

УДК 537.534.7

Д.А. Терентьев (5 курс, каф. ЭЯФ), Е.Е. Журкин, доц., к.ф.-м.н.

ИЗУЧЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ ИОННОМ РАСПЫЛЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящее время пучки ускоренных тяжелых заряженных частиц широко используются как в научных, так и технологических целях. На поверхности материалов, подвергающихся ионной бомбардировке, происходит эрозия (распыление). В самом материале при этом развивается каскад атомных соударений. При облучении вещества, структура облучаемого образца может существенно изменяться. Такие ситуации могут возникать при высоких флюенсах облучения, либо при бомбардировке мишени тяжелыми ионами или молекулами. В ситуации, когда плотность энергии в одиночном каскаде велика, (т.е. средняя кинетическая энергия приходящаяся на один атом каскада превышает энергию связи материала) говорят о так называемых плотных каскадах или столкновительном пике.

С целью изучения возможного влияния эффекта нелинейности на характеристики распыления, в работе проведено более детальное рассмотрение распыления вольфрамовой, медной, алюминиевой и арсенид галиевой мишеней, под действием ионов Ni, Ar, Cs. Выявлены простые физические критерии, позволяющие оценить степень нелинейности в рассматриваемом каскаде путем оценок средней кинетической энергии и относительной доли движущихся атомов в каскадной области. Продемонстрированы примеры расчета каскадов развивающихся в разных режимах с использованием двух альтернативных методов – метода Монте-Карло (МС), применяя программу TRIRS.SP [1], и методом молекулярной динамики (МД) используя программу SIMKIT [2]. Было показано, что введенные критерии нелинейности позволяют адекватно оценивать степень нелинейности каскада. Из проведенных расчетов видно, что коэффициент распыления в режиме нелинейных каскадов подсчитанный разными методами различается в несколько раз. В тоже время в случае линейных каскадов при использовании одинаковых моделей рассеяния и электронного торможения, методы МД и МС дают одинаковые результаты.

ЛИТЕРАТУРА:

1. E.E. Zhurkin, D.P. Ivanov « A MONTE-CARLO computer simulation of ion sputtering» // PROCEEDING of SPIE Vol. 3345 (1997) pp.252-259
2. M. Karolewski «Simulation of Atomic Collisions in Solids», <http://oak.oakland.edu/pub/simtelnet/win95/science>.