

2. Промохов А.А. Компьютерное моделирование распыления твердых тел ионным пучком¹

1. Понятие распыления

1.1. Как было открыто распыление

Явление распыления было впервые обнаружено более 145 лет назад² при исследовании электрических разрядов в газах в качестве вредного паразитного эффекта. Было замечено, что материал катода попадает на стенки разрядной трубки и загрязняет их. Сначала считали, что катод просто испаряется. Однако затем выяснилось, что это явление наблюдается и для холодного катода.

Затем был поставлен остроумный опыт: в катоде было проделано отверстие, и за катодом (т.е. со стороны катода, противоположной разряду) была поставлена металлическая мишень. Было обнаружено, что эта мишень подвержена аналогичному явлению – металл переносится из нее на стенки трубки, несмотря на то, что мишень остается холодной и даже не находится в непосредственном контакте с газовым разрядом.

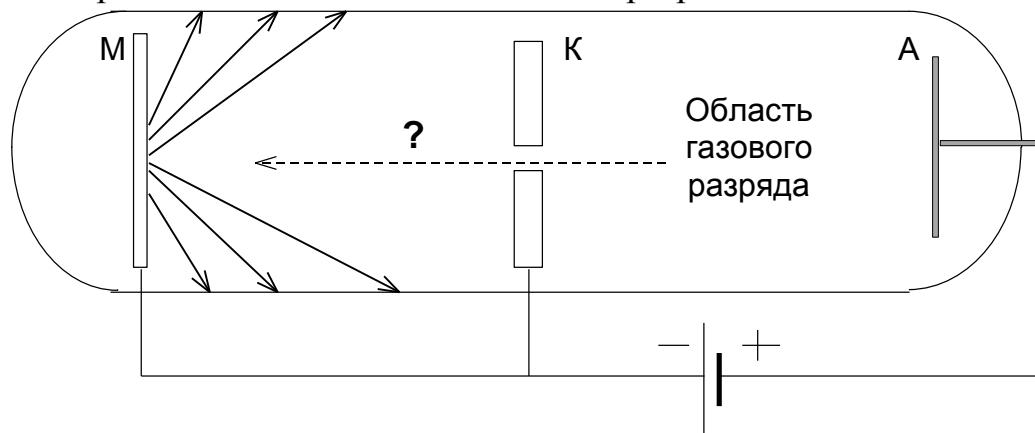


Рис. 1. Эксперимент с распылением дополнительной мишени (М), расположенной за катодом (К).

Логично объяснить происходящее так: в газовом разряде возникает "нечто", и это нечто через отверстие (канал) в катоде достигает мишени и распыляет ее. "Нечто" получило название "каналовых лучей" и было подвергнуто дальнейшим исследованиям. Постепенно было установлено, что "лучи" являются положительно заряженными ионами газа, которые образуют-

¹ © А.А. Промохов, 2012.

© Физический факультет МГУ, 2012

² W.R.Grove, Phil. Mag., vol. 5, p. 203 (1853).

ся в газовом разряде и притягиваются электрическим полем к катоду (напомним, что катодом называется отрицательный электрод). Налетая на катод, эти ускоренные ионы выбивают из него атомы (а также ионы, кластеры и проч.).

Распыление нейтральными атомами, электронами и фотонами было обнаружено значительно позднее. Оказалось также, что распыление происходит и в природе, но только не на Земле, где воздух задерживает движущиеся элементарные частицы, а на поверхности Луны и других лишенных атмосферы небесных тел под воздействием солнечного ветра.

1.2. Современное определение

Распыление – это удаление вещества из твердого тела в виде атомов, ионов, молекул или кластеров³, в результате бомбардировки поверхности твердого тела какими-либо частицами (атомами, ионами, молекулами, электронами, фотонами). В научной и производственной практике чаще всего имеют дело с распылением ионами⁴.

Примечание по терминологии: налетающий на мишень ион называют также падающим, распыляющим, ускоренным, бомбардирующим. В качестве синонимов слова "мишень" используются слова "образец" и "распыляемая поверхность".

2. Механизм распыления

Каким же образом падающие ионы заставляют атомы покидать поверхность?

Какое-то время считали, что падающий ион разогревает микроскопический участок поверхности вблизи точки своего падения, и атомы мишени испаряются из этой микроскопической области. Компьютерные расчеты показали, однако, что почти все распыленные атомы выходят из мишени задолго до того, как возмущенная падением иона область мишени успеет приблизиться к состоянию термодинамического равновесия. Впро-

³ Кластер (от англ. cluster) - это несколько атомов одного элемента, образующих устойчивое целое. От молекулы кластер отличается, по существу, лишь малой энергией связи, так что четкой границы между кластерами и молекулами нет.

⁴ Распыление электронами и фотонами, как правило, очень слабое, а распыление атомами применяется редко, поскольку создать пучок ускоренных атомов труднее, чем аналогичный пучок ионов. Ниже, если не оговорено иное, под "распылением" подразумевается распыление ионами.

чем, и до появления мощных и доступных компьютеров были основания отвергать модель испарения – поскольку еще в 1965 году эксперимент по распылению монокристалла меди⁵ показал, что выбитые из мишени атомы меди "отдают предпочтение" некоторым направлениям распространения (в соответствии с симметрией кристаллической решетки), как это видно из рис. 3, в то время как при испарении этого не происходит. Схема эксперимента приведена на рис. 2.

По современным представлениям, в значительной степени основанным на компьютерных расчетах распыления⁶, большинство вылетевших атомов выбиваются после небольшого числа столкновений в мишени⁷.

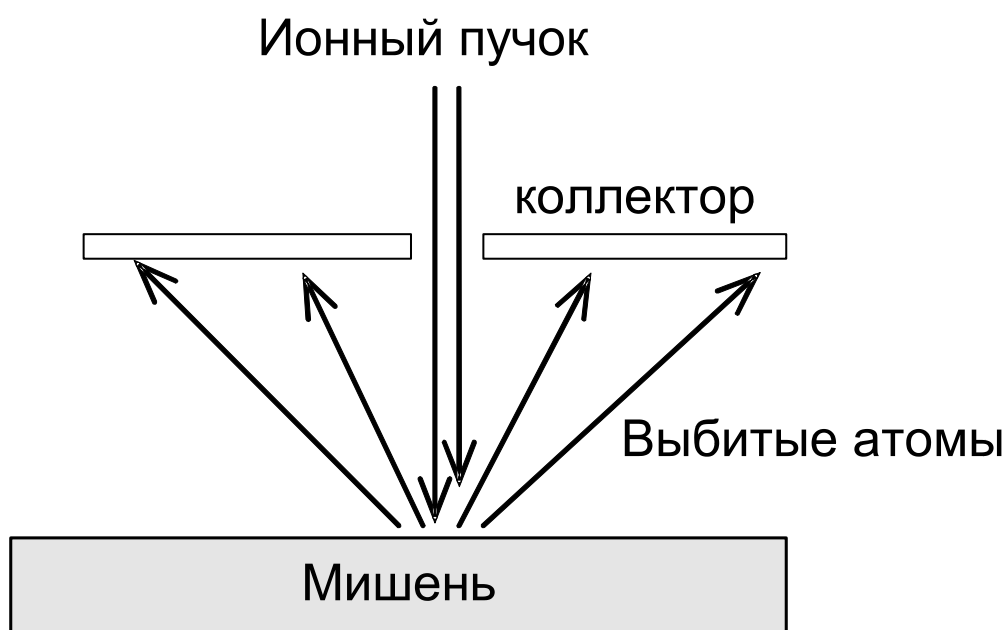


Рис. 2. Схема эксперимента 1965 г. по определению направлений выхода распыленных атомов. Ионный пучок проходит через отверстие в коллекторе.

⁵ До 1965 года пространственные распределения распыленного материала определялись только для поликристаллов.

⁶ Подтверждением самих этих расчетов является согласие между рассчитанными и экспериментально наблюдаемыми характеристиками распыления, такими как выход распыленных частиц на один падающий ион, пространственные распределения вылетающих частиц и др., а также между используемыми в расчетах потенциалами взаимодействия атомов и экспериментальными данными о сечениях рассеяния атомов друг на друге в газовой фазе.

⁷ Вы увидите это сами на экране монитора при выполнении задачи.

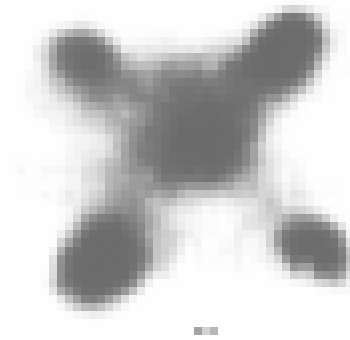


Рис. 3. Осадок на коллекторе, полученный при распылении монокристалла меди в эксперименте 1965 г.

3. Применения распыления

Распыление может вызываться падением на твердое тело в принципе любой элементарной частицы – фотона, электрона, протона, нейтрона и проч., а также падением составной частицы – атома, иона, молекулы. Однако для практических целей применяют почти исключительно ионное распыление⁸. Существует три основных применения распыления: определение состава поверхности, очистка и полировка поверхности, напыление пленок. Рассмотрим эти применения подробнее.

Определение состава поверхности происходит путем регистрации распыленных из нее атомных частиц. Проще всего зарегистрировать вылетевшие ионы, но количественный анализ в этом случае затруднителен, так

⁸ Распыление фотонами, электронами и нейтронами слишком слабое. Нейтроны к тому же трудно собрать в плотный пучок. Распыление ионизованными молекулами в принципе мало отличается от распыления ионами, но создать пучок ионизованных молекул обычно сложнее технически. То же верно для пучка атомов. Для получения пучка атомов сначала создают ионный пучок, который проходит через обогащенную электронами область, где часть ионов нейтрализуется; затем оставшиеся в пучке ионы отклоняются электрическим или магнитным полем и выводятся из пучка. Если распыляемая мишень - диэлектрик, применение атомного пучка вместо ионного позволяет избежать накопления заряда на бомбардируемом участке поверхности (этот заряд может исказить экспериментальные данные). Однако для решения этой проблемы чаще пользуются другим способом: одновременно с ионным пучком на мишень направляют электронный пучок для нейтрализации мишени. Если же распыляемая мишень - проводник, достаточно ее заземлить, и можно без проблем пользоваться ионами.

как вероятность ионизации (отношение числа вылетевших ионов какого-либо элемента к общему числу вылетевших нейтральных атомов и ионов этого элемента) чрезвычайно чувствительна к наличию даже микроскопических количеств примесей на поверхности. Гораздо более достоверный количественный анализ возможен путем регистрации атомов, которые для этого приходится превратить в ионы⁹. Можно также регистрировать излучение выбитых атомов и определять элементы по характеристическим линиям спектра.

Очистка поверхности: поверхность, находившаяся в контакте с воздухом, всегда покрыта слоем адсорбированных атомов и молекул. Даже если этот слой очень тонок (например, всего один слой атомов), по меркам технологий, применяемых в производстве приборов твердотельной электроники, поверхность является "грязной". Чтобы поверхность не загрязнялась, работа с ней ведется в вакууме, но чистую поверхность надо сначала получить. Это можно сделать путем обработки поверхности ионным пучком¹⁰, который снимает верхние слои атомов, содержащие примеси. Конечно, бомбардирующие поверхность ионы сами внедряются (имплантируются) в нее, но если использовать ионы инертного газа (аргона, криптона и др.), то от них можно в значительной степени избавиться путем отжига (прогрева) поверхности, а кроме того, благодаря химической инертности они не оказывают заметного влияния на свойства поверхности.

Полировка поверхности ионным пучком позволяет получить очень гладкие поверхности (уже говорят об атомно-гладких поверхностях), но для этого требуется тщательно подбирать тип ионов, их угол падения, энергию и дозу¹¹.

⁹ Атомы, как и ионы, можно регистрировать с помощью вторично-электронных умножителей, но эти устройства регистрации не позволяют отличить атомы/ионы разных элементов друг от друга. Ионы разных элементов можно "развести" с помощью электрического или магнитного поля, поскольку они различны по заряду и массе и поэтому движутся по разным траекториям. Преобразование выбитых атомов в ионы называется пост-ионизацией, потому что происходит после того, как выбитый атом покинул поверхность. Для этого на пути движения распыленных атомов создают поток ускоренных электронов или пропускают через эту область пространства лазерный луч со специально подобранной длиной волны.

¹⁰ Другой популярный способ - раскалывание образца в вакууме.

¹¹ Дозой называется число ионов, упавших на единицу площади. Ионное

"Использование распыления для напыления пленок" звучит загадочно, но на самом деле все просто: рядом с распыляемой мишенью ставится пластина (называемая в данном случае подложкой или коллектором), на которую попадают распыленные атомы, из которых постепенно вырастает пленка.

4. Закономерности распыления

4.1. Состояния распыленных частиц

Выбитые падающим ионом атомы могут покинуть мишень в электронейтральном состоянии или в виде положительных или отрицательных ионов, а также в составе молекул или кластеров, причем молекула или кластер также могут нести электрический заряд. Число возможных комбинаций огромно, однако здесь действуют некоторые простые правила, а именно: в подавляющем большинстве случаев число вылетевших ионов на 2–4 порядка меньше числа вылетевших атомов; число вылетевших кластеров и молекул тоже гораздо меньше числа атомов. Что касается многозарядных ионов, число ионов с зарядом n быстро (по степенному закону) спадает с ростом n . Аналогичным образом, число кластеров быстро убывает с ростом числа атомов в кластере.

Электронные оболочки вылетающих частиц могут находиться в возбужденных состояниях. Если достаточно много атомов вылетают в возбужденном состоянии, распадающемся с излучением кванта света, это свечение можно зарегистрировать¹². Здесь наблюдается следующая вполне естественная закономерность: чем сильнее возбуждение (чем больше его энергия), тем реже оно встречается.

Если распыление применяется для обработки поверхности или для того, чтобы осадить распыленный материал на подложку с получением тонкой пленки, состояние распыленного материала малосущественно. Однако оно важно для анализа поверхности, так как регистрация ионов и фотонов технически проще, чем регистрация атомов (о регистрации атомов см. сноску выше).

облучение в больших дозах может приводить к образованию рельефа в виде конусов, "поставленных" на поверхность, с размером порядка единиц микрометров и более, а также к блистерингу ("шелушению") поверхности.

¹² Иногда свечение распыляемых атомов можно даже наблюдать невооруженным глазом.

Зарядовое состояние распыленных атомных частиц (т.е. являются они ионами или атомами) иногда сильно зависит от наличия примесей на поверхности. Так, например, эмиссия вторичных ионов из чистых металлов незначительна. Однако наличие на поверхности адсорбированных атомов электроотрицательных элементов (например, кислорода) или электроположительных элементов (например, цезия) может очень сильно (на несколько порядков) повысить выход положительных или отрицательных ионов. Это позволяет повысить чувствительность методик анализа состава поверхности, основанных на регистрации вторичных ионов, но это же явление уменьшает воспроизводимость результатов измерений и, следовательно, препятствует проведению точного количественного анализа этими методиками.

4.2. Количество распыленных частиц. Понятие коэффициента распыления

Количество распыленных частиц, как и следовало ожидать, в первом приближении пропорционально числу упавших на мишень ионов¹³. Соответствующий коэффициент пропорциональности называют коэффициентом распыления (реже – выходом распыления, под влиянием английского термина *sputtering yield*). Его принято обозначать латинской буквой *Y* (от слова *yield*) или буквой *S* (от слова *sputtering*):

$$S = \text{число выбитых атомов} / \text{число упавших ионов},$$

где в число выбитых атомов включаются атомы, вылетевшие в виде ионов и в составе кластеров. Если выбиваются атомы нескольких сортов, для каждого из них можно ввести свой коэффициент распыления (называемый парциальным).

От чего зависит коэффициент распыления

Коэффициент распыления зависит от мишени (состава, структуры, ориентации поверхности по отношению к кристаллографической решетке, шероховатости поверхности) и от падающих ионов (типа, энергии, направления падения). Чем больше энергия связи¹⁴ атомов на поверхности, тем

¹³ Пропорциональность нарушается при очень больших интенсивностях (из-за нагрева поверхности) или дозах (когда происходит блистеринг, или "шелушение"). Напомним, что интенсивностью бомбардирующего потока ионов называется число ионов на единицу площади в единицу времени, а дозой - число ионов на единицу площади за все время облучения.

¹⁴ Эта энергия равна работе, которую нужно затратить на отрыв одного атома от поверхности. Если поверхность не идеальная, и атомы на ней не

меньше коэффициент распыления. Чем больше атомный номер падающего иона, тем больше коэффициент распыления. Причина в том, что ион с более высоким атомным номером имеет больший радиус и более сильно взаимодействует с атомами мишени.

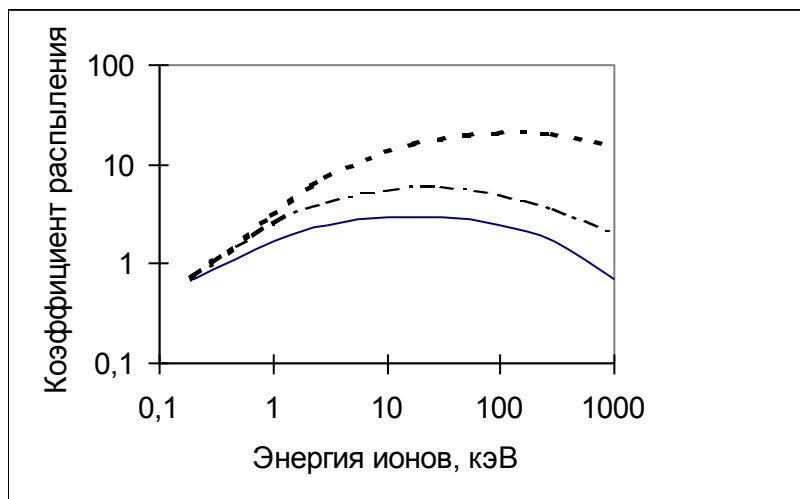


Рис. 4. Коэффициент распыления меди (поликристалл) благородными газами в зависимости от энергии падающих ионов. Сплошная линия – неон, штрих-пунктирная – аргон, штриховая – ксенон. Ионы падают по нормали к поверхности.

При возрастании энергии падающего иона коэффициент распыления сначала растет, затем падает. Максимум приходится на энергию от нескольких кэВ до нескольких десятков кэВ (см. рис. 4). Возрастающий ход этой зависимости при малых энергиях вполне естественен, а вот убывающее поведение при больших энергиях объясняется тем, что быстрый ион "слишком быстро" пролетает мимо поверхностных атомов мишени, не успевая передать им энергию и импульс. Конечно, рано или поздно вся кинетическая энергия иона будет им потеряна и передана атомам мишени, но если эти атомы находятся на "большой" глубине (порядка десятков атомных слоев), у них практически нет шансов выйти из мишени или выбить из нее другие атомы. Для тяжелых ионов указанный спад в зависимости от энергии начинается при более высокой энергии, поскольку их скорость (при той же энергии) меньше.

полностью равноправны, тогда эта работа не является точно определенной величиной - она зависит от расположения отрываемого атома по отношению к его соседям. В упрощенных моделях этой неопределенностью пренебрегают.

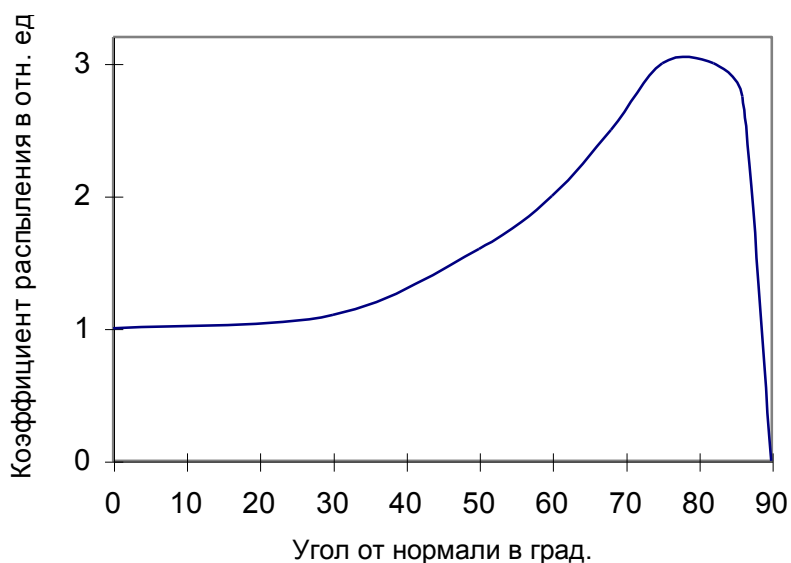


Рис. 5. Коэффициент распыления (нормированный на 1 при 0°) поликристалла меди ионами аргона с энергией 27 кэВ в зависимости от полярного угла падения ионов (угол отсчитывается от нормали).

Зависимость от угла падения ионов следующая: при отклонении ионного пучка от нормали к поверхности S сначала растет, достигает максимума при 60–70 градусах, а затем падает до нуля (см. рис. 5).

Значение в максимуме может многократно (в 10 и более раз) превосходить значение при падении по нормали. Рост в диапазоне 0° – 60° объясняется следующим образом. Когда движущаяся частица налетает на покоящуюся, она передает ей тем больше энергии, чем ближе столкновение к лобовому. Но при лобовом столкновении не происходит изменения направления движения. Если же столкновение не лобовое, "ударенная" частица получает меньше энергии. Потери энергии в цепочке атомных столкновений, начавшейся на падающем ионе и заканчивающейся на распыленном атоме, оказываются (в среднем) тем меньше, чем меньше разница в направлениях движения падающего иона и распыленного атома. Если первичный ион падает по нормали, разница в направлениях движения падающего иона и распыленного атома не может быть меньше 90 градусов. При отклонении ионного пучка от нормали это ограничение ослабляется, поэтому коэффициент распыления растет.

Этот механизм продолжает действовать и при скользящем падении (падении под малым углом от поверхности), но постепенно его затмевает другой эффект: отражение падающих ионов от мишени как целого. Представьте себе ион, который летит вдоль цепочки атомов, постепенно при-

ближаясь к ней (рис. 6). Каждому атому ион успевает передать лишь небольшую часть своего импульса. Как только компонента импульса иона, перпендикулярная цепочке, поменяет знак, ион начнет удаляться от нее. В результате ион отражается, так и не передав хотя бы одному атому достаточно большой импульс. Этим и объясняется уменьшение коэффициента распыления при очень наклонном падении.

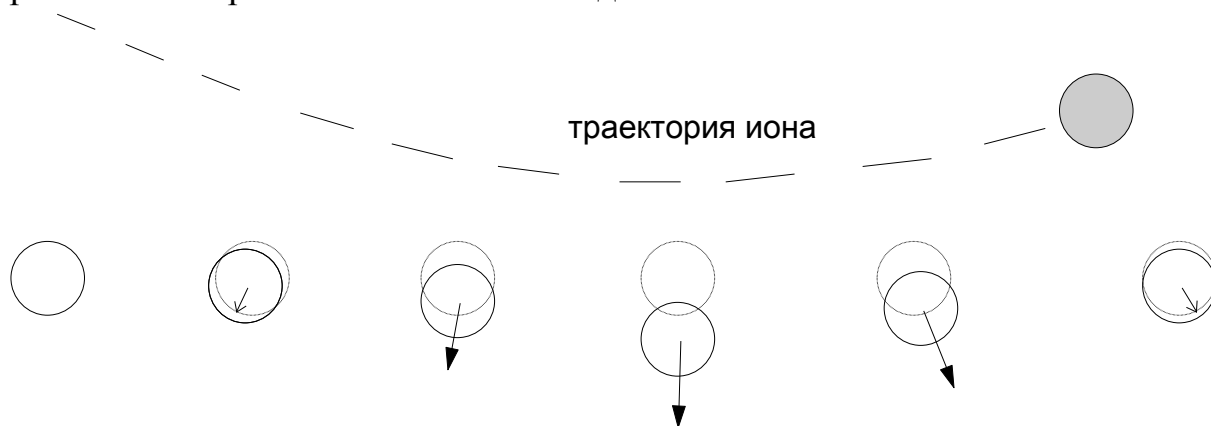


Рис. 6. Отражение иона от цепочки атомов. Пунктирные окружности – начальные положения атомов. Сплошные окружности – положения атомов в момент времени, когда ион находится в положении, показанном закрашенным кружком. Стрелки – скорости атомов в тот же момент времени.

При распылении монокристалла в дополнение к зависимости от полярного угла падения (т.е. угла от нормали к поверхности) добавляется зависимость от азимутального угла падения (т.е. угла между проекцией ионного пучка на плоскость поверхности и каким-либо выбранным направлением в этой плоскости). Если направление ионного пучка оказывается близким (в пределах 5–10 градусов) к какому-либо направлению плотной упаковки атомов монокристалла¹⁵, коэффициент распыления снижается. Это связывается с известным явлением каналирования ионов: если ион попадает в "канал" (т.е. промежуток между плотными рядами атомов), и при этом его импульс направлен вдоль канала, он может пройти сравнительно большое расстояние в кристалле, передавая лишь очень небольшую долю своей энергии каждому из атомов, мимо которых он пролетает (см. рис. 7).

¹⁵ Направлением плотной упаковки называют направление какого-либо плотного атомного ряда. Направлением плотнейшей упаковки называют направление наиболее плотного атомного ряда. Атомный ряд - совокупность атомов, лежащих на одной прямой.

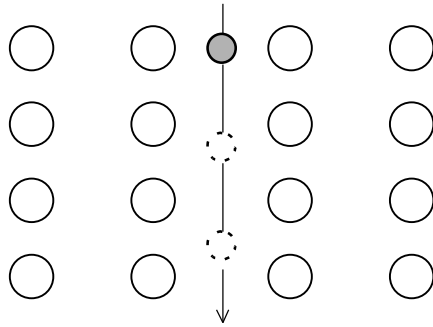


Рис. 7. Каналирование падающего иона между плотноупакованными рядами атомов (в данном случае вертикальными). Большие кружки – атомы, маленькие – положения иона в процессе движения.

Поэтому при падении вблизи направления плотной упаковки, когда часть ионов попадает в канал, коэффициент распыления уменьшается. Зависимость от полярного угла (при фиксированном азимутальном) в случае монокристалла тоже меняется по сравнению с поликристаллом: хотя общий ход ее остается прежним, на кривой появляются дополнительные максимумы и минимумы, вызванные эффектом каналирования.

4.3. Направления вылета распыленных частиц. Понятие пространственного распределения

Пространственные распределения распыленных частиц, иначе называемые распределениями распыленных частиц по направлениям вылета¹⁶, можно получить на коллекторе – металлической пластине, поставленной вблизи распыляемой мишени, на которую попадают и к которой "прилипают"¹⁷

¹⁶ Математическая формулировка следующая: $I(\theta, \varphi) = dN/d\Omega$, где I - функция распределения, углы θ и φ определяют направление выхода распыленной частицы, dN - число частиц, вылетевших вблизи этого направления в телесный угол $d\Omega$

¹⁷ Прилипают, впрочем, не все. Отношение числа прилипших к числу всех прилетевших атомов (включая сюда также ионы, кластеры и проч.) называют коэффициентом прилипания. Он зависит от угла падения атома на коллектор, причем недостаточно хорошо известным образом, поэтому для получения точных данных о пространственном распределении приходится использовать сферический коллектор, в центре которого находится мишень. Можно обойтись цилиндрическим коллектором, но тогда за один раз (с одного коллектора) можно будет измерить распределение интенсивности только для одного значения азимутального угла.

распыленные атомы (для примера см. фотографию коллектора на рис. 3). В случае поликристаллических и аморфных мишеней пространственные распределения не зависят от азимутального угла. Зависимость от полярного угла обычно примерно косинусоидальная, $I(\theta, \varphi) \sim \cos(\theta)$ (то есть интенсивность выхода в заданном направлении пропорциональна телесному углу, под которым видна единичная площадка на поверхности мишени, если смотреть на мишень в этом направлении). При распылении легкими ионами пространственное распределение отклоняется от закона косинуса в сторону усиления интенсивности выхода вблизи нормали к поверхности, а при распылении тяжелыми ионами – в противоположную сторону.

В случае монокристалла возникает зависимость от азимутального угла (на рис. 3 изображен именно такой случай). Как следует из компьютерных расчетов, пространственные распределения из монокристалла определяются расположением атомов в верхнем слое атомов мишени, и не зависят от расположения атомов в ниже лежащих слоях. Атомы верхнего слоя, расположенные рядом с выбиваемым атомом (атомом, который получил направленный "наружу" импульс), ограничивают возможные направления его выхода. Этот механизм формирования пространственных распределений получил название поверхностного. Раньше, до компьютерных расчетов, предполагали, что пространственные распределения формируются благодаря фокусонам. Фокусонном называют последовательность из нескольких почти лобовых столкновений, в каждом из которых атом почти полностью передает свой импульс и энергию следующему атому в плотноупакованном ряду (см. рис. 8).

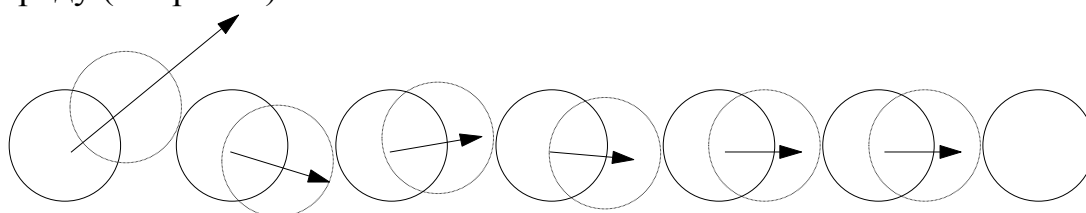


Рис. 8. Фокусон – цепочка столкновений в атомном ряду. Чтобы более наглядно изобразить передачу и фокусировку импульса, атомы представлены твердыми сферами. Пунктиром показано положение каждой сферы в момент удара о следующую сферу. Стрелки показывают скорость каждой сферы до удара о следующую.

Если предположить, что значительная доля распыленных атомов являются завершающими атомами фокусонных, атомы должны вылетать преимущественно в направлениях плотной упаковки – а именно это и наблюдается в

эксперименте. Компьютерные расчеты, однако, показали, что хотя фокусы действительно возникают при ионной бомбардировке, они в основном направлены вглубь мишени (а не наружу) и не существенны для распыления (по крайней мере при обычных энергиях падающих ионов – т.е. до 100 кэВ). Возникает вопрос, а почему же все–таки максимумы интенсивности в пространственных распределениях распыленных атомов почти всегда совпадают с направлениями плотной упаковки? Однозначный ответ здесь дать трудно. Во–первых, поверхностный механизм имеет тенденцию к формированию максимумов именно в направлениях, совпадающих с направлениями плотной упаковки¹⁸. Во–вторых, направлений более–или–менее плотной упаковки обычно достаточно много для того, чтобы какое–нибудь из них с достаточной точностью совпало с максимумом интенсивности. Но не исключено, что в компьютерных расчетах мы не учитываем каких–то особенностей взаимодействия атомов твердого тела, побуждающих их вылетать именно в направлениях плотной упаковки.

Пространственные распределения почти не зависят от энергии ионов в широком диапазоне энергий. Зависимость от направления падения ионов следующая. Если ионы падают не по нормали, пространственное распределение становится асимметричным: сторона, с которой приходит ионный пучок, ослабевает, а противоположная сторона усиливается. Это объясняется, как выражаются на своем жаргоне специалисты, "трудностью разворота импульса" – в каскаде столкновений всегда больше атомов, движущихся в направлении падающего иона, чем движущихся в противоположном направлении (см. об этом также в разделе "Количество распыленных частиц", подраздел "От чего зависит коэффициент распыления").

5. Расчет распыления

5.1. Введение

Расчет распыления также называют "компьютерным моделированием" распыления. Слово "моделирование", которое часто используется в смысле

¹⁸ Скорее всего, эти совпадения не случайны. Рассмотрим поверхностный атом (А). Один из его ближайших соседей (В) оказался выше поверхности и поэтому отсутствует. Как расположатся атомы С и D, лежащие в поверхностном слое и ближайšie к А и В? Скорее всего, симметрично относительно проекции направления АВ на плоскость поверхности. Если атом А начинает двигаться от поверхности с небольшим азимутальным отклонением от направления АВ, один из пары С-D подправит его траекторию так, чтобы она стала ближе к линии АВ.

"подбор модели", в данном случае приобретает другой смысл, а именно "имитация развития процессов в системе во времени". По-английски это именно так и называют – simulation (симуляция, имитация), а не modelling (моделирование).

В конечном итоге расчет должен дать сведения о движении атомов. Компьютер позволяет это сделать, но только если известны начальные условия и законы движения. К сожалению, эти законы известны лишь приближенно¹⁹. Многие физики, впрочем, верят, что если когда-нибудь удастся провести полный квантовомеханический расчет (с волновыми функциями электронов и ядер), то это и будет точный результат²⁰. Но для такого расчета современные компьютеры слабоваты. В настоящее время компьютерные расчеты распыления проводятся без учета (или с очень схематичным учетом) процессов в электронных оболочках частиц. Вместо этого рассчитывается движение атомов как неделимых материальных точек.

5.2. Физическая модель

Для расчета распыления нам необходимо знать, во-первых, законы взаимодействия атомов мишени между собой и с падающим ионом и, во-вторых, начальное расположение атомов мишени.

От чего зависит сила, действующая на атом²¹? Точного ответа дать нельзя – ведь само представление о твердом теле как о совокупности атомов является приближением к более строгой квантовомеханической модели. Представляется, однако, разумным и удобным принять, что сила, действующая на каждый из атомов, однозначно определяется положением всех атомов в тот же момент времени. Почти все расчеты распыления выполняются в

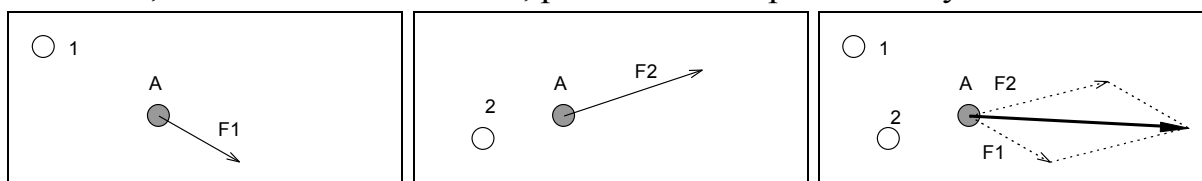
¹⁹ Начальные условия известны тоже не вполне точно. Даже на идеальной (не содержащей дефектов) поверхности атомы расположены несколько иначе, чем в объеме (т. наз. релаксация поверхности) или даже совершенно по-другому (реконструкция поверхности). Данные о релаксации и реконструкции имеются не для всех случаев, и они не всегда точны. Если же вспомнить о существовании дефектов, проблема еще более усложняется.

²⁰ Если принять, что уравнение Шредингера является точным, можно точно рассчитать эволюцию во времени для волновой функции системы "твердое тело плюс падающий ион". Начальные условия, или хотя бы распределение вероятностей для различных возможных начальных условий, в принципе можно найти путем аналогичного расчета в отсутствие падающего иона.

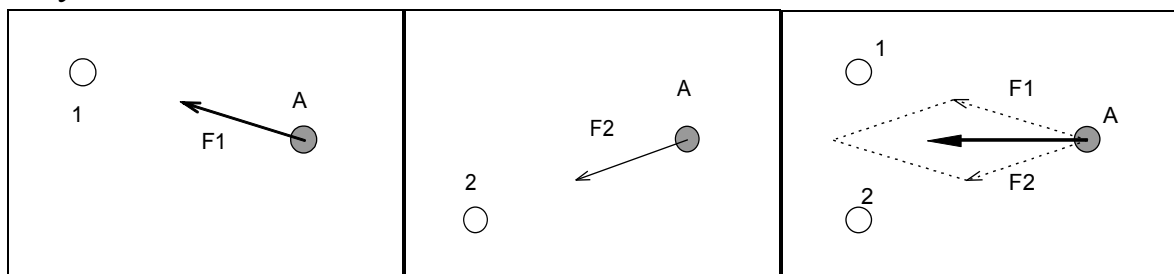
²¹ Здесь и далее слово атом используется для краткости вместо "атом или ион".

этом приближении²².

Как же именно могут эти силы зависеть от положения частиц? Мы привыкли к парным взаимодействиям частиц. Кулоновское взаимодействие электрических зарядов, гравитационное взаимодействие масс – все это примеры парного взаимодействия, при котором взаимодействие между любыми двумя частицами не зависит от остальных частиц, а полная сила равна геометрической сумме всех действующих сил, как это показано на рисунке ниже. Частица 1 действует на частицу A с силой F_1 , частица 2 – с силой F_2 , а обе вместе – с силой, равной геометрической сумме F_1 и F_2 .



Однако взаимодействие не всегда является парным. Взаимодействие атомов, происходящее посредством взаимопроникновения электронных оболочек, является непарным (“многочастичным”) взаимодействием, поскольку электрон, “затраченный” на образование связи с одним атомом-соседом, уже не может быть использован для взаимодействия с другими. Этот случай показан на рисунке ниже. Сила, с которой действуют частицы 1 и 2 вместе, не равна геометрической сумме сил, с которыми они действуют по-отдельности – она меньше.



Заметим, что поскольку закон сохранения энергии выполняется и для непарных взаимодействий, для них, как и для парных, можно ввести потенциал взаимодействия (но теперь он не будет суммой слагаемых вида $U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$, а будет иметь более сложный вид).

Многочастичные потенциалы дают больше возможностей для описа-

²² Иногда, “для учета сил торможения газом свободных электронов”, вводят также силу “вязкости”, то есть силу, направленную против направления движения атома и пропорциональную его скорости. Существуют теоретические выражения для этой силы. Однако сила эта невелика и слабо влияет на результаты расчета распыления.

ния экспериментально обнаруженных свойств веществ, но зато они сложнее в разработке и использовании. Вполне естественно, что ввиду роста мощности и падения цены компьютеров, а также по мере накопления все больших объемов экспериментальных данных, которые все труднее описать парными потенциалами, многочастичные потенциалы используются все чаще. В программе sput.exe тем не менее, использован парный потенциал, имеющий в данном случае то преимущество, что на основе данных о рассеянии атомов друг на друге в газовой фазе было разработано общее (пригодное для любых элементов) выражение для этого потенциала. В соответствии с ним, потенциальная энергия взаимодействия (отталкивания) между двумя атомными частицами с атомными номерами Z_1 и Z_2 , находящимися на расстоянии r друг от друга, равна

$$U(r) = 52 \cdot (Z_1 \cdot Z_2)^{3/4} \exp(-r/b) \cdot \text{эВ},$$

где $b = 0,219$ ангстрем, Z_1 и Z_2 – атомные номера (т.е. заряды ядер) взаимодействующих атомов (ангстрем равен 10^{-10} м; электронвольт равен $1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж). Это выражение, известное достаточно давно, было выведено из экспериментальных данных по рассеянию атомов.

Приведенное выше выражение для потенциальной энергии монотонно убывает с расстоянием, и в соответствии с ним атомы всегда отталкиваются друг от друга. Это создает две проблемы в расчете. Во-первых, блок атомов нестабилен: атомы начинают разлетаться еще до подлета к ним падающего иона. Эту проблему можно решить, занулив силу взаимодействия для всех расстояний больше некоторого “расстояния взаимодействия” R (которое выбирается немного меньше расстояния между ближайшими атомами). Блок станет квазистабильным: если его не трогать, с ним ничего не происходит. Однако остается вторая проблема: из-за отсутствия притяжения блок, как бы велик он ни был, при ударе иона разлетается весь, и коэффициент распыления оказывается бесконечно большим. Проще всего это исправить путем введения плоского потенциального барьера, который ставится на границе области движения атомов. Реально это означает, что когда выходящий из мишени атом достигает плоскости барьера, он теряет определенное количество кинетической энергии (называемое высотой барьера), причем эта потеря происходит только за счет вертикальной (перпендикулярной барьеру) составляющей скорости атома. Если это невозможно (вертикальная компонента скорости слишком мала для этого), то атом не проходит через барьер, а отражается от него²³. Высоту барьера вы-

²³ В программе sput.exe, используемой в этой задаче, такой атом не отра-

бирают равной энергии связи²⁴ либо подгоняют под экспериментальные данные (т.е. выбирают такой, чтобы результаты расчета характеристик распыления как можно лучше совпадали с экспериментальными данными). Энергию связи, при отсутствии более точных данных, часто принимают равной энергии атомизации²⁵. Если данных по энергии атомизации нет, можно просто взять сумму теплоты плавления и теплоты испарения вещества.

Выбор начального положения атомов

Начальное положение атомов задается программе sput.exe в отдельном файле, который можно редактировать обычным образом. При желании можно построить из атомов реальную (например, гранецентрированную кубическую) решетку. Однако для повышения наглядности и с целью упростить работу по подготовке координат атомов рекомендуется проводить расчет в двумерном приближении (все атомы движутся в одной плоскости). Решетку предлагается использовать простейшую – квадратную (атомы располагаются в вершинах квадратов, на которые разбита плоскость).

Для выбора длины стороны квадрата рекомендуется поступить следующим образом:

- 1) выяснить по справочнику плотность распыляемого элемента (можно взять данные для монокристалла, поликристалла или аморфного состояния);
- 2) рассчитать межатомное расстояние (т.е. длину стороны куба) в простой кубической решетке, при котором плотность воображаемого монокристалла данного элемента с такой решеткой будет равна фактической плотности.

жается от барьера, а просто исчезает из расчета (оставаясь при этом на экране; то же самое происходит и с атомом, преодолевшим барьер). На результатах расчета это практически не сказывается.

²⁴ Эта энергия равна работе, которую нужно затратить на отрыв одного атома от поверхности.

²⁵ Энергия атомизации равна работе, которую надо совершить для того, чтобы “разобрать” твердое тело на атомы, отнесенной к числу атомов. Может показаться, что она всегда должна быть равна энергии связи, но на самом деле это справедливо только при некоторых дополнительных предположениях.

Примечание: расположение атомов в простой кубической решетке можно описать следующим образом: пространство разбито на одинаковые непересекающиеся кубы, и в каждой вершине куба находится атом.

3) Длину стороны квадрата для квадратной решетки выбрать равной межатомному расстоянию, вычисленному в предыдущем пункте.

5.3. Аналитический расчет распыления

Решить аналитически систему уравнений движения многих тел невозможно. Но ведь нас не интересует²⁶ движение каждого атома. Почему бы вместо отдельных атомов не рассмотреть их функцию распределения по координатам и импульсам? Если вычислить эту функцию для заданных граничных условий и проинтегрировать поток через верхнюю грань кристалла, можно получить коэффициент распыления. Это было сделано П.Зигмундом (P.Sigmund), но полученное в результате аналитическое выражение не всегда дает достаточно точные результаты. Кроме того, оно совершенно не учитывает кристаллическую структуру материала мишени²⁷.

5.4. Компьютерный расчет распыления

Движение атомов, рассматриваемых как материальные точки с известными законами движения, можно рассчитать путем численного решения системы дифференциальных уравнений.

Реальный распыляемый образец содержит порядка 10^{20} и более атомов. Ясно, что решать систему из 10^{20} дифференциальных уравнений²⁸ компьютер не может. Но этого и не требуется. Значимая для распыления часть одного каскада столкновений уместается в сравнительно небольшом блоке атомов. При энергиях падающего иона порядка единиц кэВ минимально необходимый блок может содержать несколько сотен или тысяч атомов (в зависимости от масс атомов мишени и иона и угла его падения)²⁹. Систему

²⁶ Это так, если надо получить, например, коэффициент распыления. Если же мы хотим изучить механизмы распыления, приходится изучать отдельные траектории.

²⁷ Это невозможно в принципе, если пользоваться одночастичными функциями распределения. Если же перейти к многочастичным функциям, уравнения усложнятся многократно.

²⁸ Точнее, из 3×10^{20} , поскольку для каждой пространственной координаты возникает отдельное уравнение.

²⁹ Если рассчитывать в двумерном приближении, необходимый размер блока меньше. Ориентировочные значения размеров блока приведены ниже в разделе “Источники погрешности и методы ее оценки”.

из сотен или тысяч дифференциальных уравнений уже можно, в принципе, решать.

Обычно заранее неизвестно, какие размеры моделируемого блока атомов будут достаточными. Приходится провести расчет несколько раз с разными размерами (отличающимися, например, в два раза). Разницу между этими результатами можно считать примерно равной разнице между более точным из них и точным решением (тем, которое получилось бы в пределе бесконечно большого блока).

В эксперименте наблюдаются усредненные (суммарные) результаты падения огромного числа частиц на мишень. Чтобы получить такие распределения в расчете, приходится "бросить" на мишень много (несколько тысяч) ионов. Может показаться, что в расчете результат падения каждого иона получится одним и тем же, однако это не так. Эффект от падения иона зависит от так называемой точки прицеливания – т.е., от того, как проходит линия невозмущенного (воображаемого) движения иона по отношению к атомам мишени. Поэтому расчет выполняется многократно с различными начальными положениями иона (т.е. с различными точками прицеливания). Для каждого иона исходное положение атомов восстанавливается.

При сдвиге падающего иона вдоль поверхности на расстояние, равное расстоянию между соседними поверхностными атомами, результат расчета каскада не меняется (поскольку атомы, естественно, равноправны). Поэтому достаточно "расставить" падающие ионы на отрезке³⁰, параллельном поверхности и по длине равном этому расстоянию. Лучше всего, естественно, расставить их на этом отрезке равномерно. Чтобы каждый каскад столкновений мог развиваться в мишени во все стороны, каждый ион должен падать приблизительно посередине блока атомов мишени.

Начальное положение иона должно быть на таком расстоянии от поверхности, когда взаимодействия еще нет (рекомендуется 1–2 межатомных расстояния).

При расчете распыления отдельную проблему составляет выбор момента окончания расчета каскада. В данном случае она решается так: выбирается область моделирования, охватывающая все атомы блока и падающий ион, и в ходе расчета каждый атом, покидающий эту область, как бы "исчеза-

³⁰ Здесь подразумевается плоский случай. В объемном случае ионы расставляются равномерно в плоской области, которую называют репрезентативной областью.

ет"³¹. Что касается атомов, остающихся в области моделирования, то программа контролирует их энергии. Как только оказывается, что кинетическая энергия каждого из них меньше поверхностного барьера, расчет данного каскада прекращается.

5.5. Источники погрешности и методы ее оценки

При выполнении задачи следует учитывать следующие источники погрешности расчета:

1. Неточность численного решения системы дифференциальных уравнений, описывающих движение атомов. Чем меньше шаг разностной схемы, тем меньше эта погрешность.
2. Неточность расчета движения, связанная с тем, что рассчитываются не все атомы мишени, а лишь несколько десятков атомов, расположенных вблизи точки падения иона на мишень. Чем больше атомов в блоке, тем меньше эта погрешность.
3. Неточность, связанная с тем, что рассчитывается ограниченное число падающих ионов, то есть в расчет включаются не все точки прицеливания. Чем больше каскадов (с разными точками прицеливания) рассчитано, тем меньше эта погрешность.

При решении дифференциальных уравнений с помощью разностных схем погрешность оценивают следующим образом: расчет проводится для двух заметно различных значений шага разностной схемы (различающихся, скажем, в два раза), и отклонение полученных результатов от истинного считают приближенно равным разнице между ними. Этот способ является нестрогим, но лучшего способа зачастую нет.

Размеры блока атомов (по вертикали и по горизонтали) подбираются аналогично: расчет проводится с атомными блоками существенно разного размера, результаты сравниваются. Например, проводятся два расчета с блоками, различающимися в два раза по вертикали, и различие между полученными результатами считается примерно равным отклонению лучшего из них от того, который получился бы в пределе бесконечно большого размера по вертикали. Затем та же процедура проводится для горизонтального размера. Однако **внимание:** горизонтальный и вертикальный размер **не независимы**. Если Вы сначала определили таким способом вертикальный размер (при как-то выбранном и фиксированном горизонтальном), а затем определили горизонтальный размер, и он оказался гораздо больше, чем использованный при определении вертикального, то следует заново

³¹ Исчезает из расчета, оставаясь при этом на экране.

определить вертикальный размер (и так далее...). Если хочется пройти этот путь быстрее, можно увеличить в два раза оба размера сразу³².

Подбор вертикального и горизонтального размера блока атомов достаточно провести для одной (наибольшей) энергии падающего иона, и затем можно будет пользоваться этим блоком и при меньших ее значениях.

Погрешность, вносимую конечностью числа падающих ионов, можно оценить теоретически. Рассматривая число атомов, распыленных одним упавшим ионом, как случайную величину, и предполагая (например), что она подчиняется распределению Пуассона, можно оценить отклонение реально полученного числа распыленных атомов от истинного (среднего) как квадратный корень из этого числа. Другой способ оценки этой погрешности – провести расчет несколько раз с разным числом падающих ионов.

При подборе значений рассмотренных выше параметров расчета ориентируйтесь на такие значения (для энергий падающих ионов 100 эВ и менее):

Форма блока атомов: размер блока по горизонтали в 3 – 6 раз больше размера по вертикали.

Размер по вертикали: 4 – 6 межатомных расстояний.

Размер по горизонтали: 10 – 30 межатомных расстояний

Параметр `step_calc` (влияет на выбор величины шага разностной схемы³³): 0.1 – 0.3.

Число падающих ионов: такое, чтобы число распыленных атомов составило 30 – 100 штук.

6. Алгоритмические хитрости

Численное решение системы из нескольких десятков дифференциальных уравнений неизбежно требует немалого времени. В данном случае к тому же требуется такую систему решать многократно – для каждого падающего иона. Чтобы программа работала быстрее, в ней реализованы некоторые

³² Строго говоря, в какой-то степени взаимозависимыми в этом смысле являются все влияющие на точность параметры - шаг разностной схемы, вертикальный и горизонтальный размер блока атомов, число падающих ионов. Однако, если не выбирать совсем уж непригодных значений, степень этой взаимозависимости невелика. Ориентировочные значения этих параметров приводятся ниже в тексте.

³³ Величина шага разностной схемы во времени выбирается так, чтобы перемещение любого атома за шаг не превосходило **`step_calc`** ангстрем.

“хитрости”, позволяющие избежать совершения ненужных действий.

6.1. Не рассчитывать лишних расстояний

Чтобы рассчитать силу, действующую на атом, надо просуммировать силы, действующие на него со стороны всех остальных атомов. Для подавляющего большинства пар атомов сила взаимодействия между ними равна нулю, так как атомы слишком далеко друг от друга. Но чтобы убедиться в этом, программе приходится рассчитывать расстояние между атомами (порядка 10 операций процессора). Итак, на каждом шаге разностной схемы надо рассчитывать расстояние между всеми парами атомов. Если имеется n атомов, число пар атомов равно $n(n-1)/2$.

Однако без этого можно обойтись! Ведь *окружение* каждого атома, то есть множество действующих на него атомов, меняется не на каждом шаге разностной схемы, а только изредка. Итак, надо для каждого атома A создать и поддерживать список атомов, которые могут оказаться взаимодействующими с ним. Как же гарантировать, что никакой атом, не входящий в этот список, не приблизится к атому A на расстояние взаимодействия? Очень просто – список создается “с запасом”: в него включаются все атомы, находящиеся от атома A на расстоянии не более $R+L$, где R – расстояние взаимодействия, а L – добавка. До тех пор пока ни один атом (включая атом A) не прошел (после создания списка) расстояние $L/2$, можно быть уверенным, что никакой атом, не входящий в список, не приблизился к A на расстояние R .

6.2. Не тратить время на неподвижные атомы

В начале каждого каскада все атомы мишени неподвижны. По мере развития каскада все больше атомов вовлекается в него, но *в среднем* за все время развития каждого каскада число задействованных в каскаде атомов гораздо меньше общего числа атомов в мишени. Как же объяснить программе, что для некоторых (не затронутых каскадом) атомов не нужно рассчитывать сил и перемещений? Надо для каждого атома завести переменную, указывающую, “активен ли он”, то есть надо ли им заниматься. Первоначально активен только падающий ион. На каждом шаге во времени вычисляется действующая на него сила, а для этого вычисляются расстояния от него до всех близких к нему частиц. Воспользуемся этой информацией – будем активизировать каждую частицу, к которой падающий ион приблизился на расстояние взаимодействия (R). Активизированные таким образом атомы придут в движение и будут в свою очередь активизировать другие атомы, встречающиеся на их пути.

7. Контрольные вопросы

1. Каким образом было впервые обнаружено распыление?
2. Нарисуйте схему опыта, в котором были открыты каналовые лучи.
3. Дайте определение распыления.
4. Дайте определение коэффициента распыления.
5. Какое устройство позволяет регистрировать распыленные атомы и ионы?
6. Для чего применяется распыление? Каким образом оно применяется для:
 - а) анализа поверхности;
 - б) полировки и очистки поверхности;
 - в) напыления пленок.
7. Почему распыление электронами и фотонами применяется редко?
8. От чего зависит коэффициент распыления?
 8. а. Как зависит коэффициент распыления от полярного угла падения ионов?
 8. б. Как зависит коэффициент распыления от энергии падающих ионов?
 8. в. Как зависит коэффициент распыления от атомного номера падающих ионов?
9. Как зависит интенсивность потока распыленных частиц от полярного угла их выхода? От азимутального угла?
10. Что такое парный потенциал взаимодействия? Что такое многочастичный потенциал взаимодействия?
11. Можно ли аналитически решить уравнения движения атомных частиц при распылении? Как можно аналитически рассчитать коэффициент распыления?
12. Какие модельные представления и приближения обычно используются в компьютерном расчете (моделировании) распыления?
13. Почему недостаточно провести расчет распыления для одного падающего иона?
14. Какие алгоритмические ухищрения применяются для ускорения расчета распыления?

Задание

1. Определить коэффициент распыления как функцию энергии падающих ионов

Расчет проводится для угла падения, назначенного преподавателем, для четырех энергий, составляющих 100, 75, 50 и 25% от максимальной энергии (способ выбора максимальной энергии описан в разделе “Порядок выполнения работы”).

2. Определить коэффициент распыления как функцию угла падения ионов

Расчет проводится для максимальной рабочей энергии (см. выше) для углов падения 0° , 30° , 60° и 75° от нормали к поверхности.

3. Определить порог распыления

Порог распыления – это минимальная энергия ионов, при которой возможно распыление (т.е. коэффициент распыления ненулевой). Угол падения – тот же, что в задании номер 1 выше.

4. Определить последовательность столкновений, приводящую к распылению при припороговой энергии

Пронаблюдать на экране и зарисовать в тетрадь последовательность столкновений, приводящую к распылению атома самым медленным ионом, еще способным вызвать распыление. Угол падения – тот же, что в предыдущем задании.

Тип (химический элемент) мишени и падающих ионов, а также угол падения ионов для заданий 1 и 3 назначаются преподавателем.

Примечание для преподавателя: при очень наклонном падении (угол от нормали более 70°) распыление затруднено. Можно попробовать и такие углы, но если при выполнении задачи окажется, что порог распыления превосходит 100 эВ, а время расчета слишком велико³⁴, рекомендуется выбрать менее наклонное падение.

³⁴ Чем выше энергия падающих ионов, тем больше должен быть размер блока атомов, тем больше атомов вовлекается в каскад, и тем дольше он рассчитывается.

2. Описание программы sput.exe

Программа **sput.exe** предназначена для компьютерного моделирования распыления. Она рассчитывает движение системы материальных точек для заданных начальных координат и скоростей. Рассмотрение движения ограничено в пространстве. После того, как какой-либо атом выходит из области моделирования (она выбирается программой так, чтобы в ней поместились все атомы и падающий ион, и отображается на экране в виде прямоугольной рамки), рассмотрение его движения прекращается, он не движется сам и не влияет на движение других атомов, а его изображение замирает на рамке. Но это еще не значит, что атом распылился. Программа регистрирует в качестве распыленных только частицы, вылетевшие из области моделирования в положительном направлении координатной оси **z** (через верхнюю сторону прямоугольника на экране), при условии, что вертикальная компонента скорости достаточна для преодоления поверхностного барьера (параметр “энергия связи” в файле **param.dat**). Расчет продолжается, пока в области моделирования есть хотя бы один атом, кинетическая энергия которого больше энергии связи.

Изображение атомов на экране можно отключить (параметр **visualise** в файле **param.dat**).

После запуска программа **sput.exe** читает необходимые для ее работы параметры из файла **param.dat** (см. о нем в следующем разделе), начальные положения атомов – из файла **atoms.dat**, а начальные положения и некоторые другие характеристики падающих ионов – из файла **ions.dat**. Программа ищет эти файлы в текущем каталоге (то есть каталоге, в котором Вы находитесь в момент запуска программы). Описание внутренней структуры файлов **atoms.dat** и **ions.dat** приведено ниже. Для создания файлов **atoms.dat** и **ions.dat** можно использовать программы **makeatom.exe** и **makeions.exe** (см. подробнее ниже).

Внимание! Файл **param.dat** содержит данные как для **sput.exe**, так и для **makeions.exe** и **makeatom.exe**. Например, параметр “число атомов в горизонтальном ряду” используется программой **makeatoms.exe** при создании файла **atoms.dat**. Если Вы изменили этот параметр, необходимо до запуска **sput.exe** запустить **makeatom.exe**. Чтобы не забыть об этом, рекомендуется вместо **sput.exe** запускать пакетный файл **all_3.bat**.

Файл **all_3.bat**:

makeatom.exe
makeions.exe
sput.exe

copy log.txt + re-
sult.dat

Последняя строка файла **all_3.bat** означает “добавить содержимое файла **result.dat** к файлу **log.txt**”. Файл **log.txt** содержит протокол Вашей работы: программы **makeatom** и **makeions** записывают в него свои входные параметры, а входные и выходные данные программы **sput.exe** попадают в него путем копирования файла **result.dat**.

Программа **sput.exe** создает файл **sput.dat** и записывает в него по ходу работы параметры каждого распыленного атома. Каждые 10 секунд по ходу работы (и при ее окончании) **sput.exe** создает файл **result.dat** и пишет в него число рассчитанных на данный момент каскадов и коэффициент распыления. Если файлы с именем **result.dat** или **sput.dat** уже существуют, **sput.exe** уничтожает их старое содержимое.

Пример файла
result.dat:

Sput.exe. Дата: 11. 1.1998; Время: 12:23
Просчитано каскадов: 10
Коэффициент распыления равен 5.000000E-01
Затрачено времени в сек: 11
Параметр величины шага step_calc= 4.000000E-02

Пример файла **sput.dat:**

Номер Каскада	Номер расп. атома	Тип расп. частицы	Импульс расп. част. в атомн. ед.		
			по осям: x	y	z
1	—	0	4.61	.00	30.99
2	—	0	16.01	.00	34.57
2	11	1	23.51	.00	32.89
3	—	0	32.50	.00	35.54
3	11	1	21.22	.00	42.11
4	—	0	50.09	.00	31.39
4	11	1	16.57	.00	26.76
5	—	0	63.87	.00	26.03
6	—	0	66.15	.00	32.60
7	—	0	48.87	.00	44.28

Комментарий: Для каждого распыленного атома записывается одна строка. Если падающий ион отражается от блока атомов и выходит через верхнюю грань области моделирования, для него тоже записывается одна строка.

Параметр “номер каскада” (или, другими словами, номер падающего иона) равен номеру строки в файле **ions.dat**, содержащей данные об этом ионе. Параметр “номер распыленного атома” равен номеру строки в файле **atoms.dat**, где заданы координаты этого атома. Параметр “тип распыленной частицы” равен 1 для атома и 0 для иона. Декартовы компоненты импульса атома (или иона) после его выхода из мишени выводятся в атомной системе единиц, в которой в число основных единиц входят атомная единица массы (а.е.м.) и атомная единица энергии (эВ). Отсюда следует, что атомная единица импульса равна корню квадратному из $\text{эВ} \times \text{а.е.м.}$ (так как, например, из формулы $E=p^2/2m$ следует $p=\sqrt{2mE}$).

Программу **sput.exe** можно прерывать нажатием на **<Control+C>** (удерживая нажатой клавишу **Ctrl**, нажать на клавишу **C**). Если не поможет, попробуйте **<Control+Break>**. Имейте в виду, что прерывание обычно срабатывает только после окончания текущего каскада.

3. Файл **param.dat**

Файл **param.dat** содержит данные, используемые программами **sput.exe**, **makeatom.exe** и **makeions.exe**, а также некоторые комментарии и разъяснения.

Ниже приводится копия файла **param.dat**

PARAM.DAT

___Файл исходных данных для расчета распыления___

Используется программами **sput**, **makeatom**, **makeions**

Нельзя изменять порядок следования данных (иначе программы не смогут их прочесть). Программы игнорируют все пустые строки и все строки, начинающиеся с пробела. Поэтому пробелы слева от числа, задающего значение параметра, не допускаются. Строки комментария, кроме расположенных в конце файла после всех данных, должны начинаться с пробела.

Секция 1. Параметры мишени.

2.35 Расстояние между соседними атомами в ангстремах.

4 Количество горизонтальных слоев атомов

15 Количество атомов в каждом горизонтальном слое

63.5 Масса атома мишени в а.е.м.

40 Атомный номер атома мишени

3. Энергия связи (т.е. "поверхностный барьер") в эВ.

Секция 2. Параметры падающих ионов.

40. Масса иона в а.е.м.

18 Атомный номер иона

150. Энергия падающего иона в эВ.

55. Угол падения иона (от нормали к поверхности) в град.

10 Число падающих ионов

Секция 3. Вспомогательные параметры расчета:

0.04 <step_calc> Параметр, влияющий на величину шага во времени при численном интегрировании уравнений движения (в ангстремах).

t <visualize> Надо ли отображать движение атомов на экране.

.5 <radius_atom> Радиус круга, изображающего атом, в ангстр.

0.3 <step_image> Смещение атома, при котором надо обновить его изображение на экране (в ангстр.)

0 <wait_time> Задержка в сотых долях секунды (см. ниже).

f <leave_track> Оставляют ли атомы "треки".

12 10 <colors> Номера цветов, используемых для отображения иона и атома.

f <batch_mode> Устанавливается в .true. для работы из пакетного файла (чтобы sput.exe не останавливалась на операторах PAUSE)

Подробнее о вспомогательных параметрах:

<step_calc> – влияет на выбор шага алгоритма, осуществляющего численное решение уравнений движения. Чем меньше этот параметр, тем точнее (но, увы, тем медленнее) расчет. Рекомендуется 0.5–3% межатомного расстояния.

<visualize> – логическая переменная (равная .true. или .false., поставьте букву t или f). Если .true., процесс распыления отображается на экране. Если .false., движение атомов на экране не отображается.

<radius_atom> – радиус (в ангстремах) кружка, изображающего атом. Рекомендуется 5–20% межатомного расстояния.

<step_image> – расстояние в ангстремах, на которое должен сместиться атом, прежде чем будет обновлено его изображение на экране. Чем меньше этот параметр, тем аккуратнее программа отображает движение атомов, но тем больше времени она на это тратит. Рекомендуется 5–10% межатомного расстояния.

<wait_time> – задержка, в сотых долях секунды, перед обновлением изображения очередного атома. Позволяет замедлить работу программы (для удобства наблюдения за развитием каскада).

<leave_track> – логическая переменная (равная .true. или .false., поставьте букву t или f). Если .true., на экране отображаются пройденные атомами траектории.

<colors> – номера цветов, которыми изображаются падающий ион и атомы мишени:

- 1 – темно-синий
- 2 – темно-зеленый
- 3 – сероголубой
- 4 – краснокоричневый
- 5 – фиолетовый
- 6 – коричневый
- 7 – светло-серый
- 8 – темно-серый
- 9 – ярко-синий
- 10 – ярко-зеленый
- 11 – ярко-голубой
- 12 – ярко-красный
- 13 – розово-фиолетовый
- 14 – ярко-желтый
- 15 – белый

****Конец файла param.dat****

4. Файлы atoms.dat и ions.dat

Файлы **ions.dat** и **atom.dat** создаются программами **makeions.exe** и **makeatom.exe**, соответственно, на основе данных, содержащихся в файле **param.dat**. Затем эти файлы используются программой **sput.exe**.

4.1. Формат файла atoms.dat

Каждая строка файла соответствует одному атому и содержит 3 вещественных числа, разделенных пробелами.

Число пробелов не ограничивается (но, естественно, между любыми двумя соседними числами должен быть хотя бы один пробел).

- Первое число: координата x (горизонтальная координата) в ангстрем-

мах

- Второе число: координата у (горизонтальная координата) в ангстремах

(Примечание: в плоском случае координата "у" обязательно у всех частиц равна нулю!)

- Третье число: координата z (вертикальная координата) в ангстремах

Пример одной строки файла **atoms.dat**:

```
0. 0. 40.
```

4.2. Формат файла *ions.dat*

Каждая строка файла соответствует одному падающему иону и содержит 5 вещественных чисел, разделенных пробелами. Число пробелов не ограничивается (но, естественно, между любыми двумя соседними числами должен быть хотя бы один пробел).

- Первое число: координата x (горизонтальная) в ангстремах
- Второе число: координата у (горизонтальная) в ангстремах

(Примечание: в плоском случае координата "у" обязательно у всех частиц равна нулю!)

- Третье число: координата z (вертикальная) в ангстремах
- Четвертое число: энергия иона в электронвольтах
- Пятое число: угол падения иона от нормали к поверхности в градусах (отсчитывается против часовой стрелки от направления "вертикально вниз").

Пример одной строки файла *ions.dat*:

```
5.4 0. 3.9 100. 45.
```

5. Файл-протокол *log.txt*

Этот файл предназначен для протоколирования всей проделанной Вами работы. Программы **makeatom.exe** и **makeions.exe** пишут в файл **log.txt** "краткие отчеты о проделанной работе" (сводку своих входных параметров) в режиме добавления (новые данные добавляются к концу файла). Файл **all_3.bat** содержит команду добавления содержимого файла **result.dat** (выходные данные программы **sput.exe**) в **log.txt**.

Порядок выполнения работы

I. Подготовительные операции

1. Подготовка параметров расчета

Получить у преподавателя следующие параметры

- а) химический элемент, из которого состоит мишень;
- б) химический элемент, ионы которого налетают на мишень;
- в) угол падения ионов на мишень.

Найти в таблицах атомные массы, атомные номера обоих этих элементов и плотность материала мишени. Затем рассчитать расстояние между атомами в мишени (см. руководство к задаче) и энергию связи атома мишени.

Указание: Энергию связи рассчитать приближенно как сумму теплоты плавления и теплоты испарения (см. табл. 1). Не забудьте преобразовать из Дж/моль в эВ/атом. Межатомное расстояние в мишени рассчитать из имеющихся в таблице 1 данных об атомном весе и плотности, в предположении (на самом деле ложном, но принимаемом для простоты), что расположение атомов соответствует простой кубической решетке.

2. Подготовка рабочего каталога.

Создайте в каталоге C:\PRAKT\PROGRAMS\SPUT\STUDENTS\³⁵ подкаталог (далее по тексту “ваш каталог”), его название сконструируйте из первых букв Вашего имени и фамилии.

Скопируйте в ваш каталог все файлы из каталога “..\STUDENTS\TEMPLATE”. После этого вся работа ведется только в вашем каталоге. Запустите пакетный файл **all_3.bat** для проверки работоспособности программ и файла данных **param.dat**. Программа должна рассчитать один каскад, отображая на экране движение атомов.

3. Выбор максимальной рабочей энергии³⁶

Максимальная энергия падающих ионов, охватываемая расчетом, должна превышать порог распыления не менее чем в 4 раза (чтобы расчет при 25% от этой энергии, предусмотренный заданием, дал ненулевой результат). Желательно выбирать максимальную энергию так, чтобы она была кратна 50, например 250, 300, 350 эВ. С другой стороны, выбирать слишком большое значение этой энергии нецелесообразно, так как при высоких энергиях падающего иона необходимый размер блока атомов увеличивается, и время расчета быстро растет. Рекомендуется поэтому прежде всего

³⁵ Путь может быть и другим. Тогда попробуйте найти сами (рекомендуемый ориентир - каталоги STUDENTS\TEMPLATE) или спросите преподавателя.

³⁶ В идеале исследуемый диапазон энергий должен включать значение, при котором достигается максимум коэффициента распыления (обычно несколько кэВ). Но пока это невозможно из-за недостаточного быстродействия наших компьютеров.

приблизительно (с точностью порядка 30–50%) определить порог распыления. Для большинства комбинаций ион–мишень и углов падения он не превышает 50 эВ³⁷. Параметры, влияющие на точность расчета (размеры блока атомов, величина шага разностной схемы) установите в соответствии с рекомендациями в руководстве к задаче. Число падающих ионов установите равным 20–40. Угол падения – тот, который задан преподавателем.

4. Подбор параметра `step_calc`

Параметр `step_calc` влияет на величину шага разностной схемы. Чем меньше этот параметр, тем точнее расчет, но тем больше времени затрачивается на него.

Установите энергию ионов равной максимальной рабочей энергии. Число падающих ионов – такое, чтобы число распыленных частиц было не менее 40. Значения всех прочих параметров – как в предыдущем упражнении. Проведите расчет со значениями параметра `step_calc`, отличающимися вдвое, и сравните результаты. Если S отличается более чем на 15%, уменьшите `step_calc` еще вдвое, и так до тех пор, пока очередное изменение S при уменьшении `step_calc` не станет меньше 15%. Предпоследнее из опробованных значений `step_calc` следует использовать во всех последующих упражнениях задачи. И наоборот, если различие в значениях S при первой пробе оказалось меньше 15%, можно попробовать увеличить значение `step_calc`.

5. Подбор горизонтального размера блока атомов (параметр “количество атомов в слое” в файле `param.dat`)

Проведите расчет для увеличенного в 1,5 раза количества атомов в слое. По данным в файле `log.txt` сравните значения S для разных значений этого параметра при равных значениях прочих параметров. Если S изменился более чем на 15%, увеличьте горизонтальный размер еще в 1,5 раза, и так до тех пор, пока очередное изменение S не окажется меньше, чем 15%. Предпоследнее из опробованных значений количества атомов в слое следует использовать во всех последующих упражнениях задачи. И наоборот,

³⁷ При больших углах падения порог распыления неограниченно растет как функция угла падения для любых комбинаций ион-мишень. Для очень легких ионов (например, гелий), распыляющих мишень из тяжелых атомов с большой энергией связи (например, вольфрам), порог распыления может составлять 100 эВ и более даже и при нормальном (т.е. перпендикулярном) падении.

если S изменился слабо, можно попробовать уменьшить количество атомов.

6. Подбор вертикального размера блока атомов (параметр “количество слоев” в файле param.dat)

Применяя тот же алгоритм, что в упражнении 5, подберите вертикальный размер блока атомов. Если в результате подбора вертикального размера блока атомов коэффициент распыления S увеличился более чем в 1,5 раза, необходимо снова провести подбор количества атомов в слое (упр. 5) с новым значением вертикального размера блока атомов и затем еще раз выполнить упражнение 6.

II. Упражнения

Упражнение 1. Определение коэффициента распыления как функции энергии падающих ионов

Получить коэффициент распыления для максимальной рабочей энергии, а затем для 3 меньших энергий, составляющих 75, 50 и 25% от максимальной рабочей энергии. Если число распыленных атомов для этих малых энергий оказывается меньше 40, увеличить число падающих ионов. Угол падения – заданный преподавателем. Оценить погрешность полученных результатов. Если вдруг оказалось, что для заданных Вам параметров расчет на используемом Вами компьютере занимает слишком много времени (более 5 мин. на расчет одного значения коэффициента распыления), посоветуйтесь с преподавателем, каким образом его ускорить. Можно проводить расчет с меньшим числом ионов, или уменьшить размер блока атомов, или увеличить шаг разностной схемы.

Упражнение 2. Определение коэффициента распыления как функции угла падения ионов

Число падающих ионов – как в предыдущем упражнении. Для максимальной рабочей энергии получить S для углов падения 0° , 30° , 60° и 75° от нормали. Оценить погрешность полученных результатов.

Примечание: угловая зависимость может заметно отличаться от изображенной на рис. 5. Ее максимум может находиться при углах порядка 30° , иногда даже 0° . Причина в том, что рис. 5 соответствует гораздо более высокой энергии ионов, а также в погрешности, вносимой использованием плоской модели. Однако если падающие ионы гораздо тяжелее атомов

мишени, рассчитанная Вами угловая зависимость должна быть похожа на изображенную на рис. 5.

Упражнение 3. Определение порога распыления.

Для угла падения ионов, заданного преподавателем, определить порог распыления (минимальное значение энергии падающих ионов, при котором возможно распыление) с погрешностью не более 10 эВ. Рекомендуется метод деления отрезка пополам: если есть две энергии, $E_1 < E_2$, такие что при E_1 распыления нет, а при E_2 оно есть, то порог распыления лежит между E_1 и E_2 . Проводится расчет для энергии E_3 , лежащей между E_1 и E_2 (например, $(E_1+E_2)/2$), что позволяет уменьшить интервал, и так далее. При выполнении этого упражнения число падающих ионов следует установить для начала равным 20. После того как определен интервал шириной не более 10 эВ, содержащий пороговую энергию, следует перепроверить нижнюю границу интервала с увеличенным вдвое числом ионов. При этом S может оказаться ненулевым, и тогда бывшая нижняя граница становится верхней, а нижнюю придется искать заново. После того как она будет найдена, надо опять проверить ее путем увеличения числа ионов вдвое. При 80 падающих частицах расчет происходит уже довольно долго. Для ускорения расчета можно проводить его только для ионов, которые начинают свое движение вблизи той точки (точек), откуда начинал свое движение “успешный” (приведший к распылению) ион в предыдущем расчете. В этом случае нельзя пользоваться файлом **all_3.bat**. Надо после изменения числа ионов в файле **param.dat** запускать **makeions.exe**, потом удалять лишние строки из **ions.dat** (рекомендуется сделать пометку об этом в файле–протоколе **log.txt**), затем запускать **sput.exe**. Определить, какой именно ион был “успешным”, можно по данным в файле **sput.dat**.

Упражнение 4. Определение последовательности столкновений, приводящей к распылению при самой малой энергии

Проведите еще раз расчет для верхней границы найденного выше интервала энергий, в котором лежит порог распыления. По данным, записанным в файл **sput.dat**, определите номер каскада, в котором происходит распыление атома. Найдите в файле **ions.dat** строку с таким номером, удалите все остальные строки из этого файла. Теперь при запуске программы **sput.exe** она будет проводить расчет только этого каскада (но не запускайте теперь **all_3.bat!**). Загляните еще раз в файл **sput.dat** и найдите там номер атома,

который распыляется. Атомы, расставленные программой **makeatom.exe**, нумеруются слева направо и сверху вниз. Зная это, Вы сможете идентифицировать на экране атом, который распыляется. Запустите **sput.exe** в режиме визуализации с “треками” (для этого установите параметр “**leave_track**” равным “**t**”) и проследите³⁸ за последовательностью столкновений, приводящей к распылению атома. Зарисуйте ее.

III. Завершение работы (очистка рабочего места)

Удалите из Вашего каталога все, кроме файлов **log.txt** и **param.dat**.

IV. Отчет о работе

При сдаче задачи Вы должны представить следующие данные:

- 1) Значение максимальной рабочей энергии, размеры блока атомов и значение параметра **step_calc**.
- 2) Коэффициент распыления (с указанием погрешности) в зависимости от энергии ионов (в виде таблицы или графика).
- 3) Коэффициент распыления (с указанием погрешности) в зависимости от угла падения ионов (в виде таблицы или графика).
- 4) Диапазон энергий (не шире 10 эВ), в котором лежит пороговая энергия распыления.
- 5) Схему последовательности столкновений, приводящей к распылению при припороговой энергии ионов.
- 6) Файлы **log.txt** и **param.dat** в Вашем каталоге (на случай, если потребуется проверить правильность параметров расчета). Ваш каталог и эти файлы будут храниться на диске в течение одного месяца после выполнения Вами задачи.

³⁸ Расчет можно для удобства наблюдения замедлить с помощью параметра **wait_time** в файле **param.dat**.

Табличные данные для расчета

Таблица 1. Характеристики некоторых мишеней

Примечание: Вам надо будет перевести теплоту плавления и испарения из кДж/моль в эВ/атом. Напоминаем, что $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$, $1 \text{ моль} = 6,05 \cdot 10^{23} \text{ штук}$, $1 \text{ а.е.м.} = (6,05 \cdot 10^{23})^{-1} \text{ г}$.

Элемент	Обозначение	Атомный номер	Атомный вес, а.е.м. (средний)	Плотность, 10^3 кг/м^3	Теплота испарения (кипения), кДж/моль	Теплота плавления, кДж/моль
Алюминий	Al	13	27,0	2,7	293	11
Бериллий	Be	4	9,0	1,85	291	13
Ванадий	V	23	50,9	6,0	445	18
Вольфрам	W	74	183,9	19,4	770	35
Гадолиний	Gd	64	157,3	7,9	360	10
Галлий	Ga	31	69,7	5,9	256	6
Гафний	Hf	72	178,5	13,3	569	24
Германий	Ge	32	72,6	5,3	334	38
Европий	Eu	63	152,0	5,2	147	9
Железо	Fe	26	55,8	7,9	350	14
Золото	Au	79	197,0	19,3	331	13
Индий	In	49	114,8	7,3	228	3
Иридий	Ir	77	192,2	22,4	613	26
Кобальт	Co	27	58,9	8,9	376	16
Кремний	Si	14	28,1	2,33	356	50
Лантан	La	57	138,9	6,1	413	6
Магний	Mg	12	24,3	1,74	128	9
Марганец	Mn	25	54,9	7,3	227	12
Медь	Cu	29	63,5	9,0	302	13
Молибден	Mo	42	95,9	10,2	528	36
Никель	Ni	28	58,7	8,9	370	18
Ниобий	Nb	41	92,9	8,6	662	28
Олово	Sn	50	118,7	5,9 (α)	296	7
Осмий	Os	76	190,2	22,6	748	32
Палладий	Pd	46	106,4	12,0	353	17
Платина	Pt	78	195,1	21,5	511	20

Плутоний	Pu	94	244	19,8	351	3
Рений	Re	75	186,2	21,0	716	33
Родий	Rh	45	102,9	12,4	496	22
Ртуть	Hg	80	200,6	14,0	59	2
Рубидий	Rb	37	85,5	1,53	70	2
Рутений	Ru	44	101,1	12,4	602	24
Свинец	Pb	82	207,2	11,3	178	5
Серебро	Ag	47	107,9	10,5	251	11
Скандий	Sc	21	45,0	3,0	351	14
Таллий	Tl	81	204,4	11,9	162	4
Тантал	Ta	73	180,9	16,7	745	35
Тербий	Tb	65	158,9	8,3	331	11
Технеций	Tc	43	98,9	11,5	593	24
Титан	Ti	22	47,9	4,5	410	15
Тулий	Tm	69	232,0	9,3	191	17
Уран	U	92	238,0	19,0	494	9
Хром	Cr	24	52,0	7,2	338	16
Церий	Ce	58	140,1	6,8	409	2
Цинк	Zn	30	65,4	7,1	115	7
Цирконий	Zr	40	91,2	6,5	558	15
Эрбий	Er	68	167,3	9,1	261	20

Таблица 2. Характеристики некоторых благородных газов

Элемент	Обозначение	Атомный номер	Атомный вес, а.е.м. (средний)
Аргон	Ar	18	40,0
Гелий	He	2	4,00
Криптон	Kr	36	83,8
Ксенон	Xe	54	131,3
Неон	Ne	10	20,2