulations / Y. Zhong, K. Nordlund, M. Ghaly, R. S. Averback // Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 58, № 5. – P. 2361–2364.
321. **Likonen, M.** A secondary-ion-mass-spectrometry study of low-energy ion-beam mixing of Au-Pt interfaces / M. Likonen, M. Hautala, I. Koponen // J. Appl. Phys. – 1992. – Vol. 72, № 12 – P. 5898–5904.
322. **Likonen, M.** The effect of ion beam mixing on SIMS depth resolution / M. Likonen, M. Hautala, I. Koponen // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 64, № 1. – P. 149–152.

323. **Koponen, I.** High energy ion beam mixing in dense collision cascades / I. Koponen, M. Hautala // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 69, № 2. – P. 182–192.
324. **Tsatis, D. E.** Transient diffusion in ion beam mixing / D. E. Tsatis // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 115, № 5. – P. 569–571.
325. **King, B. V.** Calculation of ion mixing and energy deposition using a modified version of TRIM / B. V. King, R. P. Webb // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1992. – Vol. 64. – P. 724–729.
326. **Miotello, A.** Revisiting the thermal-spike concept in ion-surface interactions / A. Miotello, R. Kelly // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 122, № 4. – P. 458–469.
327. **Kelly, R.** On the mechanisms of target modification by ion beams and laser pulses / R. Kelly, A. Miotello // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 122, № 3. – P. 374–400.
328. **Горбань, О. М.** Теоретичний аналіз механізмів хемостимульованої дифузії / О. М. Горбань, В. І. Меняйло // Український фізичний журнал. – 1999. – Т. 44, № 3. – С. 375–380.
329. **Gorban, A. N.** Some Details of Hydrogen Interaction with Si and Ge Surface / A. N. Gorban, A. S. Yanovsky, S. V. Kolomoets // Physics of Low-Dimensional Structures. – 1998. – № 9/10. – P. 65–76.
330. **Gorbenko, V. I.** Effects of H-atoms on basic processes in H₂/H₂O/InP system / V. I. Gorbenko, A. N. Gorban, J. A. Schwets // Vacuum. – 1999. – Vol. 54. – P. 179–182.
331. **Flynn, C. P.** Electron-phonon interactions in energetic displacement cascades / C. P. Flynn, R. S. Averback // Phys. Rev. B. – 1988. – Vol. 38, № 10. – P. 7118–7120.
332. **Nordlund, K.** Mechanisms of ion beam mixing in metals and semiconductors / K. Nordlund, M. Ghaly, R. S. Averback // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol. 83, № 3. – P. 1238–1246.
333. **Nordlund, K.** Role of electron-phonon coupling on collision cascade development in Ni, Pd, and Pt / K. Nordlund, L. Wei, Y. Zhong, R. S. Averback // Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 57, № 22. – P. 13965–13968.
334. **Pronnecke, S.** The effect of electronic energy loss on the dynamics of thermal spikes in Cu / S. Pronnecke, M. Victoria, T. D. de la Rubia, A. Caro, M. W. Guinan // J. Mater. Res. – 1991. – Vol. 6, № 3. – P. 483–491.
335. **Caro, A.** Electron-phonon coupling in molecular dynamic codes / A. Caro // Rad. Effects and Defects in Solids. – 1994. – Vol. 130. – P. 187–194.

336. **Grankin, V. P.** High-efficiency electronic accommodation of energy of heterogeneous recombination of hydrogen atoms on the surface of the monocrystal ZnS / V. P. Grankin, V. Yu. Shalamov, N. K. Uzunoglu // *Chemical Physics Letters*. – 2000. – Vol. 328. – P. 10–16.
337. **Гранкин, В. П.** Высокоэффективная электронная аккомодация при взаимодействии атомов водорода с поверхностью монокристалла сульфида цинка / В. П. Гранкин, В. Ю. Шаламов // *Письма в ЖТФ*. – 2000. – Т. 26, Вып. 5. – С. 57–61.
338. **Гранкін, В. П.** Релаксація коливальних збуджень молекул на поверхні широкозонних твердих тіл, що перебувають у метастабільному стані / В. П. Гранкін, В. Ю. Шаламов // *Український фізичний журнал*. – 1999. – Т. 44, № 5. – С. 625–627.
339. **Ho, P. S.** Effects of enhanced diffusion on preferred sputtering of homogeneous alloy surfaces / P. S. Ho // *Surf. Sci.* – 1978. – Vol. 72, № 3/4. – P. 253–263.
340. **Webb, R.** The influence of preferential enhanced diffusion on composition changes in sputtered binary solids / R. Webb, G. Carter, R. Collins // *Radiat. Effects*. – 1978. – Vol. 39. – P. 129–139.
341. **Johnson, R. A.** Solute segregation under irradiation / R. A. Johnson, N. Q. Lam // *J. Nucl. Mater.* – 1978. – V. 69, № 70. – P. 424–433.
342. **Wiedersich, H.** A theory of radiation-induced segregation in concentrated alloys / H. Wiedersich, P. R. Okamoto, N. Q. Lam // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 98–108.
343. **Okamoto, P. R.** Radiation-induced segregation in binary and ternary alloys / P. R. Okamoto, L. E. Rehn // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 2–23.
344. **Ахизер, И. А.** Теория сегрегации в сплавах при облучении / И. А. Ахизер, Л. Н. Давыдов // *УФЖ*. – 1982. – Т. 27, № 7. – С. 116–119.
345. **Горнушкина, Е. Д.** О радиационно-стимулированной диффузии при протонном облучении / Е. Д. Горнушкина, И. В. Кириллова, Р. Ш. Малкович // *ФТТ*. – 1982. – Т. 24, № 4. – С. 1088–1093.
346. **Wagner, W.** Radiation-induced segregation in Ni-Cu alloys / W. Wagner, L. E. Rehn, H. Wiedersich, V. Naundorf // *Phys. Rev.* – 1983. – Vol. 28, № 12. – P. 6780–6794.
347. **Chen, I-W.** Irradiation-induced segregation in multicomponent alloys / I-W. Chen // *J. Nucl. Mater.* – 1983. – Vol. 116, № 2. – P. 249–259.
348. **Wiedersich H.** Ion-induced surface modification of alloys / H. Wiedersich // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 1984. – Vol. 27. – P. 13–24.

349. **Johnson, R. A.** Radiation induced diffusion and solute segregation / R. A. Johnson // *Mat. Sci. Forum.* – 1984. – Vol. 1. – P. 228–238.
350. **Величко, О. И.** Расчет значений предельных доз имплантации в условиях радиационно-стимулированной диффузии внедряемых примесей / О. И. Величко // *Поверхность.* – 1985. – № 1. – С. 85–87.
351. **Rehn, L. E.** Radiation-induced segregation during sputtering / L. E. Rehn, N. Q. Lam, H. Wiedersich // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1985. – Vol. 7/8. – P. 764–767.
352. **Lam, N. Q.** Sputter-induced compositional modification in a Ni-Au alloy / N. Q. Lam, H. A. Hoff, P. G. Regnier // *J. Nucl. Mater.* – 1985. – Vol. 133, № 8. – P. 427–429.
353. **Rehn, L. E.** Radiation-induced segregation in ternary alloys: Ni-Ge-Al and Ni-Ge-Si / L. E. Rehn, P. R. Okamoto, P. M. Baldo // *J. Nucl. Mater.* – 1985. – Vol. 135. – P. 155–159.
354. **Lam, N. Q.** Subsurface compositional modifications in Ni-Cu alloys during high-temperature ion sputtering / N. Q. Lam, H. A. Hoff, H. Wiedersich, L. E. Rehn // *Surf. Sci.* – 1985. – Vol. 149, № 2–3. – P. 517–536.
355. **Макарец, Н. В.** Стационарные концентрации и предельные дозы ионно-имплантированных примесей / Н. В. Макарец, Г. Л. Фалько, А. М. Федорченко // *Поверхность.* – 1985. – № 1. – С. 116–119.
356. **Проценко, А. Н.** Радиационно-стимулированная диффузия при ионном травлении / А. Н. Проценко, Э. Ф. Чайковский // *ЖТФ.* – 1986. – Т. 56, № 2. – С. 400–403.
357. **Корнеева, Л. А.** Пространственно-временная эволюция профиля имплантированных ионов в полупроводниках в присутствии радиационных дефектов / Л. А. Корнеева, Е. А. Мазур, А. И. Руденко // *ФТП.* – 1986. – Т. 20, № 8. – С. 1546–1548.
358. **Корнеева, Л. А.** Радиационно-индуцированное перераспределение имплантированных ионов в полупроводниках с дефектами / Л. А. Корнеева, Е. А. Мазур, А. И. Руденко // *ФТП.* – 1986. – Т. 20, № 11. – С. 2023–2028.
359. **Lam, N. Q.** Bombardment-induced segregation and redistribution / N. Q. Lam, H. Wiedersich // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1987. – Vol. 18, № 4–6. – P. 471–485.
360. **Okino, T.** Effect of Frenkel pair generation-annihilation term upon diffusion equation of self-interstitials and vacancies / T. Okino, M. Yoshida // *Japanese Journal of Applied Physics.* – 1989. – Vol. 28, № 1. – P. 86–90.
361. **Scerl, M. W.** Compositional changes in alloys during ion bombardment at elevated temperatures / M. W. Scerl, N. Q. Lam,

- P. Sigmund // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1998. – Vol. 140, № 1. – P. 75–90.
362. **Бажин, А. И.** Преимущественное распыление двухкомпонентного сплава АхВ1-х низкоэнергетическими ионами А⁺ / А. И. Бажин, В. Ю. Жадько, Л. О. Корнилова, Г. В. Корнич, С. В. Теплов // Металлофизика. – 1989. – Т. 11, № 6. – С. 98–100.
363. **Бажин, А. И.** Расчет профилей концентраций компонент бинарного сплава в условиях ионной бомбардировки / А. И. Бажин, В. Ю. Жадько, Г. В. Корнич, С. В. Теплов // Поверхность. – 1990. – № 2. – С. 60–66.
364. **Yacout, A. M.** Near-surface compositional modifications of ternary alloys during sputtering at elevated temperatures / A. M. Yacout, N. Q. Lam, J. F. Stubbins // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 42. – P. 49–60.
365. **Yamamoto, H.** A low-energy SIMS investigation of the analysing depth by measuring diffusion coefficients, using a nickel deposited copper single crystal / H. Yamamoto, T. Kikuchi // Surf. Sci. – 1986. – Vol. 177. – P. 229–237.
366. **Hung, L. S.** Temperature dependence of atomic transport in ion mixing / L. S. Hung, W. Xia, D. B. Poker, M. Fernandes, K. Tao, S. S. Lau, J. W. Mayer // J. Appl. Phys. – 1988. – Vol. 64, № 5. – P. 2354–2358.
367. **De Reus, R.** Critical temperature for radiation enhanced diffusion and metastable alloy formation in ion beam mixing / R. De Reus, A. M. Vredenberg, A. C. Voorrips, H. C. Tissink, F. W. Saris // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1991. – Vol. 53, № 1. – P. 24–34.
368. **Macht, M.-P.** Limits of depth resolution for sputter sectioning: a secondary ion mass spectrometry investigation of ⁶³Ni in nickel / M.-P. Macht, R. Willecke, V. Naundorf // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 43, № 5. – P. 507–512.
369. **Wang, Z.-L.** Atomic mixing induced by ion-beams / Z.-L. Wang // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1984. – Vol. 2, № 6. – P. 784–791.
370. **Betz, G.** Dynamic surface composition changes in binary alloys under bombardment / G. Betz, M. Opitz, P. Braun // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1981. – Vol. 182/183, № 1. – P. 63–66.
371. **Varga, P.** Preferential sputtering of compounds due to light ion bombardment / P. Varga, E. Taglauer // J. Nucl. Mater. – 1981. – Vol. 111/112. – P. 726–731.
372. **Eckstein, W.** Computer simulation of preferential sputtering / W. Eckstein, W. Moller // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1985. – Vol. 7/8, № 6. – P. 727–734.

373. **Новиков, И. И.** Дефекты кристаллического строения металлов / И. И. Новиков; М.: Металлургия, 1983. – 232 с.
374. **Stepanova, M. G.** Relaxation-induced segregation in the theory of collision mixing / M. G. Stepanova // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1995. – Vol. 95, № 3. – P. 481–484.
375. **Степанова, М. Г.** Релаксация упругих напряжений и релаксационная сегрегация в теории каскадного перемешивания: Препр./ М. Г. Степанова; АН России. Институт прикладной математики; 40-97. – М. : 1997. – 45 с.
376. **Берт, Н. А.** Эффект структурного дальнего действия в арсениде галлия при ионной бомбардировке / Н. А. Берт, И. П. Сошников, М. Г. Степанова // Физика Твёрдого Тела. – 1998. – Т. 40, № 3. – С. 438–440.
377. **Swartzfager, D. G.** Differential sputtering and surface segregation: the role of enhanced diffusion / D. G. Swartzfager, S. B. Zimechi, M. J. Kelly // J. Vac. Sci. Technol. – 1981. – Vol. 19, № 2. – P. 185–191.
378. **Li, R.-S.** Energy dependence of the surface composition changes in Au-Cu alloys under Ar ion bombardment / R.-S. Li, L.-X. Tu, Y.-Z. Sun // Surf. Sci. – 1985. – Vol. 163, № 1. – P. 67–78.
379. **Kornich, G. V.** Calculation of marker distortion at elevated temperatures under low energy ion bombardment / G. V. Kornich, G. Betz // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 129, № 4. – P. 459–464.
380. **Kornich, G. V.** Simulation of mass transport processes in a high temperature Ni crystal under low energy ion bombardment / G. V. Kornich, G. Betz, A. I. Bazhin // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1999. – Vol. 152, № 4. – P. 437–448.
381. **Valiev, S. H.** The radiation stimulated diffusion role in high dose, low energy, high temperature ion bombardment / S. H. Valiev, T. S. Pugacheva, F. G. Jurabekova, S. A. Lem, Y. Miyagawa // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 127/129, № 3. – P. 265–267.
382. **Krishan, K.** Radiation-induced structural changes in alloys / K. Krishan, C. V. Sundaram // Pramana. – 1985. – Vol. 24, № 1. – P. 361–381.
383. **Kelly, R.** On the role of Gibbsian segregation in causing preferential sputtering / R. Kelly // Surf. and Interf. Anal. – 1985. – Vol. 7, № 1. – P. 1–7.
384. **Kelly, R.** New estimates of the characteristic depth of sputtering and of the bombardment-induced segregation ratio / R. Kelly, A. Oliva // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1986. – Vol. 13, № 3. – P. 283–294.

385. **Kelly, R.** Bombardment-induced Gibbsian segregation and its role in secondary ion formation / R. Kelly // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1986. – Vol. 14, № 1. – P. 421–428.
386. **Kelly, R.** The theory of the preferential sputtering of alloys, including the role of Gibbsian segregation / R. Kelly, A. Oliva // Erosion and Growth of Solids stimulated by atom and ion beam, edited by G. Kiriakidis, G. Carter, I. L. Whitton. – 1986. – P. 41–69.
387. **Shimizu, R.** Preferential sputtering / R. Shimizu // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18, № 5. – P. 486–495.
388. **Mejia-Lira, F.** Theory of changes in the concentration profile in binary alloys surfaces under irradiation F. Mejia-Lira, J. L. Moran-Lopez // Surf. Sci. Lett. – 1984. – Vol. 143. – P. 427–432.
389. **Ahmad, M.** A nonmonotonic concentration depth profile of Pt-Rh alloys: A surface segregation study using the atom-probe field ion microscope / M. Ahmad, T. T. Tsong // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1985. – Vol. 3, № 3. – P. 806–807.
390. **Kirschner, J.** Surface segregation and its implementations for sputtering / J. Kirschner // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1985. – V. 7/8, № 7/8. – P. 742–749.
391. **Itoh, M.** Effect of segregation on preferred sputtering of alloys / M. Itoh, K. Morita // Radiat. Effects. – 1984. – Vol. 80, № 3. – P. 163–182.
392. **Kelly, R.** Bombardment-induced compositional change with alloys, oxides, oxysalts and halides. II. The role of segregation / R. Kelly // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1989. – Vol. 39, № 1. – P. 43–56.
393. **Dawson, P. T.** Mechanisms of radiation-induced surface composition modification in V-Cr alloys at high and low temperature / P. T. Dawson, M. P. Hu // Surf. – 1985. – Vol. 163. – P. 198–214.
394. **Li, R. – S.** Influence of bombardment-induced Gibbsian segregation on alloy sputtering / R. – S. Li // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1993. – Vol. 82, № 3. – P. 283–290.
395. **Nagai, Y.** Alloy surface segregation effect on the angular distribution of Ni-Be sputtered particles / Y. Nagai, T. Toshima // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1986. – Vol. 4, № 2. – P. 179–183.
396. **Koshikawa T.** Preferential sputtering of Cu-Ni alloys at low temperature using lower energy Auger electron spectra / T. Koshikawa, K. Goto, N. Saeki, R. Shimizu, E. Sugata // Surf. Sci. – 1979. – Vol. 79, № 2. – P. 461–469.
397. **Li, R. S.** Changes in gold concentration at the surface of a Au-Cu alloy sputtering at low temperature / R. S. Li, T. Koshikawa, K. Goto // Surf. Sci. Lett. – 1982. – Vol. 121. – P. 561–568.

398. **Koshikawa, T.** Surface compositional changes by segregation in sputtered alloys / T. Koshikawa, K. Goto // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18, № 4. – P. 504–508.
399. **Hetzendorf, G.** Preferential sputtering and surface segregation in Au-Pd alloys / G. Hetzendorf, P. Varga // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1987. – Vol. 18, № 4. – P. 501–503.
400. **Hashizume, T.** Surface segregation of Cu-Ni alloys / T. Hashizume, A. Jimbo, T. Sakurai // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1985. – Vol. 3, № 3. – P. 818–819.
401. **Dawson, P. T.** Surface segregation and preferential sputtering in Gr-Mo alloys / P. T. Dawson, S. A. Petrline // Surf. Sci. – 1985. – Vol. 152/153. – P. 925–931.
402. **Li R. S.** Ion radiation-enhanced diffusion and segregation in an Au_{0.56}Cu_{0.44} alloy between-120° C and room temperature / R. S. Li, T. Koshikawa // Surf. Sci. – 1985. – Vol. 151. – P. 459–476.
403. **Li, R. S.** Changes in gold concentration at the surface of a Au-Cu alloy sputtering at low temperature / R. S. Li, T. Koshikawa, K. Goto // Surf. Sci. Lett. – 1982. – Vol. 121. – P. 561–568.
404. **Andersen, H. H.** Surface segregation during alloy sputtering and implantation / H. H. Andersen, B. Stenum, T. Sorensen, H. J. Whitlow // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1983. – Vol. 209/210, № 5. – P. 487–494.
405. **Andersen, H. H.** Transients in the composition of material sputtered from alloy targets / H. H. Andersen, B. Stenum, T. Sorensen, H. J. Whitlow // Nucl. Instr. and Meth. B. – 1984. – Vol. 2, № 5. – P. 601–605.
406. **Grandjean, Y.** Kinetic model for equilibrium and nonequilibrium segregation in concentrated alloys under irradiation / Y. Grandjean, P. Bellon, G. Martin // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 50, № 6. – P. 4228–4231.
407. **Фельдман, Э. П.** Взаимодействие точечных дефектов с границами раздела в гетерофазных средах / Э. П. Фельдман, В. М. Юрченко, О. А. Амиршадян // Известия АН. Серия физическая. – 1997. – Т. 61, № 2. – С. 210–220.
408. **Мельник, Т. Н.** Роль латерального взаимодействия и борьбы за места в кинетике сегрегации примесей на межкристаллитных и межфазных границах / Т. Н. Мельник, В. М. Юрченко, Э. П. Фельдман // Металлофизика и Новейшие Технологии. – 1999. – Т. 21, № 4. – С. 28–34.
409. **Фельдман, Э. П.** Явление кооперации и конкуренции при адсорбции примесей на границах раздела в твердых телах /

- Э. П. Фельдман, В. М. Юрченко, Т. Н. Мельник // *Металлофизика и Новейшие Технологии*. – 2000. – Т. 22, № 1. – С. 60–68.
410. **Gumen, L. N.** Surface segregation of interacting atoms: analytical approach using a thermodynamic model / L. N. Gumen, E. P. Fel'dman, V. M. Yurchenko, T. N. Mel'nik, A. A. Krokhin // *Surf. Sci.* – 2000. – Vol. 445. – P. 526–534.
411. **Posselt, M.** Range profile calculations by direct numerical solution of linearized Boltzmann transport equation / M. Posselt // *Vacuum*. – 1991. – Vol. 42, № 1/2. – P. 9–12.
412. **Posselt, M.** Linear cascade theory for inhomogeneous targets / M. Posselt // *Phys. Stat. Sol.(a)*. – 1989. – Vol. 112. – P. 263–272.
413. **Коноплев, В. М.** Моделирование столкновительного переноса атомов при ионном перемешивании маркерной структуры Cu(W) / В. М. Коноплев // *Поверхность*. – 1990. – № 5. – С. 81–85.
414. Корн, Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1978. – 832 с.
415. **Webb, R. P.** Computer simulation of ion implantation using SUSPRE code / R. P. Webb, I. H. Wilson // *Proc. 2nd International. Conf. on Simulation of Semiconductor Devices and Processes*. – Swansea, UK: Pineridge Press. – 1986. – P. 249–251.
416. **Shulga, V. I.** Pronounced nonlinear behavior of atomic collision sequences induced by keV-energy heavy ions in solids and molecules / V. I. Shulga, M. Vicanek, P. Sigmund // *Phys. Rev. A*. – 1989. – Vol. 39, № 7. – P. 3360–3372.
417. **Корнич, Г. В.** Двухмерное молекулярно-динамическое моделирование вклада столкновительной стадии низкоэнергетических каскадов в ионное перемешивание / Г. В. Корнич // *Поверхность*. – 2000. – № 3. – С. 90–92.
418. **Bacon, D. J.** Computer simulation of threshold displacement events in alloys / D. J. Bacon, H. F. Deng, F. Gao // *J. Nucl. Mater.* – 1993. – Vol. 205. – P. 84–91.
419. **Корнич, Г. В.** Моделирование вклада столкновительной стадии атомных каскадов в низкоэнергетическое ионное перемешивание / Г. В. Корнич // *Металлофизика и Новейшие Технологии*. – 1998. – Т. 20, № 10. – С. 76–80.
420. **Foreman, A. J. E.** The molecular dynamics simulation of irradiation damage cascades in copper using a many-body potential / A. J. E. Foreman, W. J. Phythian, C. A. English // *Phil. Mag. A*. – 1992. – Vol. 66, № 5. – P. 671–695.

421. **Mazzone, A. M.** Defects in irradiated metallic (Au and Ag) and semiconducting (Si) targets simulated by molecular dynamics / A. M. Mazzone // *Phil. Mag. Lett.* – 1994. – Vol. 70, № 2. – P. 93–101.
422. **Корнич, Г. В.** О выборе потенциала при моделировании вклада столкновительной стадии низкоэнергетических атомных каскадов в ионное перемешивание / Г. В. Корнич // *Металлофизика и Новейшие Технологии.* – 1999. – Т. 21, № 7. – С. 33–37.
423. **Корнич, Г. В.** О вычислении уширения концентрационного псевдослоя в процессе низкоэнергетического ионного перемешивания / Г. В. Корнич // *Поверхность.* – 1996. – № 8. – С. 58–61.
424. **Корнич, Г. В.** Моделирование ионно-индуцированных атомных каскадов столкновений вблизи порога распыления / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // *Металлофизика и новейшие технологии.* – 2000. – Т. 22, № 9. – С. 53–60.
425. **Gades, H.** Energy deposition, reflection and sputtering in hyperthermal rare-gas→Cu bombardment / H. Gades, H. M. Urbassek // *Appl. Phys. A.* – 1995. – Vol. 61. – P. 39–43.
426. **Gades, H.** Molecular-dynamics simulation of ad-atom formation under keV-ion bombardment of Pt (1 1 1) / H. Gades, H. M. Urbassek // *Phys. Rev. B.* – 1994. – Vol. 50. – P. 11167–11174.
427. **Michely, T.** Adatoms yields, sputtering yields, and damage patterns of single-ion impacts on Pt (1 1 1) / T. Michely, C. Teichert // *Phys. Rev. B.* – 1994. – Vol. 50, № 15. – P. 11156–11166.
428. **Gnaser, H.** Processes in low-energy ion-surface collisions: preferential sputtering, defect and adatom formation / H. Gnaser // *Appl. Surf. Sci.* – 1996. – Vol. 100/101. – P. 316–328.
429. **Gao, F.** Point-defect and threshold displacement energies in Ni₃Al. Point-defect properties. Calculating defect energies in alloys / F. Gao, D. J. Bacon, G. J. Ackland // *Philos. Mag. A.* – 1993. – Vol. 67, № 2. – P. 275–288.
430. **Ackland, G. J.** Simple N-body potentials for the noble metals and nickel / G. J. Ackland, G. Tichy, V. Vitek, M. W. Finnis // *Philos. Mag. A.* – 1987. – Vol. 56, № 6. – P. 735–756.
431. **Valkealahti, S.** Molecular dynamics simulation of the damage production in Al (1 1 0) surface with slow argon ions / S. Valkealahti, R. M. Nieminen // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1987. – Vol. 18, № 3/4. – P. 365–369.
432. **Gao, F.** Point-defect and threshold displacement energies in Ni₃Al II. Events at the displacement threshold / F. Gao, D. J. Bacon // *Phil. Mag. A.* – 1993. – Vol. 67, № 2. – P. 289–306.

433. **Foreman, A. J. E.** Molecular dynamics calculations of displacement threshold energies and replacement collision sequences in copper using a many-body potential / A. J. E. Foreman, C. A. English, W. J. Phythian // *Philos. Mag. A.* – 1992. – Vol. 66, № 5. – P. 655–669.
434. **Корнич, Г. В.** Моделирование перемещений атомов при бомбардировке меди ионами Ag и Xe с энергиями близкими к порогу распыления / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // *Известия вузов. Физика.* – 2000. – Т. 43, № 10. – С. 59–66.
435. **Bacon, D. J.** Computer simulation of displacement cascade effects in metals / D. J. Bacon, A. F. Calder, F. Gao // *Rad. Effects and Def. in Solids.* – 1997. – Vol. 141. – P. 283–310.
436. **Корніч, Г. В.** Моделювання температурної залежності переміщень атомів в каскадах зіткнень / Г. В. Корнич, Г. Бетц // *Український фізичний журнал.* – 2000. – Т. 45, № 10. – С. 1244–1245.
437. **Корнич, Г. В.** Молекулярно-динамическое моделирование образования дефектов в кристалле алюминия при бомбардировке ионами низких энергий / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // *Физика Твердого Тела.* – 2001. – Т. 43, Вып. 1. – С. 30–34.
438. **Корнич, Г. В.** О механизмах образования дефектов в кристалле алюминия тяжелыми ионами низких энергий / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // *Письма в Журнал Технической Физики.* – 2000. – Т. 26, Выпуск 11. – С. 18–22.
439. **Корнич, Г. В.** Об образовании дефектов в двухслойном кристалле Al/Ni под действием бомбардирующих ионов с близкими к порогу распыления энергиями / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // *Письма в Журнал Технической Физики.* – 2000. – Т. 26, Выпуск 10. – С. 60–65.
440. **Michely, T.** The scanning tunneling microscope as a means for the investigation of ion bombardment effects on metal surfaces / T. Michely, G. Cosma // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1993. – Vol. 82, № 2. – P. 207–219.
441. **Zalm, P. C.** On some factors limiting depth resolution during SIMS profiling / P. C. Zalm, C. J. Vriezema // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1992. – Vol. 67, № 5. – P. 495–499.
442. **Ohashi, T.** Molecular dynamics simulations of low energy atomic collisions between an atom and a substrate: Effect of incident angle and energy / T. Ohashi, K. Miyake, K. Ohashi // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 1997. – Vol. 121, № 1. – P. 40–43.
443. **Van Rossum, M.** Correlation between cohesive energy and mixing rate in ion mixing of metallic bilayers / M. Van Rossum, Y. – T. Cheng,

- W. L. Johnson, M. – A. Nicolet // *Appl. Phys. Lett.* – 1985. – Vol. 46, № 6. – P. 610–612.
444. **Mazzone, A. M.** Molecular dynamics simulation methods applied to ion beam mixing / A. M. Mazzone // *Thin Solid Films.* – 1992. – Vol. 216. – P. 145–148.
445. **Корнич, Г. В.** 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 // Письма в Журнал Технической Физики. – 2000. – Т. 26, Выпуск 9. – С. 31–35.
446. **Murphy S. M.** Theoretical modelling of solute segregation to a free surface in irradiated dilute alloys / S. M. Murphy // *Philosop. Mag. A.* – 1989. – Vol. 59, № 5. – P. 953–965.
447. **Hashimoto, T.** Steady-State Solution of Point-Defect Diffusion Profiles under Irradiation / T. Hashimoto // *Jap. J. Appl. Phys.* – 1990. – Vol. 29, № 1. – P. 177–178.
448. **Lam, N. Q.** Steady-state point-defect diffusion profiles in solids during irradiation / N. Q. Lam, S. J. Rothman // *Radiat. Eff.* – 1974. – Vol. 23, № 1. – P. 53–59.
449. **Muhlhoff, M.** Ion beam mixing of α -MoSi₂ / M. Muhlhoff, H. M. Urbassek // *Radiat. Effects and Defects in Solids.* – 1997. – Vol. 142. – P. 517–524.
450. **Корнич, Г. В.** Моделирование низкоэнергетического ионного перемешивания примесного слоя алюминия в никеле / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // *Поверхность.* – 2000. – № 10. – С. 32–37.
451. **Корнич, Г. В.** Двухэтапное моделирование ионного перемешивания примесных профилей низкой концентрации / Г. В. Корнич, Г. Бетц, А. И. Бажин // *Известия Академии Наук. Серия физическая.* – 2000. – Т. 64, № 4. – С. 709–715.
452. **Kornich, G. V.** Molecular dynamics simulation of mass transport processes in a Ni crystal with Al atoms as impurity under low energy ion bombardment / G. V. Kornich, G. Betz, A. I. Bazhin // *Nucl. Instr. and Meth. B.* – 2001. – Vol. 173, № 4. – P. 417–426.

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

МД	-	молекулярна динаміка;
ЗБЛ	-	потенціал Зіглера – Бірзака – Літмарка;
ЕОС	-	електронна Оже-спектрометрія;
СКЗ	-	середньоквадратичне зміщення атомів у каскадах (нм^2);
V_f	-	швидкість руху поверхні, що розпилюється;
$Y, Y_{1,2}$	-	коефіцієнти розпилення (атомів/іон), відповідно, однокомпонентної мішені, домішки і матриці (для двокомпонентної системи);
L	-	область перемішування (нм);
$D, D(x), D_{eff}(x)$	-	коефіцієнт іонного перемішування або дифузії ($\text{нм}^2/\text{с}$);
$V(x), V_{1,2}(x)$	-	середня швидкість дрейфу атомів віддачі (нм/с), відповідно, в однокомпонентній мішені, домішки і матриці (для двокомпонентної мішені);
$C_{1,2}(x,t)$	-	відносна, нормована на одиницю, концентрація компонентів 1 і 2 ($C(x,t) = N(x,t)/N$, де $N(x,t)$ – абсолютна концентрація атомів (атомів/м ³) у залежності від координати x і часу t , N – абсолютна концентрація вузлів початкової ґратки кристала (вузлів/м ³));
d	-	стала ґратки (нм);
I	-	густина потоку іонів (іонів/м ² · с);
ПЗЗ	-	послідовність зіткнень заміщення атомів у кристалі;
$\langle 110 \rangle$	-	еквівалентні по відношенню до напрямку $[110]$ напрямки у кристалі;
$[100]$	-	напрямок у кристалі;
(100)	-	площина, для якої напрямок $[100]$ є нормальним;
N_{ws}	-	кількість атомних перемішень атомів з їх початкових комірок Вігнера – Зейтца (перемішень/іон);
$N_v, N_{v,s}, N_{v,v}$	-	кількість, відповідно, загальна, поверхневих і об'ємних вакансій, що генеруються за один каскад у кристалі (вакансій/іон);
N_{in}	-	кількість міжвузлових атомів, що генеруються за один каскад у кристалі (міжвузлових атомів/іон);
N_{ad}	-	кількість радіаційно-адсорбованих атомів, що генеруються за один каскад у кристалі (ад-атомів/іон);
R^2	-	СКЗ атомів у каскаді (нм^2);
R_x^2	-	СКЗ атомів у каскаді (нм^2) в напрямку $[100]$;

R_{yz}^2	-	СКЗ атомів у каскаді (nm^2) в напрямках, що перпендикулярні до напрямку [100];
$R_{x, ad}^2$	-	СКЗ ад-атомів у каскаді (nm^2) в напрямку [100];
$R_{yz, ad}^2$	-	СКЗ ад-атомів у каскаді (nm^2) в напрямках, що перпендикулярні до напрямку [100];
РПД	-	радіаційно-прискорена дифузія;
ІП	-	іонне перемішування;
$I/\mu_{i, v}$	-	швидкісно-обмежуючий параметр,
$C_{i, v}(x, t)$	-	концентрації вакансій (v) і міжвузлових атомів (i), як функції координати x і часу t ;
C_s	-	відносна концентрація точкових стоків дефектів у об'ємі кристала;
$\alpha_{iv}, \alpha_{is}, \alpha_{vs}$	-	коефіцієнти взаємної рекомбінації вакансій і міжвузлових атомів і їх анігіляції на внутрішніх стоках дефектів (s);
$U(x)$	-	ефективна швидкість атомів домішки Al у кристалі Ni, як функція координати x .
T_m	-	температура плавлення кристала;
τ	-	об'єм одного атома;
$F(x, z)$	-	функція атомних переміщень;
$h(x)$	-	релокаційна функція;
E_{st}	-	енергія припинення розрахунку каскаду;
σ^2	-	поширення прошарку.

Наукове видання

Корніч Григорій Володимирович

**ПОВЕРХНЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
ПРИ БОМБАРДУВАННІ
НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНИМИ ІОНАМИ:
МОДЕЛЮВАННЯ І АНАЛІЗ АТОМНОЇ СИСТЕМИ**

Комп'ютерний набір: Корніч Г.В.
Графічний дизайн: Потапова Ю.А.
МД-розрахунок атомного розподілу: Корніч Г.В.
Верстання: Дяченко О.О.

Підписано до друку 05.09.2019. Формат 60×84/16. Ум. друк. арк. 17,55.
Тираж 100 прим. Зам. № 1014.

Запорізький національний технічний університет
Україна, 69063, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 64
Тел.: (061) 769–82–96, 220–12–14

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 2394 від 27.12.2005.