

УДК 537.534.9

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОН—ТВЕРДОЕ ТЕЛО ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТА И ЕГО ВЛИЯНИЕ НА ПРОФИЛИ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

© 2024 г. А. Н. Зиновьев^{а,*}, П. Ю. Бабенко^а, В. С. Михайлов^а, Д. С. Тенсин^а

^аФизико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 194021 Россия

*e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

Поступила в редакцию 28.12.2023 г.

После доработки 19.02.2024 г.

Принята к публикации 19.02.2024 г.

На основе анализа угловых распределений частиц, прошедших сквозь тонкие пленки золота, получены параметры потенциала, наилучшим образом описывающего эксперимент. Полученный потенциал отличается от потенциала, описывающего столкновения в газовой фазе заметным изменением константы экранирования. Проанализировано влияние энергии соударения, выбора потенциала и модели электронных тормозных потерь на распределение по глубине имплантированных частиц.

Ключевые слова: угловые распределения, тонкие пленки, потенциалы межатомного взаимодействия, электронные тормозные потери, ионная имплантация, поверхности частиц.

DOI: 10.31857/S1028096024060059, **EDN:** DVQGTR

ВВЕДЕНИЕ

Бомбардировка поверхности ионными пучками широко используется для создания новых материалов методом ионной имплантации. Для моделирования создаваемых структур применяются расчетные методы. Многие исследования посвящены взаимодействию плазмы со стенкой Токамака реактора. Получаемые результаты сильно зависят от выбора потенциалов взаимодействия частиц, учета структуры образца, и моделей для описания потерь энергии при торможении частиц пучка на электронах мишени. Широко используются экранированные кулоновские потенциалы: Мольера [1], ZBL [2], Ленца–Йенсена [3, 4], Кг–С [5]. В работе [6] были проанализированы данные экспериментов по рассеянию частиц в газовой фазе, и был предложен потенциал, который наилучшим образом описывает эксперименты. Данные экспериментов также хорошо согласуются с расчетами [7], выполненными в приближении функционала плотности (DFT). Эти потенциалы можно улучшить, введя поправки на спектроскопические данные о параметрах потенциальной ямы. Такое приближение было успешно использовано для определения коэффициентов отражения частиц от различных мише-

ней (Мелузова и др. [8]) и для расчета тормозной способности ядер (Зиновьев и др. [9]). При использовании методов молекулярной динамики применяются более сложные модели потенциалов для описания распыления мишеней ионными пучками [10–12]. В работе (Брукнер и др. [13]) отмечалась необходимость варьирования константы экранирования в потенциале для лучшего описания эксперимента. При изучении эффекта радужного рассеяния атомов на поверхности кристаллов металлов (Бабенко и др. [14]) из экспериментальных данных было получено большое количество потенциалов, заметно отличающихся от потенциалов, применяемых для описания рассеяния в газовой фазе. Данное отличие авторы связали с влиянием потенциала, обусловленного наведенным зарядом при приближении атомов к поверхности металлов. В нашей работе [15] была предпринята попытка по получению данных о потенциале из анализа энергетических спектров обратно рассеянных от поверхности частиц. В данной работе ставилась задача получения параметров потенциала взаимодействия ион–твердое тело, используя угловые зависимости частиц, прошедших сквозь тонкую пленку золота.

Еще одной задачей работы было проанализировать влияние выбора модели потенциала и

других параметров на описание распределений по глубине имплантированных частиц в веществе.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

В разработанной нами программе для описания взаимодействия частиц в твердом теле использовался метод Монте-Карло. Расчет велся в приближении бинарных соударений. В этом приближении рассеяние атомных частиц в твердом теле рассматривается как последовательность парных соударений с атомами твердого тела. При этом траектория движения частицы заменяется асимптотами траектории. Приближение бинарных соударений позволяет значительно ускорить проведение расчетов. В данной работе анализировалось до 50 млн. траекторий частиц, что позволяло иметь хорошую статистику при анализе энергетических и угловых распределений как отраженных от поверхности частиц, так и для прошедших сквозь тонкую пленку.

В качестве мишени рассматривался поликристалл золота, состоящий из микрокластеров размером в одну постоянную решетки случайно ориентированных в пространстве. При последующем соударении ориентация кластера в пространстве разыгрывается заново.

Потери энергии при рассеянии на атомах решетки (ядерные тормозные потери) рассчитываются точно, если известен потенциал взаимодействия. Потери энергии при торможении на электронах учитываются при каждом соударении путем умножения значения электронной тормозной способности при конкретной энергии на длину траектории между соударениями. Экспериментальные данные об электронных тормозных потерях для различных снарядов и мишеней собраны в базе данных [16]. Для системы Н–Au экспериментальные данные приведены в работах [17–23]. При энергиях менее 10 кэВ эксперимент дает существенно разные значения неупругой потери энергии. Как было показано в нашей работе [24], это различие можно устранить путем учета поправки на многократность рассеяния. В данной работе мы использовали аппроксимацию $dE/dx[\text{эВ}/\text{Å}] = 1.632E[\text{кэВ}]^{0.722}$, которая основана на данных эксперимента по обратному рассеянию частиц [21]. Эта зависимость заметно отличается от рекомендаций пакета SRIM [25], $dE/dx[\text{эВ}/\text{Å}] = 2.992E[\text{кэВ}]^{0.5}$. В используемой программе имеется возможность варьировать потенциал взаимодействия и модель для описания зависимости электронных тормозных потерь от энергии. Учитываются тепловые колебания атомов мише-

ни. Также фиксируется слой, до которого дошла частица. Более детальное описание алгоритма можно найти в работе [26]. При расчете пробега частиц в твердом теле расчет траектории прекращался, когда энергия частицы уменьшается до заданного предела (в нашем случае – 2 эВ). Правильность выбора минимальной энергии остановки движения частиц, определялся из критерия независимости результатов расчета профиля от выбора данного параметра.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ИЗ ДАННЫХ ОБ УГЛОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЯХ ЧАСТИЦ, ПРОШЕДШИХ СКВОЗЬ ТОНКИЕ ПЛЕНКИ

В нашей работе [27], где проводился анализ энергетических спектров и угловых зависимостей водородных частиц (учитывались и атомы, и ионы), отраженных от поверхности золота было установлено, что для оптимального описания экспериментальных данных необходима коррекция потенциала взаимодействия, в частности изменение константы экранирования на 10–15%.

С целью проверки этого результата мы перешли к анализу экспериментальных данных [19, 22] о прохождении водородных частиц сквозь тонкие пленки золота с толщиной порядка 150 Å. В этих случаях в энергетических спектрах наблюдается пик гауссовой формы. Сдвиг пика относительно начальной энергии бомбардирующих частиц отражает потери энергии после прохождения частиц через пленку. В работах [19, 22] измерялись энергетические спектры вылетевших частиц для различных углов вылета. При увеличении угла регистрации прошедших пленку частиц пик сдвигается, потери энергии возрастают в связи с увеличением эффективной толщины пленки.

Полуширина пика определяется эффектом страгглинга, т.е. тем, что процесс потери энергии носит случайный характер как из-за случайного характера изменения заряда налетающей частицы при пролете в твердом теле, так из-за неравномерного распределения плотности электронов в образце. В это уширение вносит также вклад разброс энергетических потерь при упругих соударениях налетающей частицы с атомами решетки. Таким образом, энергетические спектры дают информацию о значениях электронных тормозных потерь и данных о страгглинге, но практически не несут информации о потенциале взаимодействия. Угловые распределения частиц как раз связаны, в основном, с многократным рассеянием налетающей частицы на атомах решетки и могут нести нужную информацию.

Угловое распределение частиц, прошедших пленку при моделировании чувствительно к выбору потенциала взаимодействия. На рис. 1 показано измеренное [22] угловое распределение протонов с начальной энергией 9 кэВ, прошедших через пленку Au толщиной $d = 143 \text{ \AA}$.

При расчетах использовались два типа потенциалов: потенциал Зиновьева и степенной потенциал. Потенциал Зиновьева [6]:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \exp\{-B(x)x\}, \quad B(x) = \frac{c_1}{1 + c_2 x^{1/2} + c_3 x}$$

$$x = \frac{R}{a_f}, \quad c_1 = 1.575, \quad c_2 = 0.719 \quad \text{и} \quad c_3 = -0.01.$$

В качестве длины экранирования использовался параметр, предложенный Фирсовым [28]:

$$a_f = 0.88534 a_B \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3}, \quad a_B = 0.529 \text{ \AA}.$$

Как видно из рис. 1, при использовании потенциала Зиновьева с длиной экранирования, равной a_f , видна существенная разница с экспериментом. Для согласования с экспериментом потребовалось добавить в потенциал Зиновьева дополнительный член при $R_1 < (1/6) \text{ \AA}$ — $U = U_{\text{zin}} \exp[-4(R_1 - R)]$ и варьировать константу экранирования a . Наилучшее согласие достигается при $a = 1.18 a_f$.

Чтобы избавиться от необходимости введения дополнительных членов в потенциал, проводился также расчет при варьировании константы экранирования в зависимости от межъядерного расстояния, а также использовался степенной потенциал.

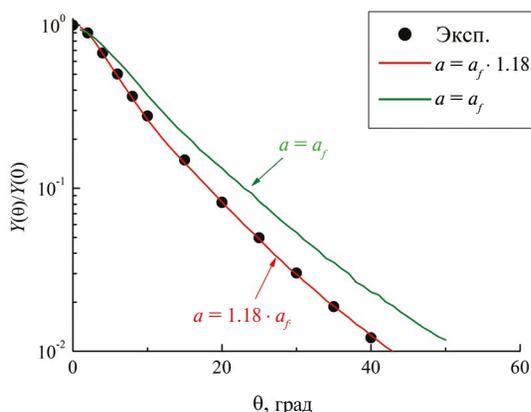


Рис. 1. Угловое распределение ионов, прошедших сквозь пленку. Данные нормированы при $\theta = 0^\circ$. Точки — экспериментальные данные. Линии — расчет с использованием потенциала Зиновьева [6] со значениями длины экранирования $a = a_f$ и $a = 1.18 a_f$.

Для проверки методики мы определили потенциал из независимых измерений, проведенных в работе [19] для столкновений протонов с энергией 10 кэВ с пленкой из золота толщиной 153 \AA . Условия экспериментов Фама и Арчуби весьма похожие, однако имеются небольшие различия в поведении угловой зависимости при углах рассеяния, больше 25° , это влияет на получаемый потенциал. В целом, разброс кривых на рис. 2 характеризует имеющиеся ошибки в получении параметров потенциала при анализе экспериментов по прохождению частиц сквозь тонкие пленки.

ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ О ПОТЕНЦИАЛАХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦА — ТВЕРДОЕ ТЕЛО

На рис. 3 сравниваются результаты определения потенциала из данных по прохождению частиц сквозь тонкие пленки с полученными ранее [27] результатами моделирования эксперимента по обратному рассеянию водородных частиц поверхностью твердого тела. Мы предполагали, что при рассеянии протонов в твердом теле достигается равновесное распределение частиц по заряду в пучке, но оно может быть различным для разных начальных энергий. Поэтому параметры потенциала для разных энергий определялись независимо. Как видно из рис. 3, данные для разных энергий близки, что еще раз подтверждает устойчивость методики определения параметров потенциала. Полученные нами потенциалы для

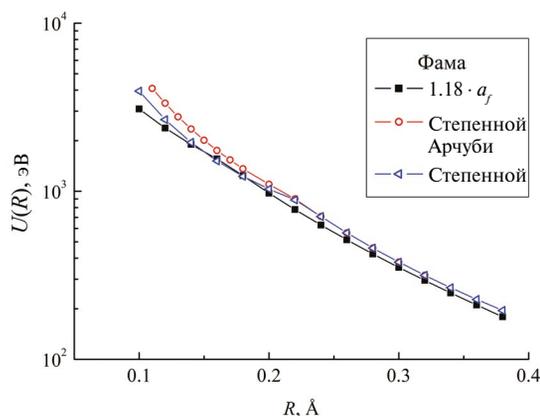


Рис. 2. Сравнение данных о потенциале, полученных при применении различных формул потенциалов при обработке экспериментов. Эксперимент [22] потенциал Зиновьева с $a = 1.18 a_f$ — квадраты. Эксперимент [22] степенной потенциал — кружки. Эксперимент [19] степенной потенциал — треугольники.

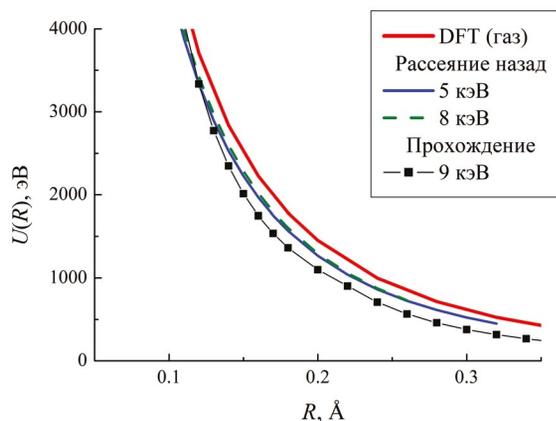


Рис. 3. Потенциалы, полученные из эксперимента по обратному рассеянию для различных энергий соударения, и потенциалы, полученные из данных по прохождению частиц через тонкие пленки. Для сравнения приведен потенциал DFT для столкновений частиц в газовой фазе.

обоих типов эксперимента в твердой фазе существенно отличаются от потенциала DFT (газовая фаза). При этом наблюдаемое различие для потенциала, полученного из анализа экспериментов по прохождению тонких пленок несколько больше.

Проведенный анализ показал, что результирующие потенциалы, полученные при обработке данных по обратному рассеянию, характеризуются увеличением функции экранирования (или уменьшением длины экранирования) на 10–15%. Для потенциалов, полученных из анализа угловых распределений частиц, прошедших сквозь тонкую пленку, разница составляет $18 \pm 2\%$ для $R = 0.3 \text{ \AA}$ и уменьшается до 6% для $R = 0.08 \text{ \AA}$, т.е. разница уменьшается для более тесных соударений. Таким образом при уменьшении межъядерного расстояния значения потенциалов для газовой и твердой фаз сближаются.

Возможны несколько причин отличия полученных потенциалов от потенциалов для газовой фазы. Одной из причин может быть поляризация облака электронов проводимости налетающей частицей. Другой причиной может быть отличие реальной кристаллической структуры поликристалла от структуры, рассматриваемой при моделировании. Напомним, мы считали поликристалл состоящим из микрокристаллов с размером в одну постоянную решетки, случайно ориентированных в пространстве. Если увеличить размеры такого микрокристалла могут возникнуть эффекты, связанные с проявлением эффекта каналирования. Они могут повлиять на траектории частиц и получаемые угловые распределения. При анализе потока обратно рассеянных частиц эти эффекты

должны проявляться слабее. Это может объяснять различие полученных потенциалов для двух типов эксперимента.

Таким образом, для уточнения получаемых результатов нужно точное знание структуры образцов.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ТОРМОЗНЫХ ПОТЕРЬ, ПОТЕНЦИАЛА И ЭНЕРГИИ СОУДАРЕНИЯ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПО ГЛУБИНЕ ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

На рис. 4 показан профиль имплантированных частиц, рассчитанный нашей программой с использованием потенциала ZBL [2] для двух моделей электронных тормозных потерь: данные эксперимента [21] и модель, применяемая в пакете SRIM [25]. Используемая модель оказывает сильное влияние на распределение по глубине имплантированных частиц. Наша программа в отличие от пакета SRIM позволяет легко менять эту модель. Видно, что при использовании экспериментальных данных Маркина [21] профиль уширяется, а средний пробег частиц увеличивается.

Далее мы будем приводить результаты с использованием экспериментальных данных [21] об электронных тормозных способностях. На рис. 5 представлены профили, полученные с использованием потенциалов ZBL, Зиновьева, и DFT (теоретического потенциала, полученного в рамках приближения функционала плотности), а также модельного потенциала, полученного из

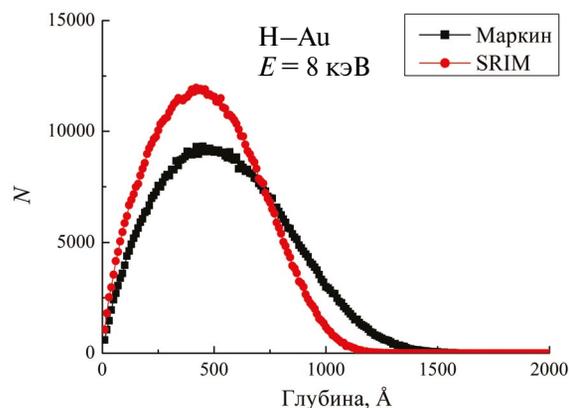


Рис. 4. Распределение по глубине имплантированных частиц для системы H–Au с начальной энергии 8 кэВ. Расчет нашей программой с использованием потенциала ZBL [2] для двух моделей электронных тормозных потерь: данные эксперимента Маркин [21] и модель, применяемая в пакете SRIM [25].

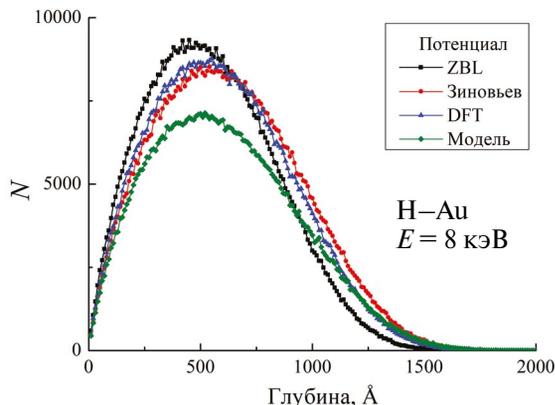


Рис. 5. Распределения имплантированных частиц по глубине, рассчитанные при использовании потенциалов ZBL, Зиновьева, и DFT, а также модельного потенциала, полученного из анализа экспериментальных данных о рассеянии в твердом теле.

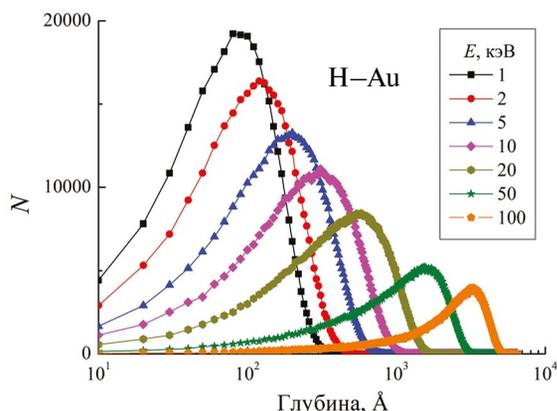


Рис. 6. Зависимость профиля (распределения по глубине) имплантированных частиц от начальной энергии.

анализа экспериментальных данных при столкновениях частиц с твердым телом. Как видно, потенциал ZBL занижает средний пробег. Потенциалы Зиновьева и DFT дают близкие результаты. При использовании модельного потенциала наблюдается некоторое уширение профиля и уменьшение числа имплантированных частиц, связанное с увеличением отражения частиц от поверхности.

На рис. 6 представлено изменение профиля имплантированных частиц при изменении энергии соударения. При моделировании использовался потенциал Зиновьева [6]. Как видно из рис. 6, при уменьшении энергии имплантированных частиц можно ожидать существенного уменьшения толщины, затрагиваемого имплантацией слоя.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан пакет программ, позволяющий описывать характеристики частиц, рассеянных от

поверхности твердого тела, а также прошедших сквозь тонкие пленки. Пакет дает возможность моделировать пробеги частиц, распределение имплантированных частиц по глубине и энерговыделение.

На основе анализа угловых распределений частиц, прошедших сквозь тонкие пленки золота, определены параметры потенциала, наилучшим образом описывающего эксперимент. Полученный потенциал отличается от потенциала, описывающего столкновение в газовой фазе заметным изменением константы экранирования и подтверждает ранее полученный такой же результат, основанный на анализе энергетических и угловых спектров обратно рассеянных частиц.

Показано, что выбор модели, описывающей торможение частиц в веществе и типа потенциала влияет на получаемые профили имплантированных частиц.

Продемонстрировано, что уменьшение энергии соударения приводит к значительному изменению толщины имплантированного слоя. Сам результат очевиден. Однако проведенное моделирование позволяет перейти к количественным характеристикам.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Бабенко П.Ю., Михайлов В.С. и Тенсин Д.С. благодарят за финансовую поддержку грант Российского научного фонда № 22-22-20081, <https://rscf.ru/project/22-22-20081/>, а также грант Санкт-Петербургского научного фонда в соответствии с соглашением от 14 апреля 2022 г. № 22/2022

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Moliere G.* // *Z. Naturforsch. A* 1947. V. 2. P. 133. <https://doi.org/10.1515/zna-1947-0302>
2. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids, the Stopping and Range of Ions in Matter, V. 1. New York: Pergamon, 1985, 321p.
3. *Lenz W.* // *Z. Phys.* 1932. V. 77. P. 713. <https://doi.org/10.1007/BF01342150>
4. *Jensen H.* // *Z. Phys.* 1932. V. 77. P. 722. <https://doi.org/10.1007/BF01342151>
5. *Wilson W.D., Haggmark L.G., Biersack J.P.* // *Phys. Rev. B* 1977. V. 15. P. 2458. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.15.2458>
6. *Zinoviev A.N.* // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 2011. V. 269. P. 829. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.074>
7. *Zinoviev A.N., Nordlund K.* // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 2017. V. 406. P. 511.

- <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.03.047>
8. Meluzova D.S., Babenko P.Yu., Shergin A.P., Nordlund K., Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B 2019. V. 460. P. 4.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.03.037>
 9. Zinoviev A.N., Babenko P.Yu., Nordlund K. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B 2021. V. 508. P. 10.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2021.10.001>
 10. Agrawal A., Mishra R., Ward L., Flores K.M., Windl W. // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2013. V. 21. P. 085001.
<https://doi.org/10.1088/0965-0393/21/8/085001>
 11. Bjorkas C., Juslin N., Timko H., Vortler K., Nordlund K., Henriksson K., Erhart P. // J. Phys.: Condens. Matter 2009. V. 21. P. 445002.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/44/445002>
 12. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Proville L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. // J. Phys.: Condens. Matter 2013. V. 25. P. 395502.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/39/395502>
 13. Bruckner B., Strapko T., Sortica M.A., Bauer P., Primetzhofer D. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B 2020. V. 470. P. 21.
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2020.02.018>
 14. Бабенко П.Ю., Мелузова Д.С., Солоницына А.П., Шергин А.П., Зиновьев А.Н. // ЖЭТФ 2019. Т. 155. С. 612.
<https://doi.org/10.1134/S0044451019040047>
 15. Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н., Тенсин Д.С. // ЖТФ. 2022. Т. 92. С. 1643.
<https://doi.org/10.21883/JTF.2022.11.53436.151-22>
 16. 3. NDS – Database.
<https://www-nds.iaea.org>
 17. Blume R., Eckstein W., Verbeek H. // Nucl. Instr. Meth. 1980. V. 168. P. 57.
[https://doi.org/10.1016/0029-554X\(80\)91231-8](https://doi.org/10.1016/0029-554X(80)91231-8)
 18. Morita K., Akimune H., Suita T. // J. Phys. Soc. Japan 1968. V. 25. P. 1525.
<https://doi.org/10.1143/JPSJ.25.1525>
 19. Archubi C.D., Eckardt J.C., Lantschner G.H., Arista N.R. // Phys. Rev. A 2006. V. 73. P. 042901.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.73.042901>
 20. Valdes J.E., Martínez-Tamayo G., Lantschner G.H., Eckardt J.C., Arista N.R. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 1993. V. 73. P. 313.
[https://doi.org/10.1016/0168-583X\(93\)95744-P](https://doi.org/10.1016/0168-583X(93)95744-P)
 21. Markin S.N., Primetzhofer D., Prusa S., Brunmayr M., Kowarik G., Aumayr F., Bauer P. // Phys. Rev. B 2008. V. 78. P. 195122.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.195122>
 22. Fama M., Lantschner G.H., Eckardt J.C., Denton C.D., Arista N.R. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 2000. V. 164-165. P. 241.
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(99\)01086-1](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(99)01086-1)
 23. Andersen H.H., Csete A., Ichioka T., Knudsen H., Moller S.P., Uggerhoj U.I. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 2002. V. 194. P. 217.
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(02\)00692-4](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(02)00692-4)
 24. Зиновьев А.Н., Бабенко П.Ю. // ПЖЭТФ 2022. Т. 115. С. 603.
<https://doi.org/10.31857/S1234567822090105>
 25. SRIM — The Stopping and Range of Ions in Matter — code.
<http://srim.org>
 26. Мелузова Д.С., Бабенко П.Ю., Шергин А.П., Зиновьев А.Н. // Поверхность 2019. В. 4. С. 74.
<https://doi.org/10.1134/S0207352819040127>
 27. Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н., Михайлов В.С., Тенсин Д.С., Шергин А.П. // ПЖТФ. 2022. Т. 48. С. 10.
<https://doi.org/10.21883/PJTTF.2022.14.52862.19231>
 28. Firsov O.B. // Sov. Phys. JETP 1958. V. 7. P. 308.

Determination of the Ion—Solid Interaction Potential from the Experiment and Its Influence on the Profiles of Implanted Particles

A. N. Zinoviev¹*, P. Yu. Babenko¹, V. S. Mikhailov¹, D. S. Tensin¹

¹Ioffe Institute St. Petersburg, St. Petersburg, 19402 Russia

*e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

Based on the analysis of the angular distributions of particles passing through thin gold films, the parameters of the potential that best describes the experiment are obtained. The resulting potential differs from the potential describing collisions in the gaseous phase by a noticeable change in the screening constant. The influence of the collision energy, the choice of potential, and the model of electron bremsstrahlung on the depth distribution of implanted particles is analyzed.

Keywords: angular distributions, thin films, interatomic interaction potentials, electronic stopping, ion implantation.