

XXIII Международная конференция
Взаимодействие ионов с поверхностью «ВИП – 2017»

XXIII International Conference
Ion – Surface Interactions «ISI – 2017»

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
ИНСТИТУТ МИКРОЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ РАН
ЯРОСЛАВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ имени Н.Э.Баумана

Взаимодействие ионов с поверхностью

ВИП-2017

Труды XXIII Международной конференции

21-25 августа 2017 г.
Москва, Россия

Редакторы

Е.Ю. Зыкова

Московский Государственный Университет

П.А.Карасёв

Санкт-Петербургский Политехнический Университет

А.И. Титов

Санкт-Петербургский Политехнический Университет

В.Е. Юрасова

Московский Государственный Университет

Ministry of Education and Science of the Russian Federation
Russian Academy of Sciences
National Research Nuclear University «MEPhI»
Moscow State University
Saint Petersburg Polytechnic University
Moscow Aviation Institute
Institute of Microelectronics Technology RAS
Yaroslavl State University
Bauman Moscow State Technical University

Ion-Surface Interactions

ISI–2017

Proceedings
of the XXIII International Conference

August 21-25, 2017
Moscow, Russia

Editors

E.Yu. Zykova
Moscow State University

P.A.Karaseov
Saint Petersburg Polytechnic University

A.I.Titov
Saint Petersburg Polytechnic University

V.E.Yurasova
Moscow State University

Volume 1

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая XXIII Международная конференция «Взаимодействие ионов с поверхностью» (ВИП-23) проводится в Москве с 21 по 25 августа 2017 года в гостинице «Интурист Коломенское».

Тематика традиционно охватывает фундаментальные и прикладные вопросы взаимодействия ионов с поверхностью.

Доклады объединены в 6 секций, работающих последовательно:

1. Распыление, структура поверхности, десорбция;
2. Рассеяние и проникновение ионов;
3. Эмиссия ионов, электронов, фотонов и рентгеновского излучения при ионной бомбардировке;
4. Имплантация ионов и модификация поверхности;
5. Ионно-индуцированные процессы в тонких пленках и наноструктурах;
6. Взаимодействие плазмы с поверхностью – физика и технология.

В рамках секций помимо регулярных устных и стендовых докладов будут представлены обзорные лекции, посвященные передовым результатам научных исследований в области взаимодействия ионов с поверхностью и в некоторых смежных областях знаний.

Организаторами конференции ВИП-23 являются Российская Академия Наук, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Московский государственный университет, Санкт-Петербургский политехнический университет, Московский авиационный институт, Ярославский филиал физико-технологического института РАН, Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана.

Конференция «Взаимодействие ионов с поверхностью» является одной из ведущих в своей области науки. Впервые она прошла в 1971 году в Харькове по инициативе профессора Я.М.Фогеля; далее конференции проводились в Москве, Киеве, Минске, Звенигороде, Ярославле. На протяжении всего времени конференция ВИП сохранялась и бережно поддерживалась её организаторами, в том числе теми, кто стоял у её истоков. К ним в первую очередь относятся: Ю.А. Рыжов, В.Е. Юрасова, Я.М. Фогель, О.Б. Фирсов, Б.Б. Кадомцев, В.Т.Черепин, В.А.Лабунов, В.Г.Тельковский, И.И.Шкарбан, В.А.Курнаев, А.И.Титов и др.

В конференции ВИП традиционно участвуют ведущие специалисты из многих стран. За время существования конференции приглашёнными докладчиками были зарубежные ученые с мировым именем: Р.Бараджиола, Р.Бериш, Г.Бетц, М.Бинейм, Х.Бронгерсма, Г.Венер, Р.Вебб, Г.Винтер, Дж.Вильямс, Н.Виноград, А.Вухер, Ж-П.Гояк, В.Есаулов, В.Зиглер, П.Зигмунд, П.Зейлманс ван Эммиховен, К.Кимура, А.Клейн, Дж.Коллигон, Т.Мишели, А.Нихауз, К.Нордлунд, Б.Раушенбах, Н.Толк, М.Томпсон, Ф.Флорес, В.Хайланд, М.Шимонский, Г.Шивец, З.Шрубек, В.Экштайн, Я.Ямазаки и многие другие.

От лица организаторов конференции выражаю глубокую благодарность российским и иностранным членам Организационного и Программного комитетов и Международного совета за большую и разнообразную помощь в организации конференций. Особая роль в развитии конференции среди зарубежных ученых принадлежит Дж.Коллигону, участвовал почти во всех конференциях ВИП, помогал в их организации, финансировании и издании трудов в журнале *Vacuum*. Неоценимую помощь в организации многих конференций ВИП и в выборе приглашенных докладчиков оказывал Питер Зигмунд.

Тенденцией последних конференций является увеличение числа поисковых работ, направленных на решение задач, которые создают научную базу для новых технологий в самых прогрессивных областях науки и техники: микро-, нано- и биотехнологиях, оптоэлектронике, медицине, ядерной, термоядерной и водородной энергетике.

Интерес к конференции ВИП увеличивается из года в год. Появляется много новых участников из разных городов России и из зарубежных стран, среди которых преобладают молодые участники. Целый ряд молодых участников выступит в этом году с приглашенными обзорными докладами по их работе.

Начиная с прошлого года, перед началом конференции проводится серия образовательных лекций для молодых участников. В этом году эти лекции расширены и выделены в отдельное мероприятие – школу молодых ученых по взаимодействию ионов с поверхностью, которая пройдет 19-20 августа.

В адрес Оргкомитета в этом году поступило около 250 расширенных тезисов научных докладов (более чем из 20-ти стран мира), которые опубликованы в настоящих трудах конференции. Видна не только широта круга участников, но и высокое качество присланных тезисов.

После завершения конференции предполагается публикация представленных докладов в виде статей в журналах "Поверхность", "Известия РАН, серия физическая" и Vacuum. Статьи для публикации будут отобраны и распределены по журналам Программным комитетом после рецензирования во время работы конференции.

В свободное от работы конференции время будут организованы экскурсии в парк Коломенское, в центр Москвы с посещением музеев Кремля и других музеев, на спектакли в московские театры.

Организаторы ВИП-23 надеются, что дружественное общение участников в ходе работы конференции будет способствовать её успеху и дальнейшему сотрудничеству учёных.

Ю.М.Гаспарян, сопредседатель Программного комитета ВИП-23.

INTRODUCTION

The 23rd International Conference on Ion-Surface Interactions (ISI-23) will be held from 21st to 24th of August 2017, in the “Intourist-Kolomenskoe” hotel in Moscow.

The Conference covers both basic and applied issues of ion-surface interaction in its six sections:

1. Sputtering, surface structure, desorption;
2. Ion scattering and ion penetration;
3. Emission of ions, electrons, photons, and X-rays in ion bombardment;
4. Ion implantation and surface modification;
5. Ion-induced processes in thin films and nanostructures;
6. Plasma- surface interaction: physics and technology.

In the frame of each section, regular oral and poster presentation together with review talks will be presented.

The ISI-23 is organized by the Russian Academy of Sciences, National research nuclear university «MEPhI» (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow state university, Moscow aviation institute, Yaroslavl branch institute of physics and technology of the RAS, and Institute of microelectronics technology and high-purity materials of the RAS, Moscow State Technical University.

The ISI Conference is one of the leading in the field of ion-surface interaction. It was organized for the first time in Kharkov in 1971 on the initiative of Prof. Ya.M. Fogel. Later it was hold at Moscow, Kiev, Minsk, Zvenigorod, Yaroslavl.

For a long time, the ISI conference is carefully supported by her organizers, including those who stood at its origins: Yu.A. Ryzhov, V.E. Yurasova, B.B.Kadomtsev, V.T.Cherepin, V.A.Labunov, V.G.Telkovsky, I.I.Shkarban, V.A.Kurnaev, A.I.Titov and others.

The ISI conference is traditionally attended by leading experts in the field from many countries. In different time, invited speakers were: R.Baragiola, R.Behrisch, G.Betz, M.Bernheim, G.Betz, H.Brongersma, J.Colligon, W.Eckstein, V.Esaulov, F.Flores, J.-P.Gauyacq, W.Heiland, A.Itoh, K.Kimura, A.Klein, T. Michely, A.Niehaus, K.Nordlund, B.Rauschenbach, G.Schiwietz, P.Sigmund, Z.Sroubek, M.Szymonski, M.Thompson, N.Tolk, R.Webb, G.Wehner, J.Williams, N.Winograd, H.Winter, A.Wucher, Y.Yamazaki, P.Zeijlmans van Emmichoven, J.Ziegler, and many others.

The tendency of the last conferences was raising number of cutting-edge papers oriented towards solution of issues that provide a scientific basis for the emerging technologies: in micro-, nano-, and biotechnologies, optoelectronics, medicine, nuclear fusion and fission, hydrogen energy, etc.

The popularity of the ISI conference increases year by year. There are many new participants from different regions of Russia and from abroad, and many of them are young people. A number of young participants will have a chance to present their results as oral or invited talks.

Starting from last year, a tutorial course of lectures for young participants is organized before the conference. This year, these lectures were expanded and highlighted in a separate event - the school of young scientists on the interaction of ions with the surface, which will be held on 19-20 August.

This time, the Organizing Committee received about 250 extended abstracts from over 25 countries. The materials are published in this Conference Proceedings. It is my pleasure to mark both the variety of attendees and high quality of the extended abstracts received.

After the conference, selected papers of the Conference will be published as special issues of the “Bulletin of the Russian Academy of Sciences, Physics”, “Journal of Surface Investigation”, and “Vacuum”.

Guided tours to Kolomenskoye Park, to the center of Moscow, with visits to the Kremlin museums and other museums and theaters will be organized for participants in the time free of scientific sections.

The organizing committee hope that friendly communication between participants during the Conference would promote its success, that this conference will be just as interesting as the previous ones, that there will be lively discussions and that many useful contacts will be established.

Yury Gasparyan,
Co-chair of ISI-23 Programme committee



Участники конференции ВИП-22 в Москве, гостиница «Интурист Коломенское», 21.08.2015.
Participants of ISI-22 in Moscow (Hotel "Intourist-Kolomenskoe", 21.08.2015)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Ю.А.Рыжов	– председатель, академик РАН, МАИ
М.Н.Стриханов	– сопредседатель, НИЯУ МИФИ
В.Е.Юрасова	– зам. председателя, МГУ
А.И.Титов	– зам. председателя, СПбГПУ
В.А.Курнаев	– зам. председателя, НИЯУ МИФИ
А.Ф.Вяткин	– зам. председателя, ИПТМ РАН
Е.Д.Маренков	– ученый секретарь, НИЯУ МИФИ

Члены оргкомитета:

П.Ю.Бабенко	– ФТИ им.А.Ф.Иоффе
Л.Б.Беграмбеков	– НИЯУ МИФИ
А.М.Борисов	– МАИ
Ю.М.Гаспарян	– НИЯУ МИФИ
А.М.Зимин	– МГТУ
Е.Ю.Зыкова	– МГУ
П.А.Карасев	– СПбГПУ
Д.С.Коллигон	– Университет Хадерсфильд
Г.В.Корнич	– ЗНТУ
А.А.Семенов	– МАИ
О.С.Трушин	– ЯФ ФТИАН

ORGANISING COMMITTEE

- Yu.A.Ryzhov – *Chairperson*, Academician of RAS
M.N.Strikhanov – *Co chairperson*, National Research Nuclear University «MEPhI»
V.E.Yurasova – *Vice chairperson*, Moscow State University
A.I.Titov – *Vice chairperson*, St. Petersburg State Polytechnic University
V.A.Kurnaev – *Vice chairperson*, National Research Nuclear University «MEPhI»
A.F.Vyatkin – *Vice chairperson*, Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials RAS
E.D.Marenkov – *Scientific secretary*, National Research Nuclear University «MEPhI»

Members of organizing committee

- P.Yu. Babenko – Ioffe Physical-Technical Institute RAS
V.I. Bachurin – Yaroslavl branch of Institute of Physics and Technology RAS
L.B. Begrambekov – National Research Nuclear University «MEPhI»
A.M. Borisov – Moscow Aviation Institute
J.S. Colligon – The University of Huddersfield
Yu.M. Gasparyan – National Research Nuclear University «MEPhI»
P.A. Karaseov – St. Petersburg State Polytechnic University
G.V. Kornich – Zaporozhye National Technical University
A.A. Pisarev – National Research Nuclear University «MEPhI»
A.A.Semyonov – Moscow Aviation Institute
O.S. Trushin – Yaroslavl branch of Institute of Physics and Technology RAS
A.M. Zimin – Moscow State Technical University
E.Yu. Zykova – Moscow State University

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

- В.Е.Юрасова – *председатель*, МГУ, Москва, Россия
Ю.М.Гаспарян – *сопредседатель*, НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

Члены программного комитета:

- С.Жанг – Университет Наньянг, Сингапур
С.О.Кучеев – ЛЛНЛ, Ливермор, США
Ю.В.Мартыненко – НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
Е.С.Машкова – НИИЯФ МГУ, Москва, Россия
А.Н.Михайлов – ННГУ, Нижний Новгород, Россия
Т.Михели – Университет Кёльн, Германия
А.А.Писарев – НИЯУ МИФИ, Москва, Россия
В.Н.Попок – Университет Ольборг, Дания
Д.И.Тетельбаум – ННГУ, Нижний Новгород, Россия

МЕЖДУНАРОДНЫЙ СОВЕТ

А.И.Бажин (Украина), И.Бургдорфер (Австрия), Р.Вэбб (Великобритания),
А.Делькорте (Франция), Ф.Джурабекова (Финляндия), А.Н.Зиновьев
(Россия), В.А.Иванов (Россия), К.Кимура (Япония), В.А.Лабунов
(Белоруссия), Й.Мальхербе (ЮАР), У.Х.Расулев (Узбекистан), Н.А.Соболев
(Португалия), А.И.Титов (Россия), Х. Урбасек (Германия),
Ш.Фаско (Германия), В.С.Черныш (Россия).

СПОНСОРЫ

Российский фонд фундаментальных исследований

Издательство «Elsevier»

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

PROGRAM COMMITTEE

- V.E. Yurasova – *Chairperson*, Moscow State University, Russia
Yu.M. Gasparyan – *Co chairperson*, National Research Nuclear University «MEPhI»

Members of programme committee

- S.O. Kucheyev – Lawrence Livermore National Laboratory, USA
Yu.V. Martynenko – National Research Center «Kurchatov Institute», Russia
E.S. Mashkova – Institute of Nuclear Physics of MSU, Russia
T. Michely – University of Koeln, Germany
A.N.Mikhailov – University of Nizhni Novgorod, Russia
A.A. Pisarev – National Research Nuclear University «MEPhI», Russia
B.N.Popok – Aalborg University, Denmark
D.I. Tetelbaum – University of Nizhni Novgorod, Russia
S. Zhang – Nanyang Technological University, Singapore

INTERNATIONAL ADVISORY BOARD

- A. Bazhin (Ukraine), J. Burgdorfer (Austria), V. Chernysh (Russia),
A. Delcorte (France), F. Dzhurabekova (Finland), V. Ivanov (Russia),
S. Facsko (Germany), K. Kimura (Japan), V. Labunov (Belarus),
J. Malherbe (South Africa), U. Rasulev (Uzbekistan), N. Sobolev (Portugal),
A.I. Titov (Russia), H. Urbassek (Germany), R. Webb (UK),
A. Zinovyev (Russia).

SPONSORS

- Russian Foundation for Basic Research
«Elsevier»
National Research Nuclear University «MEPhI»

Пленарное заседание

Plenary session

STOPPING OF SLOW IONS REVISITED

P. Sigmund* and A. Schinner#

**Department of Physics, Chemistry and Pharmacy, University of Southern Denmark,*

DK-5230 Odense, Denmark, sigmund@sdu.dk

#Department of Experimental Physics, J. Kepler University, A-4040 Linz, Austria

According to common textbook knowledge the electronic stopping cross section S_e of ions penetrating matter is expected to be proportional to the projectile speed up to the Thomas-Fermi speed $v_{TF} = Z_1^{2/3} v_0$, where v_0 is the Bohr speed and Z_1 the atomic number of the ion. This picture, established by Lindhard and Scharff in 1961 [1], is widely accepted as a valid basis for estimating penetration and energy deposition profiles by transport theory or simulation. When it comes to quantitative details, the situation is more complicated for quite a number of reasons. In this talk I want to discuss such complications, both on the experimental and the theoretical side, and ways to overcome some of them.

- In contrast to stopping in the Bethe regime, in particular proton stopping above 1 MeV/u, where the state of the art requires an accuracy better than 1 %, discrepancies of more than a factor of two are not uncommon between low-velocity stopping data from different sources [2]. While factors like target purity may contribute to such errors, problems in data analysis are likewise candidates for closer inspection.
- Arguments supporting a linear dependence $S_e \propto v$ [3–5] assume projectile speeds below pertinent electron velocities in the target. Once v exceeds v_0 , this becomes increasingly questionable. Extension to $v > v_0$ was supported primarily by comparison with experimental data for ranges of fission fragments [1, 6].

Indeed, both positive and negative curvature can be observed in experimental data in the velocity range between v_0 and v_{TF} . The main cause of such behavior is variation in ion charge [7, 8], which is not foreseen in the above estimates.

- Instead of the predicted smooth dependence of S_e on the atomic numbers of Z_1 and Z_2 of the ion and the target, pronounced structure has been observed long ago, in particular Z_1 -oscillations [9, 10]. This effect is unquestionably real, but quantitative data depend on data analysis involving a valid correction for nuclear stopping, for which there is no commonly accepted standard [11].

- When experimental data are fitted to a power law $S_e \propto v^p$, the power p has been found to vary between ~ 0.8 and ~ 1.2 for $v < v_0$ [10]. A theoretical reason for such behavior is not known to our knowledge.
- Reciprocity arguments [12] suggest the existence of Z_2 structure similar to Z_1 structure. Such structure has been searched for, but experimental evidence is still inconclusive.
- Reciprocity in stopping cross sections, $S_e(Z_1, Z_2) = S_e(Z_2, Z_1)$ must be strictly obeyed in nonionizing collisions between neutral atoms, but has also been found to be approximately obeyed in solids [12, 13]. In case of major deviations a close look at the data analysis is indicated.
- Drastic deviations from reciprocity have been found in the popular SRIM code [14]. The origin of such discrepancies has been asserted to be related to the analysis of measured ion ranges [12].
- In addition to a correction for nuclear stopping also an electronic-stopping correction may be necessary, whenever only a fraction of the beam enters the detector [15]. This correction is determined by the dependence of electronic energy loss on impact parameter.
- The separation of energy loss into electronic and nuclear stopping becomes questionable when the two effects are comparable in magnitude. While such coupling is evident in straggling and higher moments, it has also been proposed for the stopping cross section [16].

References

- [1] J. Lindhard and M. Scharff, Phys. Rev. 124 (1961) 128.
- [2] H. Paul, *Stopping power graphs*, URL <https://www-nds.iaea.org/stopping/>.
- [3] E. Fermi and E. Teller, Phys. Rev. 72 (1947) 399.
- [4] J. Lindhard, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 28 no. 8 (1954) 1.
- [5] O. B. Firsov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 36 (1959) 1517, [Engl. transl. Sov. Phys. JETP **9**, 1076-1080 (1959)].
- [6] J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiøtt, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 no. 14 (1963) 1.

- [7] A. F. Lifschitz and N. R. Arista, Nucl. Instrum. Methods B 316 (2013) 245.
- [8] P. Sigmund and A. Schinner, Nucl. Instrum. Methods B 342 (2015) 292.
- [9] J. H. Ormrod and H. E. Duckworth, Can. J. Phys. 41 (1963) 1424.
- [10] B. Fastrup, P. Hvelplund and C. A. Sautter, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 35 no. 10 (1966) 1.
- [11] L. G. Glazov and P. Sigmund, Nucl. Instrum. Methods B 207 (2003) 240.
- [12] P. Sigmund, Europ. Phys. J. D 47 (2008) 45.
- [13] V. Kuzmin and P. Sigmund, Nucl. Instrum. Methods B 269 (2011) 817.
- [14] J. F. Ziegler, *Particle interactions with matter* (2012), URL www.srim.org.
- [15] J. C. Eckardt, G. H. Lantschner, M. M. Jakas and V. H. Ponce, Nucl. Instrum. Methods 230 (1984) 168.
- [16] P. Sigmund, Izv. Russ. Akad. NAUK Ser. Fiz. 72 (2008) 608, [Bulletin Russ. Acad. Sci. Phys. Ser. 72, 569 (2008)].

MOLECULAR IMAGING USING TRANSMISSION SECONDARY ION MASS SPECTROMETRY

K. Nakajima¹⁾, K. Yamamoto¹⁾, K. Narumi²⁾, Y. Saitoh²⁾, K. Hirata³⁾, and K. Kimura¹⁾*

¹⁾*Department of Micro Engineering, Kyoto University, Nishikyo, Kyoto, Japan*

²⁾*Takasaki Advanced Radiation Institute, QST, Takasaki, Gumma, Japan*

³⁾*National Metrology Institute of Japan, AIST, Tsukuba, Ibaraki, Japan*

**e-mail: kimura@kues.kyoto-u.ac.jp*

Introduction

There has been an increasing demand for molecular imaging in a wide range of fields, especially biology and medical science. The most commonly used technique for molecular imaging is MALDI (matrix assisted laser desorption ionization) [1]. MALDI provides imaging of large biomolecules such as peptides and amino-acids. The spatial resolution of MALDI is, however, limited by the use of matrix and is about several tens μm which is not enough for many applications. In this respect, secondary ion mass spectrometry (SIMS) could be a good alternate technique. By using a micro ion beam, spatial resolution better than 100 nm can be easily achieved [2]. In the conventional SIMS, however, large molecules are easily destroyed by the irradiation of the primary ions. Consequently, the yield of intact molecular ions is very low for molecular imaging. There has been a number of attempts to improve the yield of intact molecular ions in SIMS. During the past two decades, various kinds of large cluster ions, such as C_{60} ions [3], argon gas cluster ions [4], water cluster ions [5], and metal cluster ions [6] have been used as primary ions to improve the yield of intact molecular ions. It was shown that these cluster ions enhance emission of intact large molecular ions compared to monatomic ion bombardment. However, the luminosities of ion sources used for these cluster ions are not good enough to provide micro beams with enough intensity for molecular imaging. In this presentation, we propose a new technique for molecular imaging using so-called transmission SIMS in combination with secondary electron microscopy. The preliminary results of this new technique will be presented.

Transmission SIMS

In the conventional SIMS, secondary ions emitted in the backward direction from the sample surface are analyzed. If the primary ion has enough energy to transmit through the sample, the secondary ions emitted in the forward direction upon transmission of the primary ion can be also analyzed, which we call *transmission SIMS*. We have demonstrated that the secondary ion yield of intact biomolecules are enhanced in the forward direction compared to

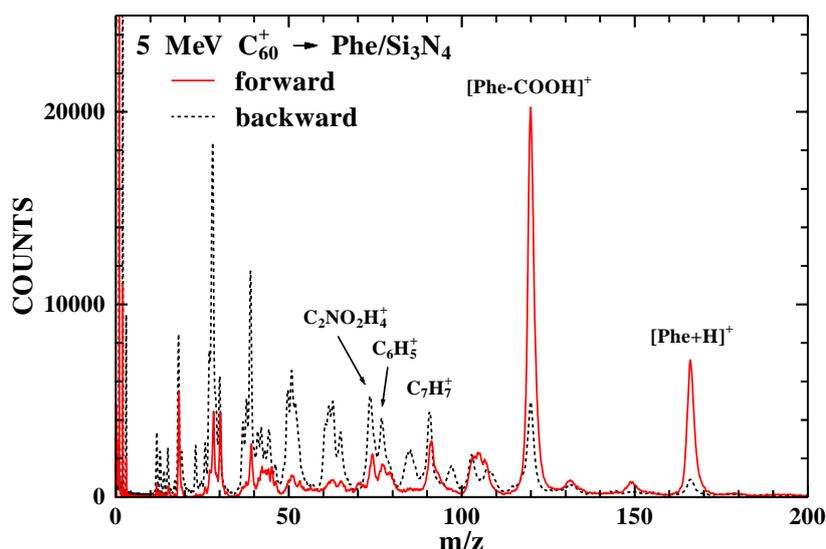


Fig. 1. Mass spectra for positive ions from phenylalanine films on a-Si₃N₄ films under 5 MeV C₆₀⁺ ion bombardment. The spectra observed in the forward direction (solid line) and the backward direction (dashed line) are shown.

the backward direction using 5 MeV C₆₀ ions [7]. Figure 1 shows examples of the observed mass spectra of secondary ions when 5 MeV C₆₀ ions are incident on a phenylalanine film deposited on a self-supporting thin silicon nitride film. The dashed line shows the mass spectrum of secondary ions emitted in the backward direction when the primary ions are incident on the phenylalanine side. There is a peak at $m/z = 166$, which corresponds to the protonated intact phenylalanine ions. There are, however, many peaks of fragment ions at lower mass numbers and the yields of these fragment ions are much larger than the intact phenylalanine ion. When the secondary ions are observed in the forward direction, the observed spectrum changes drastically as shown by a solid line in Fig. 1. The yield of the intact phenylalanine ion is enhanced by one order of magnitude, while the yield of the fragment ions are considerably reduced compared to the backward direction. This clearly demonstrates the advantage of transmission SIMS.

The observed yield enhancement of the intact molecular ion might be related to the broadening of the spatial distribution of the constituent carbon atoms during the passage through the film. Due to the broadening, the deposited energy distributes in a large area with a relatively low peak energy density at the exit surface. This is a suitable situation for the emission of intact molecular ions. If this is the case, the enhancement should be changed when the distribution changes. In order to see if this is the case, phenylalanine films of different thicknesses were prepared on a silicon nitride films and the secondary ions emitted in the forward direction upon transmission of 5 MeV C₆₀ ions were measured. Figure 2 shows

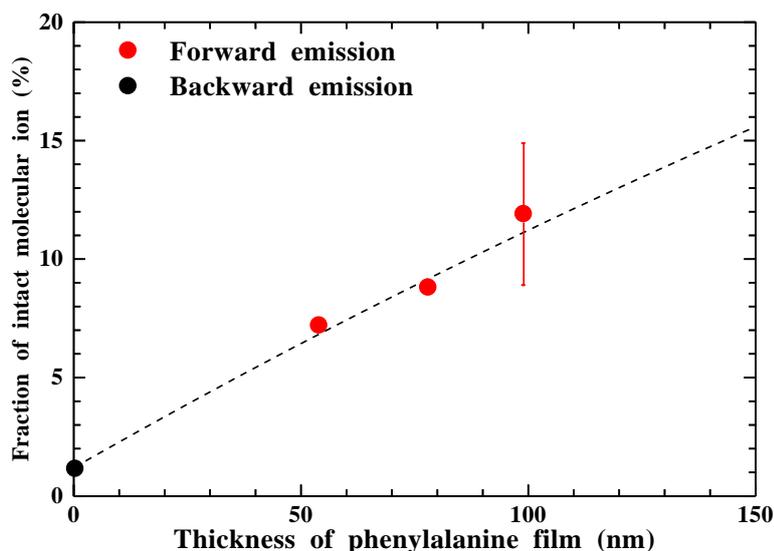


Fig. 2. Fraction of intact phenylalanine ions as a function of the thickness of the phenylalanine film.

the fraction of the intact phenylalanine ion yield in the total secondary ions as a function of the film thickness. The fraction increases with increasing thickness as is expected. This indicates that moderate energy deposition enhances emission of intact molecular ions.

Novel molecular imaging technique using transmission SIMS

Although the yield enhancement of intact molecular ions is observed using 5 MeV C_{60} ions in the forward direction, it is not easy to prepare a micro beam of 5 MeV C_{60} ions for molecular imaging due to the poor luminosity of the ion source. We therefore developed a

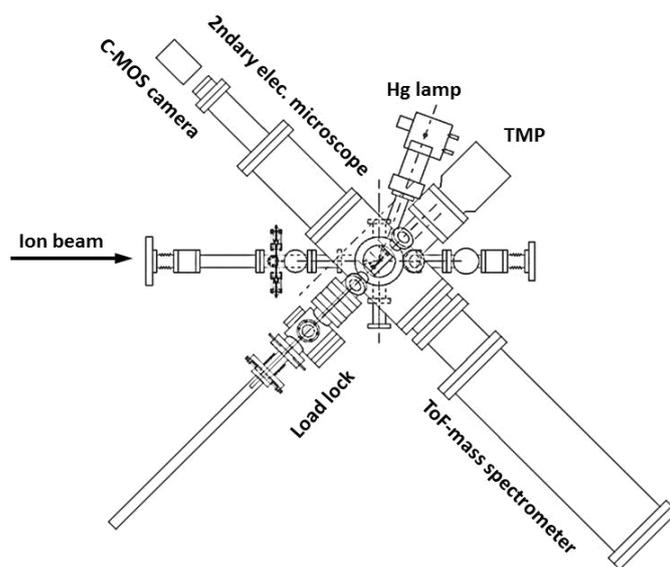


Fig. 3. Schematic drawing of the equipment developed for molecular imaging.

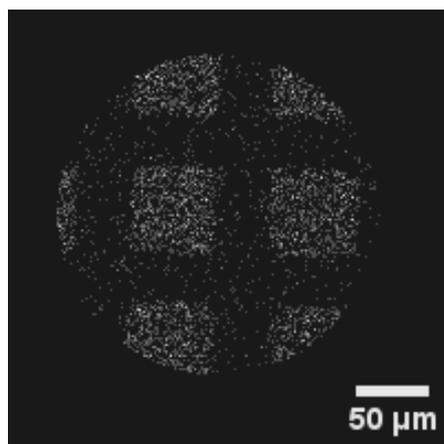


Fig. 4. Molecular image of phenylalanine observed using 6 MeV Cu^{3+} ions.

new molecular imaging technique which does not require a micro beam. The developed equipment is schematically shown in Fig. 3, where the transmission SIMS is combined with secondary electron microscopy. The primary ions transmitted through a thin film sample are detected by a surface barrier detector. The secondary ions emitted in the forward direction are mass analyzed by a time of flight mass spectrometer using the primary ion signal as a start signal. Simultaneously, secondary electrons emitted in the backward direction upon incidence of the primary ion are observed by a secondary electron microscope and the image is taken by a high-speed C-MOS camera. The impact position of the primary ion can be determined from the observed secondary electron image. By combining the information of the impact position and the information of the secondary ion, molecular imaging can be performed. In order to examine the performance of the developed technique, phenylalanine was deposited on a silicon nitride film through a square mesh to prepare a patterned phenylalanine film. An example of the observed molecular image of phenylalanine is shown in Fig. 4. An array of squares is clearly seen, demonstrating the ability of molecular imaging using the developed technique. The spatial resolution estimated from the observed image is about 1 μm . In this observation, 6 MeV Cu^{3+} ions were used as primary ions. Brighter images should be obtained using MeV C_{60} ions.

Acknowledgement

The authors are grateful to the crew of the 3 MV tandem accelerator at QST/Takasaki for providing the 5 MeV C_{60}^+ beam and to the members of the Quantum Science and Engineering Center of Kyoto University for the use of the tandem accelerator. This work was supported by JSPS KAKENHI Grant (Grant Number 26246025).

References

1. S. Khatib-Shahidi, M. Andersson, J. L. Herman, T.A. Gillespie, R.M. Caprioli, *Anal. Chem.* **78** (2006) 6448.
2. K. Goto, M. Waki, T. Takahashi, M. Kadowaki, M. Setou, *Chem. Bio. Chem.* **13** (2012) 1103.
3. E.A. Schweikert, M.J. van Stipdonk, R.D. Harris, *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **10** (1996) 1987..
4. N. Toyoda, J. Matsuo, T. Aoki, I. Yamada, D.B. Fenner, *Appl. Surf. Sci.* **203-204** (2003) 214
5. K. Mori, D. Asakawa, J. Sunner, K. Hiraoka, *Rapid Commun. Mass. Spectrom.* **20** (2006) 2596.
6. R.D. Rickman, S.V. Verkhoturov, E.S. Parillis, E.A. Schweikert, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 047601.
7. K. Nakajima, K. Nagano, M. Suzuki, K. Narumi, Y. Saitoh, K. Hirata, and K. Kimura, *Appl. Phys. Lett.* **104** (2014) 114103.

**Swift heavy ions, ices and astrophysics: irradiation of water ices
and complex organic molecules**

G. Silva Vignoli Muniz⁽¹⁾, A. Agnohotri⁽¹⁾, R. Martinez^{(1),(3)}, A. Domaracka⁽¹⁾, H. Rothard⁽¹⁾, G. Strazzulla⁽²⁾ M.E. Palumbo⁽²⁾ and P. Boduch⁽¹⁾

⁽¹⁾*Centre de recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique
(CEA/CNRS/ENSICAEN/Université de Caen-Basse Normandie)*

CIMAP-GANIL Bd Henri Becquerel, BP 5133, F-14070 Caen cedex 05, France.

⁽²⁾*INAF-Osservatorio Astrofisico di Catania, Via S. SOFIA 78, 95123 Catania, Italy.*

⁽³⁾*Departamento do Fisica, Universidade Federal do Amapa, Brazil.*

E-mail: boduch@ganil.fr

The main objective of this research program is to simulate the effects of heavy ion irradiation on astrophysical ices. Heavy ions (C, O, S, Fe, Ni) are present in the solar wind, in cosmic rays and in the magnetosphere of giant planets. Ices, found e.g. on comets and dust grains (dense clouds) in space are mainly formed by simple molecules (like H₂O, CO, CO₂, NH₃ ...). For complex organic molecules, several theories claim that these molecules have possibly reached the early Earth via comets and meteorites [1]. Indeed, the recent space missions identified nucleobase's precursors: glycine was detected in the coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko [2]. Additionally, analysis of carbonaceous meteorites on Earth shows a presence of nucleobases, including adenine. That is an indication of its existence in outer space.

In the laboratory, the icy samples are deposited at low temperature (typically between 15K and 150K) and are irradiated with swift heavy ions delivered by GANIL (Grand Accélérateur National d'Ions Lourds, Caen, France). Low energy (KeV domain) ions can simulate the effect of solar wind on ice and high energy (MeV-GeV) ions, the role of cosmic rays. In situ infrared absorption spectroscopy allows to observe the disappearance of molecules (fragmentation or sputtering), and the appearance of new molecular species as a function of the projectile fluence [3]. Destruction cross section can be determined and can give informations about the radioresistance of the irradiated target molecules. Time of flight experiments have also been performed in order to study sputtering processes for secondary ion emission and determine cluster size distribution.

Two new series of results will be presented:

- Low energy ion irradiation of H₂O ices. Different thicknesses have been irradiated with 90 KeV O⁶⁺ at different temperatures. The figure 1 shows the evolution of the Time Of Flight (TOF) spectra as a function of the temperature. The cluster distribution is obviously temperature dependent. The production yield of (H₂O)_nH⁺ cluster decreases when the temperature increases. We have also studied the effect of the ice structure on the cluster distribution and on the sputtering yield. One experiment was also performed with heavy water (D₂O). The comparison with H₂O will be presented.

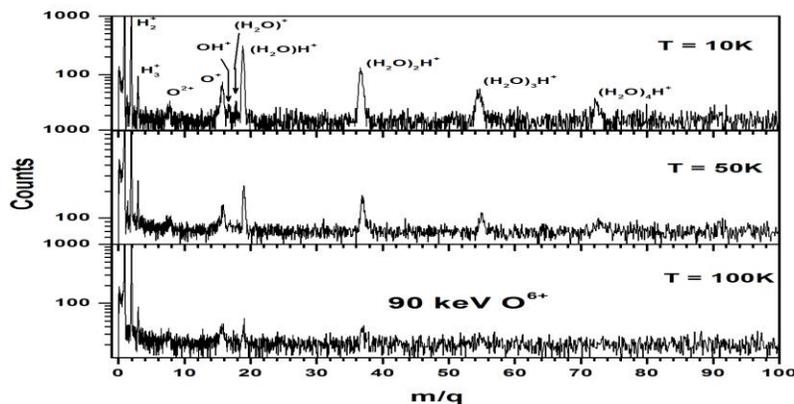


Figure 1: Mass distribution of $(\text{H}_2\text{O})_n\text{H}^+$ clusters for H_2O ices at 10, 50 and 100K irradiated with 90 KeV O^{6+} ions.

- For complex molecules, we will present new results on nucleobases irradiation in solid phase at low temperature. The experiments were performed at GANIL (Caen, FR) and GSI (Darmstadt, DE). 5 nucleobases have been irradiated in a solid phase: adenine, cytosine, uracil, guanine and thymine. The evolution of these molecules under heavy ion irradiation was followed by infrared absorption spectroscopy as a function of projectile fluence. The corresponding destruction cross sections were determined. For cytosine and adenine, several projectiles were used in order to vary the electronic stopping power (figure 2 and 3). The figure 2 shows the evolution of column density of cytosine for 4 different projectiles (190 MeV Ca, 92 MeV Xe, 17 MeV Ni and 116 MeV U).

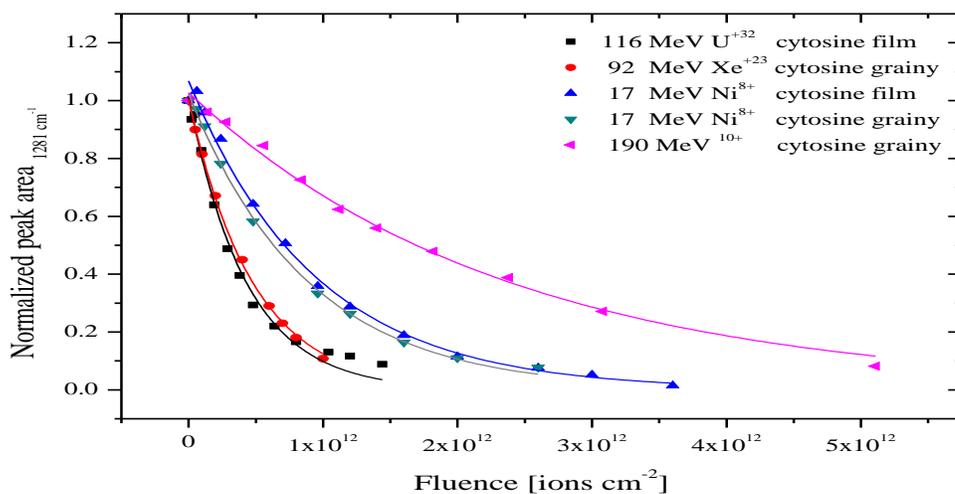


Figure 2: Column density of cytosine as a function of fluence for several projectiles (From 190 MeV Ca to 116 MeV U).

It is clear that the faster decays are associated to projectiles having the highest electronic stopping power S_e . The figure 3 represents the evolution of the column density as a function of the local dose. In this case, all the curves have the same behavior: this is a strong indication that the energy deposited locally (local dose) is the key parameter.

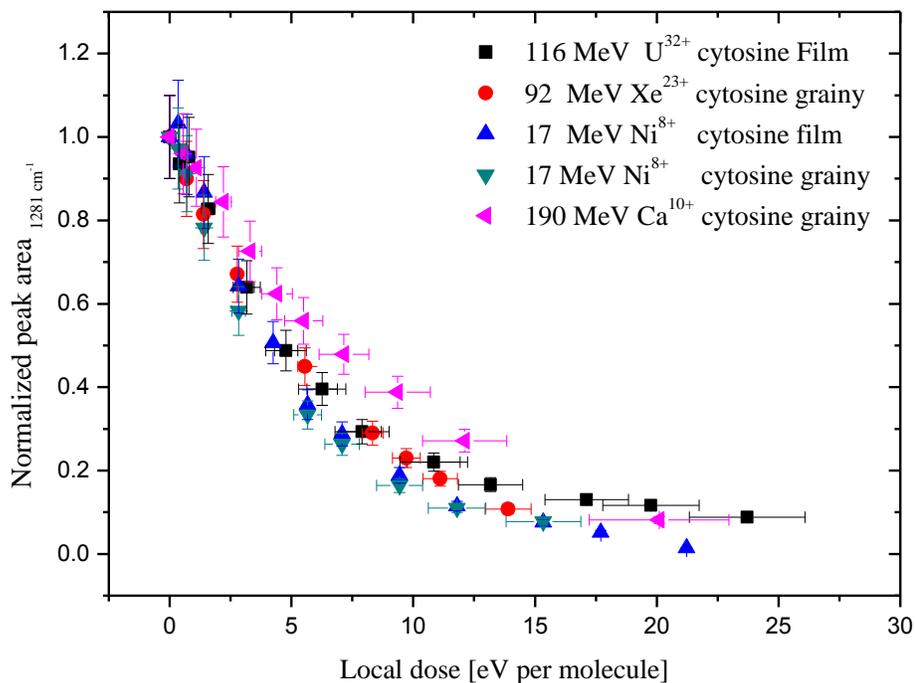


Figure 3: Column density of cytosine as a function of the local dose for the same ions.

From these curves, it is possible to determine the corresponding destruction cross sections for a fixed temperature. Then, it was also possible to characterize the evolution of the destruction cross section as a function of the electronic stopping power S_e . The obtained destruction cross sections will be compared for all nucleobases in order to classify their radio-resistance. New infrared absorption bands also arise under nucleobase irradiation and can be mainly attributed to HCN, CN^- , $C_2H_4N_4$, nitriles groups ($R-C\equiv N$) and isocyanides groups ($R-N\equiv C$).

[1] P. Ehrenfreund and S. B. Charnley, *Organic molecules in the interstellar medium, comets, and meteorites: a voyage from dark clouds to the early Earth*. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 38(1) (2000) 427-483.

[2] Kathrin Altwegg et al, Space Sciences, 2016.

[3] M.A. Allodi et al. *Complementary and Emerging Techniques for Astrophysical Ices Processed in the Laboratory*, Space Science Reviews 180 (2013) 101-175

Секция 1. Распыление, структура поверхности, десорбция

Section 1. Sputtering, surface structure, desorption

SYSTEMATICS IN ION BEAM SPUTTER DEPOSITION

C. Bundesmann, R. Feder*, T. Lautenschläger, M. Mateev, D. Spemann

Leibniz-Institute of Surface Modification (IOM), Permoserstr. 15, 04318 Leipzig, Germany

E-mail: carsten.bundesmann@iom-leipzig.de

**Now with: Clausthal University of Technology, 38640 Goslar, Germany*

Ion beam techniques are versatile tools with a large variety of applications in materials processing, for example, ion implantation, surface smoothing and patterning, ion beam figuring, ion beam etching, and deposition of films or nanostructures.

Ion beam sputter deposition (IBSD) is a physical vapour deposition (PVD) technique using low-energy ions. In contrast to other PVD techniques, for instance, magnetron sputtering or evaporation techniques, IBSD offers more degrees of freedom for tailoring the properties of the secondary, film-forming particles and, hence, the properties of the films [1]. Though widely used, the capabilities of IBSD are not completely understood and utilized yet. The present paper focuses on closing this gap, i.e. it describes systematic investigations of the correlation between process parameters, properties of secondary particles and film properties. Exemplary, the work was done for Ag (metal), Ge (semiconductor), TiO₂ and SiO₂ (dielectrics).

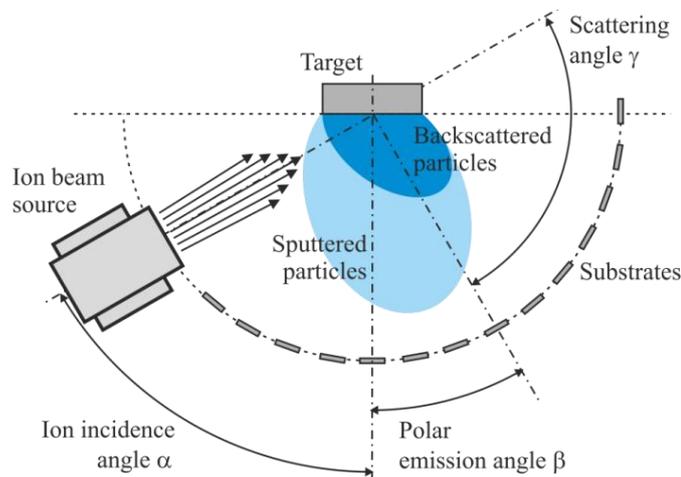


Figure 1: Schematic sketch of the experimental setup.

Figure 1 shows the experimental setup. It allows adjusting geometrical parameters (ion incidence angle, polar emission angle) and ion beam parameters (ion energy, ion species). Depending on these parameters the angular and energy distribution of the sputtered target and backscattered primary particles changes [1-4], which have a direct impact on film properties [5-8]. Table 1 lists the main process parameters.

Table 1: List of main process parameters.

Ion incidence angle	(α)	$0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$
Polar emission angle	(β)	-40° to 90° (steps 10°)
Ion energy	(E_{ion})	0.5 keV, 1.0 keV, 1.5 keV
Ion species		Ar, Xe
Targets		Ag, Ge Ti, Si

The angular and energy distribution was measured using the collection method and energy-selective mass spectrometry, respectively. Investigated film properties are thickness, growth rate, structural properties, composition, optical properties, mass density, and electrical resistivity.

Selected energy distributions of sputtered target particles and backscattered primary particles for sputtering of Ag are shown in Figure 2 [1,3]. The shape of the curves is mainly determined by the scattering geometry, i.e. the scattering angle ($\gamma = 180^\circ - \alpha - \beta$). All energy distributions are dominated by a peak at low energy ($E < 20$ eV). However, additional features can appear. The energetic position of these features shift linearly with the ion energy.

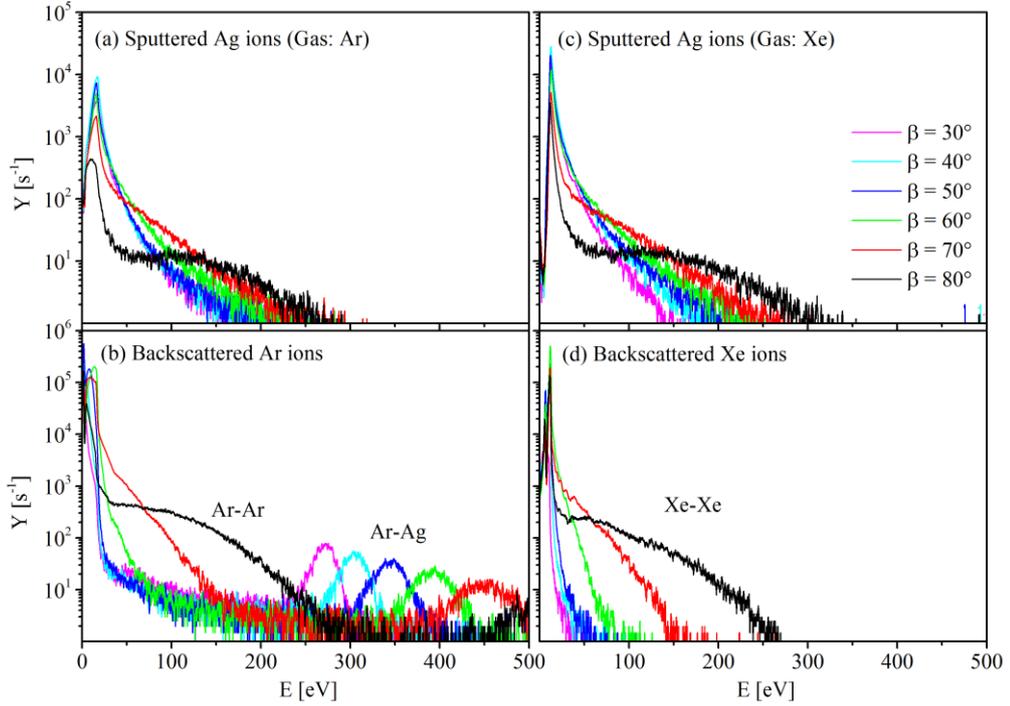


Figure 2: Experimental energy distributions of sputtered target ions (a,c) and backscattered primary ions (b,d) for sputtering a Ag target with Ar ions (a,b) and Xe ions (c,d) [1,3]. Shown are data for different emission angles (ion energy 1.0 keV, ion incidence angle 30°).

The energy distributions of the sputtered particles show the dominant peak followed by a decay proportional to E^{-2} if the sum of incidence and emission angle is less than 90° . This is

in agreement with the well-known Thompson's formula. However, if the sum is larger than 90° , an additional shoulder appears. This shoulder is related to direct sputtering events and moves to higher energies with increasing emission angle (and increasing ion energy). The energy distribution for sputtering with Ar and Xe are almost the same with slightly higher maximum energies for sputtering with Xe.

The energy distributions of the backscattered primary particles can show up to two additional features, an additional broad shoulder and a second peak at higher energy, which are related to direct scattering at an implanted primary particle or a target particle, respectively. The occurrence of the additional features and their energetic position depends again on the scattering angle and the mass of the projectile (in relation to the mass of the target particle). Therefore, the second peak is missing for sputtering with Xe, because it occurs only if the sum of incidence and emission angle is higher than 130° (i.e. the scattering angle is less than 50°). Similar results are obtained for sputtering Ge and Ti.

The observations can be explained by considering simple two-particle interaction. The energy of the backscattered (E_1 , mass m_1) and sputtered particle (E_2 , mass m_2) after the collision in dependence on the scattering angle in the ideal case is given by

$$E_1 = E_{\text{ion}} \left(\frac{m_1 \cos(\gamma) \pm \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2(\gamma)}}{m_1 + m_2} \right)^2 \quad (1)$$

$$E_2 = E_{\text{ion}} \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \cos^2(\delta) \quad (2)$$

E_{ion} is the energy of the incident primary particle. The target particle is assumed to be at rest before the collision. Figure 3 shows calculation results.

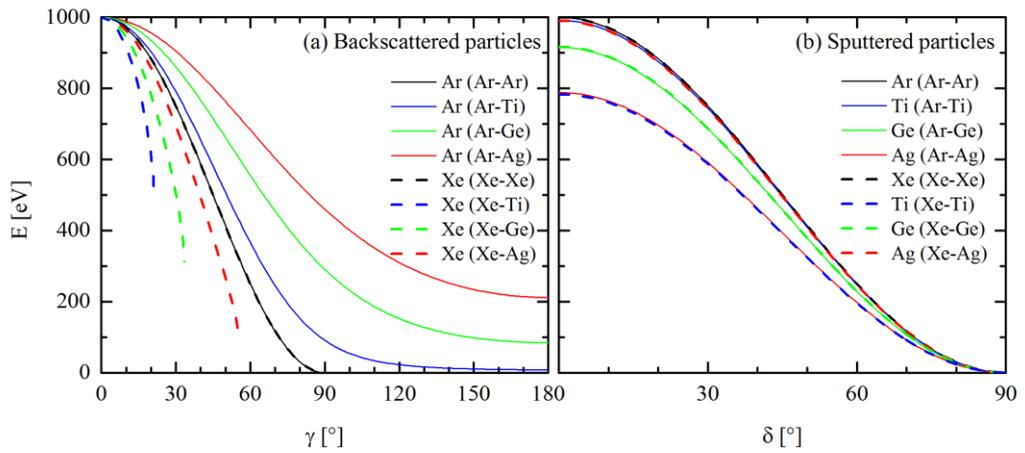


Figure 3: Calculated energy of scattered primary and sputtered target particles vs. scattering angle for sputtering Ti, Ge, and Ag with Ar (solid lines) and Xe (dashed lines). E_{ion} is 1.0 keV.

The data illustrate clearly that directly scattered and sputtered particles can gain considerable energy. This is of special importance for the backscattered primary particles, because they are typically neglected when discussing sputtering experiments. The energy of scattered Ar particles is higher than that of scattered Xe particles, and the energy gets higher when sputtering a target with lower mass. The calculated energies agree very well with the energetic positions of the additional features in the experimental energy distributions

Film properties should show similar systematic changes [5-8]. First of all, the thickness was measured and growth rate was calculated. The angular distributions of thickness and growth rate are of over-cosine shape and tilted in forward direction due to anisotropy effects in the evolution of the collision cascade. Furthermore, the crystallinity was investigated. Ag films are polycrystalline, Ge, TiO₂, and SiO₂ films are amorphous.

The measurement of the composition revealed a considerable amount of implanted primary particles inside the films. Exemplary, Figure 4 shows the atomic fraction of Ar and Xe particles inside Ge films for selected sets of process parameters [6]. The atomic fraction depends predominantly on the scattering angle, and is higher for sputtering with Ar than for sputtering with Xe. The amount decreases with increasing scattering angle. Similar results were observed for the TiO₂ and SiO₂ films [7,8].

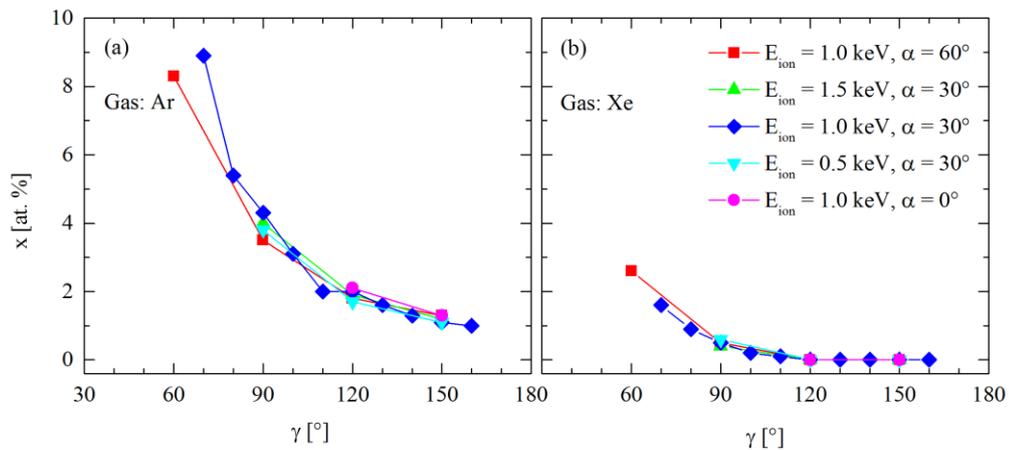


Figure 4: Atomic fraction of inert gas atoms versus scattering angle of Ge films grown by sputtering with Ar (a) or Xe (b) for different parameter sets (ion energy, ion incidence angle) [6].

The Ag films were characterized concerning their electrical properties [5]. Electrical resistivity data are plotted in Figure 5. Again, the scattering geometry and ion species are the most important parameters. The electrical resistivity decreases with increasing scattering angle. Furthermore, it is higher for sputtering with Ar than for sputtering with Xe. The structural characterization showed that the systematic changes of the electrical resistivity are caused by changes of the average grain size.

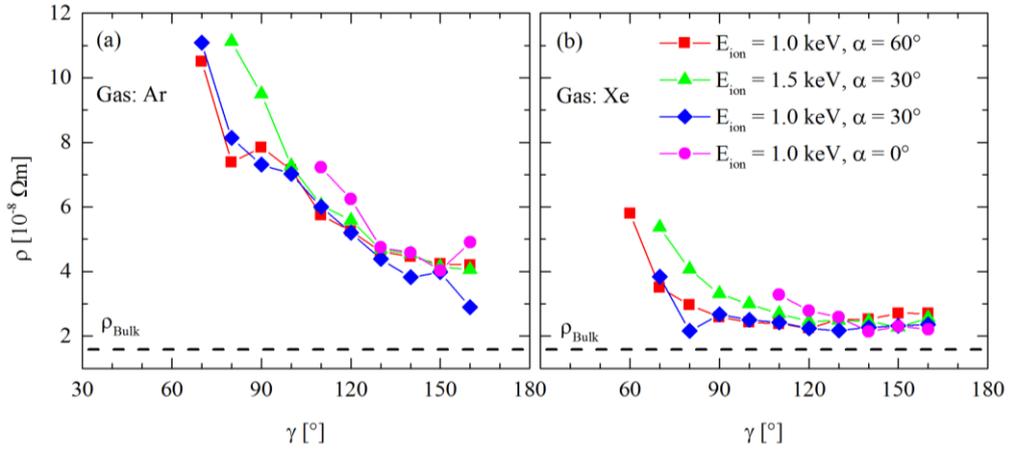


Figure 5: Electrical resistivity vs. scattering angle of Ag films grown by sputtering with Ar (a) or Xe (b) for different parameter sets [5]. The dashed line marks the electrical resistivity of Ag bulk.

The main application of TiO_2 and SiO_2 films are optical coatings. Therefore, the optical properties were determined for these films [7]. Figure 6 depicts selected spectra of the index of refraction of TiO_2 films. In principal, the index of refraction decreases with increasing emission angle, and it is lower for sputtering with Ar than for sputtering with Xe. Furthermore, decreasing the ion energy results in a lower index of refraction. Similar results were obtained for the SiO_2 films.

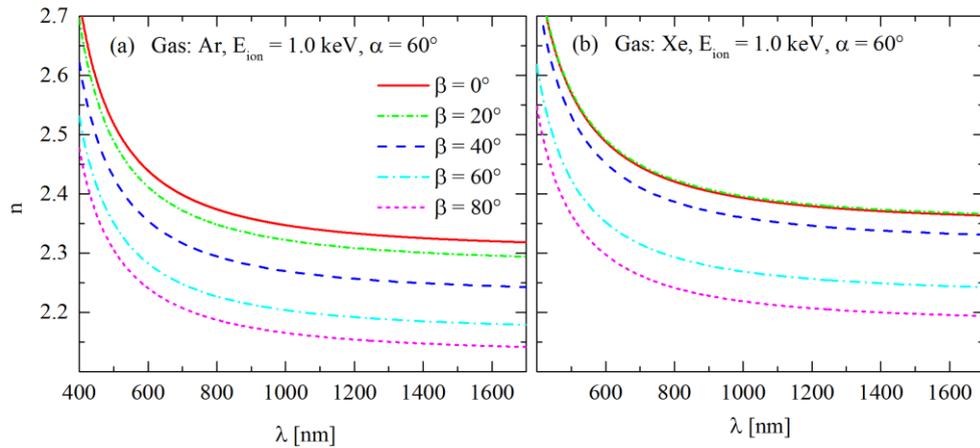


Figure 6: Spectra of the index of refraction of TiO_2 films grown by sputtering with Ar (a) and Xe (b) [7]. Shown are spectra for different emission angles (with the same ion energy and incidence angle).

The optical properties are strongly correlated with the mass density, i.e. the higher the mass density the higher the index of refraction. In Figure 7 the index of refraction at a wavelength of 550 nm versus mass density is plotted for different deposition techniques reported here or by other groups. When comparing these data, it is obvious that the index of refraction (and mass density) increases systematically with increasing particle energy. The particle energy is known to be lowest in the evaporation process and highest in the arc deposition process.

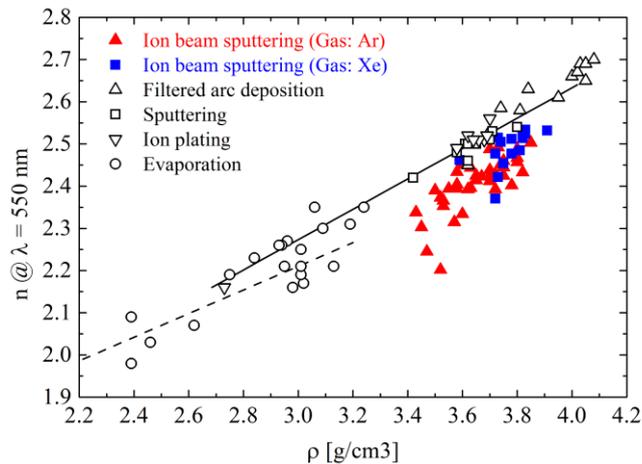


Figure 7: Index of refraction at $\lambda = 550$ nm versus mass density of TiO_2 films grown by various deposition techniques [7]. Open symbols and lines represent reference data from other sources.

In summary, the investigations have revealed a systematic correlation between growth parameters and properties of secondary particles, and, in consequence of that, with film properties. These systematics are mainly driven by the scattering geometry (scattering angle) and ion species. Ion energy and ion incidence angle have only a small or negligible influence. Interestingly, the greatest impact comes from the backscattered primary particles, a fact that has been unconsidered or at least underestimated so far.

The variety of investigated materials shows impressively that selected film properties can be tuned deliberately. The results can be easily transferred to other materials and, hence, are of great technological interest.

The authors are deeply grateful to the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) for financial support (projects BU2625/1-1 and -2), and to A. Finzel, F. Frost, J.W. Gerlach, M. Mensing, M. Müller, F. Scholze, E. Thelander, R. Woyciechowski (all IOM) for technical support.

- [1] R. Feder et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, **316** (2013) 198.
- [2] R. Feder et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, **334** (2014) 88.
- [3] C. Bundesmann et al., Contrib. Plasma Phys. **55** (2015) 737.
- [4] T. Lautenschläger et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, **385** (2016) 30.
- [5] C. Bundesmann et al., Thin Solid Films **551** (2014) 46.
- [6] C. Bundesmann et al., Thin Solid Films **589** (2015) 487.
- [7] C. Bundesmann et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, **395** (2017) 17.
- [8] C. Bundesmann et al., Appl. Surf. Sci., in press, DOI: 10.1016/j.apsusc.2016.08.056.

STRUCTURE OF HILLOCKS AT SURFACE OF CERAMICS IRRADIATED WITH SWIFT HEAVY IONS

N. Ishikawa^{*}, T. Taguchi[#] and N. Okubo^{*}

^{*}*Nuclear Science and Engineering Center, Japan Atomic Energy Agency (JAEA), Tokai, Ibaraki 319-1195, Japan, e-mail: ishikawa.norito@jaea.go.jp;*

[#]*Quantum Beam Science Research Directorate, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology (QST), Tokai, Ibaraki 319-1195, Japan*

Numerous studies have been performed so far for nanometer-sized hillocks created at the irradiated surface of various inorganic materials irradiated with swift heavy ions (SHI). It is known that sufficiently high electronic energy deposition is needed to create such hillocks, and therefore electronic energy deposition rather than elastic energy deposition plays an important role in the hillock formation. Since a hillock created at the irradiated surface and an ion track created continuously along the ion-path are connected to each other, mechanism of hillock formation should be closely related to that of ion track formation.

The important features characterizing the hillock are its size (height and diameter), shape and crystal structure. The height can be precisely measured by atomic force microscope (AFM), whereas the diameter measurement is likely to be affected by curvature of probe tip of AFM machine [1-3]. Shape of hillocks is also one of the important features to elucidate the formation mechanism. Conical-shape hillocks have been often reported by using AFM[3-5]. However, it should be pointed out that it is hard to identify exact shape of hillocks by AFM because of finite size of probe tip. If hillocks happen to be spherical, it is almost impossible to identify their shape as long as AFM is used. Moreover, the crystal structure of hillock cannot be identified by AFM.

In the present study, we developed a simple method to solve all these problems by using TEM. The present method has been reported in Ref.[6], and the method is illustrated in Fig.1. The technique is applied to observe hillocks created for ion-irradiated CeO₂. This oxide

material has been studied for many years as a non-radioactive surrogate to study the behavior of nuclear fuel material, UO₂. Ion track formation and hillock formation are the important aspects of radiation damage in UO₂ nuclear fuel subjected to fission fragments with the initial energy of ~100 MeV. Therefore, it is important to investigate the surface morphology of ion-irradiated CeO₂ to elucidate the mechanism of hillock formation and ion track formation.

For studying hillock formation in ion-irradiated CeO₂ using TEM, thin samples were prepared. At first the sintered polycrystalline CeO₂ sample was finely grinded using an agate mortar and pestle, and the grinded samples were then placed randomly on a three mm diameter 200 mesh copper grid. Here, the copper grids covered with holey carbon film were used in order to minimize the overlap of sample image and carbon film image. The thinned samples were subsequently irradiated with 200 MeV Au ions at oblique incidence (45 degrees relative to normal direction) as illustrated in Fig.1. The irradiation was performed at room temperature in the tandem accelerator at JAEA-Tokai (Japan Atomic Energy Agency, Tokai Research and Development Center). The irradiated samples were examined using a transmission electron microscope (TEM, Model 2100F, JEOL Ltd.) operated at 200 kV.

Figure 2 shows the bright field image of CeO₂ irradiated with 200 MeV Au at oblique incidence (45 degree relative to the normal direction). The figure evidently shows that hillocks are created at the crack faces (side surface) as indicated by the arrows . Diameter of the hillocks can be measured for many of the observed hillocks created at the crack face, if the diameter of the hillock is defined as the maximum width of a hillock. The mean diameter of the hillocks created at the crack face is 10.6±1.3 nm. The ion tracks are also recognizable as inhomogenous line-like contrasts as shown in the figure.

Figure 3 shows the magnified image of the hillock and the ion track. This figure shows that the hillock is not amorphous and have crystalline lattice structure. Since the hillock shown in Fig.3 is partly overlapped with the matrix, it is not obvious whether the shape of the hillock is semi-spherical or spherical. It is likely that the hillocks have spherical shape, since

the black contrasts at both ends of the ion tracks have spherical shape. As Fig.4 clearly shows, many of the hillocks are actually spherical. Moreover, the figure shows both lattice spacing and crystal orientation of (111) plane of the hillocks are the same as those of the matrix. Therefore, it is likely that the hillocks have the same crystalline structure which is same as that of CeO₂ matrix.

Present results shows that many of the hillocks are found to be spherical for ion-irradiated CeO₂. The hillock shape is an important information in the respect that it is closely related to the mechanism of hillock formation. Spherical hillocks have never been reported in the previous studies using AFM. According to the previous literatures, the shape of hillocks created by SHI is expressed as “hillock-like”[1], “Gaussian shape”[2], “a section of a sphere”[7], or “conical”[4,8] based on the observations using AFM. We believe that it is important to reexamine the hillock shape for materials other than CeO₂ using the present TEM technique.

Finding of spherical hillocks gives important insight on the hillock formation mechanism. It is likely that the change in hillock shape (spheroidization) is something to do with a liquid phase process rather than a solid phase process, and it should be related to local melting due to high-density energy deposition by ion irradiation. A spherical shape has minimal surface and maximal volume, and it is the most energetically stable shape for liquid with high surface tension. If there are sufficiently strong cohesive forces at the surface constituting surface tension, the protruded liquid tends to form droplet rather than spreading over the surface.

The lattice spacing of (111) plane of hillocks is same as that of undamaged matrix within the experimental error as shown in Fig.4, indicating that the hillocks have a crystalline structure which is same as that of CeO₂ matrix (i.e. fluorite structure). Recrystallization of whole volume of the hillock suggests that cooling rate is slow enough for molten droplet to recrystallize completely. Since the orientation of crystal lattice of the hillocks coincides with that of the

matrix, it is likely that recrystallization starts from the matrix-side of the hillock rather than from the vacuum-side of the hillock.

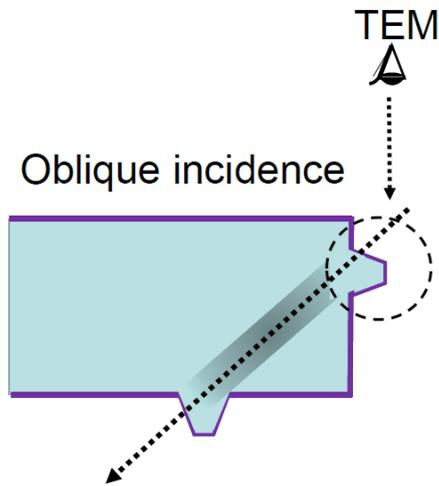


Fig.1 The present method of observing hillocks. Thin samples are irradiated with SHI at oblique incidence, and the as-irradiated samples are observed by TEM.

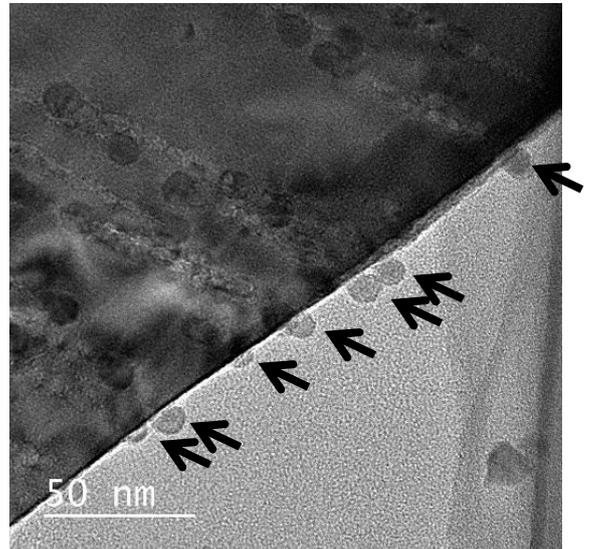


Fig.2 Bright field image of CeO_2 irradiated with 200 MeV Au ions at oblique incidence. The arrows show hillocks created at a crack face.

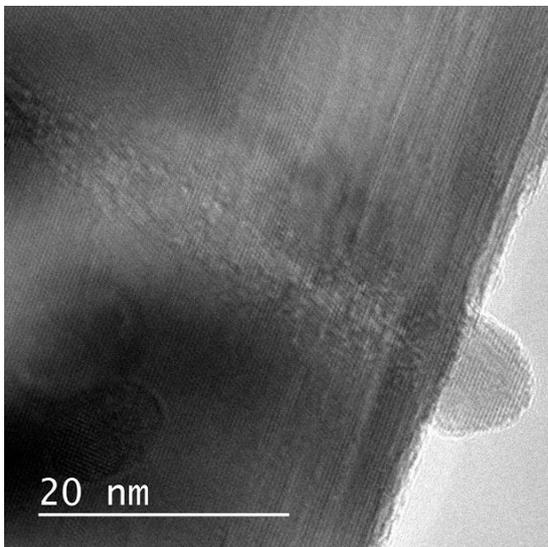


Fig.3 Bright field image of CeO_2 irradiated with 200 MeV Au ions at oblique incidence. The arrows show hillocks created at a crack face.

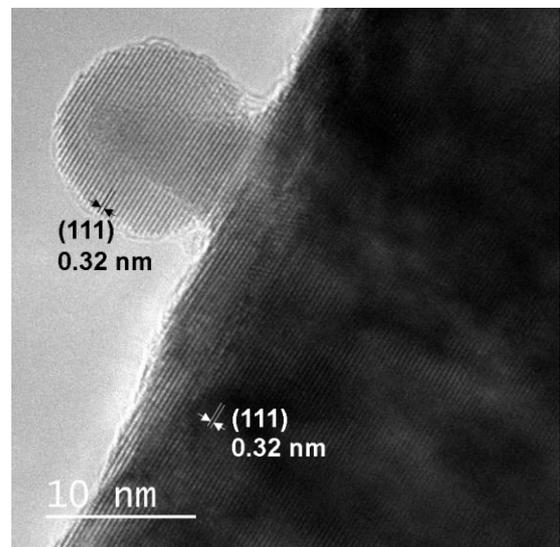


Fig.4 Bright field image of CeO_2 irradiated with 200 MeV Au ions at oblique incidence.

1. F. Aumayr, S. Facsko, A.S. El-Said, C. Trautmann and M. Schleberger, *J. Phys.: Condens. Matter* 23 (2011) 393001.
2. N. Khalfaoui, C.C. Rotaru, S. Bouffard, M. Toulemonde, J.P.Stoquert, F. Haas, C. Trautmann, J. Jensen and A. Dunlop, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 240 (2005) 819.
3. D. Schwen, E. Bringa, J. Krauser, A. Weidinger, C. Trautmann and H. Hofsäss, *Appl. Phys. Lett.* 101 (2012) 113115.
4. N. Khalfaoui, C.C. Rotaru, S. Bouffard, E. Jacquet, H. Lebius and M. Toulemonde, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 209 (2003) 165.
5. C. Müller, K.O. Voss, M. Lang and R. Neumann, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 212 (2003) 318.
6. N. Ishikawa, N. Okubo and T. Taguchi, *Nanotechnology* 26 (2015) 355701.
7. A. Müller, C. Müller, R. Neumann, F. Ohnesorge, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 166-167 (2000) 581.
8. V.A. Skuratov, D.L. Zagorski, A.E. Efimov, V.A. Kluev, Yu.P. Toporov and B.V. Mchedlishvili, *Radiation Measurements* 34 (2001) 571.

**ASTROPHYSICAL SILICATES: CONTRIBUTION OF
ION INDUCED SPUTTERING TO SURFACE MODIFICATION
AND EXOSPHERES OF SOLAR SYTEM OBJECTS**

R. Martinez^{1,2}, Th. Langlinay¹, C.R. Ponciano³, E.F. da Silveira³,
M.E. Palumbo⁴, G. Strazzulla⁴, J.R. Brucato⁵, H. Hijazi⁶, A.N. Agnihotri¹,
P. Boduch¹, A. Cassimi¹, A. Domaracka¹, F. Ropars¹, H. Rothard¹

¹ *Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique
Normandie Univ, ENSICAEN, UNICAEN, CEA, CNRS, CIMAP, 14000 Caen, France*

² *Departamento de Física, Universidade Federal do Amapá, Brazil*

³ *Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brazil*

⁴ *INAF-Osservatorio Astrofisico di Catania, Italy*

⁵ *INAF-Osservatorio Astrofisico di Arcetri, Firenze, Italy*

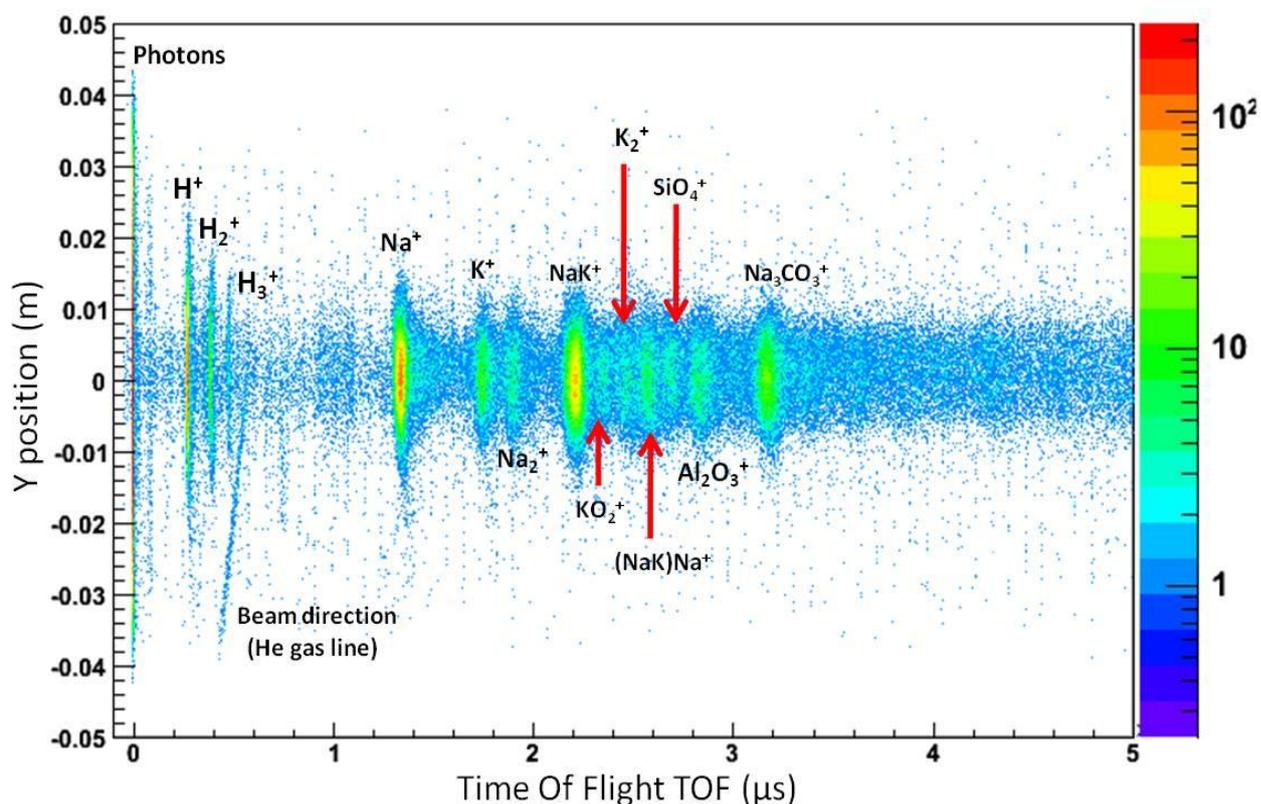
⁶ *Université Aix-Marseille, France*

At CIMAP-GANIL, a new ultrahigh vacuum XY-TOF-SIMS system has been used to study secondary ion ejection from lithium fluoride LiF [1] and thin nepheline films [2,3]. Together with ices, silicates such as nepheline are the dominant material of the surfaces of many objects in the Solar System. They can e.g. be found on asteroids, on the Moon and the planet Mercury. They are exposed to solar wind, cosmic rays, and ions present in the magnetospheres of the giant planets. Apart from hydrogen and helium, the irradiation field consists of multiply charged heavy ions. Ion bombardment (solar wind, cosmic rays) is able, among other effects, to influence the reflectance spectra of irradiated silicates by inducing physico-chemical changes known as a whole as “space weathering” [4]. Sputtered particles also contribute to the composition of the exosphere of planets or moons [3-5].

We studied the evolution of the yields of sputtered particles from nepheline as a function of projectile fluence by secondary ion mass spectrometry [1]. Swift heavy ion beams (10 MeV/u) and slow multiply charged ions (around 100 keV) were delivered by the GANIL facility (SME and ARIBE beam lines). Our XY-TOF-SIMS apparatus allows not only measuring mass distributions, but in addition, energy and angular distributions; the measured energy distributions of some species (Na, K) allow estimating the percentage of sputtered

particles escaping from the moon's and planet's gravitational field, and of those contributing to the exosphere.

The figure below shows as an example the position of the secondary ions on the Y coordinate of the XY-imaging micro-channelplate MCP detector with delay line anode as a function of their time-of-flight. Assignments of the observed peaks are indicated.



Na and K ions dominate the flux distribution of sputtered particles, in agreement with observations made by the Messenger spacecraft exploring the exosphere in orbit around Mercury [6]. Energy distributions have maxima around ~3 eV for Na and ~2 eV for K [2,3]. From these distributions, it becomes possible to estimate the fraction of Na and K which can escape from Mercury's gravitational field.

The composition and stoichiometry of the nepheline sample changes during the irradiation with slow heavy ions. At the beginning, Na⁺ is emitted more efficiently? After a certain projectile fluence, the Na yield remains almost constant, while the K⁺ yield increases

continuously. This may contribute explain the observed apparently non-uniform variations of the Na/K ratio in Mercury's exosphere. Although sputtered ions may be trapped by the electro-magnetic field of Mercury's magnetosphere or may escape due to interaction with the solar wind, these results indicate the possibility that Mercury's exosphere is feeded with sputtered particles ejected from the surface, like Na⁺ and K⁺.

It is interesting to note that these findings are possibly related to the abundance of Na and K at the surface. Secondary ions come from the surface, with a probing depth of some monolayers. Therefore, they should be a good indicator of the surface stoichiometry, but other parameters like inhomogeneities of the target surface target should be taken into account.

These results contribute to the ongoing debate on the mechanisms that govern the composition and variability of the exosphere of Mercury [2-4,6]. Since it is not yet possible from these experiments to determine if sputtering is the dominant mechanism for the production of sodium and/or potassium contributing to Solar system object's atmospheres, it is certainly important to continue experiments on sputtering of astrophysical silicates such as nepheline or olivine. This important to understand existing data from earth based or space observation, and in particularly those that will be collected by the instruments on board Bepi Colombo, the European space mission that will visit Mercury in the near future.

Acknowledgements: The experiments were performed at GANIL “Grand Accélérateur National d'Ions Lourds” (Caen, France). This work was supported by the region of “Basse-Normandie”, by the French- Brazilian exchange program (Capes-Cofecub) and by the Brazilian agency CNPq (INEspaço). The authors wish to thank T. Been, F. Noury and J.M. Ramillon for support to the preparation of the experiments. MEP and GS are grateful to Italian Space Agency that supported this research (project ASI-SERENA).

1. R. Martinez, Th. Langlinay, P. Boduch, A. Cassimi, H. Hijazi, F. Ropars, P. Salou, E.F. da Silveira, H. Rothard, *Electronic sputtering of thin lithium fluoride films induced by swift heavy ions*, Mater. Res. Express 2 (2015) 076403
2. M.A. Allodi, R.A. Baragiola, G.A. Baratta, M.A. Barucci, G.A. Blake, Ph. Boduch, J.R. Brucato, C. Contreras, S.H. Cuyllé, D. Fulvio, M.S. Gudipati, S. Ioppolo, Z. Kanuchová, A. Lignell, H. Linnartz, M. E.Palumbo, U. Raut, H. Rothard, F. Salama, E.V. Savchenko, E. Sciamma-O'Brien, G. Strazzulla, *Complementary and Emerging Techniques for Astrophysical Ices Processed in the Laboratory*, Space Sci. Rev. 180 (2013) 101-175

3. R. Martinez, Th. Langlinay, C.R. Ponciano, E.F. da Silveira, M.E. Palumbo, G. Strazzulla, J.R. Brucato, H. Hijazi, A.N. Agnihotri, P. Boduch, A. Cassimi, A. Domaracka, F. Ropars, H. Rothard, *Sputtering of sodium and potassium from nepheline: secondary ion yields and velocity spectra*
Nucl. Instrum. Meth. B (2017), doi: 10.1016/j.nimb.2017.01.042
4. C.A. Dukes, W.Y. Chang, M. Famá, R.A. Baragiola, *Laboratory studies on the sputtering contribution to the sodium atmospheres of Mercury and the Moon*,
Icarus 212 (2011) 463-469
5. Hermann Rothard, Alicja Domaracka, Philippe Boduch, Maria Elisabetta Palumbo, Giovanni Strazzulla, Enio F. da Silveira, and Emmanuel Dartois,
Modification of ices by cosmic rays and solar wind,
J. Phys. **B**: At. Mol. Opt. Phys. 50 (2017) 062001 (Topical Review)
6. T.H. Zurbuchen, J.M. Raines, G. Gloeckler, S.M. Krimigis, J.A. Slavin, P.L. Koehn, R.M. Killen, A.L. Sprague, R.L. McNutt Jr., S.C. Solomon, *MESSENGER Observations of the Composition of Mercury's Ionized Exosphere and Plasma Environment*
Science 321 (2008) 90-92

EROSION OF FUSION RELEVANT SURFACES BY USING A QUARTZ CRYSTAL MICROBALANCE

R. Stadlmayr^{a,*}, B. M. Berger^a, D. Blöchl^a, D. Mayer^a, B. Stechauner^a and F. Aumayr^a

^a*Inst. of Applied Physics TU Wien, Fusion@ÖAW, Wiedner Hauptstraße 8-10, 1040 Vienna, Austria*

**Corresponding author: tel.: +43 58801-13437, e-mail: stadlmayr@iap.tuwien.ac.at*

For a future fusion reactor, like DEMO, a stable and quiescent plasma can be assumed. With this presumption, the lifespan of the plasma facing components (PFC) in the reactor will be dominated by the plasma-induced erosion due to ion and neutral particle bombardment. Therefore an improvement of our understanding in ion-surface interactions is crucial in order to use nuclear fusion as an energy source. At the expected low ion energies in the near PFC surface region [1], the erosion rate of high-Z materials is significantly lower than the erosion of low-Z materials. Therefore the use of thin tungsten (W) armors as PFCs are foreseen in some DEMO design studies [1, 2]. Additionally, the presumed steady-state operation of a future fusion reactor brings new demands to the heat removal from the PFCs. Especially the bonding of the W armor to the cooling components is highly important and technologically challenging.

An attractive alternative to a full tungsten armor, especially for recessed areas in a fusion reactor, is the use of tungsten containing steels, like EUROFER [3]. Investigations of Fe-W sample films (with 1.5 at% W), which can be seen as a model system for EUROFER, showed a strong decrease in the sputtering yield for low energetic D ion bombardment at high incident fluences (figure 1) [4, 5]. Preferential sputtering of the lighter element could be observed and causes surface enrichment of tungsten, which correlates with the reduction of the erosion yield [4, 5].

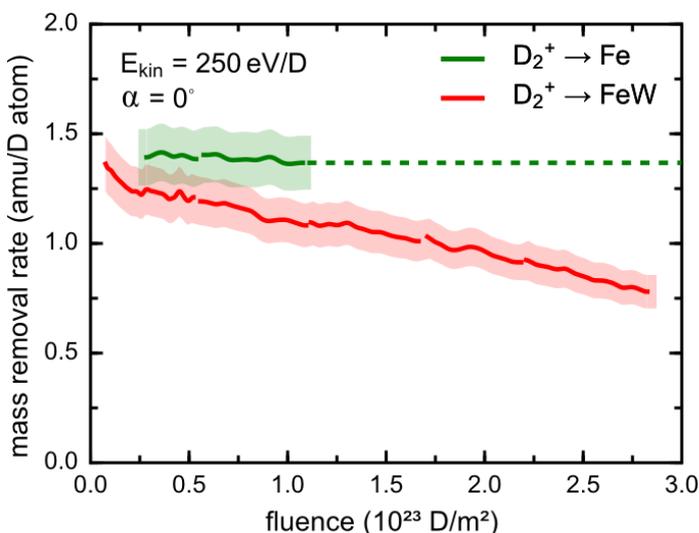


Figure 1: Fluence dependence of the erosion rate for pure Fe and FeW samples. A strong decrease of the mass removal rate can be seen for FeW, while pure Fe stays constant (picture adapted from [5]).

In addition to the reduction of the erosion yield, clear changes of the surface structure could be observed. AFM investigations of the irradiated film show a self-organized quasi-periodic patterning due to the ion bombardment [6]. At a bombarding angle of incidence of 60 degree (with respect to the surface normal) perpendicular mode ripples (PeMR) can be seen, which are oriented parallel to the ion beam direction (figure 2) [5, 7]. These structural modification of the surface morphology also influences the sputtering behavior.

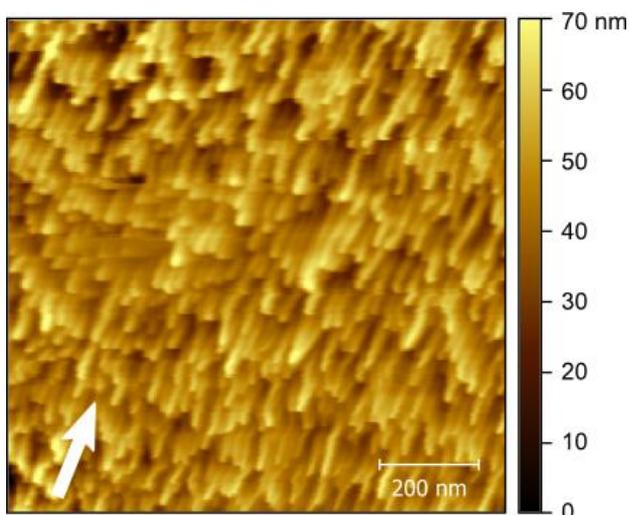


Figure 2: AFM Image of an FeW sample after a bombarding fluence of 3×10^{23} D/m² under 60 degree. The white arrow indicates the ion beam incidence direction. Formation of perpendicular mode ripples (PeMR), parallel to the ion beam is observed [5].

To separate the effect of surface structural modifications from the effect of surface enrichment of high Z materials, experiments were performed using pure Fe target films.

Due to the fact, that Ar might be used as seeding gas in fusion reactors like ITER, to avoid local overheating of the PFCs by radiative cooling [8] and Ar - Fe sputtering yields are significantly higher than D - Fe sputtering yields, our investigations concentrated on Ar.

Hence we investigated the interaction of mono-energetic Ar ions with 400 nm thin pure Fe films, by using a highly sensitive quartz crystal microbalance (QCM). This setup is an ideal tool to measure small mass changes and allows in-situ investigation of a dynamic erosion behavior (figure 3) [9, 10].

The sample films were deposited onto polished quartz crystals, by using a magnetron sputter deposition technique at IPP Garching, Germany.

The evolution of the sputtering behavior of the Fe model films under Ar ion bombardment was then investigated under specific angle of incidence ($\alpha = 0^\circ - 70^\circ$) and in dependence of the bombarding ion fluence. As ion source a Perking Elmer PHI sputter ion gun was used,

which allows acceleration voltages of up to 2kV in steps of 500V (figure 3) and ion fluxes of $\sim 10^{17}$ ions/m²/s.

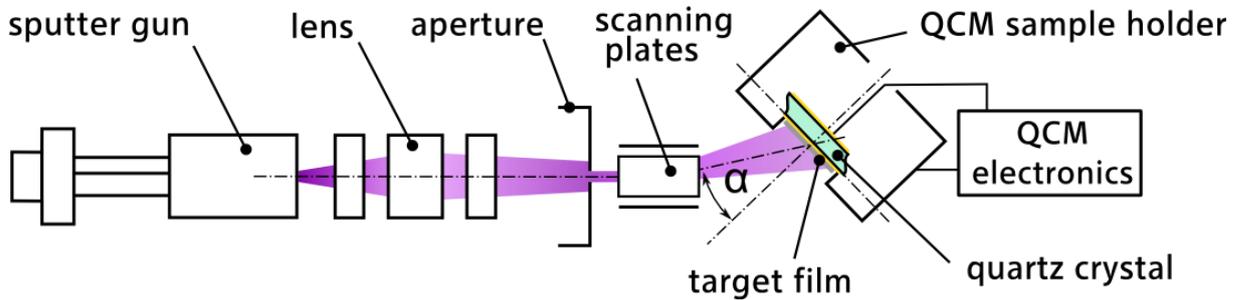


Figure 3: Schematics of the experimental setup. The sputter ion gun generates a mono-energetic ion beam, which is focused and deflected by a lens system and scanning plates. This ion beam hits a target film onto the QCM and causes sputtering and therefore mass change. This can be measured as a change in the resonance frequency of the quartz crystal ($\Delta f \sim \Delta m$) [5, 9, 10] (picture adapted from [5]).

For pre and post characterization, after predefined fluence steps, a CYPHER atomic force microscope (AFM) was used to analyze the sample surface morphology and to evaluate root mean square (RMS) roughness parameters.

Comparing the experimental results of the sputtering behavior of Fe under Ar bombardment to dynamic binary collision approximation (BCA) sputtering calculations with SDTrimSP [11] showed clear discrepancies. These simulations were not able to reproduce the angular dependent sputtering behavior, which points out that changes in the surface topography are not taken into account. Also RMS roughness values do not correlate well with the measured sputtering yields.

The performed AFM measurements allowed also extracting the local angular distribution of the sample surfaces. Including this information to simulations with SDTrimSP and SDTrimSP-2D [12] lead to a more accurate agreement with the measurements.

Results will be presented and discussed at the conference.

The authors are grateful to M. Oberkofler and T. Schwarz-Selinger (IPP Garching) for preparation of the Fe and Fe-W model films and to M. Schmidt (TU Wien) for his continued support with the QCM electronics. This work has been carried out within the framework of the EUROfusion Consortium and has received funding from the Euratom research and training program 2014-2018 under grant agreement No 633053. The views and opinions

expressed herein do not necessarily reflect those of the European Commission. Financial support by KKKÖ is also greatly acknowledged.

1. H. Bolt, V. Barabash, G. Federici, J. Linke, A. Loarte, J. Roth & K. Sato. Plasma Facing and High Heat Flux Materials - Needs for ITER and Beyond, *Journal of Nuclear Materials*, 307 – 311 (2002) 43 – 52
2. D. Maisonnier, I. Cook, S. Pierre et al. The European power plant conceptual study, *Fusion Engineering and Design*, 75 – 79 (2005) 1173 – 1179
3. R. Lindau, A. Möslang, M. Rieth et al. Present development status of EUROFER and ODS-EUROFER for application in blanket concepts, *Fusion Engineering and Design*, 75 – 79 (2005) 989 - 996
4. K. Sugiyama, J. Roth, V. Alimov et al. Erosion study of Fe-W binary mixed layer prepared as model system for RAFM steel, *Journal of Nuclear Materials* 463 (2015)
5. B.M. Berger, R. Stadlmayr, D. Blöch, E. Gruber et al. Erosion of Fe-W model system under normal and oblique D ion irradiation, *Nuclear Materials & Energy*, submitted 2017
6. S. Facsko, T. Dekorsy, C. Koerdt, C. Trappe, H. Kurz, A. Vogt & H.L. Hartnagel, Formation of Ordered Nanoscale Semiconductor Dots by Ion Sputtering Science, *American Association for the Advancement of Science* 285 (1999) 1551-1553
7. T. Škerek, K. Temst, W. Vandervorst & A. Vantomme, Ion-induced roughening and ripple formation on polycrystalline metallic films, *New Journal of Physics*, 15 (2013) 093047
8. A. Kallenbach, M. Bernert, R. Dux et al. Impurity seeding for tokamak power exhaust: from present devices via ITER to DEMO, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 55 (2013) 124041
9. G. Sauerbrey, Verwendung von Schwingquarzen zur Wägung dünner Schichten und zur Mikrowägung, *Zeitschrift für Physik*, 155 (1959) 206
10. G. Hayderer, M. Schmid, P. Varga, H.P. Winter, F. Aumayr, A Highly Sensitive Quartz-Crystal Microbalance for Sputtering Investigations in Slow Ion-Surface Collisions, *Review of Scientific Instruments*, 70 (1999) 3696
11. A. Mutzke, R. Schneider, W. Eckstein, R. Dohmen, SDTrimSP Version 5.00, IPP-Report 12/8 (2011)
12. A. Mutzke, R. Schneider. SDTrimSP-2D: Simulation of Particles Bombarding on a Two Dimensional Target, IPP-Report (2009)

ATOMIC LAYER ETCHING WITH GAS CLUSTER ION BEAMS

N. Toyoda and I. Yamada

*Graduate school of engineering, University of Hyogo, 2167 Shosha, Himeji, Hyogo, Japan,
e-mail: ntoyoda@incub.u-hyogo.ac.jp*

1. INTRODUCTION

Owing to the progress of recent state-of-the-art semiconductor devices, advanced etching technology at the sub-10 nm scale has to be developed. To satisfy the production requirements, atomic layer etching (ALE) has recently attracted increasing attention [1]. Although ALE has been enthusiastically developed in the 1990s [2], it has not been used for mass production, owing to productivity issues. In general, the ALE process entails sequential steps of adsorption of reactive molecules on a solid surface, and subsequent removal of the surface altered layer by ion irradiation. If the removal of the surface layer is self-limiting, precise etching control is realized.

Another precise etching technique, which has been developed by our group, is “gas cluster ion beam” (GCIB) [3]. Gas clusters are aggregates of several thousands of gaseous atoms or molecules. As the kinetic energy of a gas cluster ion is shared by thousands of atoms, the kinetic energy of each atom in the cluster can be only equal to several eV, thus producing low-damage irradiation. In addition, as thousands of atoms or molecules simultaneously hit an area of a few nanometers, the target area experiences both high pressure (~ several GPa) and high temperature (~ 10^4 K) [4]. As a result, chemical reactions between GCIB reactive molecules and substrate atoms are enhanced [5]. By utilizing the unique irradiation effects provided by the GCIB, damage-free depth profiling of polymers or organic materials has been widely realized in X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and in secondary ion mass spectroscopy [6,7].

Furthermore, when reactive gases are introduced into a target chamber as background gases during GCIB irradiations, reactions between the adsorbed reactive gases and substrate atoms will occur [8]. By utilizing continuous GCIB irradiation and continuous acetic acid vapor supply, we achieved reactive etching of various metals [9,10]. When considering the GCIB etching steps with reactive gas vapor, it is expected that each step (adsorption, reaction, and desorption by GCIB bombardment) would work even if they were to be conducted separately.

In this study, ALE with GCIB was investigated for the first time. As a test material, Cu was etched by using O₂-GCIB with acetic acid, large amount of corrected experimental data were available for this material combination. ALE process using O₂-GCIB with acetic acid is discussed by analyzing the real-time Cu thickness variation. Absorption of acetic acid and GCIB irradiation effects were modeled from the etching rate variation in relation to the acceleration voltage, irradiation time, and acetic acid partial pressure

2. METHODS

Figure 1(a) shows an experimental configuration of the GCIB etching system with reactive gas vapor. In the source chamber, O₂ neutral clusters are formed. Subsequently, they were ionized by electron bombardments in an ionizing chamber. Subsequently, the gas cluster ions were electrostatically accelerated up to 20 kV. In the irradiation chamber, acetic acid vapor was supplied using a needle valve. The acetic acid partial pressure (P_{AcOH}) was monitored with a residual gas analyzer. For ALE of Cu with O₂-GCIB irradiation, a quartz crystal sensor was installed in the target chamber. Prior to the experiments, 1 μm thick Cu films were deposited on quartz crystal oscillators by vacuum evaporation. The Cu thickness was measured with a rate monitor. A shutter was mounted in front of the quartz crystal sensor to allow blocking the O₂-GCIB. It was also used to measure the O₂-GCIB ion current.

Figure 1(b) shows the time diagram of ALE by O₂-GCIB irradiation with acetic acid vapor. At first, acetic acid vapor was introduced into the irradiation chamber, and the Cu surface was exposed it. The duration time of the acetic acid supply (T_{AcOH}) was varied between 2 and 60 s. The acetic acid partial pressure (P_{AcOH}) was varied between 1.1×10^{-3} and

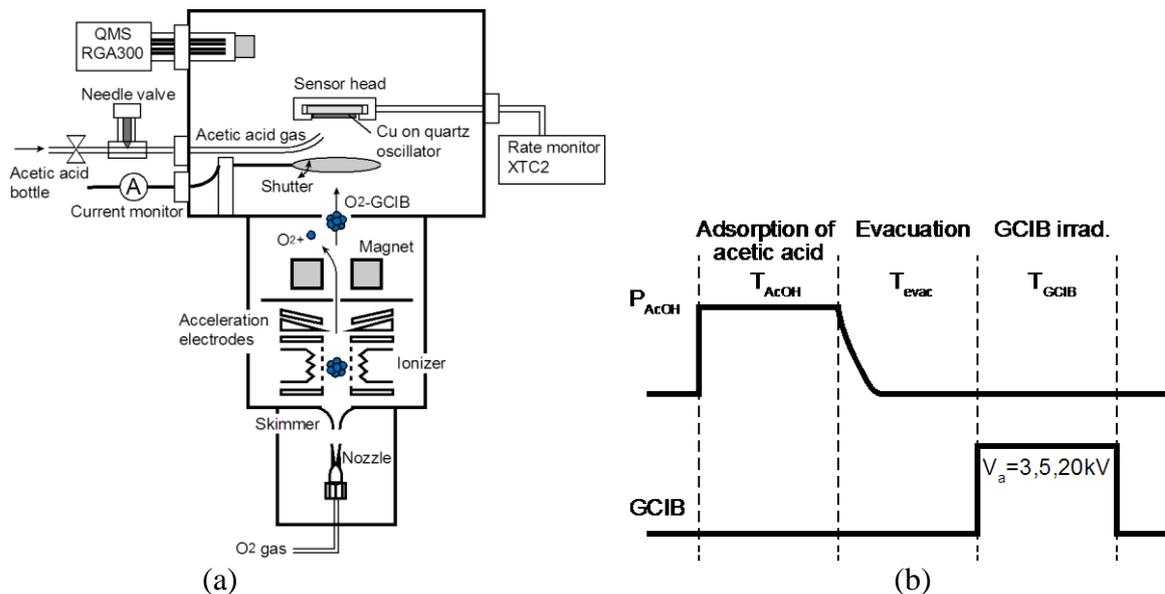


Figure 1: Schematics of GCIB-ALE system (a) and Time diagram of ALE with GCIB

2.6×10^{-3} Pa. After T_{AcOH} , the acetic acid supply was stopped by closing a valve; then, the irradiation chamber was evacuated for a certain time (T_{evac}). T_{evac} was fixed at 30 s throughout this study. After evacuation, the Cu surface with adsorbed acetic acid was irradiated with the O_2 -GCIB for various irradiation times (T_{GCIB}). The O_2 -GCIB acceleration voltages (V_a) were 3, 5, and 20 kV. The O_2 -GCIB incident angle was normal to the Cu surface. The depth of the Cu film etched by one ALE cycle was defined as “etching per cycle” (EPC). In addition to thickness measurements, the surface morphology of Cu after ALE with O_2 -GCIB was analyzed by using atomic force microscopy in the air.

3. RESULTS AND DISCUSSIONS

Upon continuous O_2 -GCIB etching, the mechanism behind the etching of Cu by O_2 -GCIB irradiation in presence of acetic acid vapor could be explained by the following steps: (1) CuO formation upon O_2 -GCIB irradiation; (2) acetic acid adsorption; (3) reaction between CuO and acetic acid upon O_2 -GCIB irradiation; (4) desorption of $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ reaction products upon O_2 -GCIB impact. Separating these etching steps, ALE by O_2 -GCIB irradiation is expected. In this study, (1) adsorption of acetic acid on Cu, (2) evacuation of acetic acid vapor, and (3) O_2 -GCIB irradiation were conducted separately.

Figure 2 shows the time dependence of the Cu etching depth, measured with a quartz crystal monitor for three ALE cycles. The duration time of the acetic acid adsorption on Cu (T_{AcOH}) was 2 s. P_{AcOH} was 2.6×10^{-3} Pa, and the substrate temperature was 25 °C. Subsequently, acetic acid vapor was evacuated for 30 s. Then, O_2 -GCIB irradiation was

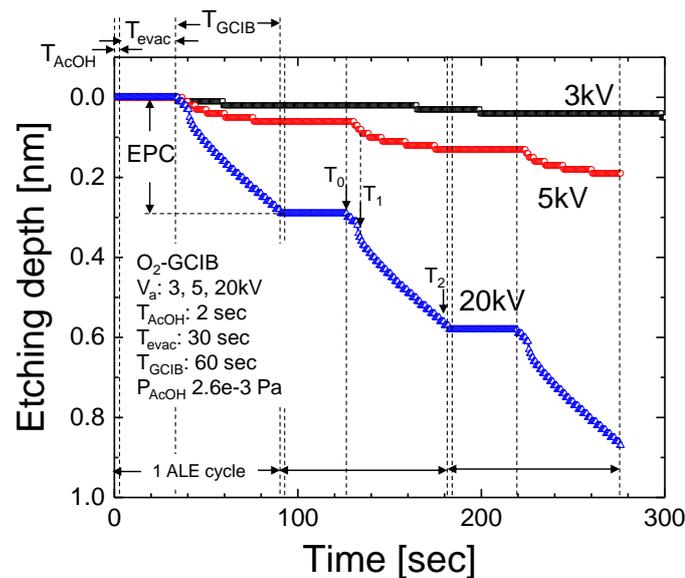


Figure 2: Time dependence (3 cycles of ALE) of Cu etching depth upon O_2 gas cluster ion beam etching in presence of acetic acid.

conducted for 60s (T_{GCIB}) at V_a values of 3, 5, and 20 kV. As shown in Figure 2, when V_a was 3 kV, almost no etching occurred. On the other hand, the tendency was completely different when V_a was 20kV. At the beginning of the O_2 -GCIB irradiation ($T_0 - T_1$), the Cu etching depth decreased rapidly. Then, the Cu etching rate became moderate, and the etching depth increased linearly with the irradiation time ($T_1 - T_2$). This indicated that physical sputtering occurred during this period. When V_a was 5 kV, the etching depth decreased rapidly at the beginning of the O_2 -GCIB irradiation, similarly to that observed at 20 kV. However, the etching did not proceed even if the GCIB irradiation time increased. As previously mentioned, almost no physical etching occurred after O_2 -GCIB irradiation at V_a of 5 kV. As a consequence, Cu etching inherently terminated after reactive removal of the surface layer (0.07 nm). This self-limiting step is necessary for ALE.

Next, the dependence of the etching depth on the acetic acid partial pressure (P_{AcOH}) was investigated. P_{AcOH} was varied between 1.2×10^{-3} and 2.6×10^{-3} Pa. Figure 3 (a) shows the relationship between P_{AcOH} and EPC of Cu by ALE with O_2 -GCIB irradiation. The V_a and T_{GCIB} values were 5 kV and 100 s, respectively. By increasing the P_{AcOH} , the EPC gradually increased. In general, adsorption of molecules on solid surfaces (adsorption isotherm) can be categorized according to six different models [11]. Among these adsorption isotherms, the adsorption of acetic acid molecules can be characterized using Brunauer-Emmett-Teller model (multilayer adsorption). As, in this experiment, P_{AcOH} (2.6×10^{-3} Pa) was significantly lower than the equilibrium vapor pressure (2.0 kPa at 25 °C), the adsorption isotherm had the same shape as that of the Langmuir model (monolayer adsorption). Therefore, the relationship between the partial pressure divided by the amount of adsorption and the partial pressure

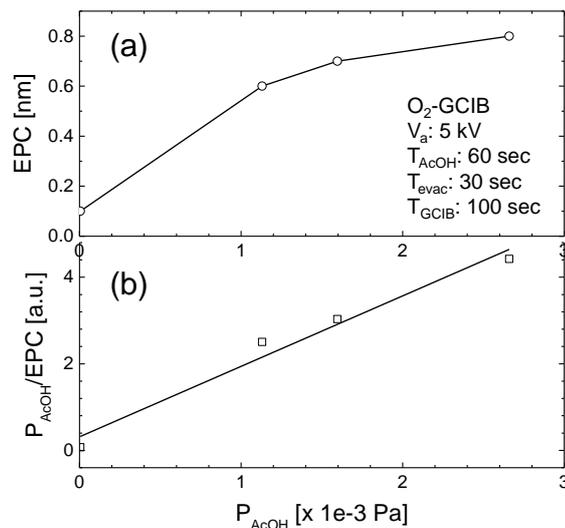


Figure 3: (a) Relationship between P_{AcOH} and etch per cycle (EPC), (b) modified Langmuir plot using P_{AcOH}/EPC and P_{AcOH}

showed a linear relationship (Langmuir plot). Figure 3(b) shows a modified Langmuir plot obtained from figure 3(a). As we assumed that the EPC increased with the amount of adsorbed materials, we used $P_{\text{AcOH}}/\text{EPC}$ as the vertical axis of the Langmuir plot. In Figure 3 (b), an almost linear relationship between P_{AcOH} and $P_{\text{AcOH}}/\text{EPC}$ can be observed, indicating that the adsorption of acetic acid on Cu in this experiment could be modeled as quasi-Langmuir type.

Next, the Cu surface morphologies after ALE with O_2 -GCIB were studied. Figure 4 shows AFM images of pristine Cu (a), Cu after ALE with 5 kV O_2 -GCIB (b), and Cu after ALE with 20 kV O_2 -GCIB (c); the AFM scan area was $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$, while the number of ALE cycles was 5. The etching conditions were as follows: $P_{\text{AcOH}} = 2.6 \times 10^{-3} \text{ Pa}$, $T_{\text{AcOH}} = 2 \text{ s}$, $T_{\text{GCIB}} = 60 \text{ s}$. In the case of pristine Cu, the root mean square roughness (R_{rms}) was 2.06 nm. After ALE with 5 kV O_2 -GCIB, the Cu surface was almost identical to the pristine one, and the R_{rms} value was 1.99 nm. However, after ALE with 20 kV O_2 -GCIB, the Cu surface was smoothed, and exhibited an R_{rms} value of 1.53 nm, as shown in Figure 4(c). T_{GCIB} , which was 60 s, was considerably longer than the duration time for reactive sputtering (several seconds). Therefore, physical sputtering occurred. We have reported that the surface smoothing upon GCIB irradiation was promoted by the physical sputtering effects of the GCIB. As a result, the pristine Cu surface appeared smoother after ALE with 20 kV O_2 -GCIB ($T_{\text{GCIB}} = 60 \text{ s}$), whereas no smoothing effect was observed after ALE with 5 kV O_2 -GCIB.

Considering these results, the process of Cu ALE using the O_2 -GCIB can be summarized as follows. At first, acetic acid adsorption was promoted by the introduction of acetic acid vapor. Subsequently, the residual acetic acid vapors in the irradiation chamber were evacuated, and the adsorbed acetic acid molecules remained on the Cu surface. In the initial stages of the O_2 -GCIB irradiation, the surface Cu atoms covered by acetic acid molecules were reactively

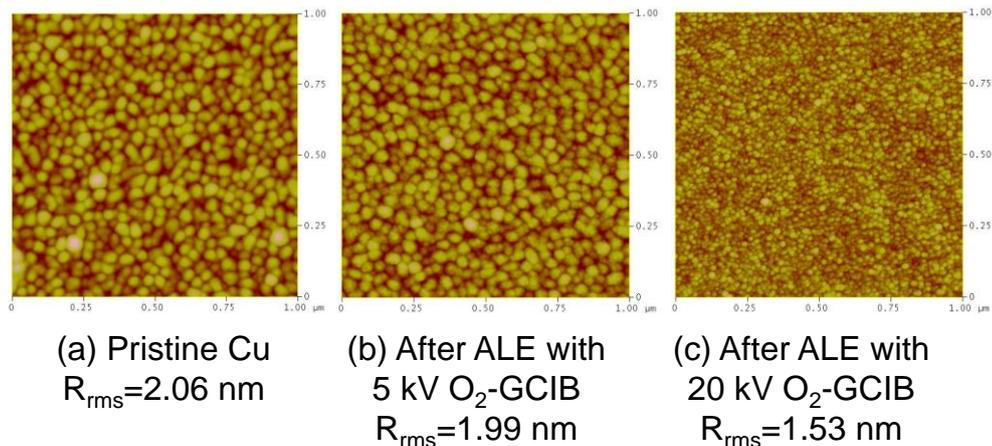


Figure 4: AFM images of Cu (a) pristine Cu; (b) after ALE with 5 kV O_2 -GCIB; (c) after ALE with 20 kV O_2 -GCIB

etched by the O₂-GCIB. The Cu reactive etching occurred at V_a values of 5 and 20 kV. After removal of the surface Cu layer, no adsorbed acetic acid molecules were present anymore. In the case of the 5 kV O₂-GCIB irradiation, etching terminated, and thus ALE with 5 kV O₂-GCIB appeared as a self-limiting process. However, in the case of 20 kV O₂-GCIB irradiation, physical sputtering occurred, and therefore the etching depth increased with the irradiation time. As the surface smoothing was a consequence of the physical sputtering, Cu surface smoothing was observed at 20kV.

In this study, we demonstrated for the first time ALE of Cu using O₂-GCIB in presence of acetic acid. Notably, ALE with GCIB can be applied to many different material combinations. As the GCIB uses extremely low-energy (several eV/atom) irradiation, precise control of atomic etching without severe damages is attainable. In addition, location specific ALE is possible because the GCIB is a spot beam with a diameter of several mm. Thus, ALE with GCIB can be applied to improve atomic-level thickness variation on large wafers.

REFERENCES

- [1] K. J. Kanarik, T. Lill, E. A. Hudson, S. Sriraman, S. Tan, J. Marks, V. Vahedi, and R. A. Gottscho, *J. Vac. Sci. and Technol. A* 33, 020802 (2015).
- [2] Y.Horiike, T.Tanaka, M.Nakano, S.Iseda, H.Sakaue, A.Nagata, H.Shindo, S.Miayazaki, and M.Hirose, *J. Vac. Sci. and Technol. A*, 8, 1844 (1990).
- [3] I.Yamada, J.Matsuo, N.Toyoda, and A.Kirkpatrick, *Mat. Sci. and Eng., R*, 34, 231, (2001).
- [4] Z. Insepov, and I. Yamada, *Nucl. Instr. and Meth. B*, 112, 16, (1996)
- [5] N.Toyoda, H.Kitani, J.Matsuo, and I.Yamada, *Nucl. Instr. and Meth. B*, 121, 484, (1997).
- [6] T. Miyayama, N. Sanada, M. Suzuki, J. S. Hammond, S.-Q. D. Si and A. Takahara, *J. Vac. Sci. Technol. A*, 28, L1 (2010).
- [7] S. Ninomiya, K. Ichiki, H. Yamada, Y. Nakata, T. Seki, T. Aoki, and J. Matsuo, *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 23, 1601 (2009).
- [8] T. Suda, N. Toyoda, K. Hara, and I. Yamada, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 51, 08HA02 (2012).
- [9] A.Yamaguchi, R.Hinoura, N.Toyoda, K.Hara, I.Yamada, *Jpn. J.Appl.Phys.*, 52, 05EB05 (2013)
- [10] J.Matsuo, N.Toyoda, M.Akizuki, I.Yamada, *Nucl. Instr. and Meth. B*, 121, 459 (1997).
- [11] K.S.W. Sing, D. H. Everett, R. A. W. Haul, L. Moscou, R. A. Pierotti, J. Rouquerol, and T. Siemieniewska, *Pure and Appl. Chem.*, 57, 603, (1985).

ОСОБЕННОСТИ ИОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ ФУЛЛЕРЕНОВ PECULIARITIES ION SPUTTERING OF FULLERENES

Капустин С.Н., Матвеев В.И.
Kapustin S.N., Matveev V.I.

Северный (Арктический) Федеральный университет имени М.В.Ломоносова,
г. Архангельск, Россия, hare22@yandex.ru

The research of ion sputtering of nanoparticles is interesting both from the fundamental and applied points of view. We propose amendments to simple model of ion sputtering which let taking into account the main features of nanoparticles sputtering. This theory is based on simple physical suggestions and being in a not bad correspondence with the experiment. Calculations of the relative yield of clusters in the sputtering of fullerenes are presented.

В работах [1]-[4] была последовательно развита модель ионного распыления металла, основанная на простых физических принципах. Она позволяет оценить массовые, зарядовые и кинетические спектры многоатомных кластеров с числом атомов $4 < N < 60$ при энергии падающего иона 1-100 кеВ. Модель после проведения незначительной модификации, так же описывает распыление и неметаллических элементов, в частности углерода (рис 1). В данной работе представлена поправка к модели ионного распыления для описания массовых и зарядовых спектров при ионном распылении наноструктур.

Для применения модели к наноструктурам требуется учесть некоторые особенности наночастиц. Размер зоны возбуждения (область из которой могут вылетать продукты распыления) в твердом теле определяется в основном импульсом и массой бомбардирующего иона. Взаимодействие между отдельными наноструктурами слабее, чем между их внутренними элементами, поскольку чаще всего осуществляется через взаимодействие Ван-дер-Ваальса. В случае рыхлой упаковки наноструктур можно считать, что размер зоны возбуждения приблизительно равен размеру наночастицы. Использование этого предположения позволило успешно рассчитать относительный выход кластеров при распылении фуллеренов (рис 2) не меняя остальную модель.

В случае плотной упаковки наночастиц [5] (в качестве мишени применялась таблетка из прессованного порошка фуллеренов C_{60}), вид экспериментальных данных позволяет предположить существования двух механизмов распыления. В треке иона, где вещество нагревается до больших температур и происходит разрушение молекул C_{60} , их структура не оказывают влияния на процесс формирования кластеров. Однако за

пределами трека, где возбуждение передается от молекулы к молекуле путем столкновений, фуллерен может быть выбит из мишени как единое целое, и лишь за тем испарить несколько атомов. При расчете дополнительного механизма выхода кластеров, фуллерен считался единой частицей. В работе [3] было получено выражение (6) для W_N - вероятности вылета из возбужденной зоны кластера, состоящего из N атомов с внутренней энергией E_{int} . Чтобы учесть вероятность фрагментации кластера C_{60} за счет внутренней энергией проинтегрируем спектр выбитых кластеров по внутренней энергии от $n\delta$ до $(n+1)\delta$

$$W_N^n = \int_{n\delta}^{(n+1)\delta} \frac{dw_N}{dE_{int}} dE_{int},$$

где δ – энергия сублимации одного атома, n - количество испарившихся из перегретого кластера атомов. Мы получим вероятность вылета возбужденной молекулы фуллерена, которая после фрагментации превратится в кластер из $60 - n$ атомов. Вероятность получения кластером заряда при вылете находилась согласно методике, описанной в работе [4]. Результаты расчетов представлены на рисунке 3.

Интерес представляет так же случай распыления полифуллеренов [8], молекул вида $[C_{60}]_n$. Отдельные фуллерены связаны в кластер силами Ван-дер-Ваальса, которые намного слабее ковалентных связей между атомами углерода в фуллерене. В случае вылета стабильного фуллеренового кластера $[C_{60}]_n$ фрагментацией составляющих его фуллеренов можно пренебречь. Расчеты проходили по стандартной процедуре описанной в работе [3], молекула C_{60} принималась за единое целое. Результаты расчетов представлены на рисунке 4.

Известно, что полное количественное и детальное описание процессов ионного распыления в виде кластеров возможно лишь численными методами молекулярной динамики. Сложность таких расчетов существенно возрастает с ростом числа атомов в кластере. Предлагаемый подход основан на капельной модели кластера и не учитывает оболочечных эффектов в строении наночастиц, поэтому предназначен для предварительной оценки ситуации и описания физических механизмов формирования продуктов ионного распыления в виде кластеров.

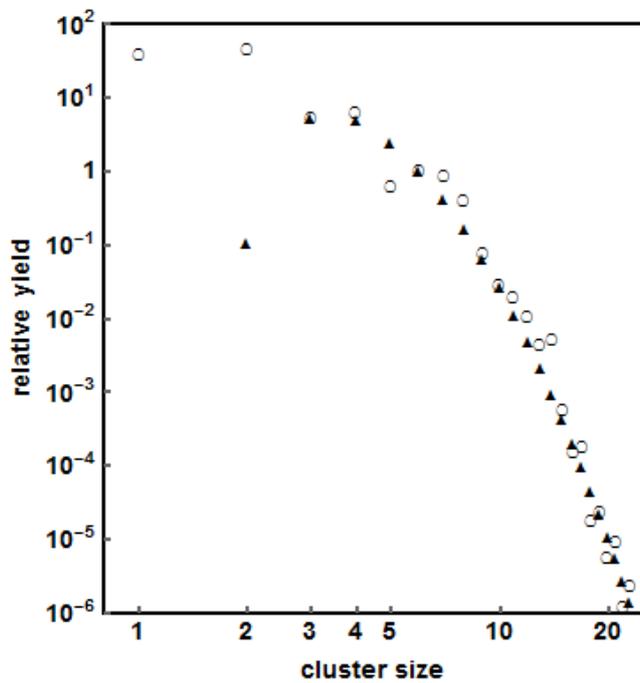


Рис 1. Сравнение относительного выхода отрицательно заряженных многоатомных кластеров при бомбардировке графита ионами Cs^+ с энергией 8 кеВ. Круги – эксперимент [6], треугольники – модель.

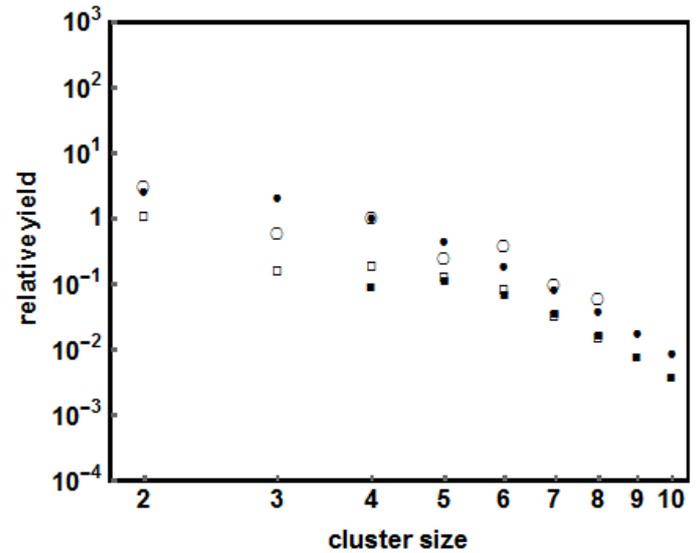


Рис 2. Относительный выход кластеров C_n^- при бомбардировке фуллерена C_{60} ионами Cs^+ , данные [7]. Пустые фигуры – эксперимент, залитые фигуры – модель. Кружочки – энергия падающего иона 5 кеВ, квадраты – энергия падающего иона 4 кеВ

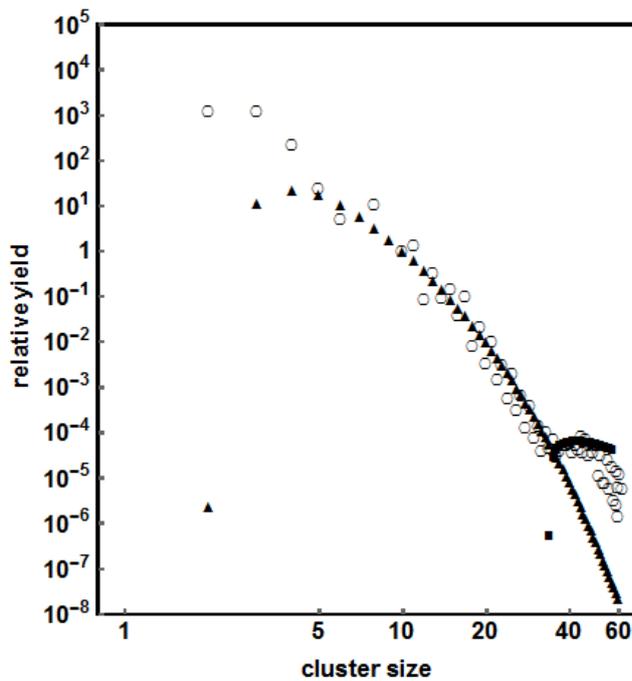


Рис. 3. Относительный выход C_n при бомбардировке C_{60} ионами Cs^+ 60 кеВ. Круги – эксперимент [5], треугольники – модель без учета дополнительного механизма распыления, квадраты – улучшенная модель.

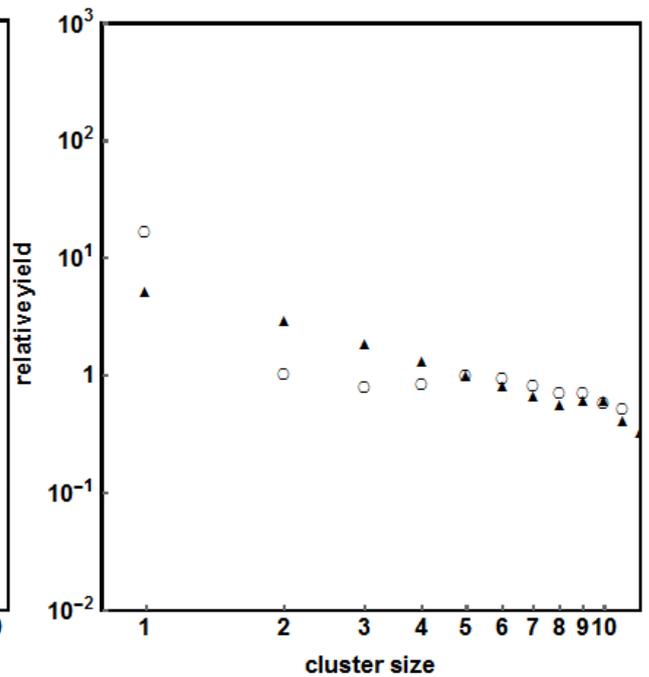


Рис. 4. Относительный выход кластеров $[C_{60}]_n^+$ при бомбардировке C_{60} ионами Ar^+ с энергией 13 кеВ. Круги – эксперимент [8], треугольники – модель.

Литература:

[1] В.И. Матвеев, С.А. Кочкин, ЖТФ 137 (2010) 820

- [2] В.И. Матвеев, Д.Н. Макаров, С.Н. Капустин, Письма в ЖТФ 41 (2015) 15
- [3] В.И. Матвеев, С.Н. Капустин, Известия РАН, серия физическая. 80 (2016) 131
- [4] В.И. Матвеев, С.Н. Капустин, Известия высших учебных заведений, физика.59 (2016) 13
- [5] И.В. Веревкин, С.В. Верхотуров, Н.Х. Джамилев, С.Е. Максимов, В.В. Соломка, Письма в ЖТФ. 21, (1995) 49.
- [6] A.D. Bekkerman, N. H. Djemilev, V.M. Rotshtein, Technical Physics Letters journal, 16 (1993) 52
- [7] S. Zeeshan, S. Yamin, S. Javeed, K. Yaqub, A. Ashraf, A. Awais, S. A. Janjua, The Nucleus, 48 (2011) 181
- [8] F. Seitz, H. Zettergren, P. Rousseau, Y. Wang, T. Chen, M. Gatchel, J. D. Alexander, M.H. Stockett, J. Y. Chesnel, M. Capron, J. C. Pouilly, A. Domaracka, A. Mery, S. Maclot, V. Vizcaino, H. T. Schmidt, L. Adoui, M. Alcamí, A.G.G.M.Tielens, F. Martin, B. A. Huber, H. Cederqist, The journal of chemical physics 139 (2013)

**РАСПЫЛЕНИЕ КРЕМНИЯ И ДИОКСИДА КРЕМНИЯ
НИЗКОЭНЕРГИТИЧНЫМИ ИОНАМИ ПЛОТНОЙ АЗОТНОЙ И АРГОНОВОЙ
ПЛАЗМЫ**

**THE SPUTTERING OF SILICON AND SILICON DIOXIDE BY LOW ENERGY
IONS OF DENCE NITROGEN AND ARGON PLASMA**

И.И. Амиров, В.И. Бачурин, М.О. Изюмов, Н.О. Шуваев

I.I. Amirov, V.I. Bachurin, M.O. Izyumov, N.O. Shuvaev

Ярославский филиал Физико-технологического института РАН

150007, Университетская, 21, Ярославль, Россия, E-mail: vibachurin@mail.ru

The sputtering of Si and SiO₂ films by low energy (50-300 eV) ions of nitrogen and argon plasma of inductive radio frequency low pressure discharge have been studied. It was found that the sputtering rate of Si by Ar⁺ ions is approximately 1.3 times more than for SiO₂. In the case of using N₂⁺ ion bombardment the sputtering rate of SiO₂ is higher approximately 2.2 times relatively to Si for all used ion energies. This effect may be explained by the presence of chemical mechanism of sputtering of SiO₂ and Si by N₂⁺ ions in addition to physical mechanism.

Введение

Процессы ионно-плазменной обработки поверхности с целью придания ей нужных функциональных свойств находят применение во многих областях нанотехнологии [1-3]. Так плазменная иммерсионная имплантация Si, пленок металлов азотом используется получения ультратонких нитридных покрытий. В таком процессе одновременно с их образованием происходит распыление материала. Относительная скорость распыления двух материалов, селективность их распыления изменяется в зависимости от рода материала и энергии бомбардирующих ионов. Ранее нами на примерах распыления пленок металлов было показано, что в плотной плазме Ar вблизи порога распыления селективность распыления может отличаться в несколько раз и теоретически быть бесконечной [4]. В данной работе проведены исследования селективности распыления двух наиболее распространенных в технологии нанoeлектроники материалов Si и SiO₂ в плотной азотной и аргоновой плазме ВЧ индукционного разряда низкого давления. Проведено сравнение полученных данных по селективности их распыления при энергии ионов <300 эВ с данными, полученными при энергии бомбардирующих ионов 1-10 кэВ.

Методика проведения экспериментов

Распыление пластинок кремния и термического диоксида кремния проводилось в реакторе плотной плазмы высокочастотного индукционного разряда, подробно описанного в [4]. Плазма генерировалась в разрядной камере с помощью двухвиткового индуктора и ВЧ генератора ($f=13.56\text{МГц}$). Для увеличения плотности заряженных частиц в плазме разрядная камера помещалась в неоднородное магнитное поле, создаваемое электромагнитной катушкой. Держатель образцов (Al пластина диаметром 160 мм) размещался на ВЧ электроде в реакционной камере. При подаче на него ВЧ мощности на электроде устанавливался отрицательный потенциал самосмещения, который соответствовал средней энергии бомбардирующих ионов [4]. В экспериментах ВЧ мощность смещения изменяли в диапазоне 60-400 Вт. Энергия ионов при этом изменялась от 50 до 300 эВ.

Образцами служили пластинки Si и SiO₂ размером 10x10 мм с маской из фоторезиста со сформированным фотолитографическим в нем рисунком. Пластинки вырезались из кремниевой пластины КДБ-0.1 (100). Для предотвращения нагрева образцов в плазме они устанавливались на держателе на вакуумной смазке. Температура образцов при распылении равнялась приблизительно 300 К. Время травления образцов определялась временем распыления фоторезиста. Контроль времени удаления фоторезиста осуществляли лазерно-интерферометрическим способом. После удаления фоторезиста с использованием профилометра TALYSTER измеряли высоту протравленной структуры. Скорость распыления V_{et} определяли из отношения высоты ступеньки к времени распыления.

Условия проведения экспериментов были следующими: остаточное давление в камере $5 \cdot 10^{-4}$ Па; давление во время распыления $P=0.08$ Па; ВЧ мощность разряда $W=800$ Вт; расход плазмообразующего газа $Q=10$ нсм³/мин (в нормальных условиях).

Результаты и их обсуждение.

На рис.1 представлены график зависимости скорости распыления Si и SiO₂ в плазме Ar от энергии ионов. Скорость распыления Si была выше скорости распыления SiO₂ приблизительно в 1.3 раза. Из литературных данных следует, что при более высоких энергиях ($E_i=4.5\text{кэВ}$) скорости их распыления были одинаковыми [5]. Можно отметить, что вблизи порога распыления скорости распыления Si и SiO₂ были, приблизительно, одинаковыми.

В плазме N₂ скорость распыления Si была в 2.2 раза меньше скорости распыления SiO₂ (рис. 2). Причем она была приблизительно в 10 раз меньше, чем в

плазме Ar. Это объясняется тем, что плотность ионного потока в азотной плазме была два раза ниже. Кроме того, в азотной плазме основным ионом являлись ионы N_2^+ . В этом случае при столкновении с поверхностью молекулярный ион разбивается на два атома с вдвое меньшей энергией.

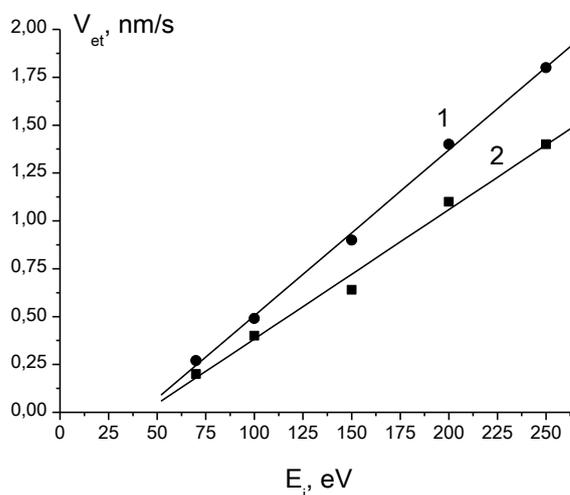


Рис. 1. Зависимость скорости распыления Si (1) и SiO_2 (2) в плазме Ar от энергии ионов.

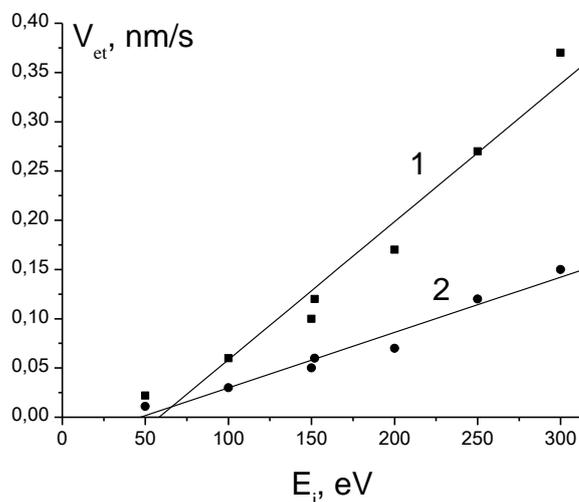


Рис. 2. Зависимость скорости распыления SiO_2 (1) и Si (2) в плазме N_2 от энергии ионов.

Зависимость скоростей распыления SiO_2 и Si в азотной плазме от плотности тока является линейной. Наблюдается тенденция увеличения селективности травления SiO_2/Si до 3 при увеличении плотности тока с 2 до 8 mA/cm^2 (рис 3).

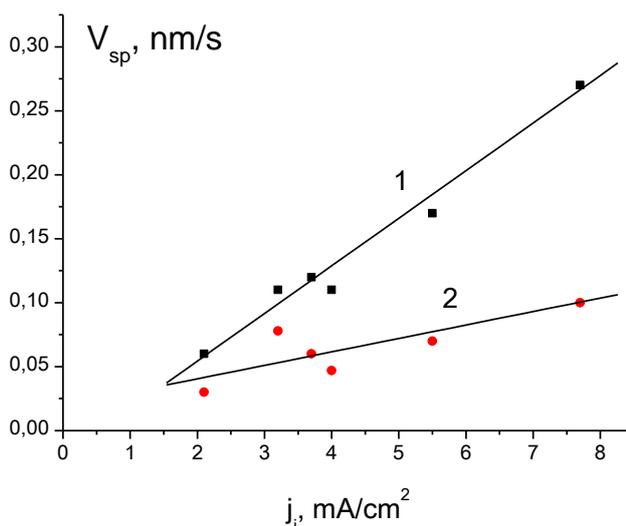


Рис.3. Зависимость скорости травления SiO_2 (1) и Si (2) в плазме N_2 от плотности ионного тока при $E_i=150$ эВ.

При практически одинаковых плотностях кремния и диоксида кремния энергия связи атомов на поверхности соединения почти в 2 раза выше. Поэтому можно было ожидать такой же селективности распыления Si и SiO₂ за счет каскадного механизма. Очевидно, что увеличение скорости распыления SiO₂ ионами Ar⁺ и N₂⁺ по сравнению с распылением Si связано с существованием наряду с физическим механизмом распыления SiO₂ химических механизмов.

При травлении диоксида кремния ионами аргона в приповерхностном слое образуется избыток кремния за счет преимущественного распыления кислорода. Оже анализ показывает, что состав поверхности изменяется до SiO_{1.67}. Избыточный Si взаимодействует с SiO₂, в результате чего образуются молекулы SiO, слабо связанные с поверхностью. Присутствие газообразных молекул SiO в продуктах травления диоксида кремния в аргоновой плазме экспериментально было обнаружено в работе [6].

В случае распыления SiO₂ и Si ионами азота селективность увеличивается за счет протекания химических реакций, ведущих к изменению скорости травления, в приповерхностных слоях, как диоксида кремния, так и кремния. При бомбардировке пленок SiO₂ ионами N₂⁺ обнаружено образование в приповерхностном слое летучих газовых молекул SiO и NO [5]. По оценке авторов [5] этот химический механизм приводит к увеличению распыления почти в три раза. Взаимодействие ионов азота с поверхностью кремния приводит к формированию на поверхности стехиометрического нитрида кремния (Si₃N₄) [7], энергия связи атомов на поверхности которого в полтора раза превышает ее значения для кремния. Следовательно, скорость распыления за счет каскадного механизма будет уменьшаться. Таким образом, селективность травления SiO₂/Si ионами азота может быть обусловлена химическими процессами, протекающими на поверхности, ведущими к увеличению распыления SiO₂ и уменьшению распыления Si.

[1]. N. Dwivedi, R.J. Yeo, N. Satyanarayana, S. Kundu, S. Tripathy. Scientific Report. 5 (2014) 7772.

[2]. G.J. Wan, R.K.Y. Fu, P. Yang, J.P.Y. Ho, X. Xie, N. Huang, P.K. Chu. NIMB 242 (2006) 296–299.

[3]. I. J. R. Baumvol, C. Krug, F. C. Stedile, M. L. Green, D. C. Jacobson, D. Eaglesham, J. D. Bernstein, J. Shao, A. S. Denholm, and P. L. Kellerman. Appl. Phys. Lett. 74, No. 6, 1999.

[4]. И.И. Амиров, М.О. Изюмов, В.В. Наумов, Поверхность №8 (2016) 82.

[5] В.И. Бачурин, С.А. Кривелевич, Е.В. Потапов, А.Б. Чурилов, Поверхность №3 (2007) 19.

[6] Walkup R.E., Avouris Ph, Dreyfus R.W., Jasinski M., Appl. Phys. Lett. 45 (1984) 372.

[7] Бачурин В.И., Лепшин П.А., Смирнов В.К., Чурилов А.Б., Известия РАН, сер. физ. 62 (1998) 16.

STRUCTURING OF THE LITHIUM FLUORIDE SURFACE BY HIGHLY CHARGED IONS

M.V. Sorokin¹, A.S. El-Said², R.A. Wilhelm^{3,4},
R. Heller³, S. Facsco³, F. Aumayr⁴

¹ National Research Centre 'Kurchatov Institute', Moscow, Russia, m40@lab2.ru;

² King Fahd University of Petroleum and Minerals, Dhahran, Saudi Arabia;

³ Institute of Ion Beam Physics and Materials Research, HZDR, Dresden, Germany;

⁴ Institute of Applied Physics, Vienna University of Technology, Vienna, Austria.

LiF crystal block (Korth Kristalle, Germany) grown from the melt in an inert atmosphere were mechanically cleaved in ambient atmosphere along a (100) plane to obtain platelets of $\sim 1.0 \text{ cm}^2$ area and $\sim 0.5 \text{ mm}$ thickness. The fresh cleaved samples were irradiated at normal incidence to isotope-pure highly charged ($^{129}\text{Xe}^{Q+}$) ions of different charge states ranged from $Q = 15$ to $Q = 36$, which corresponds to a wide range of potential energies between $E_p = 2.2 \text{ keV}$ and $E_p = 37.8 \text{ keV}$. The ions were extracted from the electron beam ion trap (EBIT) facility (located at the Ion Beam Center of the Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf).

After irradiation, the surfaces were probed using Nanoscope III (Digital Instruments) scanning force microscope (SFM) operated in tapping mode. It was observed, that depending on the ion energy, different kinds of nanostructures can be created on the crystal surface [1]. A typical SFM image and line profile (used for rim height estimation) for each shape of the created nanostructures are shown in the Figure 1.

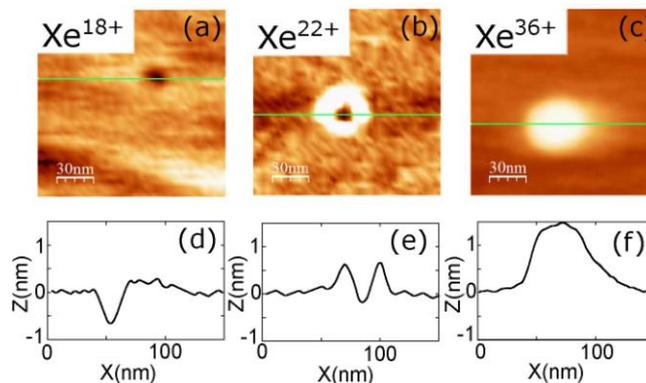


Figure 1. SFM topographic image (up) and line profile (down) of one pit, volcano-like structure and hillock induced by Xe^{18+} , Xe^{22+} and Xe^{36+} , respectively.

For the low charge states of $Q = 15\div 18$ the structures are pits as shown in Fig. 1 (a and d). The pits exhibit a mean depth of ~ 0.6 nm corresponding to about two atomic layers. The average lateral size of the pits increases from ~ 20 nm for $Q = 15$ to ~ 25 nm for $Q = 18$. Upon increasing the charge state to $Q = 22$, the shape of the created structures changes. The pits are now surrounded by a rim protruding out of the surface, Fig. 1 (b and e). The rim height also depends on the potential energy and increases from 0.6 nm for $Q = 22$ to 1.4 nm for $Q = 30$. For the even higher charge states of $Q = 33$ and 36 the shape of the structures changes to hillocks as seen in Fig. 1 (c and f), with an average height of 1.0 and 1.5 nm, respectively.

In order to analyze the effect of the ion potential energy E_p , on material modifications we adopted the inelastic thermal spike model for insulators, originally used for swift heavy ions [2]. For low-velocity ions we can consider a hemispherical problem of heat propagation, assuming the crystal surface as a reflecting boundary:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 K \frac{\partial T}{\partial r} \right) + N \quad (1)$$

where $T(r, t)$ is the temperature distribution to be found, $C(T)$ is the heat capacity, $K(T)$ is the thermal conductivity. The heat source $N(r, t)$ represents the energy transfer from the electronic subsystem [2,3]:

$$N(r, t) = \frac{2E_p}{(4\pi\sigma)^{3/2} \tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{4\sigma^2}\right) \quad (2)$$

Here the factor of 2 reflects the hemisphere geometry and

$$\sigma^2 = D_e t + r_0^2 \quad (3)$$

where electron diffusivity $D_e = 1$ cm²/s [2] and the electron-lattice relaxation time $\tau = 8 \times 10^{-14}$ s [3]. Initial radius of the free electron distribution $r_0 = 1$ nm. Although some part of the ion potential energy can be lost due to electron emission, we neglect this effect as the retention part in the case of insulators should be close to E_p . Moreover certain energy fraction is absorbed directly by lattice due to high ionization density and corresponding change of the interatomic potential. Formally we also include it into $N(r, t)$ to be consistent with the thermal spike model.

Numerical solution of the Eq. (1) is plotted in the Fig. 2. When $T(r, t)$ reaches the melting temperature of LiF, $T_m = 1118$ K, the melting starts, keeping $T = T_m$ until the latent

heat of fusion is absorbed. During the cooling down the solidification proceeds similarly at T_m , forming a plateau on $T(r, t)$.

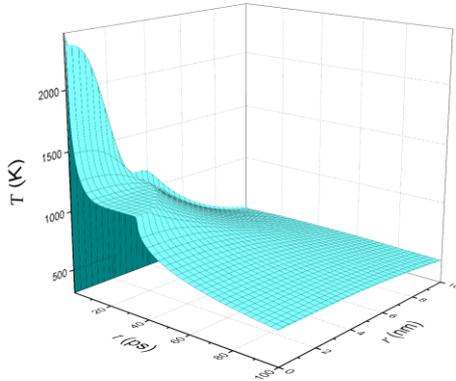


Figure 2. Lattice temperature (T) as a function of time (t) and distance (r) from the 20-keV HCl's impact site.

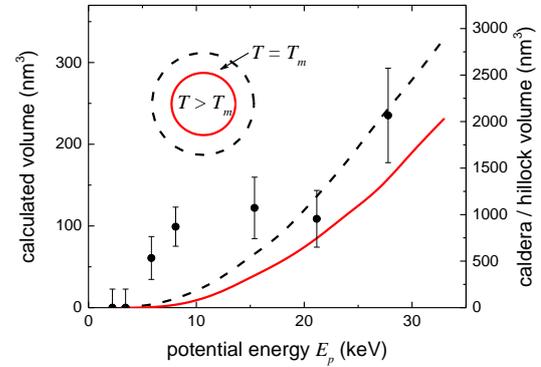


Figure 3. Experimental (black dots, right axis) and calculated volumes of the impact regions.

The maximum outer radii of the partially (dashed line) and completely (solid line) molten region are used to calculate the enclosed hemispherical volume. The completely molten volume $T > T_m$ is smaller due to the latent heat, as shown in Fig. 3. The calculations showed that the melting occurs at a potential energy of about 6.0 keV, which is in fair agreement with the observed threshold of caldera formation [1]. However the calculated volumes are not commensurable with the size protruded structures. The latter is rather determined by thermal expansion, but the viscous flow or at least high-temperature plastic deformation needs to release the expansion and keep it quenched. Note that track formation in LiF requires considerably higher heating, which formally exceeds vaporization temperature [4].

1. A.S. El-Said, R.A. Wilhelm, R. Heller, M. Sorokin, S. Facsko, F. Aumayr, Phys. Rev. Lett. 117 (2016) 126101.
2. A. Meftah, F. Brisard, J.M. Costantini, E. Dooryhee, M. Hage-Ali, M. Hervieu, J.P. Stoquert, F. Studer, M. Toulemonde, Phys. Rev. B 49 (1994) 12457.
3. M. Toulemonde, J.M. Costantini, Ch. Dufour, A. Meftah, E. Paumier, F. Studer, Nucl. Instr. and Meth. B 116 (1996) 37.
4. M. Toulemonde, Ch. Dufour, A. Meftah, E. Paumier, Nucl. Instr. and Meth. B 166-167 (2000) 903.

**АНАЛИЗ АСМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ КОРРЕЛЯЦИОННЫМИ
МЕТОДАМИ**

**THE AFM IMAGES ANALYSIS OF THE SURFACE STRUCTURE
OF SEMICONDUCTOR MATERIALS BY CORRELATION METHODS**

Т.Г. Авачева¹, А.Д. Маслов², А.П. Авачев²
T.G. Avacheva¹, A.D. Maslov², A.P. Avachev²

* *Кафедра математики, физики и медицинской информатики, ФГБОУ ВП Рязанский государственный медицинский университет имени академика И.П. Павлова, Россия, г. Рязань, ул. Высоковольтная, д.7, e-mail: mfmi.rzgtu@mail.ru;*
Кафедра микро- и нанoeлектроники, ФГБОУ ВП Рязанский государственный радиотехнический университет, Россия, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1

In the paper the use of the atomic force microscopy (AFM) and an average mutual information (SMI) to study the surface structure of crystalline, polycrystalline and amorphous silicon films is demonstrated. The influence of technological parameters of obtaining information on the characteristics of disordered semiconductors is analyzed.

Продемонстрированы возможности применения атомно-силовой микроскопии (АСМ) и метода средней взаимной информации (СВИ) для исследования структуры поверхности кристаллических, поликристаллических и аморфных кремниевых пленок. Проанализировано влияние технологических параметров получения на информационные характеристики неупорядоченных полупроводников.

Для исследования процессов, связанных с облучением твёрдого тела, взаимодействие плазмы с поверхностью и других, часто необходимо оценивать степень упорядочения структуры. В этом направлении перспективным методом является применение корреляционных методов анализа поверхностей по АСМ изображениям. Этот подход построен на рассмотрении процессов структурообразования неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации и позволяет выявить влияния технологических параметров на свойства выращиваемых и обрабатываемых в том числе с помощью ионных методов материалов. Целью данной работы стала апробация разработанную методику диагностики структуры поверхности по расчету СВИ на основе АСМ изображений поверхности неупорядоченных материалов.

В настоящее время в научной практике использует параметры, характеризующие отдельные элементы структуры, а не структуру в целом (размеры зерен, локальные характеристики шероховатости поверхности и т.д.), Используются и статистические

обработки (усредненные значения шероховатости, пористость, средний размер зерен, распределение по размерам и т.д.). Такие подходы недостаточны для описания систем со сложной и неоднородной структурой, какими являются поверхности материалов [1].

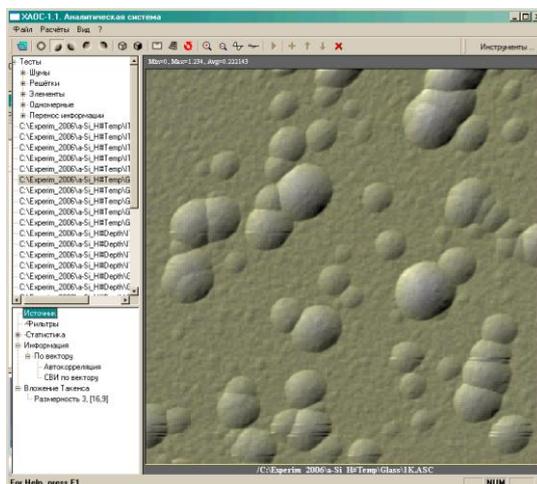


Рисунок 1. Методика анализа упорядоченности структуры по расчету информационных параметров «NanoInform»

Используемая в данной работе методика расчета средней взаимной информации (СВИ) для двумерных массивов чисел позволяет оценить степень воспроизводимости параметров полупроводника по корреляциям в структуре его поверхности [2]. В [3] показано, что СВИ характеризует систему именно с учетом ее динамических особенностей (рисунок 1).

Исходными данными были изображения поверхности полупроводника, полученные средствами атомно-силовой микроскопии, для них было построено двумерное распределение СВИ по вектору. Изображение распределения СВИ строилось таким образом, что чем ярче точка с координатами $(x; y)$, тем больше средняя взаимная информация между всеми точками поверхности исходного образца, которые можно соединить вектором с соответствующей длиной и направлением.

Данная методика была протестирована на модельных поверхностях (рисунок 2) и доказала свою эффективность в исследовании самоорганизующихся структур на основе неупорядоченных полупроводников, она позволяет не только качественно, но и количественно характеризовать различные структуры [4].

Также были исследованы образцы α -Si:H, полученные при различных технологических условиях (рисунок 3). При увеличении времени осаждения пленки на подложку величина СВИ возрастает. Полученная зависимость свидетельствует о возникновении дальнедействующих корреляций на поверхности. При увеличении толщины пленки в результате процессов самоорганизации образуется более упорядоченная структура, и пленка все меньше повторяет структуру подложки [5].

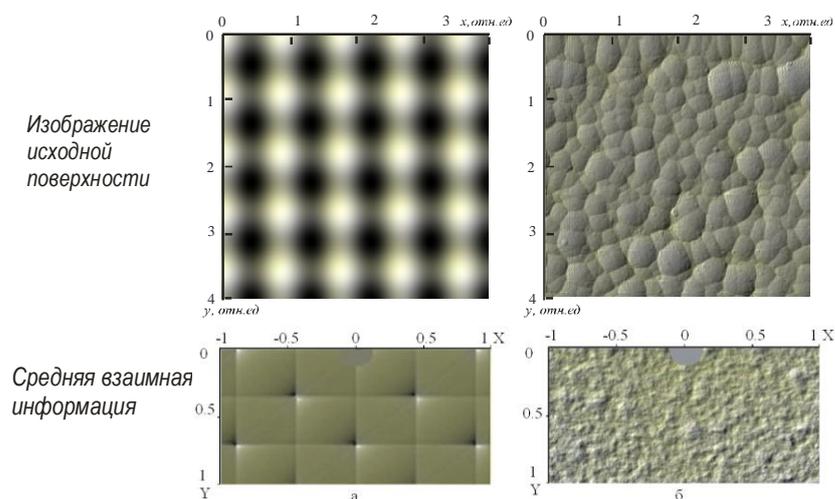


Рисунок 2 – Типичный вид распределения СВИ:
 а-для модели идеального кристалла (двумерная синусоидальная решетка);
 б-распределение СВИ для реального образца α -Si:H.

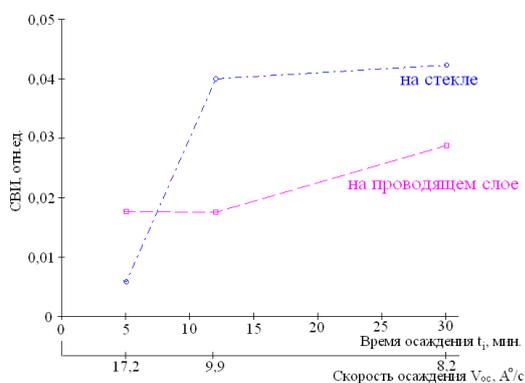


Рисунок 3 – Зависимость СВИ образцов α -Si:H от времени осаждения

Таким образом, на основе подходов нелинейной динамики разработана методика исследования информационных характеристик структур микро- и нанoeлектроники. Проведены экспериментальные исследования структур различной организации, показано, что расчет средней взаимной информации позволяет выявлять и количественно описывать дальнедействующие корреляции в структуре поверхности неупорядоченных материалов, которые свидетельствует о присутствии в ней упорядоченности.

1. С.П. Вихров, Т.Г. Авачева, Н.В. Бодягин, Н.В. Гришанкина, А.П. Авачев, Физика и техника полупроводников 46 (2012) 433.
2. Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Вихров С.П., Мурсалов С.М. ФТП. 42 (5), 513 (2008).
3. Т.Г. Авачёва, Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, С.М. Мурсалов, Процессы самоорганизации в неупорядоченных материалах, Рязань: РГРТУ, 2007.
4. N.V. Grishankina, S.P. Vikhrov, T.G. Avacheva, Semiconductors, 46 (2012) 415.
5. Т.Г. Авачёва, Е.В. Балашов, С.П. Вихров, Н.В. Бодягин, С.М. Мурсалов, П.Е. Старов, Вестник Рязанского государственного радиотехнического университета 23 (2008) 129.

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ И МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНОГО ВОЛОКНА ПРИ РАСПЫЛЕНИИ ИОНАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

STRUCTURAL AND MORPHOLOGICAL CHANGES OF CARBON FIBER SURFACE UNDER SPUTTERING BY NOBLE GAS IONS

Н.Н. Андрианова¹, А.М. Борисов¹, В.А. Казаков^{1,2}, Е.С. Машкова³
М.А. Овчинников^{1,3}, С.В. Савушкина²
N.N. Andrianova¹, A.M. Borisov, V.A. Kazakov^{1,2}, E.S. Mashkova³
M.A. Ovchinnikov^{1,3}, S.V. Savushkina²

¹Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет),
125993, Москва, Россия;

²ГНЦ - ФГУП «Исследовательский центр имени М.В. Келдыша», 125438, Москва, Россия;

³Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына
МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия, e-mail: es_mashkova@mail.ru

SEM images and Raman spectra of graphite PAN-fibers of one-directional carbon-carbon composite KUP-VM after high-fluence 10-30 keV Ne⁺ and Ar⁺ ion irradiation at normal and oblique incidence have been studied.

Углерод-углеродные композиционные материалы, армированные углеродными полиакрилонитрильными (ПАН) волокнами, рассматриваются как приоритетные конструкционные материалы ядерных реакторов, термоядерных устройств и аэрокосмической техники. Углеродные ПАН-волокна обладают высокосовершенной текстурированной оболочкой и ядром с турбостратной структурой. Распыление таких систем под действием ионного облучения может приводить как к структурным фазовым переходам, так и к значительным изменениям морфологии оболочки ПАН-волокна. При этом в зависимости от температуры облучения T и уровня радиационных нарушений, определяемого числом смещений на атом (СНА, dpa), могут происходить процессы аморфизации, рекристаллизации, а также развитие специфической морфологии поверхности, в частности, гофрирование волокна [1-3]. Для исследования этих процессов в настоящей работе наряду с электронно-микроскопическими методами анализа использовали спектроскопию комбинационного рассеяния (КР) лазерного излучения.

Образцы однонаправленного композита КУП-ВМ, армированного ПАН-волокнами марки ВМН-4, облучали ионами Ne⁺ и Ar⁺ с энергиями 10, 25 и 30 кэВ при углах падения 0 и 70° относительно оси волокна на масс-монохроматоре НИИЯФ МГУ [4] по методике [1,2]. Плотность ионного тока составляла 0.2 - 0.4 мА/см², флуенсы облучения $\geq 10^{18}$ ион/см². Температуру мишени варьировали от комнатной до 600°C, её измерение производили с помощью хромель-алюмелевой

термопары, спай которой укрепляли на обучаемой стороне мишени вне зоны облучения. Мониторинг ионного облучения проводили путем регистрации тока ионов и электронов для определения флуенса облучения и коэффициентов ионно-электронной эмиссии и распыления. Исследования производили на растровом электронном микроскопе Quanta 600 и микрорамановском спектрометре Horiba Yvon T64000 при комнатной температуре с лазерным излучением с длиной волны 514,5 нм, диаметр зоны облучения составлял 25 мкм, мощность - 1 мВт. КР-спектры углеграфитовых материалов отражают соотношение порядок–беспорядок в материале и содержат два основных пика: *G*-пик (пик графита) при смещениях частот $\Delta k = \lambda_L^{-1} - \lambda_{KP}^{-1}$, близких к 1580 см^{-1} , и *D*-пик, обусловленный дефектностью кристаллической структуры при $\Delta k \approx 1350 \text{ см}^{-1}$. Типичный пример приведен на рис.1, см. КР-спектр «До облучения».

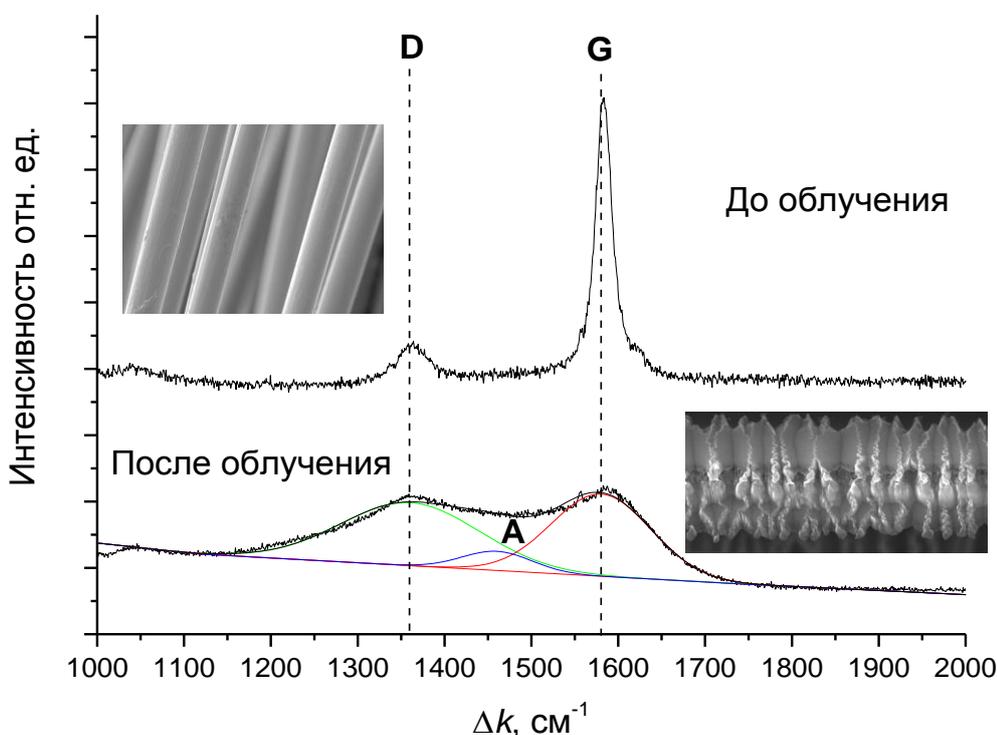


Рис.1. РЭМ изображения и КР-спектры композита КУП-ВМ до и после облучения ионами Ar^+ с энергией 30 кэВ при температуре $T=400^\circ\text{C}$

Найдено, что аморфизация поверхности волокна (область температур облучения от комнатной до температуры динамического отжига радиационных нарушений $T_a=150\text{--}200^\circ\text{C}$ [1,2]) приводит к качественному изменению КР-спектра – D- и G-пики не разделяются, образуя широкий купол. При рекристаллизации и гофрировании двухпиковая структура спектра сохраняется. Разложение КР-спектров облученных

образцов требует введения кроме G- и D-пииков также аморфного пика (A) при 1500 см^{-1} (см. рис.1), учитывающего радиационные нарушения структуры ближнего порядка при аморфизации углеродных материалов [5]. Провести облучение с уровнем радиационных нарушений, меньшим порогового уровня аморфизации можно как путем уменьшения энергии ионов, так и при увеличении угла их падения, приводящего к росту коэффициента распыления [1,2]. Так, при угле падения 70° аморфизация, в отличие от случая нормального падения ионов Ag^+ с энергией 30 кэВ, не происходит. D- и G-пиики КР-спектров разделяются. На поверхности волокна при этом наблюдается гребневидная морфология, характерная для наклонного падения ионов на поверхность поликристаллических материалов, см., например, [6]. Двухпииковая структура КР-спектра наблюдается также при температуре облучаемых мишеней больше температуры динамического отжига радиационных нарушений $T_a = 150\text{--}200^\circ\text{C}$. При этом структурный анализ поверхности показывает, что при энергии ионов 30 кэВ происходит не только рекристаллизация поверхностного слоя углеродного волокна, но и его гофрирование, см. РЭМ-изображение на рис. 1. При этом вклад аморфной составляющей в КР-спектре является наименьшим. Отметим, что гофрирование увеличивает на порядок величины удельную поверхность облученного волокна и модифицированное волокно, согласно [3], является наиболее подходящим для армирования углерод-углеродных и углерод-керамических жаростойких композиционных материалов.

1. N.N.Andrianova, A.M.Borisov, E.S.Mashkova, E.S.Parilis, Yu.S.Virgiliev, Horizons in World Physics, Nova Science Publishers. 280 (2013) 171.
2. Н.Н.Андрианова, А.М.Борисов, Ю.С.Виргильев, Е.С.Машкова, Д.В.Петров. Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исследования.6 (2014) 6.
3. Патент РФ № 2560362 Н.М. Черненко, Д.Н. Черненко, Н.Ю. Бейлина, П.Г. Елизаров, А.М. Борисов, Е.С. Машкова, Н.Н. Андрианова. Углеродное высокомодульное волокно с модифицированной поверхностью для армирования композитов и способ ее модификации. Оpubл. 20.08.2015. Бюл. № 23.
4. E.S.Mashkova, V.A.Molchanov, Medium-Energy Ion Reflection from Solids. Amsterdam: North-Holland, 1985.
5. K.Niwase, International Journal of Spectroscopy. 2012 (2012) 197609.
6. Н.Н.Андрианова, А.М.Борисов, Е.С.Машкова, А.С.Немов. Прикладная физика,4 (2006) 89.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ИОННО-КЛАСТЕРНОЙ ОБРАБОТКИ НА СОСТОЯНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ОПТИЧЕСКОЙ СТЕКЛОКЕРАМИКИ МЕТОДОМ ФЛИККЕР-ШУМОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

ANALYSIS OF INFLUENCE OF CLUSTER-ION PROCESSING ON OPTICAL GLASS CERAMICS SURFACE CONDITION BY METHOD OF FLICKER-NOISE SPECTROSCOPY

А.Д. Бакун, А.С. Гусев, Н.И. Каргин, И.А. Матющенко, С.Ф. Тимашев
A.D. Bakun, A.S. Gusev, N.I. Kargin, I.A. Matiushchenko, S.F. Timashev

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Институт функциональной ядерной электроники,
115409, Каширское ш., 31, г. Москва, Россия, e-mail: matushenko.ilya@gmail.com*

A method of parameterization of supersmooth surfaces used in micro- and nanoelectronics as substrates and light-reflecting elements is proposed. The method is based on the flicker-noise spectroscopy (FNS) as the general phenomenological approach to extracting information from the chaotic temporal or spatial signals. The glass-ceramic samples were processed by cluster-ion beams and their topology was investigated by atomic force microscopy before and after treatment. It is established that gas cluster ion beams processing of glass ceramics leads to angstrom-level surface roughness.

В работе предложен метод параметризации особенностей нанорельефа сверхгладких поверхностей, используемых в микро- и нанoeлектронике в качестве материалов-подложек, а также в качестве светоотражательных элементов технических устройств. Метод основан на использовании фликкер-шумовой спектроскопии как общего феноменологического подхода к извлечению информации из хаотических временных или пространственных сигналов. Согласно ФШС, информация о текстуре поверхности содержится в корреляционных связях составляющих исследуемых сигналов в разных диапазонах пространственных частот – низкочастотных (резонансных) и высокочастотных, представляемых последовательностью нерегулярностей разных типов (всплески, скачки, разрывы производных) на всех уровнях пространственной иерархии структуры исследуемых систем. Состояние поверхности в методе ФШС описывалась двумя основными параметрами:

1. Параметр σ , нм, являющийся *мерой нерегулярностей-скачков* исследуемого профиля и характеризующий среднеквадратичное отклонение высот профиля от базового профиля, формируемого совокупностью низкочастотных резонансных составляющих хаотических зависимостей $h(x)$; этот параметр определяется как *фактор «ступенчатости» хаотической составляющей высот профиля*.

2. Параметр $S_c(L_0^{-1})$, $(\text{нм})^2\text{мкм}$, являющийся мерой «высокочастотных» нерегулярностей исследуемого профиля, наиболее резко изменяющихся на масштабах 1

– 100 нм особенностей рельефа; этот параметр определяется как *фактор «острийности» структуры поверхности*.

Возможности ФШС подхода в определении параметров «сверхгладких» поверхностей продемонстрированы при АСМ исследовании образцов из литиевого алюмосиликатного ситалла (СО-115М), которые предназначены для изготовления элементов прецизионной отражающей оптики. При этом следует отметить, что исследуемые подложки были предварительно подвергнуты механо-химической обработке, на финишной стадии которой использован абразив с размерами зерен $0.1 \div 0.4 \text{ мкм}$. Полированная поверхность такой стеклокерамики включает дефекты разного происхождения, характеризующиеся различными пространственными масштабами:

- следы механо-химического воздействия в виде анизотропных линейно структурированных дефектов, оставшиеся после абразивного полирования;
- уединенные выступы (впадины) при локальных нарушениях однородности;
- остаточный хаотический рельеф;
- «наночастицы», соответствующие выходу на поверхность кристаллитов β -эвкриптита $\text{LiO}_2 \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$.

Для удаления (сглаживания) перечисленных дефектов поверхности в работе применялся метод ионно-кластерной обработки. Использование пучков ускоренных кластерных ионов в качестве дополнения или замещения стандартной технологии химико-механической планаризации позволяет избавиться от основного ее недостатка – формирования остаточного рельефа с размахом высот порядка 1 нм. К достоинствам метода также следует отнести меньшую трудоемкость и хорошую совместимость с планарной технологией изготовления полупроводниковых приборов и интегральных микросхем.

Обработка экспериментальных образцов осуществлялась с помощью установки «nAccel 100» (*Exogenesis*), в которой газовые кластеры образуются при адиабатическом расширении рабочего газа (аргона) в вакуум через сверхзвуковое сопло с диаметром критического сечения 50 мкм. Сформированные кластеры ионизировались электронным ударом и ускорялись разностью потенциалов 10 – 30 кВ. Затем пучок ускоренных кластерных ионов попадал в камеру образца, где происходило его взаимодействие с обрабатываемой поверхностью. Плотность тока в центре пучка при

ускоряющем напряжении 30 кВ составляла 2 мкА/см^2 , профиль распределения тока гауссов с полушириной около 12 мм. В ходе экспериментов давление остаточных газов в камере образца не превышало $4 \times 10^{-2} \text{ Па}$. Сепарация ионизированных частиц по массам не осуществлялась. Типичная схема установки для получения газовых кластерных ионов приведена на рисунке 1.

Отличительной особенностью применяемого ускорителя является возможность обработки поверхности пучком ускоренных нейтральных атомов. Для этого перед камерой образца располагается электростатический конденсатор, отклоняющий заряженные частицы, содержащиеся в пучке. На мишень попадает только пучок ускоренных нейтральных атомов, образовавшийся при частичном разрушении кластерных ионов в результате столкновений с молекулами остаточных газов. В этом случае отсутствие корреляции между ударами отдельных атомов исключает возбуждение ударных волн и образование «кратеров» на поверхности. Обработка стеклокерамики пучком ускоренных атомов привела в поставленных экспериментах к наилучшим результатам.

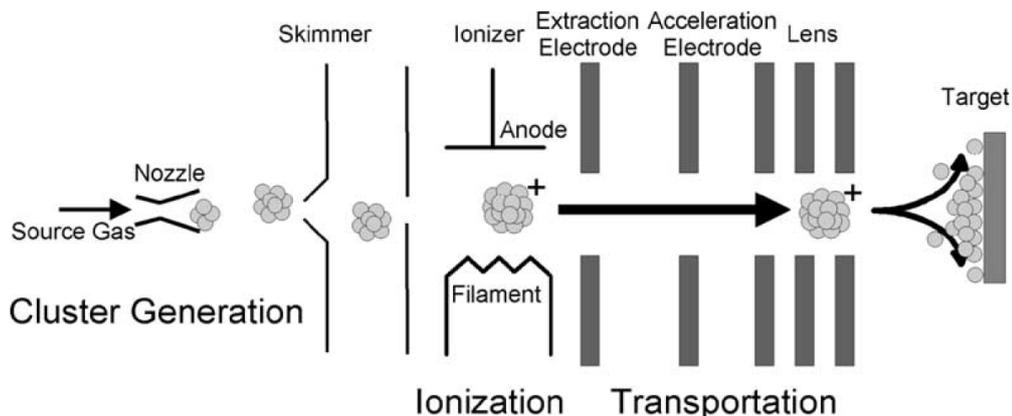


Рисунок 1 – Схема получения газовых кластерных ионов

В ходе выполнения исследования было установлено, что ионно-кластерная обработка при выбранных режимах воздействия, приводит, во-первых, к сглаживанию дефектов поверхности экспериментальных образцов, мерой которого может служить изменение ФШС параметров σ и $Sc(L_0^{-1})$, и, во-вторых, к «планаризации» поверхности, мерой которой являются величины среднеквадратичных отклонений указанных ФШС параметров.

Работа выполнена в рамках базовой части госзадания Министерства образования и науки РФ на 2017-2019 г., проект №16.7771.2017/БЧ.

**УГЛОВАЯ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТИ СЕЛЕКТИВНОСТИ
РАСПЫЛЕНИЯ КРЕМНИЯ И ДИОКСИДА КРЕМНИЯ ИОНАМИ АЗОТА**

**THE ANGLE AND ENERGY DEPENDENCIES OF SPUTTERING SELECTIVITY
OF SILICON AND SILICON DIOXIDE BY NITROGEN IONS**

В.И. Бачурин*, И.В. Журавлев, Д.С. Кибалов, В.К. Смирнов

V.I. Bachurin*, I.V. Guravlev, D.S. Kibalov, V.K. Smirnov

WOSTEC, Москва, Россия

**ЯФ ФТИАН, 150007, ул. Университетская, д. 21, Ярославль, Россия E-mail:*

vibachurin@mail.ru

The sputtering rates of Si and SiO₂ films by N₂⁺ ion beams with energy 0.5 and- 5 keV at 5° - 70° angles of incidence have been studied. It was found that the sputtering rate of SiO₂ by N₂⁺ ions about 2.2 times more than for Si at normal incidence of primaries for all used ion energies. This value decreases up to 1.3 at 70° angle of incidence. The obtained results are discussed in the frames of physical and chemical mechanisms of sputtering Si and SiO₂ by chemically active nitrogen ions.

Ионное распыление поверхности твердых тел широко применяется в технологиях производства интегральных микросхем (СБИС), микроэлектромеханических систем (МЭМС) и др. Одной из основных задач такого распыления является селективное травление пленок металлов, диэлектриков, полупроводников (селективность есть отношение скоростей распыления компонентов распыляемой системы). Чаще всего для этих целей используются современные реакторы плотной плазмы. При плазмохимическом травлении материалов в качестве плазмообразующих выбираются фтор- или хлорсодержащие газы (CF_x, CCl_x, SF₅ и т.п.) с добавками водорода, кислорода и др. Взаимодействие активных атомов (F, Cl) с атомами образцов приводит к образованию летучих химических соединений (фторидов, хлоридов) на поверхности, которые легко ее покидают. Этот процесс может значительно превосходить физическое распыление, основанное на каскадном механизме П. Зигмунда [1]. Однако, использование вышеупомянутых плазмообразующих газов не всегда возможно в технологических процессах из-за загрязнения поверхности образцов и реактора фтором, хлором, серой и др.

Целью данной работы явилось изучение возможности использования селективного травления структур, содержащих диоксид кремния и кремний ионами азота. Предпосылкой исследования явились результаты [2], где было установлено, что

коэффициент распыления SiO_2 пучком ионов N_2^+ 9 кэВ в 1.8 раза больше чем для Si при нормальном падении ионов.

Эксперименты по распылению кремния и диоксида проводились на установке РЭОС РНИ – 660. Образцы Si и SiO_2/Si (толщина SiO_2 540 нм) бомбардировались ионами N_2^+ с энергией 0.5 и 5 кэВ под углами 5, 25, 45 и 70° от нормали. Токи первичного пучка составляли 70 и 300 нА, соответственно для выбранных энергий. Пучок разворачивался на поверхности в растр $1 \times 1 \text{ мм}^2$, одновременно покрывая участки и Si, и SiO_2 . После распыления измерялась глубина полученных растров на профилемере Talystep. Для формирования резкой границы области распыления образцы частично накрывались пластинкой поликремния. Время бомбардировки подбиралось таким, чтобы глубина растров составляла 20 -100 нм. В этом случае относительная погрешность измерений не превышала 10%. Было выполнено несколько серий экспериментов. Селективность определялась как отношение глубин растров на поверхности Si и SiO_2 в каждом эксперименте. В процессе ионного облучения поверхность SiO_2 заряжается С целью компенсации этого процесса область растра облучалась пучком электронов. Выбором энергии и тока электронного зонда добивались минимального (меньше 10 эВ) смещения положения оже пика Si, регистрировавшегося с поверхности SiO_2 вследствие зарядки поверхности.

Результаты измерений представлены в таблице.

Отношение скоростей распыления SiO_2/Si				
	Угол падения пучка			
Энергия ионов	5°	25°	45°	70°
0.5 кэВ	2.2	2.2	1.5	1.4
5 кэВ	2.2	2.1	1.6	1.3

Видно, что отношение скоростей распыления не зависит от энергии ионов и оно немного превышает отношение коэффициентов распыления SiO_2 / Si полученное в работе [2], где энергия пучка была 9 кэВ. При углах падения больших 25° наблюдается довольно резкое уменьшение селективности распыления в 1.5 раза при 70°.

Из литературных данных известно [1], что коэффициент распыления кремния ионами инертных газов немного превышает коэффициент распыления диоксида кремния. Энергия связи атомов на поверхности Si почти в два раза меньше, чем для SiO_2 , В то же время при бомбардировке SiO_2 в приповерхностном слое протекают

химические реакции, приводящие к образованию слабосвязанных газовых молекул SiO [3]. Это приводит к увеличению коэффициента распыления диоксида кремния инертными ионами до значений близких к коэффициенту распыления кремния. В случае бомбардировки SiO₂ ионами N₂⁺ в результате химических реакций происходит образование газовых молекул SiO и NO, что повышает почти в три раза коэффициент распыления диоксида кремния по сравнению распылением его инертными ионами с массой азота [3].

Бомбардировка кремния ионами химически активных газов приводит к формированию в приповерхностном слое соединений кремния: SiO₂ при облучении ионами O₂⁺ [4] и Si₃N₄ ионами N₂⁺ [5]. Состав поверхности зависит от угла падения ионов. Стехиометрический оксид и нитрид кремния образуются при углах падения $\theta < 30^\circ$. При увеличении θ приповерхностный слой состоит из кремния и соединения, доля которого уменьшается практически до 0 при $\theta = 70^\circ$ [4,6]. Химический состав определяет среднее значение энергии связи атомов на поверхности, которое уменьшается в два раза при изменении угла падения от 0 до 70°. Это находит отражение в угловых зависимостях коэффициента распыления $Y(\theta)$. Происходит десятикратное увеличение коэффициента распыления при росте θ от 0 до 70° [4,6].

Химические процессы, протекающие в приповерхностном слое, приводят к увеличению скорости распыления ионами N₂⁺ диоксида кремния и уменьшению скорости распыления кремния. Или селективному распылению системы SiO₂ – Si. Независимость селективности от энергии ионов связана, по-видимому, с тем, что энергия определяет лишь толщину модифицированного слоя и не влияет на соотношении вкладов каскадного и химического механизмов распыления. Значение отношения скоростей распыления 2.2 при нормальном падении было получено и при распылении SiO₂ и Si ионами азотной плазмы с энергией 50-300 эВ (см. материалы данной конференции). При увеличении угла падения происходит значительный рост коэффициента распыления кремния, что является причиной наблюдаемого уменьшения селективности распыления системы SiO₂ – Si.

[1] Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Вып. 1, Ред. Бериш Р.М., М.: Мир, 1984.

[2] В.И. Бачурин, С.А. Кривелевич, Е.В. Потапов, А.Б. Чурилов, Поверхность №3 (2007) 19.

[3] Walkup R.E., Avouris Ph, Dreyfus R.W., Jasinski M., Appl. Phys. Lett. 45 (1984) 372.

[4] K. Wittmaack, SIA 29 (2000) 721.

[5] Бачурин В.И., Лепшин П.А., Смирнов В.К., Чурилов А.Б., Известия РАН сер физ. 62 (1998) 703.

[6] Bachurin V.I., Ltpshin P.A., Smirnov V.K. Vacuum 56 (2000) 241.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ
НАНОКЛАСТЕРНЫХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛОВ Ta И Mo,
СФОРМИРОВАННЫХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МАГНЕТРОННОГО
РАСПЫЛЕНИЯ**

**STUDY OF ELECTRON PROPERTIES EVOLUTION OF Ta AND Mo NANOCUSTER
THIN FILMS FORMED WITH MAGNETRON SPUTTERING**

О.С. Васильев*, П.В. Борисюк*, Т.И. Козлова*, Ю.Ю. Лебединский*#

O.S. Vasilyev*, P.V. Borisyuk*, T.I. Kozlova*, Yu.Yu. Lebedinskii *#

* *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва,*

osvasilyev@mephi.ru

Московский инженерно-физический институт, МО, Долгопрудный

The results of the study of electron properties evolution of monodisperse thin films consisted of Ta and Mo metal nanoclusters deposited onto the SiO₂/Si(001) surface with magnetron sputtering method are presented. The changes in chemical composition and electron structure of the samples were controlled by means of X-ray photoelectron spectroscopy in the UHV analysis chamber of the Multiprobe MXPS RM VT AFM-25 surface analysis system. Susceptibility to oxidation after exposure to atmosphere was studied.

Исследования свойств наноструктурных материалов вызывают в настоящее время повышенный интерес в частности, ввиду развития нанoeлектроники, микро- и нанoeлектромеханических систем [1]. Однако, формирование макроскопических наноструктурированных материалов с заданными свойствами затруднительно в связи со сложностью контроля параметров процесса осаждения. Одними из подобных материалов являются тонкие нанокластерные пленки, состоящие из нанокластеров металлов одинакового размера. Подобные пленки представляются перспективным материалом для создания высокоэффективных катализаторов, полупроводниковых устройств, а также, термоэлектрических материалов нового поколения [2]. Это обусловлено тем, что с уменьшением размера металлических кластеров, ожидается значительное увеличение величины термо-ЭДС таких пленок [3], поскольку последняя зависит от плотности электронных состояний на уровне Ферми. При этом, электропроводность таких пленок будет близка к металлической за счет туннелирования носителей заряда между нанокластерами и перколяционных эффектов, а теплопроводность будет понижена за счет пористости подобной пленки, вследствие рассеяния на границах наночастиц [4]. Таким образом, термоэлектрическая эффективность такого материала, пропорциональная

электропроводности материала, квадрату величины его термо-ЭДС и обратно пропорциональная теплопроводности, может менять свое значение для пористых пленок, состоящих из нанокластеров различных размеров [2].

В данной работе представлены результаты исследования эволюции электронных свойств тонких моодисперсных нанокластерных пленок тантала и молибдена на поверхности диоксида кремния SiO_2/Si (001). Формирование пленок осуществлялось с помощью магнетронного источника осаждения NanoGen-50 (Mantis Deposition, UK) в камере препарирования сверхвысоковакуумной системы Multiprobe MXPS RM VT AFM-25 (Omicron NanoTechnology GmbH, Germany). В процессе нуклеации нанокластеры в данном источнике приобретают единичный заряд, что позволяет осуществить фильтрацию по размерам с помощью квадрупольного масс-спектрометра MesoQ (Mantis Deposition, UK) и обеспечить формирование моодисперсных нанокластерных пленок. Для обеспечения лучшей адгезии и получения пористых пленок, состоящих из отдельных нанокластеров, на подложку подавалось положительное напряжение 800 В.

Контроль химического состава поверхности и исследование электронных свойств нанокластерных пленок осуществлялось *in situ* с помощью РФЭС (источник излучения MgK_{α} , 1253.6 eV). Анализ РФЭС-спектров показал, что все образцы непосредственно после процесса осаждения находятся в металлическом состоянии (Ta или Mo), с малым содержанием кислорода и углерода (<10%). В связи с отсутствием на полученных *in situ* спектрах пиков, соответствующих оксидным состояниям, можно сделать вывод, что кислород адсорбирован в приповерхностные слои пленок без образования химической связи с атомами нанокластеров. Показано, что с уменьшением характерных размеров нанокластеров, составляющих пленки происходит сдвиг энергии связи основных уровней (Ta4*f* и Mo3*d*) в сторону больших значений, что может быть связано с размерным эффектом [5]. Действительно, рассмотрим электрон, находящийся на основном уровне атома в нанокластере. Энергия начального состояния электрона (до процесса фотоионизации) по абсолютной величине совпадает с орбитальной энергией электрона на данной атомной оболочке. Фотоионизация приводит к образованию в атоме нескомпенсированного положительного заряда (дырки), действующего как возмущающий потенциал на оставшиеся электроны твердого тела. В результате релаксации электронной подсистемы (экранировки основной дырки) выделяется энергия – энергия релаксации. Поскольку время внутриатомной релаксации сравнимо со временем покидания фотоэлектроном атома, то выделившаяся энергия приобретает фотоэлектрон, приводя к увеличению его кинетической энергии и, следовательно, к уменьшению измеряемой РФЭС энергии связи. В нанокластере с уменьшением его размера происходит ослабление

экранировки остовой дырки оставшимися электронами за счёт сужения валентной зоны по отношению к объемному металлу, что приводит к тому, что абсолютная экранировка убывает, а её разница с объёмной экранировкой увеличивается и энергия остова уровня, регистрируемая методом РФЭС сдвигается в сторону больших значений.

Анализ *ex situ* РФЭС-спектров образцов нанокластерных пленок после выноса на атмосферу показал, что данные пленки окисляются, образуя при этом оксидную фазу Ta_2O_5 (или Mo_2O_5) с примесью металлической Ta (или Mo). При этом, аналогично образцам, не подвергшимся окислению, положения пиков $Ta4f$ (и $Mo3d$), соответствующих металлической фазе также обнаруживают размерный сдвиг энергии связи для всех образцов нанокластерных пленок. Также анализ РФЭС-спектров окисленных образцов нанокластерных пленок показал наличие характерных оксидных и металлических форм спектров валентной зоны для всех материалов Ta, Mo что может свидетельствовать о сохранении проводящих свойств нанокластерных пленок этих металлов независимо от размеров нанокластеров их составляющих. Форма спектра валентной зоны позволяет также сделать вывод, что с уменьшением размера нанокластеров уменьшается степень окисления полученных пленок.

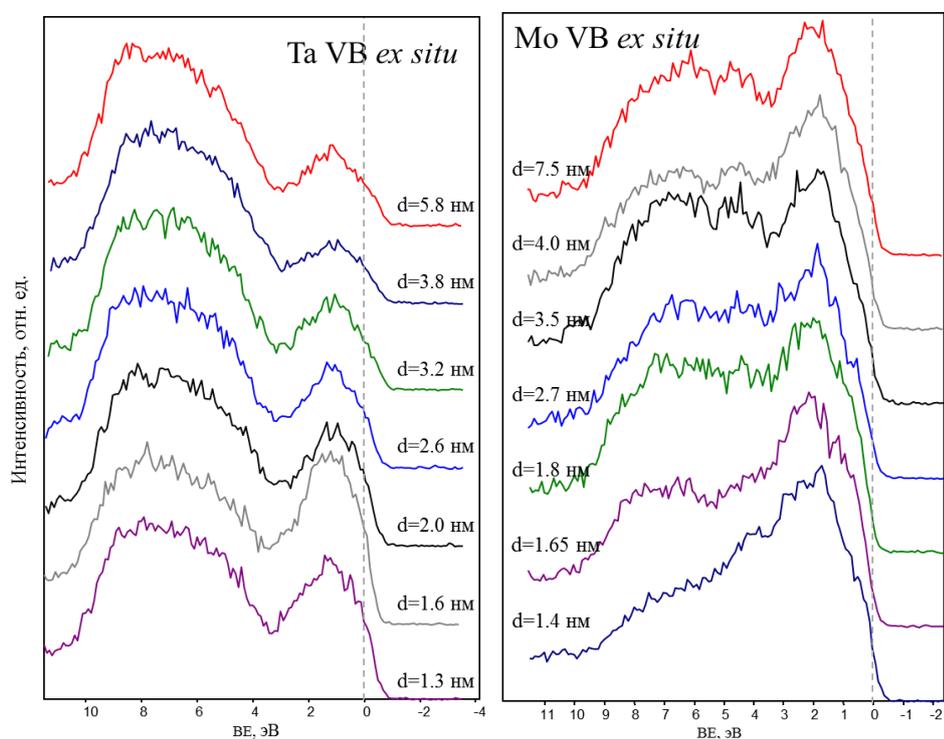


Рис. 1. РФЭС-спектры валентной зоны нанокластерных пленок тантала (слева) и молибдена (справа) после выноса на атмосферу для различных размеров нанокластеров, составляющих пленку.

Это может свидетельствовать о меньшей каталитической активности пленок Та и Мо, состоящих из кластеров размером менее 2 нм и может быть важно для их дальнейшего использования.

Для того чтобы определить глубину окисления полученных пленок, был дополнительно проведен РФЭС анализ с угловым разрешением. Полученные результаты позволили сделать вывод, что полученные нанокластерные пленки Та и Мо после выноса на атмосферу испытывают только поверхностное окисление, оставаясь в глубине (более 1-2 нм от поверхности) – состоящими только из металлической фазы. Имея в виду, что при использовании данных пленок как термоэлектрических материалов будет происходить их нагрев, была исследована термическая устойчивость полученных образцов, путем нагрева в вакууме до 600 °С с последующим анализом изменений химического состава методом РФЭС. Различия в спектрах, полученных до и после нагрева, обнаружено не было. Таким образом, по отсутствию сдвигов энергии связи основных уровней можно сказать, что размер наночастиц не изменяется, и получаемые нанокластерные пленки не теряют своей пористой структуры вследствие нагрева, что является важным для решения задачи создания высокоэффективного термоэлектрического материала.

Таким образом, в данной работе методом магнетронного распыления были сформированы тонкие нанокластерные пленки тантала и молибдена с явно выраженной пористой структурой на поверхностях диэлектрических подложек с различными размерами нанокластеров. Проведен анализ химического состава, изучена подверженность данных нанокластерных пленок окислению при выносе на атмосферу и исследована эволюция их электронных свойств в зависимости от размера нанокластеров. Дальнейшие исследования будут направлены на экспериментальное исследование термоэлектрических свойств подобных пористых пленок.

1. K.Kim, J.Guo, X.Xu, D.Fan, ACS Nano 9 (2015) 548.
2. P.V.Borisyuk, A.V.Krasavin, E.V.Tkalya, Y.Y.Lebedinskii, O.S.Vasiliev, V.P.Yakovlev, T.I.Kozlova, V.V.Fetisov, Chem. Phys. 478 (2016) 2.
3. P.V.Borisyuk, A.V.Krasavin, V.I.Troyan, Y.Y.Lebedinskii, O.S.Vasiliev, Appl. Surf. Sci. 336 (2015) 359.
4. K.Kirievsky, M.Shlimovich, D.Fuks, Y.Gelbstein, Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 20023.
5. В. Д. Борман, П. В. Борисюк, В. В. Лебидько, М. А. Пушкин, В. Н. Тронин, В. И. Троян, Д. А. Антонов, Д. О. Филатов, ЖЭТФ 129 (2006) 343.

РАСПЫЛЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ПУЧКОВ ИОНОВ ГЕЛИЯ И АРГОНА СО СРЕДНЕЙ ЭНЕРГИЕЙ 10 КЭВ
SPUTTERING OF SINGLE CRYSTALS OF SILICON IRRADIATED BY ION BEAMS OF HELIUM AND ARGON WITH MEAN ENERGY OF 10 KEV

Н.В. Волков, Д.А. Сафонов
N.V. Volkov, D.A. Safonov

НИЯУ «МИФИ», Каширское ш., 31, Москва, Россия

In this paper the peculiarities of formation of the surface topography caused by the diffusion of single-crystal Si substrate of different orientation with evaporated thin films under the irradiation by Ar^+ and He^+ ion beams with a wide energy spectrum.

Введение. Благодаря своим свойствам кремний находит применение в различных областях науки и техники. В настоящее время разработаны различные физические и химические методы получения тонких слоев кремния, например: молекулярно-лучевая и газовая эпитаксия, магнетронное распыление, вакуумное дуговое испарение, ионно-лучевое распыление, импульсное лазерное и плазмохимическое осаждение покрытий [1–3]. Актуальной задачей современного полупроводникового материаловедения является получение атомно-чистых поверхностей кристаллов – подложек с высоким качеством границы раздела и заданной наноморфологией. Это вызвано высокой чувствительностью электронных свойств материалов к дефектам и неоднородностям структуры, а также перспективой их использования для получения спонтанно упорядоченных наноструктур – равновесных массивов трехмерных островков нанометровых размеров путем предварительного создания мест, предпочтительных для зарождения кластеров. При этом большое значение имеет выбор кристаллографической ориентации, который предопределен особенностями строения решетки полупроводникового материала.

В данной работе рассмотрены особенности формирования топографии поверхности в результате распыления монокристаллической подложки Si различной ориентации с напыленными тонкими пленками под воздействием пучков ионов Ar^+ и He^+ с широким энергетическим спектром.

Методики и результаты экспериментов. В качестве материала подложки использовались пластины монокристалла кремния марки КЭФ 4,5 ориентация (100) и (110), КЭФ 2 – (111), КДБ 20 – (100). На поверхность части образцов методом

термического испарения в вакууме ($p < 1 \times 10^{-4}$ Па) напылялись пленки Al, Cu и Mo толщиной 30–40 нм. Изучение закономерностей распыления систем Al-Si, Cu-Si, Mo-Si связано с особенностями формирования морфологии приповерхностного слоя за счет более эффективного протекания процесса внедрения атомов пленок в материал подложки на значительные глубины [4-8].

Образцы облучались пучком ионов Ar^+ и He^+ на установке ВОКАЛ [9] при следующих режимах: средняя энергия ионов в пучке $\langle E \rangle = 10$ кэВ, ширина энергетического спектра ионов в пучке 1–15 кэВ, ток пучка ионов 7–10 мкА, доза облучения $\Phi = (0,5-20) \times 10^{18}$ ион/см², давление остаточных газов в области образцов при облучении не превышало величины $p < 10^{-6}$ Па. Измерение величин коэффициентов распыления выполнено методами фотометрирования слоя распыленных атомов на стеклянном коллекторе, прошедшем специальную обработку. Точность измерения величин коэффициентов распыления составляла $\pm 15\%$. Массовый состав напыленного слоя определялся методами ВИМС и ОЖЕ-спектрометрией.

Оценка состояния поверхности проведена методами профилометрирования с помощью профилометра-профилографа TR-200 и сканирующего атомно-силового микроскопа (АСМ) Solver-P-47. Определение шероховатости поверхности образцов проведено согласно ГОСТ 2789-73 по следующему выражению:

$$R_a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i|, \quad (1)$$

где n – общее число выступов (впадин) на базовой длине L_0 ; y_i – величина i -го отклонения от средней линии профиля поверхности.

В ряде случаев для получения дополнительной информации о состоянии поверхности образцов материалов после ионного облучения использовались статистические методы, которые позволяют на основе корреляционных оценок провести сравнительную оценку между образцами на протяженных участках поверхностей.

На рис.1 представлены типичные профилограммы поверхности в исходном состоянии и после ионного облучения, измеренные на базе 0,8 мкм. Как видно из рисунка высота выступов образцов в исходном состоянии находится на уровне $\pm 5-10$ нм, а после распыления их величина увеличивается до 20–30 нм.

Типовые изображение поверхности, полученные с использованием АСМ, приведены на рис.2 из которого видно, что на поверхности формируются локальных образования с характерными размерами 3–10 нм. При совместном облучении ионами

Не⁺ и Ar⁺ шероховатость поверхности уменьшается до величин 5–10 нм, размеры кластеров снижаются, а их плотность возрастает почти в два раза.

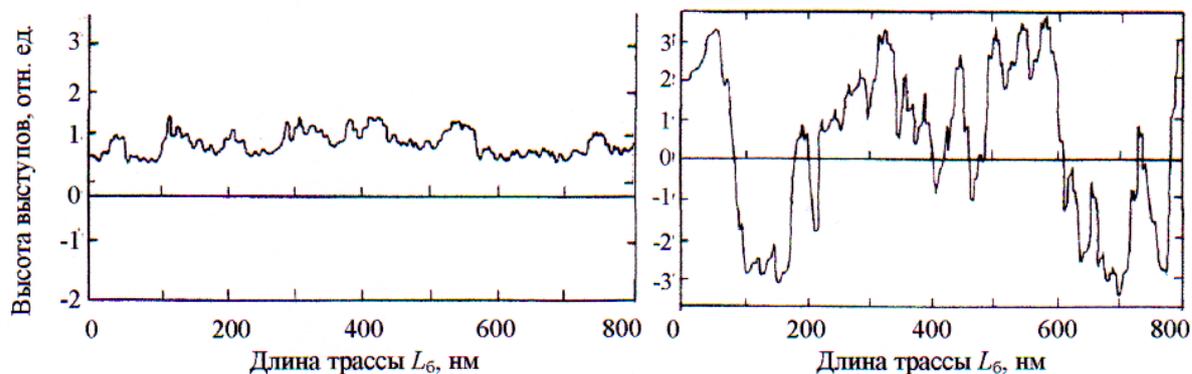


Рис.1. Нормированные профилограммы поверхности Si образца марки КЭФ 4,5 (110): в исходном состоянии (а) и после облучения пучком ионов Ar⁺ с дозой $1,5 \times 10^{18}$ ион/см² (б)

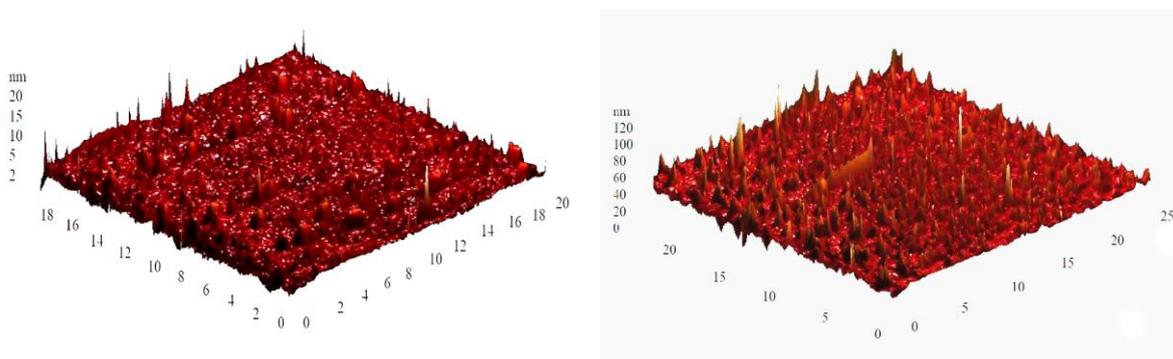


Рис.2. Топография поверхности Si-подложки КЭФ 4,5 (100) после ионного распыления пучком Ar⁺ с дозой облучения $1,2 \times 10^{18}$ ион/см² (а) и системы Mo-Si (б)

На рис.3 представлены профили распределения внедренных атомов аргона в монокристаллическую Si-мишень со средней энергией ионов аргона $\langle E \rangle = 10$ кэВ, с дозами облучения $\Phi = 1 \times 10^{17}$, 5×10^{17} и 1×10^{18} ион/см². Облучение Ar⁺ с $\langle E \rangle = 10$ кэВ при дозе $\Phi = 1 \times 10^{17}$ ион/см² приводит к накоплению атомов аргона у поверхности на уровне $C(x \approx 0) = 1$ отн.ед., сохраняющимся до глубин 14–16 нм, глубина проникновения достигает величин $X_m = 24$ –26 нм. Увеличение дозы облучения до $\Phi = 5 \times 10^{17}$ ион/см² формирует распределение $C(x)$ с выраженным максимумом концентрации на глубине $X_c = 14$ –16 нм при этом величина X_m смещается вглубь до 38–40 нм. При дозе облучения $\Phi = 1 \times 10^{18}$ ион/см² наблюдается смещение максимума концентрации на большие глубины $X_c = 14$ –18 нм ($R_p = 26$ –28 нм). Величина X_m увеличивается с 24 до 38,

48 нм. Общее содержание внедренных атомов аргона растет в соотношении $C_{Ar} = 1:1,5:2,3$ для доз $\Phi = 1 \times 10^{17}$, 5×10^{17} и 1×10^{18} ион/см² соответственно.

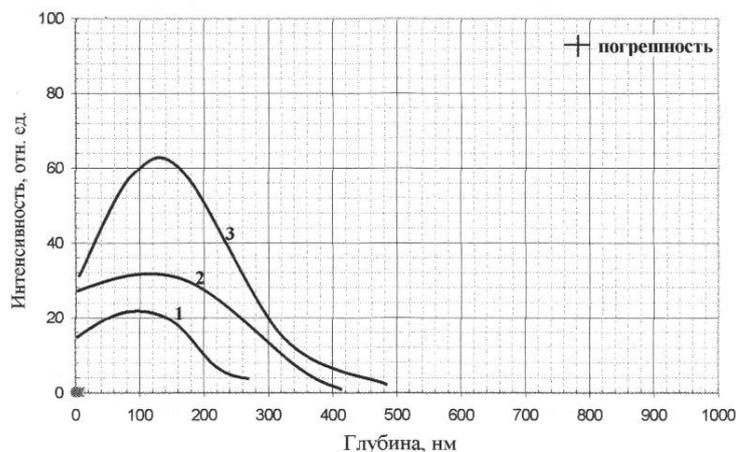


Рис.3 – Распределение внедренных атомов по глубине Si-мишени, облученной с различными дозами Φ пучком Ar^+ со средней энергией $\langle E \rangle = 10$ кэВ: 1 – $\Phi = 1 \times 10^{17}$ ион/см²; 2 – $\Phi = 5 \times 10^{17}$ ион/см²; 3 – $\Phi = 1 \times 10^{18}$ ион/см²

Закключение. Анализ состояния поверхности монокристаллов кремния после воздействия пучками ионов Ar^+ и He^+ с широким энергетическим спектром показал, что толщина модифицированного слоя существенно зависит от дозы облучения. Для оценки глубины внедрения атомов пленок целесообразно использовать приближения, учитывающие процесс распыления и радиационно-стимулированной миграции как внедряемых ионов газов, так и атомов пленок. Наилучшие результаты по однородности состояния поверхности монокристаллов кремния с различной ориентацией удается достичь при одновременном облучении ионами Ar^+ и He^+ в соотношении близком 1:1.

1. Н.Н.Герасименко, Кремний – материал нанoeлектроники, Москва: Техносфера, 2007.
2. В.Я.Шаныгии, ЖТФ. 79 (2009) 73.
3. В.А.Клюева, Молодой ученый. 10 (2016) 236.
4. Ю.Ф.Комник, Физика металлических пленок, размерные и структурные эффекты, Москва: Атомиздат, 1979.
5. А.Н.Диденко, Ю.П.Шаркаев, Поверхность. 3 (1983) 120.
6. Ю.В.Мартыненко, П.Г.Московкин, Поверхность. 4 (1991) 44.
7. P.Sigmund, A.Gras-Marti, Nucl. Instr. Meth. 168 (1980) 389.
8. Н.В.Волков, Б.А.Калин, И.Х.Аталикова, В.Ф.Рыбалко, Г.Д.Толстолуцкая, Известия АН, серия Физическая, 62-7 (1998) 1477.
9. Н.В.Волков, Б.А.Калин, Сб. Материаловедческие вопросы атомной техники, Москва: Энергоатомиздат, 1991.

**КОНТРОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ МИШЕНЕЙ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО
ИССЛЕДОВАНИЮ $d(d,n)^3\text{He}$ – РЕАКЦИИ ПРИ СВЕРХНИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ
СТОЛКНОВЕНИЯ**

**MONITORING THE TARGET SURFACE IN THE EXPERIMENTAL
INVESTIGATION OF THE $d(d,n)^3\text{He}$ REACTION AT ULTRALOW COLLISION
ENERGIES**

Г.Н. Дудкин¹, В.М. Быстрицкий², Б.А. Нечаев¹, В.Н. Падалко¹, Е.Б. Кашкаров¹,
С.И. Кузнецов¹
G.N. Dudkin¹, V.M. Bystritsky², B.A. Nechaev¹, V.N. Padalko¹, E.B. Kashkarov¹,
S.I. Kuznetsov¹

¹*Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет,
просп. Ленина, 30, Томск, Россия*

²*Объединений институт ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри, 6,
г. Дубна, Московская обл., Россия
e-mail: ebk@tpu.ru*

The data on the growth rate of an adsorbed film on a target are obtained using a quartz resonator during the operation of an accelerator with a closed electron drift. The results show that the target is purified at a target temperature of 55°C and a stream of accelerated (12 keV) deuterium particles (about $5 \cdot 10^{12}$ particles/cm²), followed by the implementation of dynamic equilibrium for the sorption and desorption processes. At the same time, the yield of neutrons is increased during the nuclear reaction $d(d,n)^3\text{He}$ due to the purification of the target.

В современных моделях ядерной астрофизики предполагается, что скорости ядерных реакций между легкими ядрами в звездах увеличиваются за счет экранирования зарядов взаимодействующих ядер отрицательно заряженными электронами [1]. Для проверки этого теоретического предположения исследуются реакции термоядерного синтеза с использованием металлических мишеней, насыщенных дейтерием. Это обусловлено наличием в металлах квазисвободных электронов, аналогичных квазисвободным электронам в звездной плазме. Вследствие необходимой методической чистоты эксперимента для исследования эффекта электронного экранирования обычно выбирают реакции $d(d,p)^3\text{H}$ или $d(d,n)^3\text{He}$.

При сравнении результатов работ по изучению механизмов протекания dd-реакции в металлах, насыщенных дейтерием, для некоторых из них наблюдается расхождение, как между собой, так и с результатами вычислений в рамках традиционных моделей атомной физики. В частности, такое утверждение относится к результатам, полученным с мишенями из ZrD_2 и TiD_2 .

Расчеты показывают, что указанные расхождения могут быть связаны с наличием на поверхности мишени паразитного адсорбированного слоя (адслоя). Следовательно, при анализе экспериментальных данных необходимо учитывать влияние

ионизационных потерь энергии дейтронов в адслое до момента их попадания в «чистый» слой дейтерированного металла.

Обычно применяемая очистка поверхности мишени потоком тяжелых ионов не является оптимальной, поскольку эта процедура может привести к радиационной стимуляции реконструкции кристаллической структуры, определяющей стехиометрию мишени. С учетом эффекта дальнего действия, указанные процессы неизбежно приводят к уменьшению содержания дейтерия в поверхностных слоях мишени.

Предполагая, что массовая толщина адслоя над поверхностью идеальной мишени не должна превышать величины 10^{14} – 10^{15} частиц/см² (примерно, 1 монослой), можно задаться целью обеспечить в условиях эксперимента динамическое равновесие сорбции/десорбции на указанном уровне.

Одним из способов оперативного слежения за процессами сорбции/десорбции является метод измерения массовой толщины, осаждаемой/распыляемой пленки с помощью кварцевого генератора, резонансная частота которого изменяется с изменением массы осажденного на кварцевую пластину вещества (чувствительность до $\sim 10^{-2}$ мкг/Гц). В наших экспериментах использовался серийный измеритель толщины напыляемых покрытий «Микрон-5». Разрешающая способность по частоте – 1 Гц.

В данной работе приведены результаты исследований темпа осаждения вещества на поверхности кварцевой пластины (без нагрева) при различных режимах работы установки. Также представлены результаты экспериментов комплексного воздействия температуры и ускоренных ионов дейтерия на состояние поверхности мишеней. В качестве мишеней использовались кварцевый резонатор прибора «Микрон-5» и напыленная на подложку титановая пленка, насыщенная дейтерием (TiD₂).

Измерения при комнатной температуре (без нагрева) проводились в вакуумной камере ускорителя с замкнутым дрейфом электронов [3] для исследования ядерных реакций dd, pd и др. при взаимодействии ускоренных до энергии 6–12 кэВ ионов дейтерия (водорода) с металлической мишенью предварительно насыщенной дейтерием. Пластина кварцевого резонатора располагалась в вакуумной камере в области, где устанавливается мишень. Последовательно, в процессе трех различных режимов работы установки, проводилось измерение частоты кварцевого резонатора с одновременным контролем его температуры. Стартовая резонансная частота была – 5921423 Гц. Начальная температура – 18°C.

На рис. 1, с учетом температурного фактора приведена кривая изменения частоты кварцевого резонатора за время работы ускорителя.

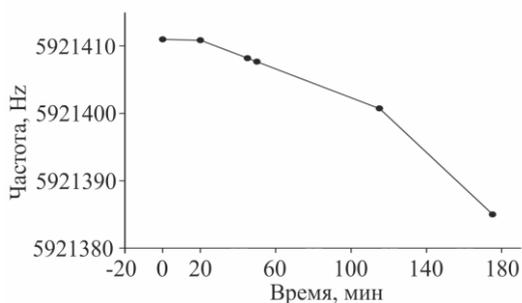


Рис. 1. Зависимость частоты кварцевого генератора от времени работы ускорителя

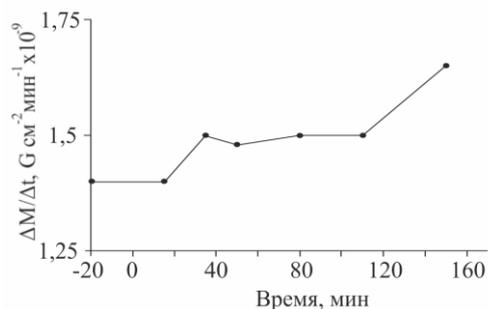


Рис. 2. Изменение темпа осаждения поверхностного слоя

Величина изменения частоты $\Delta f = 30$ Гц определяется увеличением массы кварцевого резонатора за время работы установки. Указанному изменению частоты, соответствует массовая толщина пленки $39 \cdot 10^{-8}$ г/см².

Изменение темпа осаждения пленки при работе ускорителя показано на рис. 2. Указанный здесь темп при $t < 0$ соответствует темпу напыления в режиме без включения ускорителя.

Далее были проведены эксперименты с нагревом резонатора при вакууме порядка 10^{-2} мм рт. ст. Начальная температура резонатора была 16 °С. Начальная частота – 5921280 Гц. На рис. 3 приведено измеренное изменение частоты резонатора в зависимости от температуры. До температуры ≤ 50 °С такая зависимость характерна для серийных кварцевых пластин.

Отклонение от характерной зависимости (повышение резонансной частоты) при температуре свыше 50°С можно связать, например, с процессом десорбции воды.

После открытия ($t = 0$ мин) затвора через 40 мин при вакууме 10^{-6} мм рт. ст. был включен ускоритель. Ускорялись ионы дейтерия. Период срабатывания ускорителя – 30 сек, длительность импульса тока ускоренных частиц – 10 мкс, плотность потока частиц – $5 \cdot 10^{12}$ частиц/см², энергия – 12 кэВ.

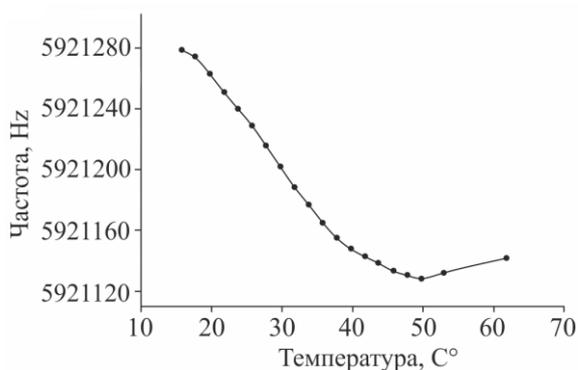


Рис. 3. Зависимость частоты резонатора от температуры

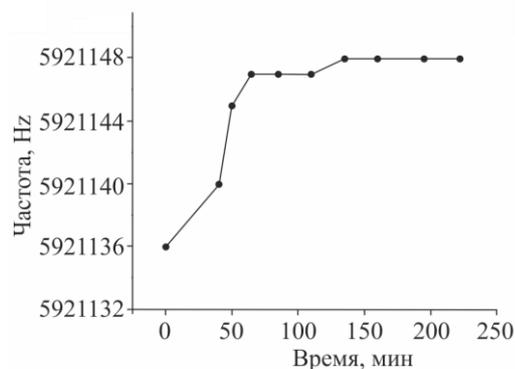


Рис. 4. Зависимость частоты резонатора от времени работы ускорителя

На рис. 4 приведена кривая изменения частоты резонатора в процессе работы ускорителя. Как следует из рисунка, темп десорбции при включении ускорителя ($t = 40$ мин) значительно увеличивается. В процессе десорбции при $t > 70$ мин поверхность мишени очищается от относительно слабо связанных частиц и, затем устанавливается динамическое равновесие процессов сорбции и десорбции.

В случае динамического равновесия минимальное массовое загрязнение поверхности, может быть зафиксировано на уровне $1.3 \cdot 10^{-8}$ г/см². Для углерода этой массе соответствует $\sim 6.5 \cdot 10^{14}$ частиц/см², что подтверждается Оже анализом.

Такая массовая толщина адслоя на поверхности мишени приемлема для экспериментов по исследованию влияния электронной экранировки в металлических (насыщенных дейтерием) мишенях на выход нейтронов при $d(d,n)^3\text{He}$ реакции.

Влияние температурного фактора было проверено в экспериментах с титановой мишенью, насыщенной дейтерием (стехиометрия TiD_2). Эксперименты показали что при нагреве мишени от комнатной температуры до ≤ 100 °С увеличивается выход нейтронов при фиксированной энергии падающих на мишень дейтронов (12 кэВ). При нагреве мишени свыше 200 °С выход нейтронов падает в результате разложения TiD_2 и последующего выхода дейтерия из мишени. Данное предположение согласуются с результатами корректного исследования, проведенного другими авторами, сублимации углеродной пленки и термодесорбции имплантированного дейтерия из титана.

Таким образом, с помощью кварцевого резонатора возможно оперативное тестирование качества вакуумной системы и отдельных устройств установки с целью выявления и устранения факторов влияющих на загрязнения мишени. Полученные результаты по комплексному воздействию на гидрогенизированную углеродную пленку на поверхности мишени, позволили отработать регламент работы с титановой и циркониевой мишенями, насыщенными дейтерием [4, 5].

Работа поддержана Национальным исследовательским Томским политехническим университетом в рамках проекта ВИУ НРиИ_23/2016.

1. H. J. Assenbaum, K. Langanke and C. Rolfs, Z. Phys. A 327 (1989) 461.
2. В.А. Батулин, А.Ю. Карпенко, А.Г. Нагорный, С.А. Пустовойтов, ВАНТ, №1 (2002) 165–168.
3. V.M. Bystritsky, V.V. Gerasimov, A.R. Krylov, et. al., Eur. Phys. J. A 36 (2008) 151–158.
4. V.M. Bystritsky, Vit.M. Bystritskii, G.N. Dudkin, et. al., Nuclear Physics A 889 (2012) 93–104.
5. V. M. Bystritskii, J. Huran, G. N. Dudkin, A. R. Krylov, B. A. Nechaev, V. N. Padalko, F. M. Pen'kov, Yu. Zh. Tuleushev, A. V. Philippov, and M. Filipowicz., Physics of Particles and Nuclei Letters, 13(1), (2016) pp. 79–97.

ИЗУЧЕНИЕ ПСЕВДОЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК ЗОЛОТА И ВИСМУТА НА СЛЮДЯНЫХ ПОДЛОЖКАХ

STUDY OF GOLD AND VISMUTH PSEUDOEPITAXIAL FILMS ON MICACEOUSES SUBSTRATES

В.К. Егоров¹, Е.В. Егоров¹, М.С. Афанасьев²

V.K. Egorov¹, E.V. Egorov¹, M.S. Afanas'ev²

¹ИПТМ РАН, 142432, г. Черноголовка, Россия, E-mail: Egorov@iptm.ru

²ИРЭ РАН, Фрязино, Россия

Au (111)/mica (001) and Bi (001)/mica (001) films heterostructures were studied by ion beam and x-ray methods. The investigations show the orientation accordance between Au [111] crystallographic direction with [001] direction of mica and Bi [001] crystallographic direction with [001] mica, too. At the same time, the real epitaxy correspondence between films and substrates is absent. There is elaborated the principle model for explanation of the pseudo-epitaxy appearing at case of a heterostructures formed on base of materials which are characterized by different structural motivation.

Интерес к исследованию особенностей кристаллического строения пленочных покрытий различных материалов на слюдяных подложках, а также их взаимного структурного сочетания связано с неоднократными упоминаниями в геологической литературе о наблюдении наличия ориентационного кристаллографического соответствия между кристаллами мусковита и соседствующими минералами [1]. Такое соответствие было названо эпитаксией, хотя в настоящее время под истинно эпитаксиальной структурой понимается такое сопряжение кристаллических решеток, при которой контактирующие материалы взаимно сорентированы по всем трем кристаллографическим направлениям [2,3]. Принято считать, что для материалов с идентичными структурными мотивами истинная эпитаксия может быть достигнута при различии в величинах параметров элементарных ячеек, не превышающим 15%. Классическим примером подобных структур являются эпитаксиальные пленки кремний-германиевых твердых растворов на кремниевой подложке. Например, наблюдается высокая степень эпитаксии в структуре $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$, в которой бинарное соединение и подложка характеризуются однотипной кубической структурой и

различием в параметрах ячейки менее 1% ($a_{\text{Si}}=0.543$ нм, $a_{\text{Si-Ge}}=0.547$ нм). На рисунке 1а представлен фрагмент дифрактограммы этой структуры в области рефлекса (400), на котором наблюдаются два пика, соответствующие рассеянию на атомах бинарной

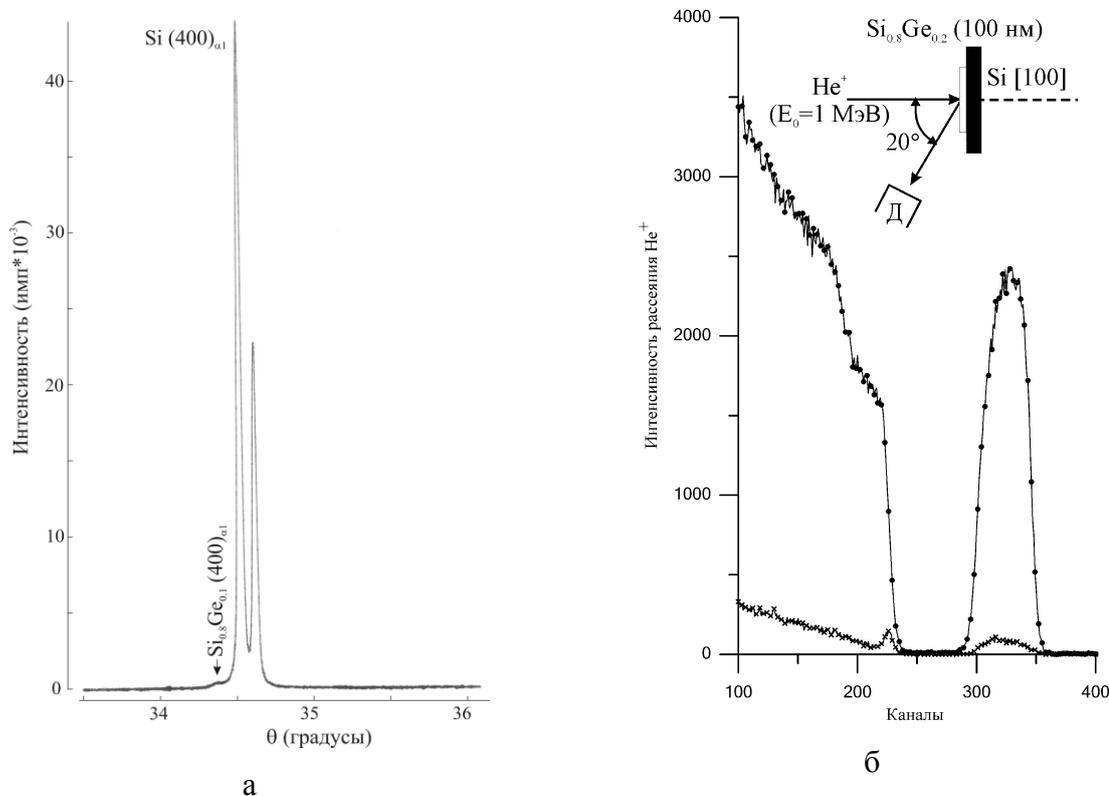


Рисунок 1. Фрагмент дифрактограммы эпитаксиальной гетероструктуры $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$ [100] в области рефлекса (400) (а) и спектры РОР осевого каналирования и случайной ориентации этого объекта для ионного пучка He^+ ($E_0=1$ МэВ).

пленки толщиной около 100 нм и атомах подложки. Как правило, подобные экспериментальные данные представляются исчерпывающим доказательством наличия эпитаксии в гетероструктурах. Для более сложных случаев делается утверждение, что для констатации эпитаксиальности в гетероструктурах и монокристалличности изучаемого материала необходимо и достаточно фиксации наличия на дифрактограммах рефлексов общего положения [4]. В то же время действительно однозначным способом установления монокристалличности в изучаемом материале и реальной эпитаксии в гетероструктурах является фиксация каналирования ионов в этих объектах [5]. На рисунке 1б представлен спектр резерфордского обратного рассеяния потока ионов He^+ для структуры $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$, полученный в условиях осевого каналирования этого потока. Там же показан спектр РОР для данной структуры, зарегистрированный в условиях ее случайной ориентации относительно направления

распространения ионного потока [6]. Спектр POP, полученный в условиях осевого каналирования ионов, характеризуется резким снижением интенсивности рассеяния на ядрах атомов Si и Ge, причем пропорциональность этого снижения оказывается одинаковой для рассеяния на ядрах атомов, принадлежащих как пленке, так и подложке. Такая ситуация реализуема только при действительной соосности всех трех кристаллографических направлений в пленке и подложке. Для данного объекта и подобных гетероструктур применение метода каналирования ионов для доказательства наличия эпитаксиального соответствия кристаллографических структур пленки и подложки, возможно, может представляться избыточным, однако только этот метод может, и должен рассматриваться в качестве абсолютного доказательства наличия монокристалличности или реальной эпитаксии в гетероструктурных образованиях. Примерами абсолютной необходимости применения такого метода для правильной характеристики наличия или отсутствия эпитаксии в гетероструктурах являются покрытия золота и висмута на слюде. На рисунке 2 представлен фрагмент дифрактограммы пленочной структуры Au/слюда, полученной в условиях вывода в отражающее положение базовых плоскостей слюдяной структуры. На дифрактограмме наблюдается ряд интенсивных рефлексов типа (00l) и интенсивные пики типа (111),

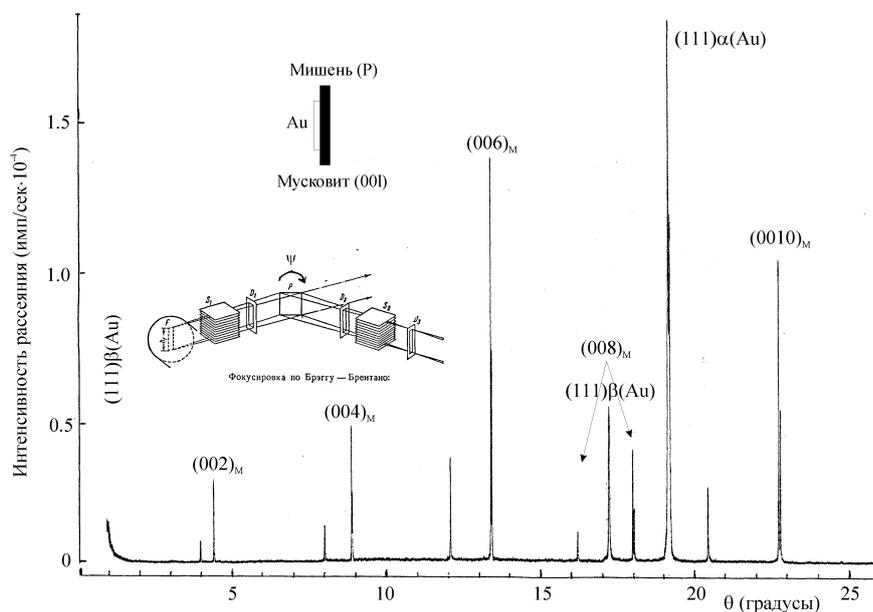


Рисунок 2. Фрагмент дифрактограммы пленочной гетероструктуры Au/мусковит, полученной в условиях фокусирующей геометрии с использованием источника излучения БСВ-28 (Cu), $U=20$ кэВ, $I=6$ мА при минимальных размерах щелей $D1=0.1$ мм, $D3=0.025$ мм.

представляющие рассеяние на атомах золота излучения $CuK\alpha$ и $CuK\beta$. Важной особенностью дифрактометрических исследований этой гетероструктуры,

выполненной в угловом интервале $0 \leq 2\theta \leq 170^\circ$, явилось отсутствие рефлексов других типов, характерных для структур пленки и подложки. Более того, фоновая составляющая дифрактограммы не продемонстрировала наличия характерных гало, сопровождающих наличие аморфной фазы в золотом покрытии. При этом угловая ширина рефлекса мусковита (0010) лишь вдвое превышала аппаратное значение и составляла 0.02° , в то время как для рефлекса золота (111) она оказалась равной 0.04° . Аналогичные экспериментальные данные были получены и для гетероструктуры Вi/слюда с той лишь разницей, что на дифрактограмме помимо линий (001) подложки присутствовали рефлексы (003), (006) и (009) висмута при отсутствии рефлексов других типов. Регистрация подобных дифрактограмм дает основания предполагать наличие эпитаксии в исследуемых гетероструктурах, или, как минимум, демонстрации в пленках золота и висмута высококачественной текстуры, ориентированной, соответственно осью [111] и осью [001], вдоль кристаллографического направления подложки [001]. Более детальные дифрактометрические исследования показали, что предположение наличия высококачественной текстуры в данных пленочных покрытиях является более обоснованным, что и было подтверждено ионно-пучковыми исследованиями этих объектов. На рисунке 3 показаны экспериментальный и теоретический спектры POP ионов водорода ($E_0=1.23$ МэВ), полученные для гетероструктуры Au/мусковит. Эти данные представляют собой одну пару экспериментального и теоретического спектров POP из серии измерений в интервале углов $\pm 10^\circ$. Проведенные исследования не выявили условий каналирования ионов в гетероструктурах Au/слюда и Вi/слюда.

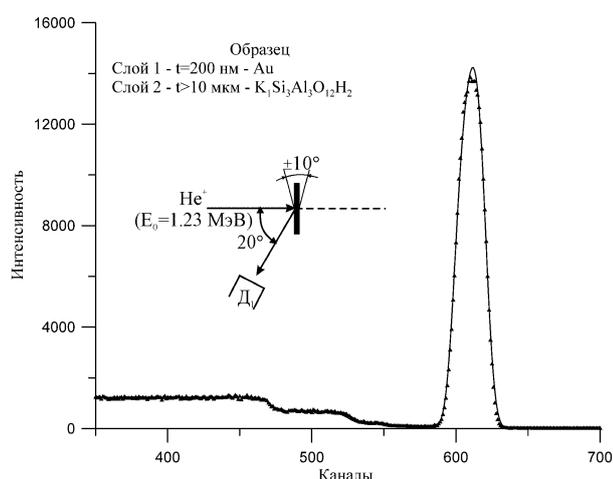


Рисунок 3. Экспериментальный и теоретический спектры POP потока ионов He^+ ($E_0=1.23$ МэВ) для мишени Au (200 нм)/ $K_1Si_3Al_7O_{12}H_2$. Теоретический спектр рассчитан без учета наличия в структуре атомов водорода. Геометрия измерений представлена на врезке. Энергетическая цена канала 1.9 кэВ/канал.

Таким образом, выполненные исследования позволяют сделать вывод об отсутствии реальной эпитаксии в исследованных гетероструктурах, а так же об отсутствии монокристалличности в металлических пленках. Однако можно уверенно утверждать, что термическое напыление золота и висмута на чистую ориентированную слюдяную подложку позволяет получать пленочные покрытия с чрезвычайно высокой степенью текстурированности. В докладе представлена модель, описывающая гетероструктуры подобного характера.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты №15-08-02618, 16-07-00665).

- [1] А. Верма, П. Кришна. Полиморфизм и политипизм в кристаллах. М.: Мир. 1969. 274 стр.
- [2] Л.С. Палатник, И.И. Папилов. Эпитаксиальные пленки. М.: ГРФМЛ. 1971. 480 стр.
- [3] М.А. Herman, Н. Sitter. Molecular beam epitaxy, fundamentals and current status. Berlin: Springer-Verlag. 1989. 382 p.
- [4] V.A. Schukin, N.N. Ledentsov, D. Bemberg. Epitaxy of nanostructures. Berlin: Springer. 2003. 485 p.
- [5] L.C. Feldman, J.W. Mayer, S.T. Picraux. Material analysis by ion channeling. New York: Academic Press. 1982. 300 p.
- [6] A.F. Vyatkin, V.K. Egorov, A.P. Zuev. A study of elastic strain relaxation on the interface of the epitaxial structure $\text{Ge}_{0.2}\text{Si}_{0.8}/\text{Si}$ by helium ion channeling // Surface Investigation. v16. 2001. P. 861-873.

**СОЗДАНИЕ ОПТИЧЕСКИ ГЛАДКОЙ ПОВЕРХНОСТИ НА СКОЛЕ
ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ГАЗОВЫМИ КЛАСТЕРНЫМИ
ИОНАМИ**

**FABRICATION OF OPTICALLY SMOOTH SURFACE ON THE CLEAVAGE OF
POROUS SILICON BY GAS CLUSTER ION IRRADIATION**

А.Е. Иешкин¹, С.Е. Свяховский¹, В.С. Черныш¹
A.E. Ieshkin¹, S.E. Svyakhovskiy¹, V.S. Chernysh¹

¹*Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия,
e-mail: ieshkin@physics.msu.ru;*

Electrochemical etching of Si is a promising method of fabricating photonic structures with hundreds of layers. Nevertheless, the cleavages of the structures are rough and thus heavily dissipate incident light. In this study, effects of gas cluster ion beam irradiation of the cleavage surfaces are investigated. The bombardment results in surface smoothing and consequent enhancement of light reflection without significant difference in sputtering rate of layers with different porosity.

Распространение света в периодических структурах привлекает пристальный интерес исследователей. В частности, в последние десятилетия активно изучаются оптические эффекты, связанные с использованием фотонных кристаллов, причем для наблюдения некоторых теоретически предсказанных явлений требуются фотонные кристаллы, содержащие не менее нескольких сотен периодов. Наиболее перспективным методом создания таких многослойных структур является электрохимическое травление с модуляцией плотности тока во времени. Однако боковая поверхность формируемых таким образом структур, получаемая сколом исходной пластины перпендикулярно слоям, характеризуется большой шероховатостью, в результате чего подаваемый на фотонный кристалл свет испытывает значительное рассеяние. В данной работе исследовано влияние ионно-кластерной полировки поверхности скола многослойной структуры из пористого кремния на ее топографию и оптические характеристики.

Образцы фотонных кристаллов из пористого кремния изготавливались при помощи технологии электрохимического травления кремния, кратко изложенной в статье [1]. В качестве сырья использовались пластины монокристаллического *p*-кремния, легированного бором, с кристаллографической ориентацией поверхности (001), проводимостью 0.005 Ом*см. Проводилось анодное травление пластины в электролите, содержащем 21% плавиковой кислоты. Слои с низкой и высокой пористостью формировались при токах травления 40 и 200 мА/см². Толщины слоёв составили, соответственно, 200 и 250 нм. В результате травления была изготовлена

многослойная структура, состоящая из 500 чередующихся слоёв, суммарная толщина структуры 113 мкм.

Облучение поверхности скола осуществлялось на ускорителе кластерных ионов МГУ имени М.В. Ломоносова [2]. Средний размер кластерных ионов аргона в пучке с энергией 10 кэВ составлял 1000 атомов/заряд, причем атомарные ионы и легкие кластеры отводились от мишени с помощью магнита. Дозы облучения равнялись $5 \cdot 10^{15}$ ион/см². Часть образца при этом была закрыта маской, что позволило сравнить характеристики обработанной и необработанной областей в пределах одного образца.

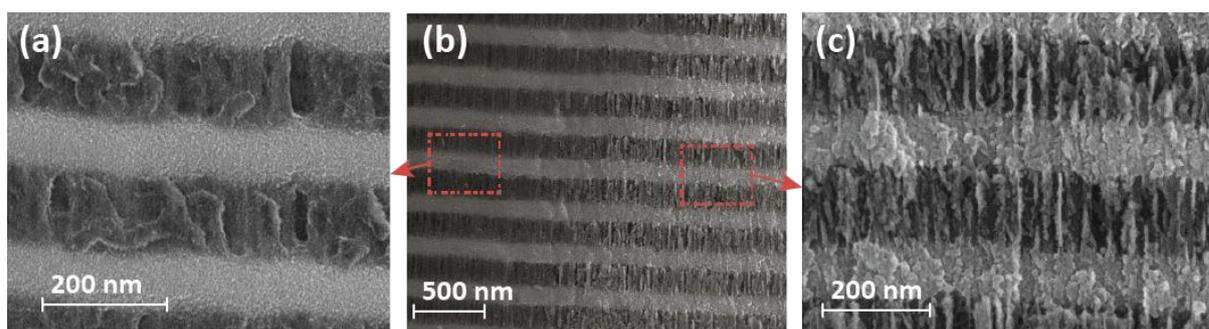


Рис. 1. Изображение скола образца, подвергнутого полировке, полученное при помощи сканирующей электронной микроскопии. (a) – полированная область, (b) – граница полированной и неполированной области со схематичным изображением снимков, (c) – неполированная область.

При помощи сканирующей электронной микроскопии был изучен скол образца, подвергнутого полировке (рис. 1). На рис. 1(b) изображена граница полированной и неполированной областей. Граница проходит примерно посередине рисунка под углом около 30 градусов к вертикали. Ширина границы составила порядка 1 мкм. На рис. 1 (a) изображена в более крупном масштабе область, подвергнутая полировке. По сравнению с неполированной областью (рис. 1 (c)) уменьшилась доля элементов с резкими изменениями формы, образец имеет сглаженную структуру. В слоях с большей плотностью (светло-серые горизонтальные полосы) наблюдается сглаживание без заметного изменения морфологии структуры. В слоях с меньшей плотностью (более тёмные полосы) наблюдается изменение структуры пористого слоя: стенки пор имеют искажения.

Высота ступеньки травления была измерена с помощью атомно-силового микроскопа и составила около 200 нм. Такое значение соответствует скорости травления почти на порядок большей, чем скорость травления массивного образца кремния при тех же условиях. Однако существенной разницы в толщинах удаленного материала для слоев с различной степенью пористости обнаружено не было.

Измерения коэффициента отражения структуры проводились на установке, в качестве источника света которой использовалась ксеноновая лампа высокого давления. Свет лампы фокусировался под углом 45 градусов в область 200 мкм на скол образца. Отражённый сигнал под зеркальным углом собирался при помощи микролинзы в многомодовое оптическое волокно и отводился в дифракционный спектрометр Avesta ASP100MF. Образец при помощи автоматизированной подвижки перемещался вдоль скола, при этом зондируемая область перемещалась вдоль боковой поверхности образца.

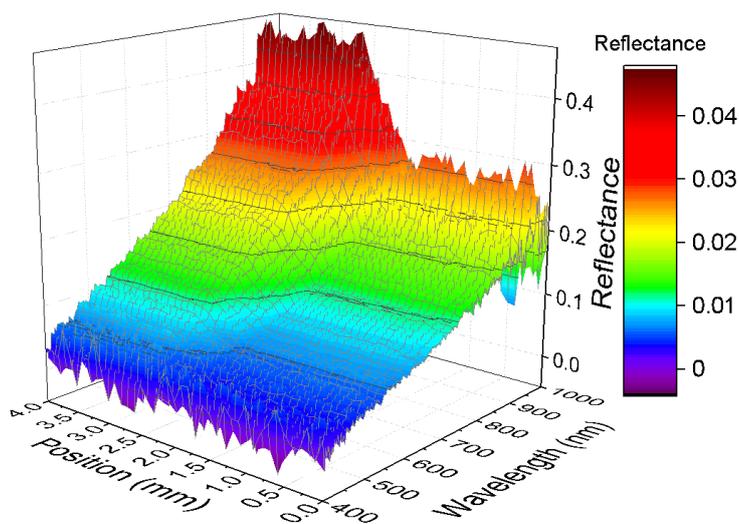


Рис. 2. Спектральная зависимость коэффициента отражения образца, измеренная в зависимости от положения измеряемой точки на сколе образца.

Был измерен спектр коэффициента отражения скола образца в различных точках поверхности, подвергнутой полировке (рис.2). Коэффициент отражения зависит от длины волны падающего излучения: в коротковолновой области отражение меньше, что вызвано сильным рассеянием на поверхности образца. Граница полированной и неполированной области расположена при координате измеряемой точки примерно 2 мм, и при переходе через эту точку коэффициент отражения изменяется примерно в два раза, причём в полированной области коэффициент отражения больше. Таким образом, полировка положительно сказывается на оптических характеристиках поверхности образца.

1. S. E. Svyakhovskiy, A. I. Maydykovsky, T. V. Murzina, “Mesoporous silicon photonic structures with thousands of periods”, J. Appl. Phys. 112, 013106 (2012).

2. A.A. Andreev, V.S. Chernysh, Yu.A. Ermakov, A.E. Ieshkin, “Design and investigation of gas cluster ion accelerator”, Vacuum 91 (2013) 47.

HYDROGEN CO-DEPOSITION WITH METALS IN PLASMA DISCHARGE

S.A. Krat, Yu.M. Gasparyan, Ya.A. Vasina, A.A. Pisarev

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),
Kashirskoe shosse 31, Moscow, Russia, e-mail: sakrat@mephi.ru*

Deposition of a single element film is always accompanied by co-deposition of a certain amount of other elements. This can be done properly to improve properties of the coating or due to contamination by impurities. In the field of thermonuclear fusion research, where hydrogen isotopes are used as a fuel, co-deposition with sputtered material from the wall is one of major mechanisms of hydrogen isotopes accumulation in the installation. Since D-T fuel will be used in ITER and future fusion reactors, accumulation of radioactive tritium will limit the lifespan of the installations due to safety concerns. For example, tritium accumulation in ITER is limited by 1 kg. This is why carbon materials were not accepted for the use in ITER. Basing on experiments, it was predicted that the safety limit could be reached after 100 of shots with tritium. Recent experiments in JET [1] demonstrated in the case of “ITER-like” wall (first wall – Be, divertor area - tungsten) accumulation of deuterium fuel in the co-deposits was 20 times lower than in the full-carbon wall campaign. This is both due to smaller amount of co-deposits and smaller concentration of deuterium in them.

In parallel to the “ITER-like materials”, investigations of hydrogen isotopes co-deposition with some other materials is also actively investigated due to some other alternative reactor concepts. One of them is based on the use of liquid metals, such as lithium and tin, as plasma facing materials [2]. The most perspective among these materials is, probably, lithium, which can efficiently absorb hydrogen isotopes. Therefore, tritium retention in lithium co-deposits is considered also as a potentially serious problem.

All this necessitates development of a unified approach to study of hydrogen co-deposition with materials. At the moment, there is no a detailed analysis of co-deposition mechanisms. Several empirical formulae exist for specific metals, such as tungsten [3] and beryllium [4], but they were developed using regressive analysis of experimental result databases in a limited range of deposition parameters, and cannot be easily extrapolated to other metals. From the experimental data, however, one can conclude that the hydrogen content in co-deposited layers depends on the temperature of the substrate, rate of deposition relative to the flux of hydrogen to the surface, average energy of hydrogen particles impinging on the surface, and the material hydrogen is being co-deposited with.

In order to develop an understanding of co-deposition, series of experiments on deuterium co-deposition with metals, specifically with tungsten and lithium, in various conditions were carried out. The theoretical model describing mechanisms of co-deposition was also proposed and compared with experiments.

The experimental installation MD-2 consists of two separately pumped vacuum chambers, one for deposition and one for analysis (see [5] for details). The ultimate pressure in the deposition chamber is about 10^{-4} Pa, and the ultimate pressure in the analysis chamber is below 10^{-7} Pa. The deposition chamber is equipped with a DC planar magnetron used to deposit films on an experimental sample. The rate of film deposition, and the total thickness of the film are monitored using quartz microbalance deposition monitor placed near the sample. The temperature of the sample during deposition is monitored using a thermocouple. The sample can be heated up to about 530 °C to study co-deposition on heated substrates using a radiative heater. Deuterium (99.98 at.% purity) is used as a working gas to sputter the target and deposit the film, which results in co-deposition. For sputtering of heavy elements, such as tungsten, argon is added to the working gas mixture. The working pressure is about 1 – 4 Pa. After the deposition, the sample is held in deuterium for several minutes until it cools down to room temperature. The sample can be transported into analysis chamber without exposing it to air, which is important for study of chemically reactive elements, such as lithium.

Deuterium content in co-deposited films is analyzed using thermal desorption spectroscopy (TDS). Both total quantity of the deuterium in the film, and the characteristic temperatures of the deuterium desorption are obtained. Spectra of D_2 (4 a.m.u.), HD (3 a.m.u), and H_2 (2 a.m.u.) release are monitored with quadrupole mass spectrometer during a linear heat up. Quadrupole sensitivity is regularly calibrated so absolute quantities of released gases in terms of particle fluxes can be measured. The maximum temperatures achieved during TDS are about 1400 K, which is enough to release deuterium from most co-deposited layers.

Dependence of deuterium content on the temperature of the substrate during the deposition was studied in detail. In all studied co-deposition conditions, deuterium content in the co-deposited layers decreased with increase of substrate temperature during deposition. However, the nature of this decrease varied depending on deposition parameters.

In certain cases, for example in case of slow codeposition with tungsten in a mixed Ar-D atmosphere, a clear correlation between temperature and D content in the film was observed. In fig 1a D/W ratios are shown for several substrate temperatures. Also, the amount

of D remaining in the film by the time it reaches a given temperature during TDS of a film deposited at near room temperature is shown. One can see that the two curves map to each other very precisely, which means that there is no difference between heating up the substrate during or after the codeposition where it comes to D removal.

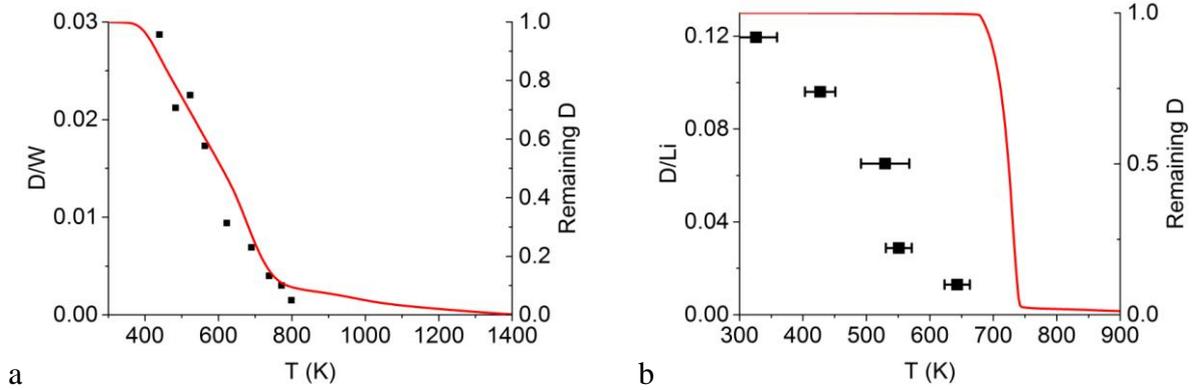


Figure 1. Deuterium content in co-deposited films on surfaces held at different temperatures : a) W-D, b) Li-D. On the right y axis, the portions of D retained in the film deposited at room temperature at the time it was heated to a given temperature is shown.

In different co-deposition conditions, for example in the case of faster Li-D co-deposition in a mixed atmosphere of D and Li vapor, another situation was observed, as can be seen in fig. 1b. D content in the films decreases strongly, by about one order of magnitude at substrate temperatures above about 550 K. However, as was observed earlier [5], most of D trapped in Li-D co-deposits is released in one sharp peak at temperatures close to 700 K. The difference can be explained in several ways. Unlike W, Li readily forms hydrides, and D is likely to be bound in the form of lithium deuteride in the co-deposited layer. It is possible that at higher temperatures, especially past the lithium melting point of 453 K, different chemical processes take place, leading to lower D content. During deposition on the hot substrate, Li could be constantly evaporating. Li evaporation rate increases rapidly with temperature. This means that the actual thickness of the films deposited at higher temperatures might be significantly lower than one measured by water-cooled QMS, which would also result in lower absolute amount of D observed during TDS analysis and perceived lower D content.

An analytical model predicting deuterium content in thick layers deposited in plasma discharge was developed. It incorporated implantation of deuterium ions at the certain depth, gas trapping and detrapping, diffusion of gas in solute form through the co-deposited layer, and implantation of energetic particles, ie gas ions and atoms reflected from the magnetron target, into the film. The constant deposition rate was assumed. It was assumed that no diffusion of gas into the substrate occurred. The thickness of the film was assumed to be

much higher than the energetic particles implantation range, and it was assumed that the deposition proceeded in a quasi-stationary mode, where deuterium concentration in the film depended only on the distance to the film surface, and not on time. Two specific edge cases were analyzed, with different assumptions about the rate of film deposition.

Firstly, the situation of slow deposition, where metal deposition rate was much lower than the flux of hydrogen atoms to the film. This case is characteristic for co-deposition of heavy elements with low sputtering yields. Secondly, a situation of rapid deposition, where metal deposition rate is much higher than the hydrogen flux to the surface, and the number of available trap sites in the co-deposited layer is much higher than the number of filled trap sites, was studied.

The work is supported by the Russian Science Foundation (grant №15-12-30027).

1. Mayer M. et al. Erosion and deposition in the JET divertor during the first ILW campaign // *Phys. Scr.* 2016. Vol. T167, № T167. P. 14051.
2. Mirnov S. Plasma-wall interactions and plasma behaviour in fusion devices with liquid lithium plasma facing components // *J. Nucl. Mater.* 2009. Vol. 390–391, № 1. P. 876–885.
3. De Temmerman G., Doerner R.P. Deuterium retention and release in tungsten co-deposited layers // *J. Nucl. Mater.* Elsevier B.V., 2009. Vol. 389, № 3. P. 479–483.
4. De Temmerman G. et al. An empirical scaling for deuterium retention in co-deposited beryllium layers // *Nucl. Fusion.* 2008. Vol. 48, № 7. P. 75008.
5. Krat S.A. et al. Deuterium release from lithium–deuterium films, deposited in the magnetron discharge // *Vacuum.* 2014. Vol. 105. P. 111–114.

LEIS ANALYSIS OF THE W SURFACE DURING WATER VAPOR ADSORPTION

N.V. Mamedov, V.A. Kurnaev, D.N. Sinelnikov, D.V. Kolodko, I. A. Sorokin

* *National Research Nuclear University MEPHI, Kashirskoe st., 31, Moscow, Russia, 115409
e-mail: NVMamedov@mephi.ru;*

1. INTRODUCTION. The adsorption of water on the surface is one of the main problems in vacuum technology. Since water is a good adsorbent, its adsorption is the reason that prevents the fast pumping of vacuum systems up to ultra-high vacuum. In addition, water vapor adsorption on metal surfaces during plasma surface interaction is a problem [1]. Singly scattered and recoil ions could form narrow peaks in energy spectra and provide information about atomic composition of the first atomic layer giving information about structure and composition of the surface and very sensitivity to the first layer of atoms [2 -5]. It was also shown [6] that the thickness of light element thin layers on the heavy substrate can be analyzed with good depth resolution ($\sim 0,3\text{nm}$) due to scattering of hydrogen ions with keV energies. Application of ion scattering spectroscopy at pressures up to several mTorr is presented in [7, 8]. In this work experimental results of low energy ion spectroscopy (LEIS) of W samples during water vapor adsorption are presented.

2. EXPERIMENTAL TECHNIQUE. The modernized ion mass monochromator experimental setup was used in these experiments [9,10]. Grazing incidence conditions are chosen for increasing intensity scattered and recoils ions (scattered angle $\theta = 16^\circ$, incident angle $\alpha = 8^\circ$). This allows to detect recoil hydrogen and to set build-in thermo chemical water source (near the surface). Thermo chemical water source (TCWS) was placed near the target in several centimeters distance (see fig.2). TCWS based on $\text{Ca}(\text{OH})_2$ thermal destruction [11]. Tube with $\text{Ca}(\text{OH})_2$ was heated to the temperature about 250 degrees. The partial pressure of water vapor in vacuum chamber from $3 \cdot 10^{-8}$ Torr to $1 \cdot 10^{-6}$ Torr could be regulated by heating control. Estimated order-of-magnitude adsorption speed is 1 ML/300s.

3. RESULTS AND DISCUSSION.

EDS analysis (by scanning electron microscope VegaTescan) detected 3% oxygen and 10% carbon on the W –sample before the experiment. Since analyzed depth at 10 keV is ~ 100 nm, so the real concentration of oxygen and carbon atoms in near surface layers can be higher. First of all, the sample was heated and cleaned by sputtering ion beam of Ar^+ with 8keV energy of $\sim 1\mu\text{A}/\text{cm}^2$ current density. Energy spectra of positive and negative ions knocked out from tungsten during Ar^+ bombardment clearly show the dynamics of changes in the intensity of the signals of elastically knocked out H^+ , W^+ , O^+ ions, and Ar^{++} are elastically scattered from the W. The spectra indicate a substantial cleaning of the surface of adsorbents to tungsten oxide.

The total pressure in the interaction chamber increases in the range $0,4 - 1 \times 10^{-6}$ Torr and the partial pressure of water vapor changes in the range $0,1-4 \times 10^{-7}$ Torr during TCWS heating. Energy spectra evolution of scattered and knock out positive and negative ions during water vapor ingress is shown in fig.1. As we can see the main part of positive spectra is

formed by Ar ions which lost energy in multiple scattering from W. The peak of ions elastically scattered from the first layer is small as compared with cupola shaped spectra but Ar^{++} peak and ionized recoils can be measured with reasonable accuracy. O^+ peak is small as compared with other positive ions and decreases with time while O^- increases. With increasing of water vapor partial pressure for an order of magnitude (within the first 20 min of exposure) the surface of the sample at room temperature is seems to be completely covered by a monolayer of water, as evidenced by the disappearance of argon ions elastically reflected from W atoms. It is seen (fig. 2) that the H^+ and O^- peaks intensity increases sharply in the first few minutes of water vapor injection, and then goes to saturation even at further increase of water partial pressure. After 20 min of injection the slope of peaks intensity abruptly decreases by a factor of 2 indicating forming more than one water monolayer.

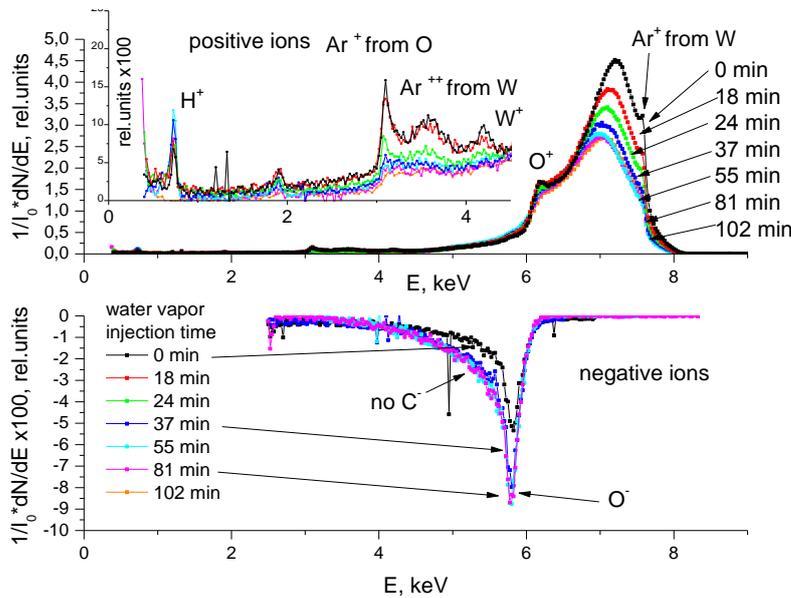


Fig 1. Energy spectra of scattered ions registered at $\theta = 16^\circ$ during water vapor adsorption

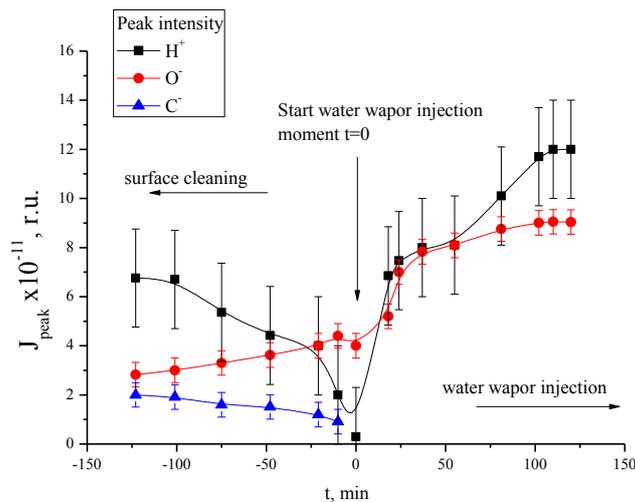


Fig. 2 The intensity peaks elastically recoil ions H^+ , O^- , C^- , during cleaning of the tungsten surface and water vapor injection

To control thickness of adsorbed water layer, scattering spectroscopy of H^+ ions was used. The energy losses of H^+ ions with keV energy in solid with low average atomic number is proportional to the thickness of this layer. Comparison of these spectra with computer simulations, which were done by the SCATTER code [12].

To determine the maximum thickness of the H₂O layer simulated energy spectra of H reflected from the W with a water layer were compared with spectra from thin film of water without substrate. As it was shown computer simulated energy spectra of scattered on 16° of hydrogen ions from W covered with water molecules do not change when the thickness of the water layer reaches ~70Å. Comparison maximum of the energy spectra showed that the film thickness of water is about 40-45Å (see fig. 3,4).

It is interesting to note that simple single scattering model could be also used to evaluate water layer thickness. It seems to be possible to translate the energy scale in the spectra in the scale of depth using a simple relation:

$$E_{\text{coh}} = (E_0 - \frac{d}{\sin \alpha} \cdot k) \cdot \mu - \frac{d}{\sin \gamma} \cdot k \quad (1)$$

where E_0 - initial energy, d - thickness, k - coefficient of inelastic energy loss in the layer (for H₂O), μ -coefficient of elastic energy loss, α – incident angle, γ -angle of registration

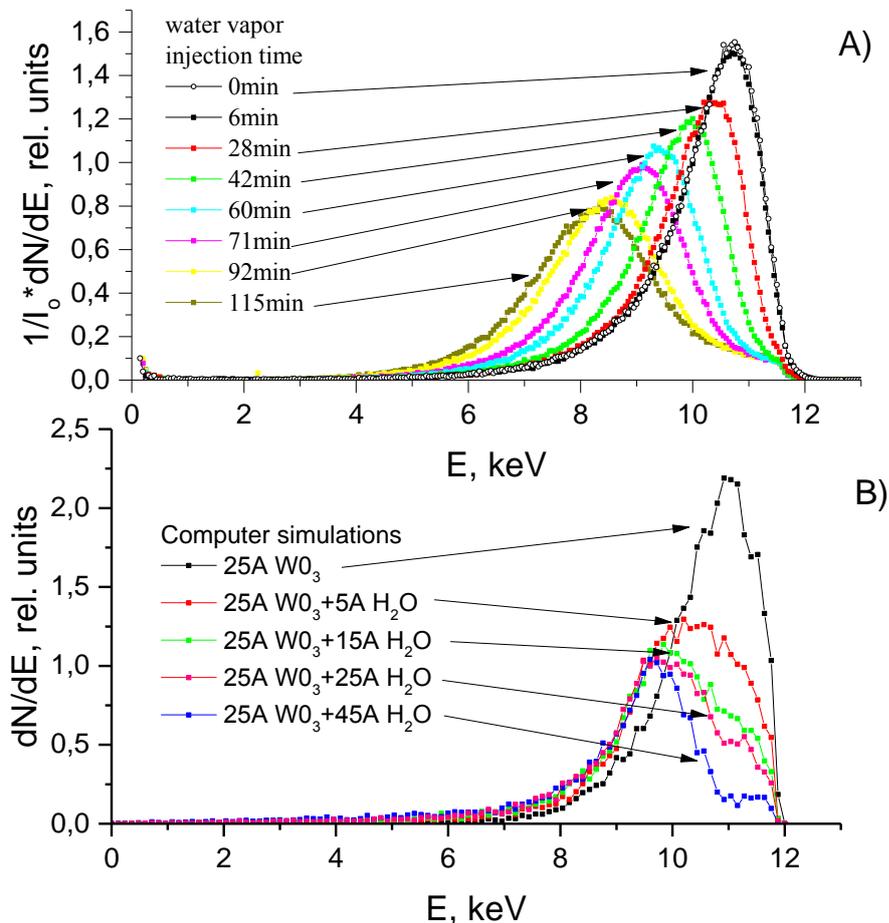


Fig. 3 Evolution of energy spectra of scattered 12 keV H⁺ ions under water vapor injection. A) experimental spectra, B) computer simulation by SCATTER code

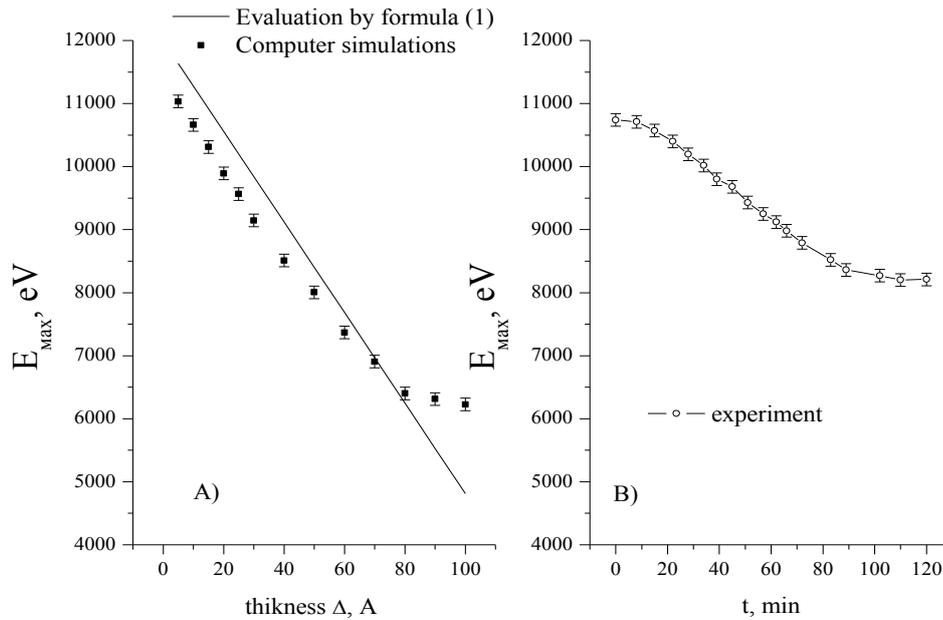


Fig 4. Maximum of the energy distribution: A) as function of the thickness of the water layer (computer simulation with code SCATTER and evaluation by formula (1), B) as function of water vapor injection duration (experiment)

4. CONCLUSION. It is shown that using ion scattering spectroscopy it is in principal possible to evaluate the thickness of water adsorbate on the tungsten surface. The water film thickness on the tungsten surface evaluated from comparison of measured energy spectra of keV hydrogen ions with Monte Carlo simulations does not exceed 40-45 Å. Formula (1) allows rough evaluation of the thickness of water molecules layer on the surface of tungsten from measurements of energy spectra of hydrogen ions at sliding incidence.

1. G. S. Voronov et al. // Plasma Physics Reports, 2013, Vol. 39, No. 4, pp. 277–288
2. H.H. Brongersma, et al // Surface Science Reports; volume 62; p. 63-109; 2007
3. Brongersma H.H. et al // Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. B, V.190, Issues 1-4 (2002), p. 11-18
4. O. M. N. D. Teodoro, A. M. C. Moutinho // Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. B, Volume 222, Issues 3-4 (2004), p.609-618
5. D. O. Boerma // Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. B, V. 183, Issues 1-2 (2001), p. 73-87
6. N.N. Trifonov, et al. // Vacuum 56, (2000), p. 253-255
7. Jaemo Im et al. / Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. B 118 (1996), p. 772-781
8. Yuping Lin et al. / Thin Solid Films, 253 (1994), p. 247 – 253
9. N.V. Mamedov, et al. // Bul. of the Rus. Academy of Sciences: Phys, 2012, Vol. 76, No. 6, pp. 683–686.
10. N.V. Mamedov, et al. /Instruments and Experimental Techniques (2015) , 58(1) : 43-48 ,
11. V.A. Kurnaev et. al., Fusion Engineering and Design, 2013, Vol. 88 Iss. 6-8 pp. 1414-1417
12. N.N. Trifonov "Interaction of hydrogen ions with thermonuclear energies with thin solid layers" (in Russian) Ph.D. Thesis, Moscow, 2002.

MULTIPLE-POINT SURFACE FORMATION ON NANOSTRUCTURED NICKEL BY ION-BEAM SPUTTERING

K.S. Nazarov^{*}, R.Kh. Khisamov^{*}, Yu.M. Yumaguzin^{*,#}, R.R. Mulyukov^{*}

** Laboratory of Nanomaterials and Nanotechnologies, Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia, e-mail: ksnazarov@rambler.ru;
Institute of Physics and Technology of the Bashkir State University, Ufa, Russia*

Nanostructuring of metals and alloys by severe plastic deformation results in considerable changes in their mechanical and physical properties [1–3]. In particular, the formation of a nanostructure in samples of metals and alloys result in a decrease in the work function of the electron and an increase in ion-electron emission, as shown in [4, 5, 6]. Such changes are associated with an increase in the volume fraction of grain boundaries in the metal and to nonequilibrium state of these grain boundaries, as a result of nanostructuring. The small size of the grains and nonequilibrium state of their boundaries also has an effect on the surface relief formation by ion-beam sputtering. In this work, the results of ion-beam sputtering of nanostructured (NS) nickel are presented. It has been shown that, on the NS nickel under special sputtering conditions, multiple-point surface forms. It has also been shown that the surface with such a relief can be used as a multiple-point field emission cathode [7].

Nickel with a purity of 99.5% was chosen for the studies. The nanostructure in samples of Nickel was formed by high pressure torsion [1]. The obtained samples were discs 10 mm in diameter and 0.25 mm in thickness. As a result of high pressure torsion in nickel was formed structure with a grain size of about 100-150 nm and grain boundaries in a nonequilibrium state, as shown in [4, 5, 8]. For comparison, samples of coarse-grained (CG) nickel with an average grain size of 4 μm were used. Before the experiment, the surface of all samples were machined and polished with a finishing suspension.

The ion-beam sputtering of the samples was performed on a setup that we developed and designed. The ion source was made by the duoplasmatron scheme with a filament cathode. To obtain a collimated ion beam, a three-electrode system of electrostatic lenses was used. The designed ion source provides ion beam of about 3 mm in diameter, with maximum current of about 1 mA and energy up to 7keV. Argon was used as a working gas. The studied sample (target) was fixed on the objective table. The design of the objective table provides rotation of the sample on the axis normal to the sample surface. The distance between the ion

source and the surface of the sample was 0.06 m. The vacuum in the chamber was held by oil-less evacuation at the level no worse than 10^{-3} Pa. The studied samples were not heated above 393 K during the sputtering.

The surfaces of the NS and CG nickel samples after ion-beam sputtering were studied with using Tescan Mira 3LMH scanning electron microscope (SEM). Studies of the NS and CG nickel samples after ion-beam sputtering were performed In the SEM images (Fig. 1), reliefs are shown that have been obtained at the following parameters of the ion-beam sputtering: ion beam energy of 3 keV, ion current of about 0.3 mA, and incident angle of ions of 60° with respect to the normal to the surface of the sample. The NS sample was sputtered for ≈ 3 hour. Due to of the relief formation scale factor the CG sample was sputtered longer— for ≈ 6 hour.

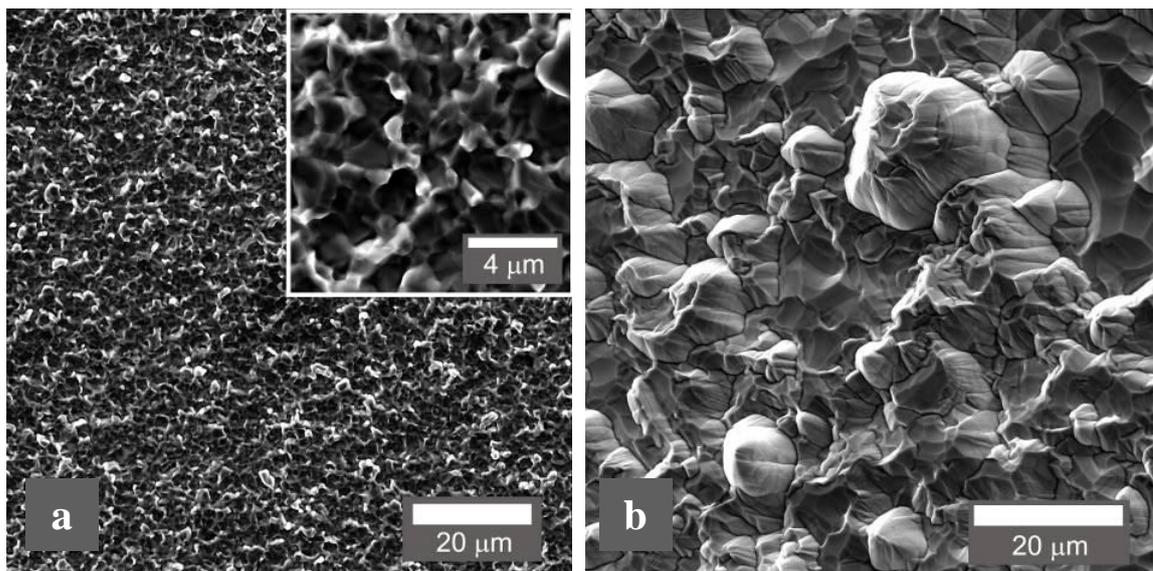


Fig. 1. SEM images of the sample surface after ion-beam sputtering of (a) nanostructured nickel and (b) coarse-grained nickel

The relief with a great number of uniformly distributed peaked hills and protrusions was formed on the surface of the NS sample (Fig. 1a). They can be characterized as the peaks of submicron dimension with the basis no more than 1 μm. Opposite the NS samples, on the surface of the CG samples, conelike hills with the etching pits around the cone basis form as a result of the ion beam sputtering (Fig. 2b). The dimensions of the cones are from several

micrometers to tens of micrometers. The cones are nonuniformly distributed over the surface. It is also seen that grain boundaries are etched due to the ion beam sputtering.

The relief on the NS nickel sample differs qualitatively from that on the CG sample. The first obvious difference is the scale of the formed structures, with the density of the peaks on the surface of the NS sample being far higher than the density of cones on the surface of the CG sample. In the figure of the NS sample, the peaks are not shaped as cones and the etched grain boundaries are not distinct. In our opinion, a significant effect on formation of the relief in the NS samples has a nonequilibrium state of grain boundaries and a great number of defects.

Therefore, it can be concluded from analysis of the images that a multiple-point surface forms on the NS sample. In addition, a single peak can serve as an emission center, and the material with such a surface is applicable as a multiple-point field emission cathode [9, 10].

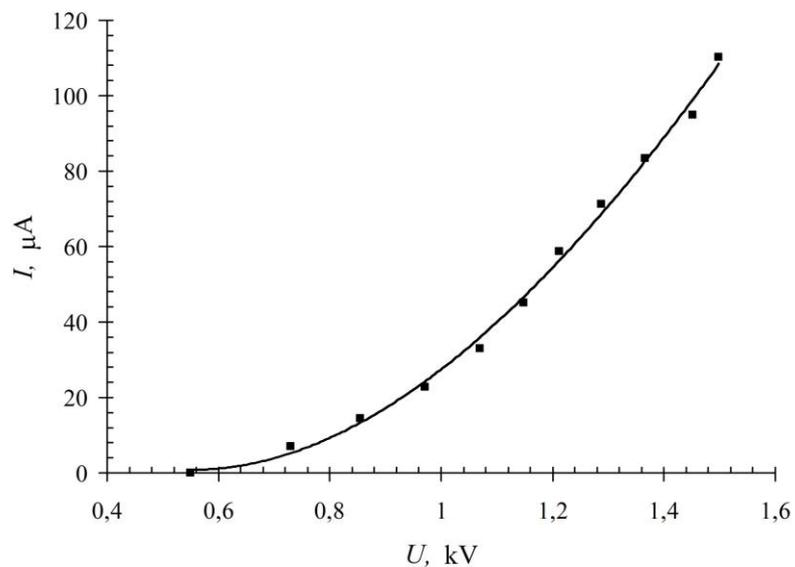


Fig. 2. CVC of the NS sample with a multiple-point surface.

The CVCs of field electron emission were taken from the NS and CG nickel samples. The measurements were performed in vacuum no worse than 10^{-3} Pa. The cathode–anode distance was 0.2 mm. The cathode, for which the studied sample served, was grounded via an

ammeter. The sample area from which the emission current was detected was $\approx 28 \text{ mm}^2$. The thus-taken CVC for the NS sample with the multiple-point surface is represented in Fig. 2.

In the presented CVC, it is seen that the maximum current achieved from the NS sample was $110 \text{ }\mu\text{A}$ at a potential at the anode of 1.5 kV . The following increase in potential brings about instability of the emission current and, finally, electrical breakdown.

Thus it has been shown that the multiple-point surface on the nanostructured nickel with nonequilibrium grain boundaries can be obtained by ion-beam sputtering. The peaks have submicron dimensions (less than $1 \text{ }\mu\text{m}$ in the basis). They are uniformly distributed with high density on the surface of the nanostructured nickel. The nanostructured nickel sample with the multiple-point surface was tested as a field emission cathode. The maximum electron emission current was $110 \text{ }\mu\text{A}$ at the cathode–anode potential 1.5 kV . The CG nickel after ion-beam sputtering used as a cathode does not produce an emission current up to 1.5 kV . Thus a relatively inexpensive and efficient multiple-point field emission cathode could be obtained from the nanostructured metal.

1. R.R. Mulyukov, *Russ. Nanotekhnol.* 2 (7–8), 38(2007).
2. A.A. Nazarov and R.R. Mulyukov, *Nanostructured Materials*. In: *Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology*, Ed. Goddard W., Brenner D., Lyshevski S., Iafrate G. CRC Press. 2002.
3. N.I. Noskova and R.R. Mulyukov, *Submicrocrystalline and Nanocrystalline Metals and Alloys* (Ural Branch of RAS, Yekaterinburg, 2003).
4. R.Kh. Khisamov, I.M. Safarov, R.R. Mulyukov, and Yu.M. Yumaguzin, *Phys. Solid State* 55 (1), 1 (2013).
5. R.Kh. Khisamov, I.M. Safarov, R.R. Mulyukov, Yu.M. Yumaguzin, L.R. Zubairov and K.S. Nazarov, *Tech. Phys.* 56 (11), 1661 (2011).
6. R.Kh. Khisamov, Yu.M. Yumaguzin, R.R. Mulyukov, K.S. Nazarov, I.M. Salimov, I.M. Safarov, and L.R. Zubairov, *Tech. Phys. Lett.* 39 (3), 265 (2013).
7. K.S. Nazarov, R.Kh. Khisamov, Yu.M. Yumaguzin, R.R. Mulyukov, *Tech. Phys. Lett.* 41 (6), 522 (2015).
8. A.A. Samigullina, R.Kh. Khisamov, and R.R. Mulyukov, *Lett. Mater.* 2 (3), 134 (2012).
9. *Non-Heated Cathodes*, Ed. by M.I. Elinsona (Sov. Radio, Moscow, 1974) [in Russian].
10. G.G. Sominskii, T.A. Tumareva, E.P. Taradaev, M.V. Mishin, and A.N. Stepanova, *Tech. Phys.* 60 (1), 133 (2015).

ANISOTROPIC PATTERNS OF ATOMS SPUTTERED FROM SINGLE CRYSTALS BY GAS CLUSTER IONS

A.V. Nazarov¹, V.S. Chernysh², K. Nordlund³, F. Djurabekova³, J. Zhao³

¹ *Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Russian Federation, e-mail: av.nazarov@physics.msu.ru*

² *Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Russian Federation*

³ *Department of Physics, University of Helsinki, Finland*

The spatial distributions of the particles sputtered from solid targets by gas cluster ion beams (GCIB) are important for understanding the mechanisms of sputtering phenomenon as well as for a wide range of technology applications such as surface polishing. The angular distributions of sputtered material are a determinative factor for surface smoothing processes [1].

Most of the published experimental data on the angular distributions of atoms sputtered by GCIB from the metals is related to the polycrystalline targets. However, the simulations are more often performed with single crystal lattices. In a recent paper [2] the anisotropy over the azimuthal angle of the spatial distributions of Ag and Mo atoms sputtered from single-crystal targets with 10 keV Ar clusters has been found. This is surprising because the crystalline structure in the impact area is destroyed during the cluster impact on the target surface.

In order to understand the reasons that lead to the spatial anisotropy of the angular distributions of sputtered material the MD simulations of sputtering of Cu and Mo single crystals by Ar clusters of different sizes were performed.

The MD simulations of the 10 keV Ar cluster bombardment of Cu (100) and Mo (100) single crystals were performed at room temperature. The size of the clusters varied from 50 to 1500 atoms per cluster. The incident direction of the cluster ions was normal to the target surface. The simulations were performed with the PARCAS code [3-5]. The Lennard-Jones potential was used for the Ar-Ar interactions, the EAM potentials [6-7] for the Mo-Mo and Cu-Cu interactions and the density-functional theory based pair-specific repulsive potentials [8] for the Ar-Mo and Ar-Cu interactions.

A distinct anisotropy is observed in the azimuthal distributions of sputtered Cu and Mo atoms. The centers of spots visible in Fig. 1 are located in the (110) plane for the Mo target with the bcc lattice and in the (100) plane for the Cu target with the fcc lattice. These planes are perpendicular to the target surface. The spots for Mo can be clearly observed for all cluster sizes that lead to any reasonable sputtering (up to 500 atoms per cluster), while for the Cu target it becomes imperceptible for sizes more than 300 atoms per cluster.

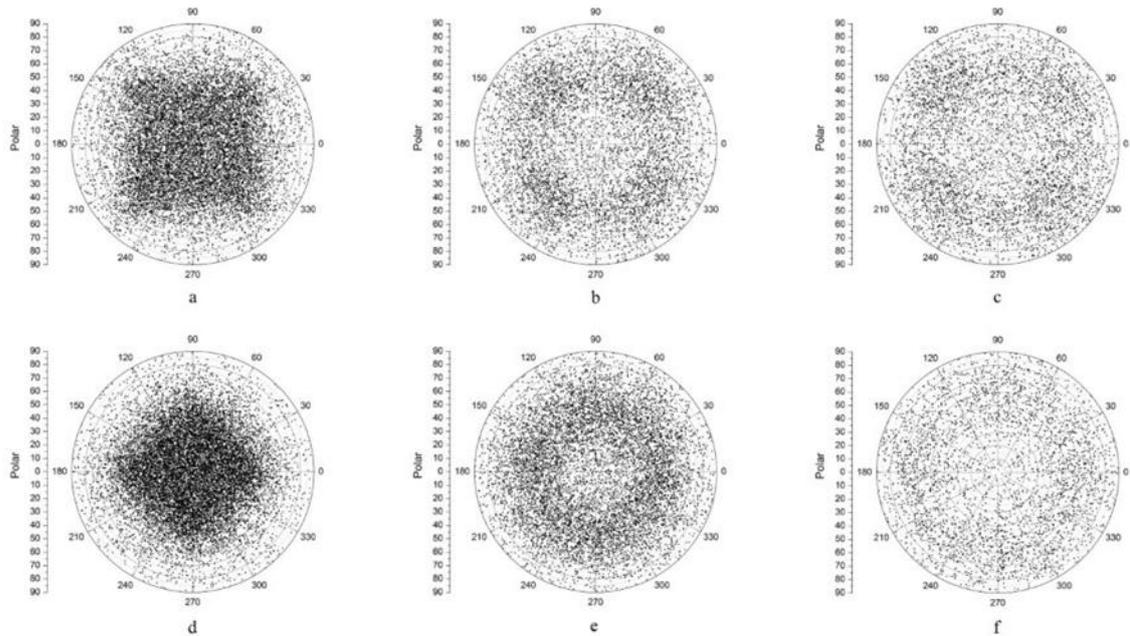


Figure 1. The polar and azimuthal distributions of sputtered material: a) Mo target, Ar₄₄ clusters; b) Mo target, Ar₃₀₀ clusters; c) Mo target, Ar₅₀₀ clusters; d) Cu target, Ar₅₀ clusters; e) Cu target, Ar₁₀₀ clusters; f) Cu target, Ar₉₀₀ clusters

The spots positions depend on the impacting cluster size, therefore these spots cannot be considered as Wehner spots. This conclusion is based on the fact that numerous experiments have shown that the angular positions of Wehner spots are determined only by the crystal structure of the irradiated surface. It was also found that the angular positions of Wehner spots do not depend on the type and energy of the projectiles.

It is well known that in the case of sputtering by atomic ions, the anisotropy of the spatial distribution of the sputtered material is determined by the crystal structure of the irradiated material in the region of the cascade of atomic collisions. In case of cluster bombardment, the crystal structure outside the impact region determines the spatial distribution of sputtered particles. The interaction of the atoms constituting the cluster with the walls of the crater, that is formed during the impact, plays an important role in the formation of the flux of the sputtered atoms. The density of target atoms that form the crater walls in different azimuthal directions is different. This density has the maximum in the close-packed directions and the minimum in between. This results in the anisotropy of the sputtered atoms flux.

This assumption is confirmed by the results of experimental and computer simulations studies of the shapes of craters formed in Si single crystals under bombardment by Ar clusters [9]. The AFM measurements showed that the Si(100) craters exhibit four-fold symmetry, while the shape of craters on a Si(111) surface shows three-fold symmetry.

1. I. Yamada, *Appl. Surf. Sci.*, 310 (2014), 77–88.
2. D. Maciazek, M. Kanski, L. Gaza, B. J. Garrison, Z. Postawa, *J. Vac. Sci. Technol.*, B 34(2016), 03H114
3. K. Nordlund, M. Ghaly, R.S. Averback, M. Caturla, T. Diaz de la Rubia, J. Tarus, *Phys. Rev. B.* 57 (13) (1998), 7556 – 7570.
4. M. Ghaly, K. Nordlund, R. S. Averback, *Phil. Mag. A*, 79(4) (1999), 795.
5. K. Nordlund, *Comput. Mater. Sci.*, 3 (1995), 448.
6. Michael J. Sabochick, Nghi Q. Lam, *Phys. Rev. B*, 43(7) (1991), 5243.
7. E. Salonen, T. Järvi, K. Nordlund, J. Keinonen, *J. Phys. Cond. Matt.*, 15 (2003), 5845-5855.
8. K. Nordlund, N. Runeberg, D. Sundholm, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, 132 (1997), 45-54.
9. S. Jones, I. Yamada, *J. Appl. Phys.*, 71 (2002)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ АТОМОВ,
РАСПЫЛЁННЫХ ПУЧКОМ ГАЗОВЫХ КЛАСТЕРНЫХ ИОНОВ**
**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF ANGULAR DISTRIBUTIONS OF
ATOMS SPUTTERED BY GAS CLUSTER IONS**

А.В. Назаров¹, В.С. Черныш², К. Нордлунд³, Ф. Джурабекова³, Дж. Джао³
A.V. Nazarov¹, V.S. Chernysh², K. Nordlund³, F. Djurabekova³, J. Zhao³

¹*НИИЯФ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия, e-mail: av.nazarov@physics.msu.ru*

²*Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

³*Физический факультет, Университет Хельсинки, Хельсинки, Финляндия*

The angular distributions of the atoms, sputtered by gas cluster ion beam, are known to have maximum in lateral direction. However, it was recently experimentally found that for some target materials, such as Mo, the significant yield of sputtered material is observed along the normal to the sample surface. In order to explain such distributions the MD simulations of Mo sputtering by Ar clusters were performed. The results of the simulations are presented.

Угловые распределения атомов, распылённых пучком газовых кластерных ионов, значительно отличаются от угловых распределений атомов, распылённых мономерами. Экспериментальные исследования, а также результаты компьютерного моделирования показывают, что распыление атомов под действием облучения пучком газовых кластерных ионов происходит преимущественно в латеральном направлении [1-2]. Такой характер угловых распределений считается одним из основных механизмов, благодаря которому достигается сглаживание поверхности облучаемого образца. Показано, что при обработке различных поверхностей кластерным пучком можно достичь шероховатости на уровне нескольких атомных слоёв.

Однако, было экспериментально продемонстрировано [3], что для некоторых материалов мишени, таких как молибден, угловые распределения имеют ярко выраженный максимум в направлении нормали к поверхности образца. Для того, чтобы объяснить механизм формирования угловых распределений, отличных от латеральных, для некоторых материалов, было проведено моделирование распыления молибдена кластерными ионами аргона методом молекулярной динамики.

На первом этапе проводилась серия расчётов распыления монокристалла молибдена кластерами аргона различных размеров с энергией 10 кэВ при нормальном падении. Для каждого размера кластеров проводилась серия расчётов с прицельным параметром, случайным образом изменяющимся в пределах постоянной решётки. Каждый расчёт производился с идеальной кристаллической решёткой мишени, изменение поверхности под действием облучения не учитывалось. Угловые

распределения строились из анализа направления скоростей расплывённых атомов. Стоит отметить, что в экспериментах, описанных в [3] для измерения угловых распределений использовался полуцилиндрический коллектор. Такая геометрия эксперимента была учтена при обработке данных моделирования. На рисунке 1 представлены полученные угловые распределения для кластеров некоторых размеров. Из рисунка видно, что для всех представленных размеров кластера распределения имеют латеральный характер, максимум по нормали к поверхности не наблюдается.

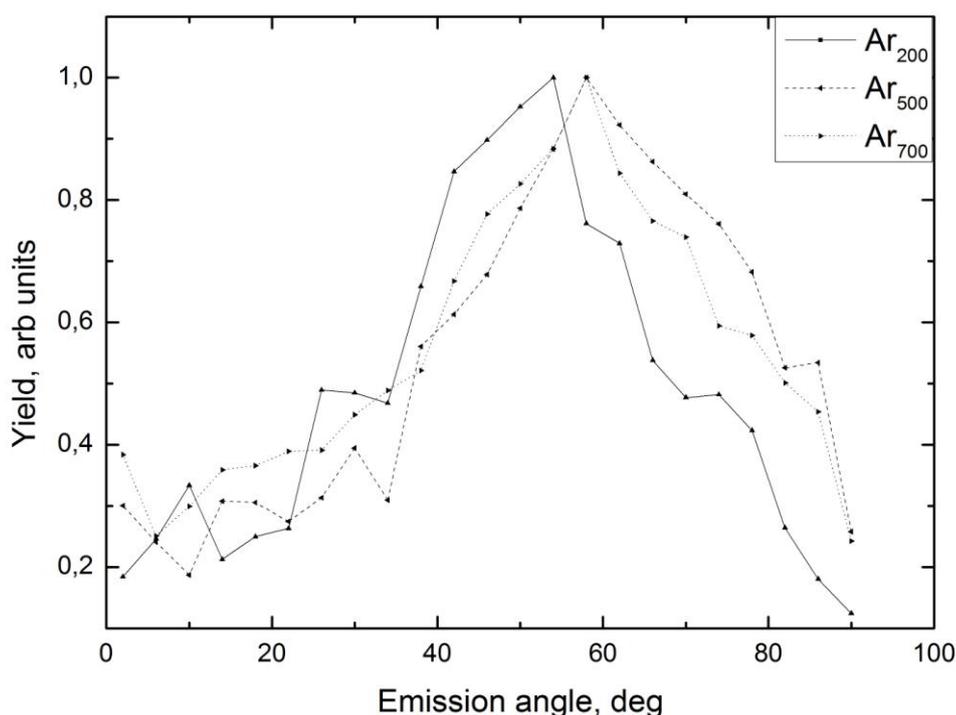


Рис.1 Угловые распределения атомов молибдена, расплывённых кластерами Ar₂₀₀, Ar₅₀₀ и Ar₇₀₀ без учёта эволюции поверхности под действием облучения.

Для выявления возможных механизмов формирования описанных в [3] угловых распределений была проведена ещё одна серия расчётов, в которой условия моделирования были максимально приближены к экспериментальным. Каждый акт соударения кластера происходит с поверхностью, полученной в результате прошлого соударения. Таким образом, в расчёт берутся эффекты, связанные с эволюцией поверхности в процессе облучения. Место соударения каждого кластера с поверхностью выбирается случайным образом в пределах области моделирования. Размер каждого кластера также выбирается случайным образом с вероятностью, соответствующей распределению кластеров по размерам, приведенному в [3].

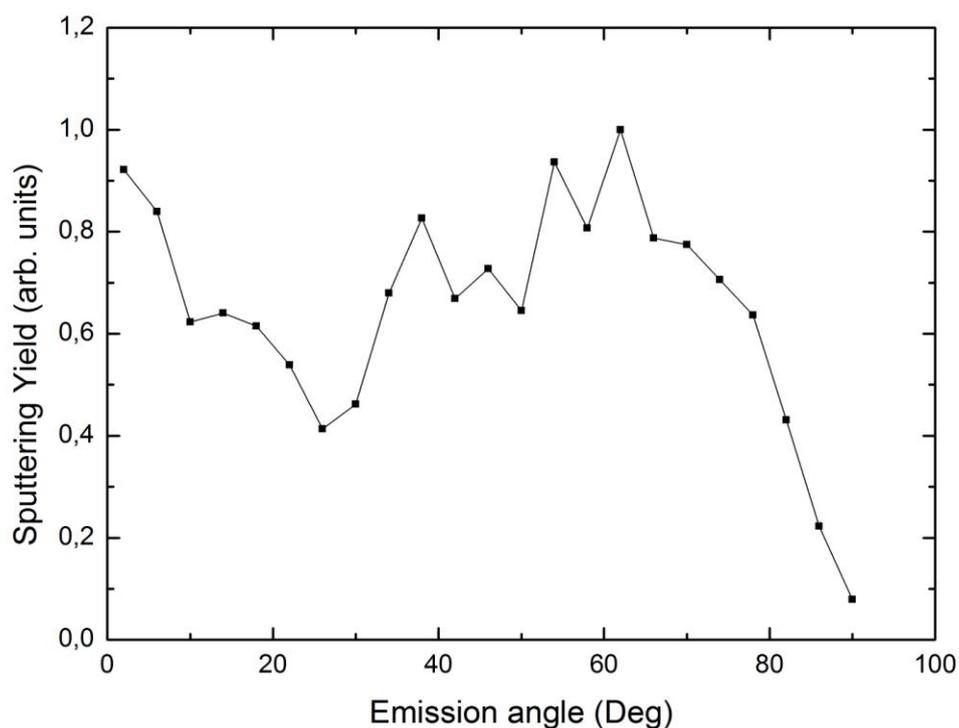


Рис.1 угловое распределение, полученное для серии из 1000 последовательных соударений кластеров аргона с молибденовой мишенью.

Угловое распределение, полученное в такой серии расчётов значительно отличается от случая, когда каждый кластер направляется в неповреждённую поверхность мишени. Выход расплывённых атомов по нормали значительно выше, распределение носит немонотонный характер.

1. N. Toyoda, H. Kitani, N. Hagiwara, T. Aoki, J. Matsuo, I. Yamada, Angular distributions of the particles sputtered with Ar cluster ions, *Mater. Chem. Phys.* 54 (1998) 262–265.
2. Z. Insepov, I. Yamada, Molecular dynamics simulation of cluster ion bombardment of solid surfaces, *Nucl. Instrum. Meth. B* 99 (1995) 248–252.
3. V. S. Chernysh, A. E. Ieshkin, and Y. A. Ermakov, *Appl. Surf. Sci.* 326, 285 (2015).

**ЭМИССИОННАЯ ТЕОРИЯ РАСПЫЛЕНИЯ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ.
ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА РАСПЫЛЕНИЯ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ
ПЕРВИЧНОГО ИОННОГО ПУЧКА**

**EMISSION THEORY OF AMORPHOUS MATERIALS SPUTTERING. THE
DEPENDENCE OF THE SPUTTERING COEFFICIENT ON THE OBLIQUE
INCIDENCE OF A PRIMARY ION BEAM**

А.Н. Пустовит
A.N. Pustovit

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской Академии наук (ИПТМ РАН), 142432, Черноголовка, Московская область, Россия,

E-mail: pustan@ipmt-hpm.ac.ru

The sputtering coefficients are calculated depending on the type of accelerated ions, their energy and angle of incidence on the target. For the systems Ar - Si and H - W a reasonable agreement is obtained between the calculated and experimental results. Two mechanisms of secondary particles admission to the stream of sputtered atoms were established.

Исследование процесса распыления материалов ионами средних энергий представляет перспективное направление для областей создания и диагностики материалов с новыми свойствами, необходимыми в различных областях науки и техники. Одним из актуальных направлений является создание аналитической теории данного процесса. В работе [1] предложена эмиссионная теория распыления. Полученные в ней расчетные значения зависимостей пороговой энергии (E_p) от соотношения масс сталкивающихся частиц и коэффициента распыления основы (Y) от энергии первичных ионов (E) удовлетворительно совпадают с экспериментальными результатами.

Целью настоящей работы является дальнейшая разработка этой физической модели для расчета зависимостей коэффициента распыления от вида бомбардируемых ионов и угла их падения на мишень (β , отсчитывается от нормали к поверхности).

Формула для расчета коэффициента распыления основы задается уравнением [1]:

$$Y = [1 + R_{12}(E) / d] h / R_{12}(E) \cos \beta, \quad (1)$$

где $R_{12}(E)$ средний пробег иона в мишени, d – межатомное расстояние в мишени, h – средняя максимальная глубина выхода вторичных частиц.

Средний пробег иона в мишени $R_{12}(E)$ рассчитывали по формуле [2]:

$$R_{12} = s^2 [2a(m_1 + m_2)^{s-1} / m_1^{s/2} m_2^{s/2-1} Z_1 Z_2 q^2 k_s]^{2/s} (E - Q)^{2/s} / 4\pi N a^2 B_1^2 B_2 [4a^2 (2a + d)^{-2} (1 + 3d/4a)]^{1-1/s}. \quad (2)$$

В формуле (2): N – плотность числа атомов в мишени, s – степенной показатель в потенциале взаимодействия Линдхарда-Нильсена-Шарфа, $a = 0.8853a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$ – длина экранирования, a_0 – борковский радиус, $B_1 = (2/s)[(3s-1)/2]^{1/2}$ и $B_2 = B[(2s-2)/2, 2/s]$ – бета-функции, m_1, m_2, Z_1, Z_2 – массы и порядковые номера иона и атома мишени, q – заряд электрона, $k_s = [(s-1)/e]^{s-1}$, Q – неупругие потери энергии иона.

Значение h вычисляется в диапазоне углов по формуле [2]:

$$h = \{1 - [U_0/(E-Q)]^{2/s} [\gamma_{12} \cos^2 \theta_2 (1 - \gamma_{12} \sin^2 \theta_1)]^{-2/s} + [d/R_{12}(E)] [\cos(\beta + \theta_2) \cos^{-1}(\beta) - (1 - \gamma_{12} \sin^2 \theta_1)^{-2/s}] \} / \{ [R_{12}(E) \cos \beta]^{-1} - [R_{22}(E) \gamma_{12}^{2/s} (1 - \gamma_{12} \sin^2 \theta_1)^{2/s} \cos(\beta + \theta_2 + \theta_1) \cos^{4/s} \theta_2]^{-1} \}, \quad (3)$$

где приведенная масса $\gamma_{12} = 4 m_1 m_2 / (m_1 + m_2)^2$, U_0 – поверхностная энергия связи выбитого атома, θ_1 и θ_2 – углы рассеяния первичного иона и выбитого атома в мишени. R_{22} – средний пробег выбитого атома в мишени. Значение R_{22} рассчитывается по (2) с учетом $m_1 = m_2$ и $Z_1 = Z_2$.

Для учета зависимостей углов θ_1 и θ_2 от E используются эмпирические уравнения:

$$\theta_1 = \theta_{10} (E_p / E)^{1/s \lambda_1}, \quad \theta_2 = \theta_{20} (E_p / E)^{-1/s \lambda_2}, \quad (4)$$

где θ_{10}, θ_{20} – начальные значения углов рассеяния (при $E = E_p$), λ_1 и λ_2 – подгоночные коэффициенты.

Все экспериментальные значения для Y взяты из работы Экштайна в [3] для аналогичных систем. Вычисления с использованием формул (1) – (4) для систем Ar-Si и H-W проведены в два этапа. На первом этапе рассчитывали зависимости коэффициента распыления от энергии первичных ионов в диапазоне 10–10⁵ эВ для нормального ($\beta = 0$) падения первичных ионов. После получения удовлетворительных результатов, на

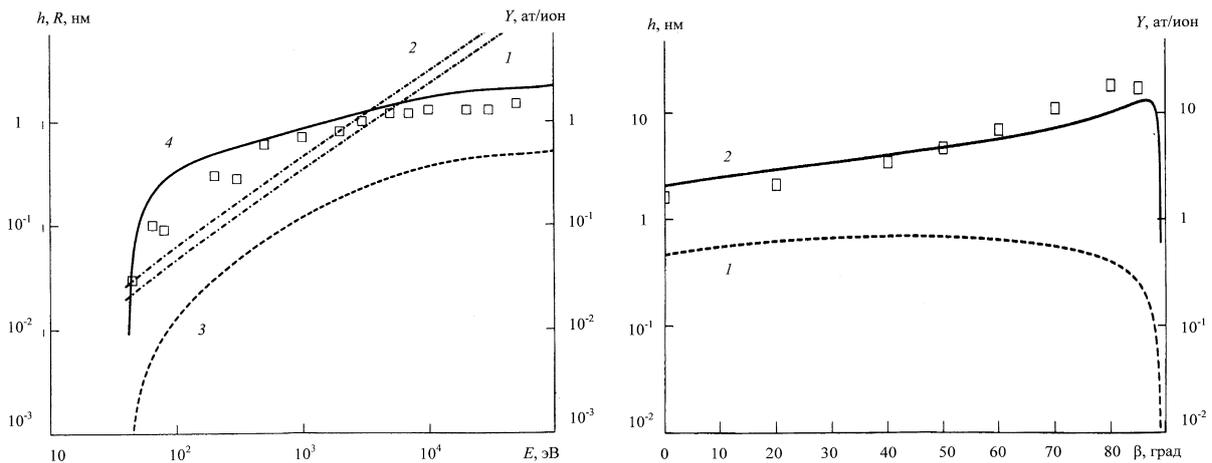


Рис. 1. Зависимости максимальной глубины выхода вторичных частиц (1), коэффициента распыления (2) и среднего пробега (R , 3 – Si, 4 – Ar) для системы Ar – Si от E (левый рис.) и β (правый рис., $E = 3.2 \cdot 10^4$ эВ) первичных ионов. Символы – экспериментальные результаты [3].

втором этапе, вычисляли зависимости коэффициента распыления от угла падения первичных ионов на мишень для конкретной энергии и с использованием параметров,

полученных на первом этапе. В случае неудовлетворительного совпадения экспериментальных и расчетных результатов параметры корректировались.

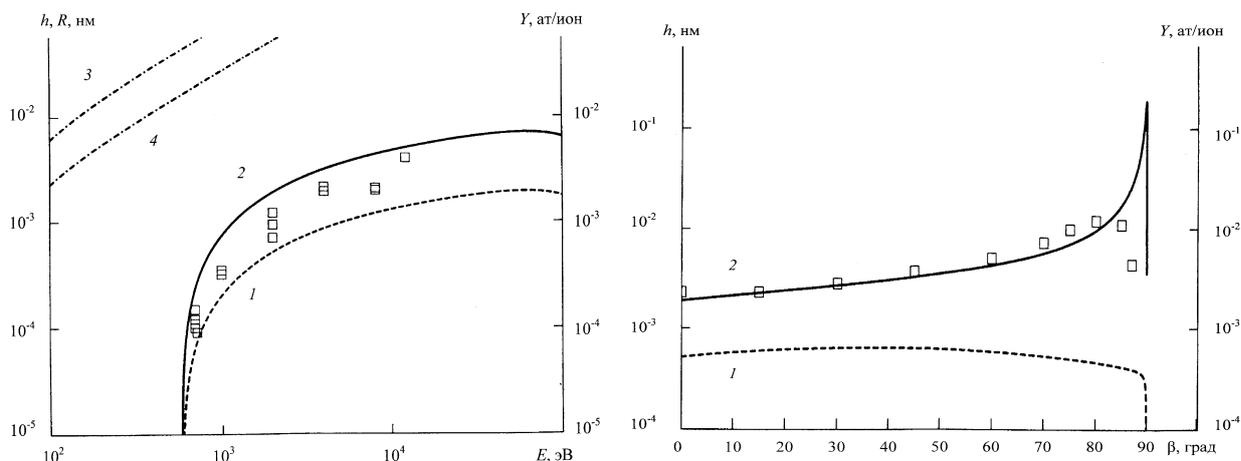


Рис. 2. Зависимости максимальной глубины выхода вторичных частиц (1), коэффициента распыления (2) и среднего пробега (R , 3 – W , 4 – H в мкм) для системы Н- W от E (левый рис.) и β (правый рис., $E = 2 \cdot 10^3$ эВ) первичных ионов. Символы – экспериментальные результаты [3].

Полученные таким образом окончательные результаты представлены на рисунках 1 (для системы $Ag-Si$, $E = 32$ кэВ) и 2 (для системы $H-W$, $E = 2$ кэВ). Экспериментальные и расчетные результаты у всех пар имеют как совпадения, так и различия. Совпадения наблюдаются для общего поведения кривых $Y(E)$ и $Y(\beta)$, а отличия в количественных результатах. Максимальные расчетные значения $Y(\beta)$ хотя и располагаются в области больших β как и экспериментальные данные, но сдвинуты на 5-10 град в область более высоких значений. Максимальные глубины выхода h зависят сильно от энергии ионов (левые части рисунков), увеличиваясь в ~ 30 раз на рис. 2 и ~ 350 раз на рис.1. В тоже время, зависимость h от β незначительная, а максимальные значения (больше на $\sim 30-40\%$) находятся при угле ~ 40 град, что ранее отмечалось в [2]. Такое поведение h указывает на два механизма образования вторичных частиц при распылении. В первом случае с ростом E возрастание $Y(E)$ связано с вовлечением в распыление более глубоких слоев мишени. Во втором случае с ростом β увеличение $Y(\beta)$ связано с вовлечением в распыление вторичных частиц, рассеянных на меньшие углы θ_1 и (или) θ_2 практически без вовлечения в процесс более глубоких слоев мишени.

[1] Пустовит А.Н.// Тез. докл. XLVI межд. Тулиновской конф. по физике взаимодей. заряд. част. с крист. / Под ред. проф. М.И. Панасюка. М.: «КДУ», «Университетская книга». 2016. С. 99.

[2] Пустовит А.Н. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2016. № 6. С. 12.

[3] Eckstein W // Sputtering by Particle Bombardment. Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies/Eds. Behrisch R., Eckstein W. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. P. 33.

ЭМИССИОННАЯ ТЕОРИЯ РАСПЫЛЕНИЯ АМОΡФНЫХ МАТЕРИАЛОВ. САΜΟΡАСΠЫЛЕНИЕ

EMISSION THEORY OF AMORPHOUS MATERIALS SPUTTERING. SELFSPUTTERING

А.Н. Пустовит
A.N. Pustovit

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской Академии наук (ИПТМ РАН), 142432, Черноголовка, Московская область, Россия,
E-mail: pustan@ipmt-hpm.ac.ru

The coefficients of selfsputtering as the function of primary ions energy and their incidence angle onto the target were calculated in terms of the emission theory of sputtering. The agreement between the calculated and experimental results are found satisfactory for systems C – C and W – W. The mechanisms that contribute to sputtering are discussed.

Одним из актуальных направлений в изучении распыления является создание аналитической теории. Предложенная в работе [1] эмиссионная теория распыления дает удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных результатов для зависимостей пороговой энергии ($E_{п}$) от соотношения масс сталкивающихся частиц и коэффициентов распыления основы (Y) от энергии первичных ионов (E). Самостоятельный интерес представляет исследование процесса самораспыления, т.е. случаев, когда массы (m) и порядковые номера (Z) иона и атома мишени совпадают. Вследствие равенства масс сталкивающихся частиц переданная энергия при столкновении максимальная.

Целью настоящей работы является исследование возможности применения эмиссионной теории распыления для расчета характеристик самораспыления (зависимостей коэффициента самораспыления Y и максимальной глубины выхода вторичных частиц h от вида бомбардируемых ионов и угла их падения на мишень β).

В случае самораспыления формула для расчета Y задается уравнением [1]:

$$Y = [1 + R_{22}(E) / d] h / R_{22}(E) \cos \beta, \quad (1)$$

где $R_{22}(E)$ средний пробег иона в мишени, d – межатомное расстояние в мишени, h – средняя максимальная глубина выхода вторичных частиц, β – угол падения иона (отсчет от нормали к поверхности образца).

Средний пробег иона в мишени $R_{22}(E)$ рассчитывали по формуле [2]:

$$R_{22} = s^2 [aZ^2 q^2 k_s]^{2/s} (E - Q)^{2/s} / \pi N a^2 B_1^2 B_2 [4a^2 (2a + d)^{-2} (1 + 3d/4a)]^{1-1/s}. \quad (2)$$

В формуле (2): N – плотность числа атомов в мишени, s – степенной показатель в потенциале взаимодействия Линдхарда-Нильсена-Шарфа, $a = 0.8853 a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$ –

длина экранирования, a_0 – борковский радиус, $B_1=(2/s)[(3s-1)/2]^{1/2}$ и $B_2=B[(2s-2)/2,2/s]$ – бета-функции, q – заряд электрона, $k_s=[(s-1)/e]^{s-1}$, Q – неупругие потери энергии иона.

Значение h вычисляется в диапазоне углов по формуле [2]:

$$h = \{ 1 - [U_0/(E - Q)]^{2/s} [\cos^2 \theta_2 (1 - \sin^2 \theta_1)]^{-2/s} + [d/R_{22}(E)] [\cos(\beta + \theta_2) \cos^{-1}(\beta) - (1 - \sin^2 \theta_1)^{-2/s}] \} / \{ [R_{22}(E) \cos \beta]^{-1} - [R_{22}(E) (1 - \sin^2 \theta_1)^{2/s} \cos(\beta + \theta_2 + \theta_1) \cos^{4/s} \theta_2]^{-1} \} , \quad (3)$$

где U_0 – поверхностная энергия связи выбитого атома, θ_1 и θ_2 – углы рассеяния иона первичного и выбитого атома в мишени. R_{22} – средний пробег атома в мишени.

Для учета зависимостей углов θ_1 и θ_2 от E используются эмпирические уравнения:

$$\theta_1 = \theta_{10} (E_{п} / E)^{1/s \lambda_1} , \quad \theta_2 = \theta_{20} (E_{п} / E)^{-1/s \lambda_2} , \quad (4)$$

где θ_{10} , θ_{20} – начальные значения углов рассеяния (при $E = E_{п}$), λ_1 и λ_2 – подгоночные коэффициенты.

Все экспериментальные значения для Y взяты из работы Экштайна в [3] для аналогичных систем. Вычисления с использованием формул (1) – (4) для систем С-С и W-W проведены в два этапа. На первом этапе рассчитывали зависимости коэффициента распыления от энергии первичных ионов в диапазоне $10-10^5$ эВ для нормального ($\beta = 0$) падения первичных ионов. После получения удовлетворительных результатов, на втором этапе, вычисляли зависимости коэффициента распыления от угла падения первичных ионов на мишень для конкретной энергии и с использованием параметров,

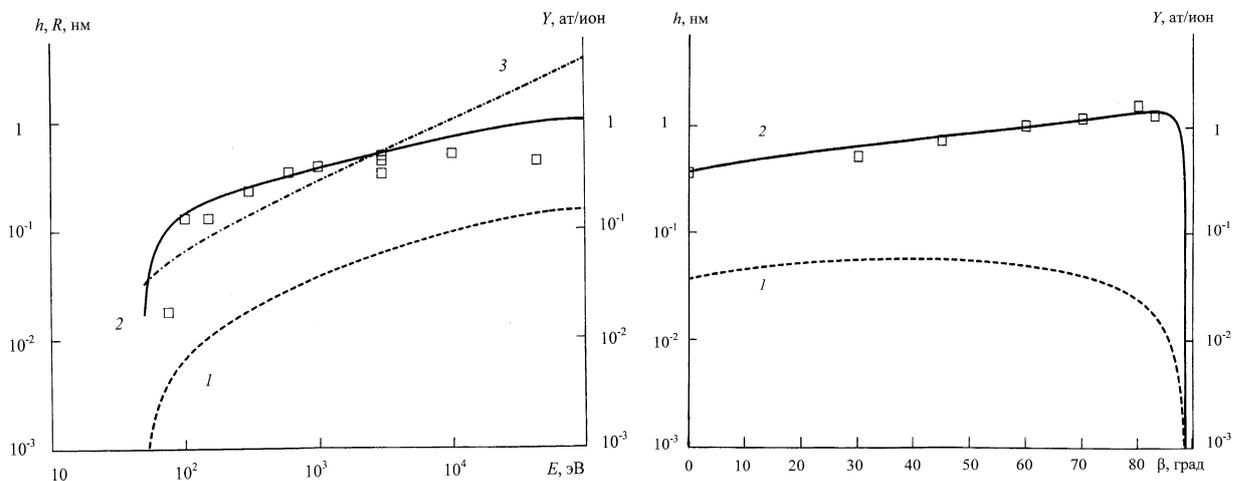


Рис. 1. Зависимости максимальной глубины выхода вторичных частиц (1), коэффициента распыления (2) и среднего пробега частиц (3) для системы С-С от E (левый рис.) и β (правый рис., $E = 10^3$ эВ) первичных ионов. Символы – экспериментальные результаты [3].

полученных на первом этапе. В случае неудовлетворительного совпадения экспериментальных и расчетных результатов параметры корректировались.

Полученные таким образом окончательные результаты представлены на рисунках 1 (для системы С-С, $E = 1$ кэВ) и 2 (для системы W-W, $E = 1$ кэВ).

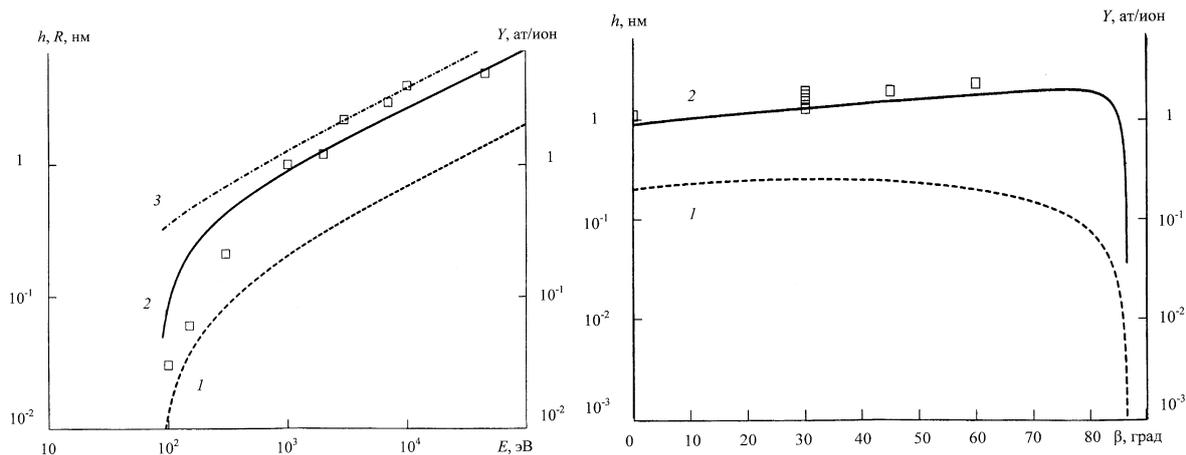


Рис. 2. Зависимости максимальной глубины выхода вторичных частиц (1), коэффициента распыления (2) и среднего пробега частиц (3) для системы W-W от E (левый рис.) и β (правый рис., $E = 10^3$ эВ) первичных ионов. Символы – экспериментальные результаты [3].

Для общего поведения кривых $Y(E)$ и $Y(\beta)$ на рис. наблюдаются приемлемые совпадения между экспериментальными и расчетными данными. Максимальные расчетные значения $Y(\beta)$ хотя и располагаются в области больших β , как и экспериментальные данные, но сдвинуты в область более больших углов на $\sim 5-10$ град. Максимальные глубины выхода h зависят сильно от энергии ионов (левые части рисунков), увеличиваясь в ~ 30 раз на рис. 1 и ~ 200 раз на рис.2. В тоже время, зависимость h от β незначительная, а максимальные значения (выше исходных при 0 град на $\sim 25-50\%$) находятся в области углов $\sim 30-40$ град, что отмечалось в [2]. Такое поведение h указывает на два механизма поступления вторичных частиц в поток распыленных атомов. В первом случае с ростом E возрастание $Y(E)$ связано с вовлечением в распыление более глубоких слоев мишени. Во втором случае с ростом β увеличение $Y(\beta)$ связано с вовлечением в распыление вторичных частиц, рассеянных на меньшие углы θ_1 и (или) θ_2 практически без вовлечения в процесс более глубоких слоев мишени.

[1] Пустовит А.Н. // Тез. докл. XLVI межд. Тулиновской конф. по физике взаимодей. заряд. част. с крист. / Под ред. проф. М.И. Панасюка. М.: «КДУ», «Университетская книга». 2016. С. 99.

[2] Пустовит А.Н. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2016. № 6. С. 12.

[3] Eckstein W // Sputtering by Particle Bombardment. Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies/Eds. Behrisch R., Eckstein W. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. P. 33.

**ВТОРИЧНОЕ РАСПЫЛЕНИЕ КРЕМНИЯ, ОСАЖДЕННОГО НА
ПОВЕРХНОСТЬ ОБРАЗЦА
ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ФОКУСИРОВАННЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ
SECONDARY SPUTTERING OF FOCUSED ION BEAM REDEPOSITED SILICON**

А.В. Румянцев, Н.И. Боргардт, Р.Л. Волков, Г.В. Чемаров
A.V.Rumyantsev, N.I.Borgardt, R.L. Volkov, G.V. Chemarov

Национальный исследовательский университет «МИЭТ», площадь Шокина, дом 1,
124498, г. Москва, г. Зеленоград, Россия, e-mail: lemi@miee.ru

Secondary sputtering of the material redeposited onto the previously milled surface during focused ion beam silicon processing is considered. It was established that redeposited material milling rate is 1.3 times higher than in pure silicon due to 20% gallium content independent of the beam energy utilized for the surface treatment. Monte Carlo simulations have confirmed the relation between the high gallium fraction in the substrate material and the sputtering yield enhancement.

При обработке поверхности твердого тела фокусированным ионным пучком (ФИП), часть распыленных атомов осаждается на поверхность образца [1]. По мере дальнейшего воздействия пучка происходит вторичное распыление этих атомов. Детальное изучение процессов осаждения материала и его последующего удаления позволит усовершенствовать модель взаимодействия фокусированного ионного пучка с веществом для количественного описания эволюции поверхности образца при распылении, а также способствует развитию практических применений эффекта переосаждения, таких как локальное контролируемое формирование аморфных или поликристаллических областей на монокристаллической подложке [2].

Для исследования процесса распыления материала, осажденного при различных энергиях пучка, на подложке из монокристаллического кремния формировались специальные, предложенные в [3] структуры, схема изготовления которых изображена на Рис. 1. На первом этапе были сформированы углубления ассиметричной формы (Рис. 1а) при ускоряющих напряжениях пучка 8, 16 и 30 кВ. Изображения в растровом электронном микроскопе (РЭМ) их продольных и поперечных сечений вдоль указанных на Рис. 1а линий представлены на Рис. 2а-в и 2г-е соответственно.

Осаждение большого количества распыленных частиц обеспечивалось за счет использования шаблона сканирования, состоящего из параллельных, на одинаковом расстоянии расположенных прямых отрезков. Цикл сканирования включал последовательное многократное прохождение пучка вдоль каждого отрезка и последующее перемещение к следующему отрезку. Реализация одного такого цикла позволила сформировать почти вертикальный наклон рельефа с осаждением значительной доли материала вблизи стенки, в направлении от которой перемещается

ионный пучок, как показано на Рис. 2а. Основные параметры процесса приведены в таблице 1. При изготовлении тестовых структур время остановки составляло 1 мкс, а полное время воздействия выбиралось так, чтобы удалить приблизительно одинаковый объем материала и получить идентичную форму углублений для ионов различных энергий.

На втором этапе использовались только поперечные сечения тестовых структур, приготовленные в области с большим количеством осажденного материала ($Si^{(r)}$) путем распыления подложки кремния, начиная от скола (Рис. 1б). С помощью данных сечений была получена гладкая поверхность с границей между осажденным и кристаллическим материалом, которая после указанных на Рис. 1б поворотов ориентировалась перпендикулярно ионному пучку, как показано на Рис. 1в. Область границы далее распылялась равномерно распределенной дозой порядка 10^{18} ионов/см² с той же энергией ионов, при которой проводилось осаждение.

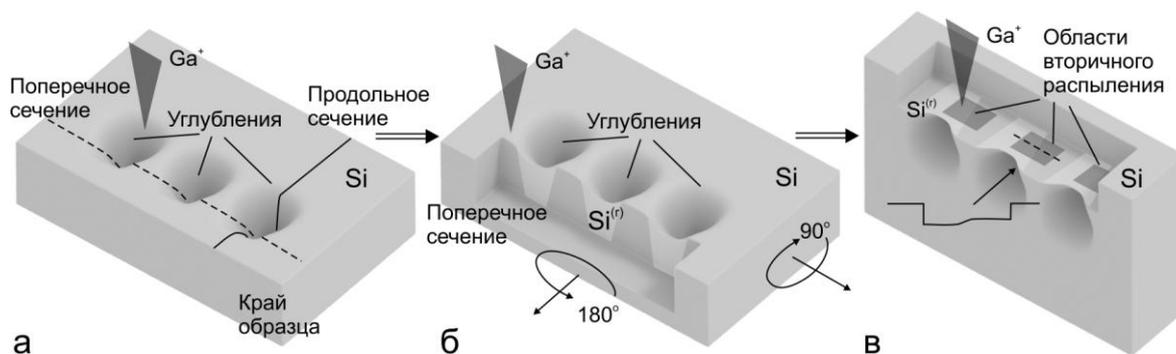


Рис.1 Схематическое изображение процесса подготовки образца для изучения вторичного распыления осажденного кремния: углубления, сформированные при ускоряющих напряжениях ионного пучка 8, 16 и 30 кВ (а), их поперечные сечения (б), вторичное распыление области границы между $Si^{(r)}$ (выглядит светлее) и Si (в).

Для улучшения контраста и защиты приповерхностного слоя на сформированные углубления напылялся тонкий слой платины и готовился образец поперечного сечения для исследования методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). На Рис. 2ж приведено изображение, соответствующее эксперименту с энергией ионов 30 кэВ. Прилегающий непосредственно к платине приповерхностный слой соответствует материалу, обогащенному при распылении атомами галлия. Из Рис. 2ж следует, что при одинаковом воздействии ионного пучка глубина распыления осажденного материала $Si^{(r)}$ в 1.3 раза больше чем кристаллического кремния. Как будет показано далее, данный результат свидетельствует об увеличении коэффициента распыления переосажденного материала: $Y_{Si^{(r)}}/Y_{Si} \approx 1.3$. Значение данного отношения слабо зависит от энергий воздействия пучка (см. таблицу 1).

Для выявления причин увеличения скорости травления проводились дополнительные исследования структуры и состава осажденного материала методами ПЭМ и рентгеновского микроанализа. Сравнение дифракционных картин от переосажденного материала и от аморфного кремния, полученного на основе метода химического парового осаждения при низком давлении (LPCVD) с приведенными в [4] параметрами, практически идентичны, что указывает на одинаковую структуру материалов и исключает образование химических соединений атомов пучка и подложки. Результаты рентгеновского микроанализа показали, что независимо от энергии ионов концентрация галлия в переосажденном материале составляет около 20%, что, по-видимому, является основной причиной увеличения скорости распыления. Также определена концентрация галлия в приповерхностном слое (Рис. 2ж) в случае воздействия пучка с энергией 30 кэВ, которая составила около 40% и 50% для кремния подложки и переосажденного материала соответственно.

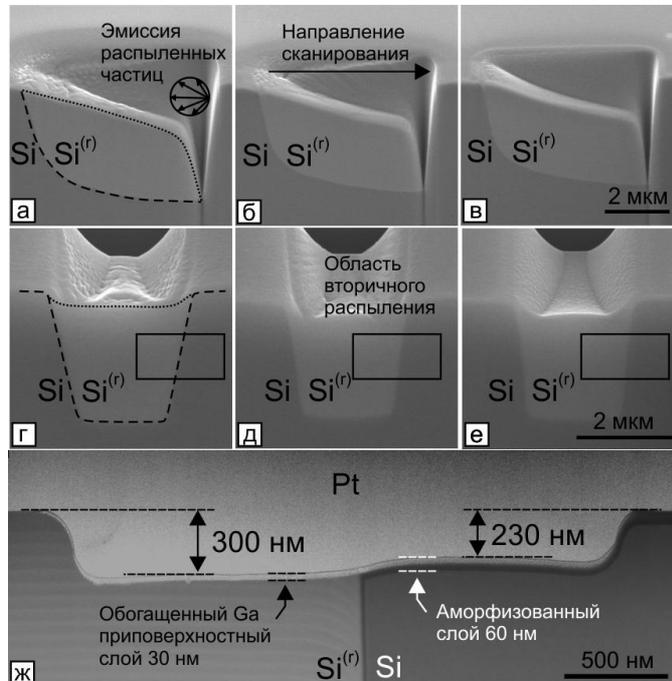


Рис.2 РЭМ-изображения (а-е) продольных (а-в) и поперечных (г-е) сечений сформированных углублений. Рисунки а,г соответствуют осаждению при ускоряющем напряжении 8 кВ, б, д -16 кВ, в, е -30 кВ. Пунктирной и точечной линиями показана граница осажденного материала с подложкой и вакуумом соответственно. ПЭМ-изображение (ж) сформированного прямоугольного углубления на границе между кристаллическим кремнием и осажденным материалом. Осаждение и вторичное распыление материала проводились при энергии 30 кэВ.

Так как атомная плотность n обогащенного галлием кремния остается постоянной независимо от концентрации галлия ($n_{Si} = 4.98 \cdot 10^{22}$, $n_{Ga} = 5.10 \cdot 10^{22}$) скорость травления v , которая в общем случае изменяется как $v \propto Y/n$, определяется

только значением коэффициента распыления $Y_{Si^{(r)}}$. Для количественной оценки влияния концентрации галлия на коэффициент распыления, проводилось моделирование методом Монте-Карло с помощью пакетов TRIDYN [5] и SDTrimSP [6] в динамическом режиме с дозой порядка 10^{17} ионов/см², обеспечивающей установившийся режим распыления. В соответствии с экспериментальными данными доля галлия в объеме осажденного материала была задана равной 20%.

Таблица 1. Параметры эксперимента и результаты моделирования методом Монте-Карло

Энергия (кэВ)	Параметры процесса при осаждении			$Y_{Si^{(r)}}/Y_{Si}$ при содержании галлия 20%		
	Ток (нА)	Полное время (с)	Шаг пучка (нм)	Эксп.	TRIDYN	SD.TRIM.SP динам.
8	0.75	392	104	1.27	1.18	1.15
16	1.7	115	78.5	1.31	1.19	1.16
30	3.5	42	66.5	1.32	1.21	1.17

Результаты расчетов показали, что установившееся содержание галлия в приповерхностной области слабо зависит от энергии пучка. Оно составляет 30-40 % и 40-50 % для распыления чистого и обогащенного галлием кремния и хорошо согласуется с экспериментальными данными. Полученное при моделировании отношение $Y_{Si^{(r)}}/Y_{Si} \approx 1.2$ не зависит от энергии пучка (таблица 1). Различие между экспериментальным и теоретическим значением может быть связано с неточностью стандартной модели расчета энергии связи поверхностных атомов рассматриваемого материала, а также не учетом возможных процессов образования преципитатов галлия и рекристаллизации кремния в приповерхностной области при распылении.

Таким образом, в работе установлено, что отношение скоростей распыления ионами галлия переосажденного материала и кремния подложки близко к 1.3 независимо от энергии пучка. Это может объясняться подтвержденным в эксперименте высоким содержанием галлия в переосажденном материале, равным примерно 20% для всех рассмотренных энергий. Поскольку галлий имеет большую ядерную тормозную способность и меньшую поверхностную энергию связи по сравнению с кремнием, увеличение его концентрации ведет к росту коэффициента распыления. Моделирование методом Монте-Карло качественно подтвердило данный вывод.

1. T.L.Matteson, S.W.Schwarz, E.C.Houge, B.W.Kempshall, L.A.Giannuzzi, J. Electron. Mater. 31 (2002) 33-39.
2. Y. Huang, D.J.H. Cockayne, C. Marsh, J.M. Titchmarsh, A.K. Petford-Long Appl. Surf. Sci. 252 (2005) 1954.
3. N.I.Borgardt, R.L.Volkov, A.V.Rumyantsev, Yu.A.Chaplygin, Tech. Phys. Lett. 41(2015) 610.
4. A.V. Novak, V.R. Novak, Tech. Phys. Lett. 39 (2013) 858.
5. W.Möller, W. Eckstein, Nucl. Instr. and Meth. B. 2 (1984) 814.
6. H.Hofsäss, K.Zhang, A.Mutzke, Appl. Surf. Sci. 310 (2014) 134.

DEUTERIUM RE-EMISSION AND THERMAL DESORPTION FROM IRON AND EUROFER

S.A. Ryabtsev*, Yu.M. Gasparyan, O.V. Ogorodnikova, Z.R. Harutyunyan, A.A. Pisarev

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),
115409 Moscow, Kashirskoe shosse 31, Russia, e-mail: ryabtsev91@mail.ru*

Reduced-activation ferritic-martensitic (RAFM) steels, such as Eurofer, are considered as candidates for structural materials in fusion reactors due to the high thermal conductivity, the low thermal expansion coefficient and good resistance to radiation swelling. There are also some concepts of fusion reactors, where RAFM steels also considered as material for plasma-facing components. In this regard, the key aspects of hydrogen (H) isotopes interaction with RAFM steels, such as tritium (T) retention and migration in these materials are particularly important as a point of safety concern.

One of the common methods for investigation of hydrogen-material interaction is thermal desorption spectroscopy (TDS). A high diffusivity, a positive heat of solution and a low binding energy of H with defects in iron, the main component of RAFM steels, leads to the fact that H isotopes are not trapped efficiently, and a significant part of accumulated H can be easily released from these steels even at room temperature, between the TDS analysis and the irradiation process. In this work, we present experimental data on the deuterium (D) release from RAFM steels in comparison with pure Fe during all stages of experiment from the beginning of irradiation to the end of TDS measurements in one installation without any contact with the air. The effect of surface oxidation on the D retention after the contact with air is also presented.

All experiments were carried out in the MEDION ion-beam facility [1], which was modified before this experimental series in order to minimize the background of D signal in the irradiation chamber during operation of the ion source and during TDS measurements. In particular, a new vacuum chamber with water-cooled walls and improved differential pumping system were installed.

Two different kinds of samples were used in the experimental series: pure iron sample (purity of 99.8%) and Eurofer sample, both with thickness of 1 mm. Each sample was used for several cycles of irradiation. In order to remove all defects produced by previous irradiations, the sample was annealed at 800 K for 10 min after TDS. There were no any indications of accumulation of defects. The samples were irradiated with D_3^+ mass-separated

ions with different energies ranging from 1 keV to 5 keV and different fluencies (2×10^{21} D/m² and 1×10^{22} D/m²) at room temperature. TDS measurements in the series were performed in 1 h after the irradiation. Release of gases from the sample at all stages of experiments was monitored by quadrupole mass-spectrometer Pfeiffer Prisma 200.

Figure 1 shows an example of experiment for iron irradiated by 5 keV D₃⁺ ions to the fluence of 2×10^{21} D/m². Three regions, re-emission flux during irradiation (sparse hatching) and deuterium release after irradiation (dense hatching) and during TDS (cross hatching), are indicated. The major part of implanted D is released already during the irradiation. One can see also, that the amount of deuterium released between the end of irradiation and start of TDS at room temperature is significantly higher than the D retention measured by TDS.

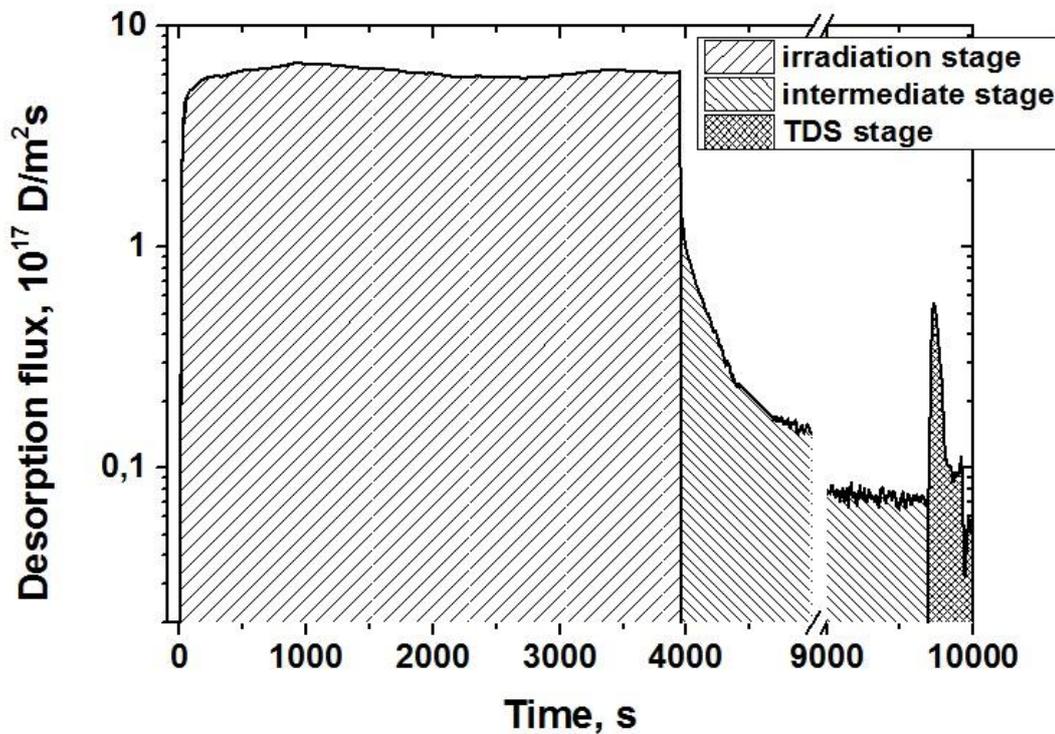


Fig. 1. The D desorption flux during and after the irradiation of iron sample with 5 keV D₃⁺ ions to the fluence of 2×10^{21} D/m².

Figure 2 illustrates the influence of the time delay between irradiation and TDS, and oxidation of the surface during air exposure. Three Eurofer samples were irradiated by 10 keV D₃⁺ with the fluence of 1.2×10^{22} D/m². However, the experimental procedure was different. The TDS for first sample was done in 30 minutes after irradiation. Second sample was kept in vacuum for 15 hours. The last sample was also done after 15 hours, but with a short air exposure. One can clearly see the difference in TDS spectra.

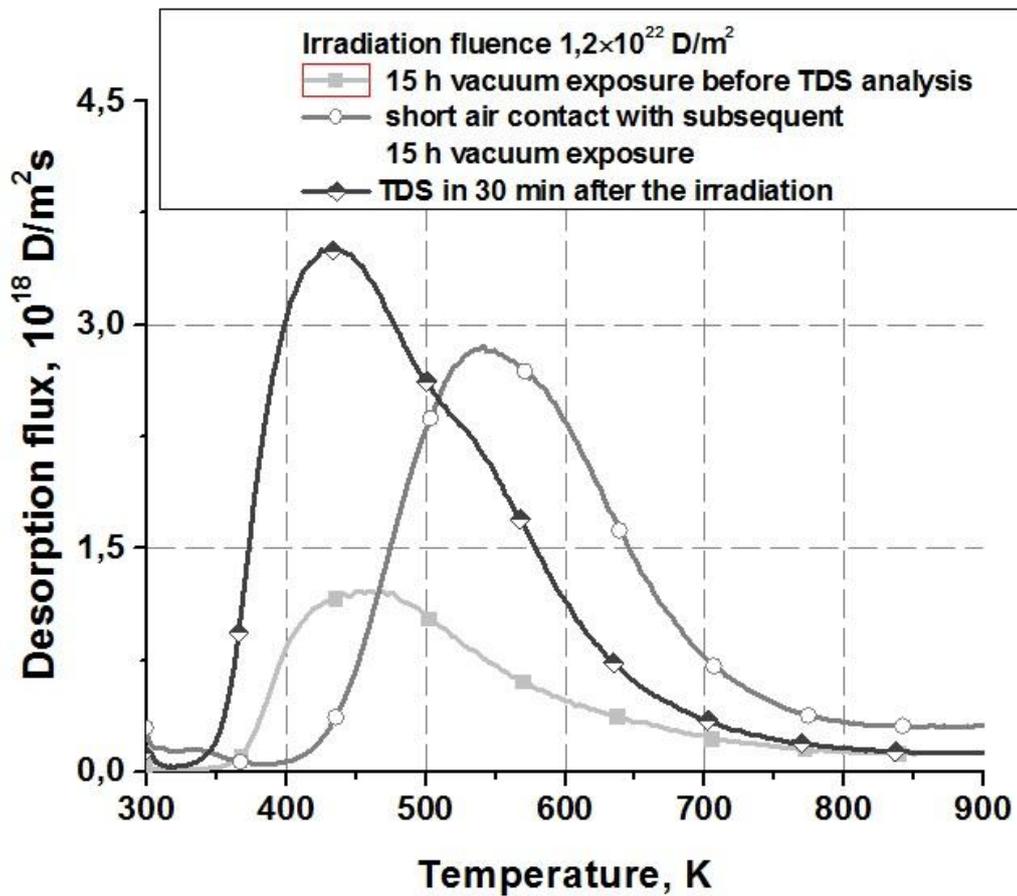


Fig. 2. Comparison of TDS spectra of D from Eurofer with different history between irradiation and TDS measurements (details in the text). Fluence - $1.2 \times 10^{22} \text{ D/m}^2$.

The TDS spectrum after air exposure has clearly shifted peak position with the maximum at 550 K. This is explained by changes in surface conditions. Because oxide layers can prevent the H desorption from steels, the total D amount measured by *ex-situ* TDS in a sample after exposure on the air is higher than that one measured by *in-situ* TDS.

All stages of experiment were simulated using 1-D diffusion model in order to get parameters of D migration and trapping in steels and to investigate the role of the surface. A good agreement was achieved assuming two types of traps.

The work is supported by the Russian Science Foundation (grant №16-12-10332).

1. V.S Efimov, Yu.M. Gasparyan, A.A. Pisarev, J. Surf. Invest. 3, 7 (2013), p. 472.

**ЭФФЕКТЫ ФОКУСИРОВКИ АТОМОВ, ЭМИТИРОВАННЫХ С ГРАНИ (001) Ni,
С РАЗРЕШЕНИЕМ ПО УГЛАМ И ЭНЕРГИИ**

**FOCUSING EFFECTS FOR ATOMS SPUTTERED FROM (001) Ni WITH ENERGY
AND ANGULAR RESOLUTION**

В.Н. Самойлов, А.И. Мусин
V.N. Samoilov, A.I. Musin

*Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия,
samoilov@polly.phys.msu.ru*

The features of angle and energy resolved focusing of atoms sputtered from the surface of the Ni (001) face were studied by molecular dynamics computer simulation. The numbers of focused and overfocused atoms decrease under transition from paramagnetic to ferromagnetic state. The maxima of focused and overfocused atoms shift towards the greater polar angles and energy with increase of the binding energy. The separate maxima of the both types of ejected atoms can be easily resolved in experiments with angle and energy resolution.

В настоящей работе представлены результаты исследований механизмов фокусировки атомов, распыленных с поверхности монокристалла под действием ионной бомбардировки. Большое внимание уделено обсуждению классификации механизмов фокусировки распыленных атомов. Анализируются классификации цепочек столкновений, приведших к распылению атома, с разделением на F (фокусированные), C (дефокусированные), CF и FC (смешанные директоны), введенные в [1], и вылета атомов по получению импульса от атомов n-го слоя Δ_0 , Δ_1 , Δ_2 , Δ_3 [2]. Обсуждается работа [3], в которой было показано, что блокировка траекторий эмитируемых атомов в сторону меньших полярных углов и по азимутальному углу является одним из основных механизмов формирования наблюдаемых пятен Венеры. Приводятся результаты работы [4], в которой было показано, что при малых энергиях бомбардирующих ионов распределение распыленных атомов в каскаде столкновений, пересекающей поверхность, не имеет максимумов вблизи плотноупакованных направлений $\langle 011 \rangle$. При этом в угловом распределении распыленных атомов наблюдались максимумы эмиссии, которые по своей угловой ширине и направлениям формирования соответствовали наблюдаемым пятнам Венеры.

Обсуждается классификация распыленных атомов с разделением на “собствен-

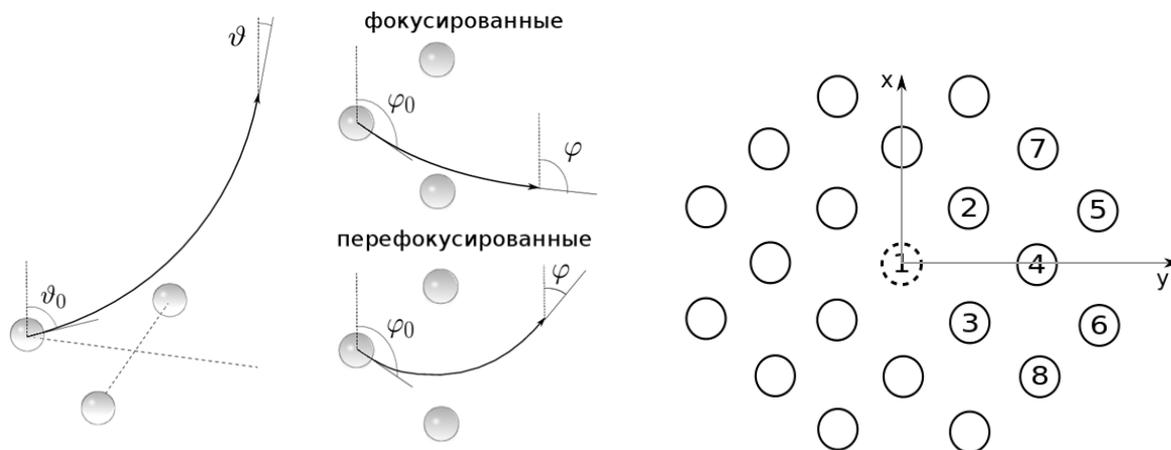


Рис. 1. Рассеяние атома на линзе из двух атомов и классификация эмитированных атомов по азимутальному углу φ (слева). Фрагмент грани (001) Ni, используемый в расчете (модель 21 атома) (справа). Вылет атома происходит из узла 1. Показана линза из двух атомов 2 и 3 – ближайших к вылетающему атому соседей в плоскости поверхности, и атом 4, на которых происходит рассеяние эмитируемого атома.

ные” по азимутальному углу и “несобственные” атомы: фокусированные и перефокусированные [5, 6]. Для несимметричных относительно направления $\langle 100 \rangle$ интервалов азимутального угла φ формирование сигнала расплывленных атомов происходит за счет “собственных” атомов, начальный угол вылета которых φ_0 принадлежит интервалу углов φ , и фокусировки “несобственных” атомов: фокусированных атомов, рассеянных на ближайшем атоме линзы из двух ближайших к эмитируемому атому атомов поверхности, и перефокусированных атомов, рассеянных на дальнем атоме линзы (рис. 1). Эффект перефокусировки был обнаружен в [4, 7] и исследован в ряде работ, например, в [5, 6].

В настоящей работе исследованы особенности фокусировки атомов, расплывленных с поверхности грани (001) Ni, по азимутальному углу φ с разрешением по полярному углу и энергии. Ставилась задача изучить вклад перефокусированных атомов в формирование распределений расплывленных атомов по углам и энергии. Также изучался вопрос о выделении перефокусированных атомов в общем сигнале эмитированных атомов. В работе проведено моделирование эмиссии атомов с грани (001) Ni при переходе из парамагнитного (p) состояния в ферромагнитное (f). Фазовый переход моделировался изменением потенциала взаимодействия атом–атом и изменением поверхностной энергии связи. В f-состоянии взаимодействие атомов включает в себя спиновое обменное взаимодействие. Для атомов Ni оно было рассчитано в [8]. Энергия связи для f-состояния на 5% больше, чем для p-состояния. Расчеты проведены по использованной нами ранее модели 21 атома [6] (рис. 1).

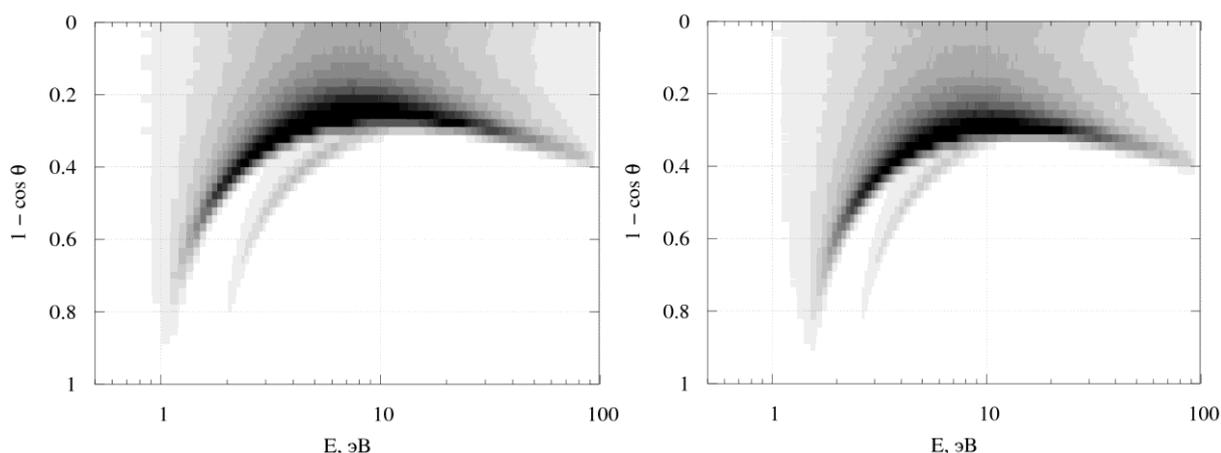


Рис. 2. Распределения распыленных атомов одновременно по $1 - \cos\theta$ и энергии E для интервала азимутальных углов φ $[76.5^\circ, 79.5^\circ]$ при эмиссии с грани (001) Ni в парамагнитном состоянии (слева) и ферромагнитном состоянии (справа). Верхний хребет образован в основном фокусированными атомами, нижний – только перефокусированными атомами.

При p–f переходе наблюдается уменьшение числа всех распыленных, фокусированных и перефокусированных по азимутальному углу атомов на 4.49% (5.48%), 9.04% (6.07%), 8.44% (8.91%) соответственно при изменении потенциала взаимодействия атом–атом (изменении энергии связи). Под влиянием каждого из двух факторов вклад фокусированных и перефокусированных атомов в распыление уменьшается на 2.62% (0.35%) и 0.28% (0.25%) соответственно. Таким образом, для этих групп атомов изменения потенциала взаимодействия и энергии связи дают вклад в одну сторону. Это можно объяснить тем, что при p–f переходе потенциал взаимодействия атом–атом становится менее жестким, а энергия связи увеличивается, что затрудняет вылет этих групп атомов. Напротив, вклад “собственных” по азимутальному углу атомов увеличивается на 2.90% (0.60%) при p–f переходе.

В распределениях с одновременным разрешением по энергии и полярному углу для фиксированных интервалов углов φ отчетливо различаются отдельные хребты – максимумы распределений для фокусированных и перефокусированных атомов (рис. 2). Максимум распределения перефокусированных атомов наблюдается в области энергии и полярных углов, при которых нет вылета других групп атомов. Таким образом, в экспериментах с разрешением по углам и энергии оказывается принципиально возможным выделить отдельно сигнал только перефокусированных атомов. При p–f переходе обнаружены заметные сдвиги максимумов распределений фокусированных и перефокусированных атомов в сторону больших энергий и больших полярных углов (рис. 2). Наблюдается также значительное уменьшение области тени для Ni в ферромагнитном состоянии.

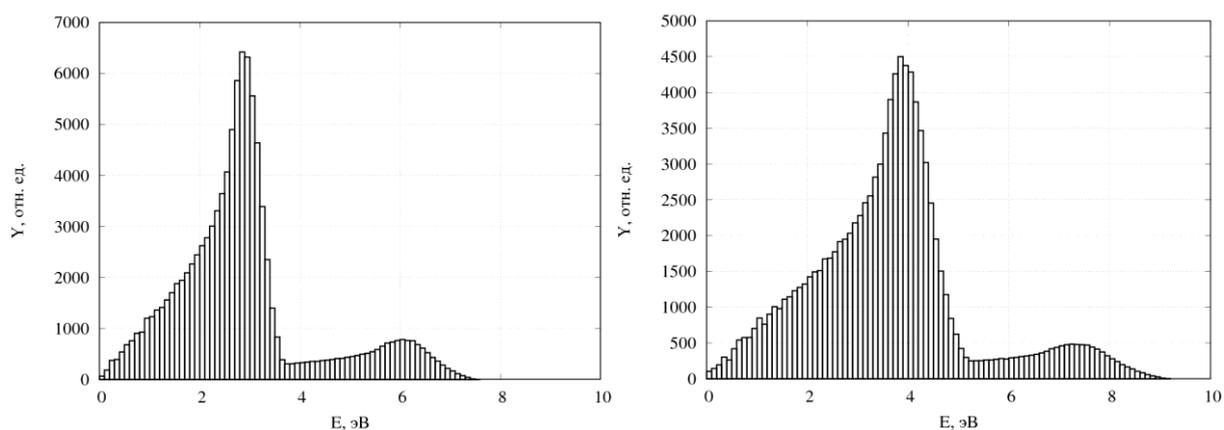


Рис. 3. Распределения распыленных атомов по энергии E при эмиссии с грани (001) Ni для полярных углов вылета ϑ [49.9° , 51.5°] и интервала азимутальных углов φ [76.5° , 79.5°]. Значение энергии связи 4.435 эВ (слева) и 5 эВ (справа). Левый максимум образован в основном фокусированными атомами, правый – только перефокусированными атомами.

Обнаружено, что при увеличении значения энергии связи максимумы распределений фокусированных и перефокусированных атомов также заметно смещаются в сторону больших полярных углов и больших значений энергии. Обсуждается вопрос о лучшем разрешении максимумов фокусированных и перефокусированных атомов. Для фиксированных интервалов полярного угла эти максимумы может разделять 2-4 эВ и более при ширине максимумов менее 1-2 эВ (рис. 3), а для фиксированных интервалов энергии они могут отстоять на $15-40^\circ$ при достаточно малой угловой ширине. Обсуждается также вопрос, материалы с какой энергией связи нужно брать для лучшего разрешения максимумов фокусированных и перефокусированных атомов.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ “Ломоносов”.

1. V.I. Shulga, Radiat. Eff. 82 (1984) 169-187.
2. S.W. Rosencrance, J.S. Burnham, D.E. Sanders, C. He, B.J. Garrison, N. Winograd, Z. Postawa, A.E. DePristo, Phys. Rev. B 52 (1995) 6006-6014.
3. G.J. Williams, B.V. King, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 153 (1999) 314-318.
4. V.N. Samoilov, O.S. Korsakova, E.L. Rodionova, A.M. Nikitin, V.I. Bachurin, Ion Beam Modification of Materials, Eds. J.S. Williams et al., Amsterdam: Elsevier Science B.V., 1996, 710-714.
5. В.Н. Самойлов, Н.В. Носов, Поверхность № 3 (2014) 81-92.
6. В.Н. Самойлов, А.И. Мусин, Н.Г. Ананьева, Известия РАН. Сер. физ. 80 (2016) 122-125.
7. О.С. Корсакова, В.А. Алешкевич, В.Н. Самойлов, А.М. Никитин, Поверхность № 2 (1997) 77-92.
8. М.В. Кувакин Некоторые задачи теории распыления. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Москва: МГУ, 1979, 147 с.

**РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО
ГАЗОВЫДЕЛЕНИЮ ИЗ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО НАСЫЩЕННЫХ ОБРАЗЦОВ НА
ПЛАЗМЕННО-ПУЧКОВОЙ УСТАНОВКЕ**

**RESEARCH RESULTS OF THE EXPERIMENTS ON GAS EMISSION FROM PRE
SATURATED SAMPLES CONDUCTED AT PLASMA-BEAM INSTALLATION**

Мажын Скаков*, Тимур Кульсартов#, Тимур Туленбергенов*, Игорь Соколов*,
Бауыржан Рахадиллов*, Дмитрий Гановичев*, Юрий Гордиенко*
Mazhyn Skakov*, Timur Kulsartov#, Timur Tulenbergenov*, Igor A. Sokolov*, Baurjan
Rahadilov*, Dmitry Ganovichev*, Yuri Gordienko*

*Institute of Atomic Energy, RSE NNC RK, Kurchatov 071100, Kazakhstan, lab243@mail.ru
SRI of Experimental and theoretical physics, Almaty 050040, Kazakhstan, tima@physics.kz

Methodological researches on estimation of gas release experiments possibility from preliminary saturated samples on plasma-beam installation were conducted in this paper.

Conduction of methodically correct post experimental tests on researching gas release from researched samples exposed to ionic radiation is one of the tasks obtaining reliable data on hydrogen isotope ion parameters interaction with fusion reactor materials [1-3].

Main points which impact on received data quality were defined for different research methods of gas release from samples after ionic radiation. Brief list of them:

A) sample pre saturation should be conducted under controlled conditions, i.e. should have adequate information on main radiation parameters:

- geometry of irradiation;
- ion flux parameter data (ion flux density, energy spectrum of ion flux);
- temperature field data in the volume of irradiation sample during radiation;
- data on irradiation time.

B) Procedures of post irradiated sample preparation on gas release should be optimal from the aspect of obtaining highest adequate information on gas release experiments. Following aspects are important according to numerous studies:

- Time of sample aging after irradiation, before gas release experiments should be possibly minimal;
- Irradiated sample contact with atmospheric gas was not desirable.

C) Gas release experiments of irradiated samples should be conducted under conditions permitting to define correctly gas flow from researched sample and depending on its temperature.

It is obviously, that for effective research on defining parameter of plasma impact on fusion reactor material sample it is desirable to have method conduction of gas release experiments directly after irradiation on the same installation on which irradiation was conducted.

Researches were conducted on plasma beam installation (scheme is in Figure 1) using target cooling device in which different researched samples were set.

Following tasks were solved during the experiment:

1) determining of sample temperature at different places, for different heating modes of samples by electron and ion beam;

2) estimation of installation system operation impact on registration of mass-spectrometer data;

3) estimation of background gas release into an installation chamber for different heating modes of samples under continuous pumping conditions;

4) obtaining depending on gas release of dissolved hydrogen from vanadium sample under sample stage heating by electron beam;

5) receiving of gas release depending saturated from deuterium ion flux from vanadium sample under sample stage heating by electron beam.

Experiments with wolfram samples were primarily conducted, for which mode parameters of sample temperature heating dimensions of 10 mm diameter; 4,5 mm thickness were estimated; data on composition of gaseous phase in interaction chamber for different stages of operation set of plasma beam installation under maximal pumping of chamber mode were given; experiments on saturation of wolfram sample by deuterium were carried out and gas release experiment under stage heating conditions was conducted.

Therefore, saturation and gas release experiments with researched sample from wolfram modeled in great amount condition impact of irradiated experiment on hydrogen isotope and target materials interaction, but not samples, defining lower border of possible background impact on such interaction.

Wolfram sample with 10 mm diameter and 4,5 mm thickness was set into target unit by molybdenum holder. CA typed thermocouple was set on sample reverse side.

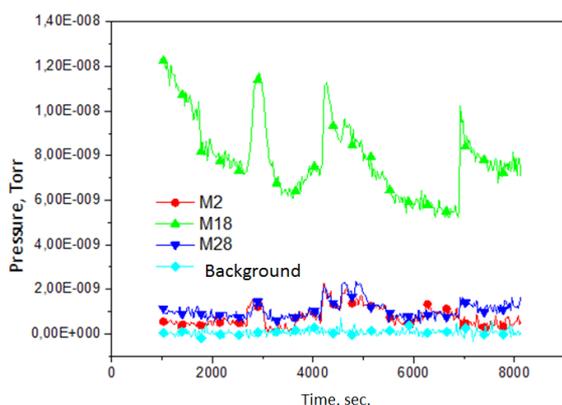


Figure 2 – Change depending of gaseous phase composition in interaction chamber under stage heating of wolfram sample by electron beam

about 5 minutes on every temperature shelves.

Sample was heated initially by 30 mm diameter electron beam, then by 8 mm diameter electron beam. Mass-spectrum changes were registered, in particular peak changes corresponding to HD, deuterium hydrogen and water molecules (see Figure 3).

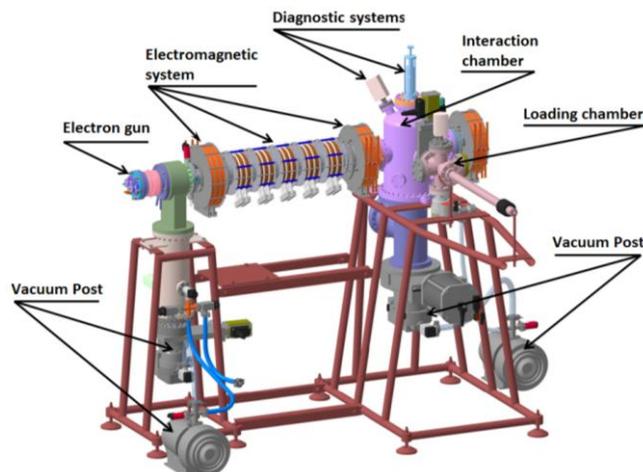


Figure1– Structural layout of plasma beam installation of simulation bench

Experiments on wolfram sample saturation with deuterium and degasification under the stage heating conditions by electron beam were conducted on the second stage of the experiment (see Figure 2).

Experiments on saturation above all should allow to estimate sample temperature level during its heating by ion and electron beam.

Saturation was conducted under deuterium pressure in recharging chamber about $3-5 \cdot 10^{-3}$ Torr; 500 V potential was given to sample upon saturation. Average saturation time was

Experiments with vanadium samples were conducted on the second stage: first sample was similar to wolfram sample (dimensions of 10 mm diameter, 4,5 mm thickness); second sample was thinner (dimensions of 10 mm diameter, 2 mm thickness).

Purpose of experiments was to define experiment mode parameters on gas release of preliminary saturated samples with maximal sensitivity of dissolved gas in sample.

At the expense of diffusion speed increase with sample temperature hydrogen release decay for second peak is more “fast” (see Figure 4).

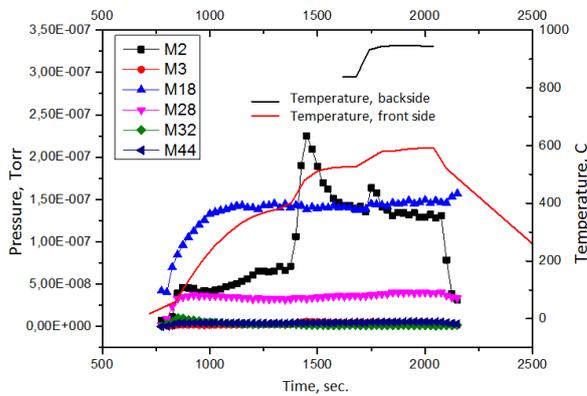


Figure 4 – Depending of gas phase composition change in interaction chamber under stage heating of vanadium sample

After second vanadium sample installation, its stage annealing was conducted under continuous pumping and mass-spectrometer registration conditions. Figure 5 shows depending change of hydrogen pressure in chamber during annealing. As can be seen from figure, hydrogen release depending similar to previous obtained one. It is seen, that at the annealing end, the sample was degasified from dissolved in it hydrogen.

Further experiment on deuterium gas release from saturated vanadium sample was conducted. Experiment diagram is shown in Figure 6. It is seen that experiment allowed to obtain qualitative gas release kinetics of deuterium and HD molecules. It turned out that deuterium quantity entered in sample in the result of interaction with ion flux was about $3 \cdot 10^{-6}$ mol.

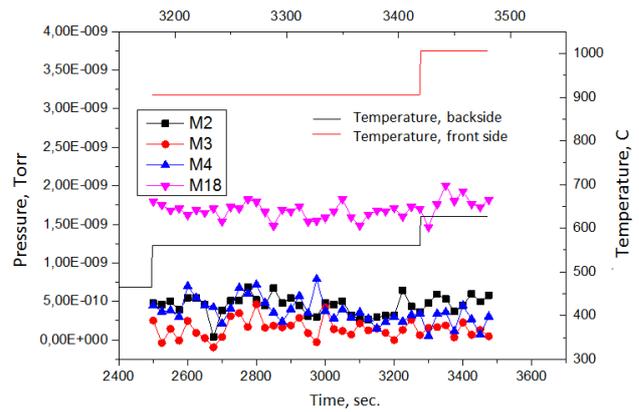


Figure 3 – Depending of gas phase composition change in interaction chamber under stage heating of wolfram sample after plasma impact

It should be noted there, that obtained experiment results on vanadium sample degasification, carried out on high sensitivity of registration system were completely approved principal possibility of gas release experiment conduction on plasma-beam installation.

Experiments with second vanadium samples were conducted for further task on defining optimal gas release method on plasma-beam installation. Second researched sample was thinner than the first, by reason of increasing method correctness.

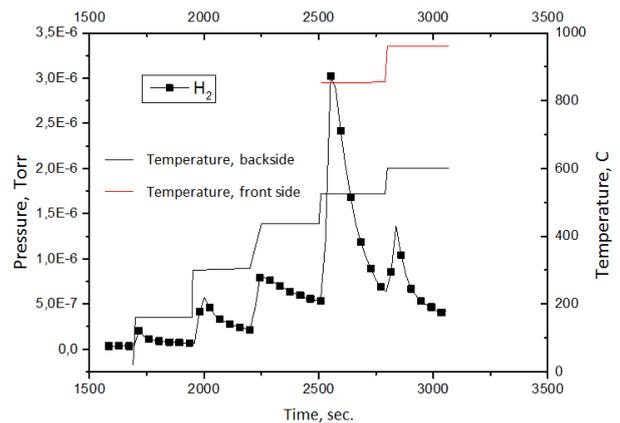


Figure 5 – Change depending of hydrogen partial pressure in interaction chamber on vanadium sample stage heating

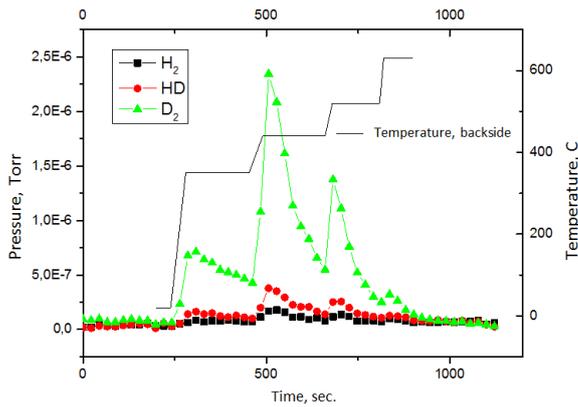


Figure 6– Gas release depending of hydrogen isotopes on stage heating of preliminary saturated vanadium sample

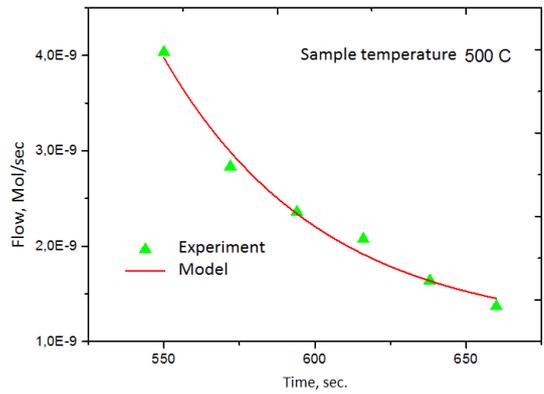


Figure 7 – Results of modeling deuterium release from vanadium sample at a sample temperature of 500 C

Modeling data of deuterium flow decay on sample temperature of 500 C is given in Figure 7.

Obtained Arrhenius depending of deuterium diffusion of effective coefficient: $D(T)=(5\pm 1)\cdot 10^{-8}\cdot \exp((12530\pm 1000)/(R\cdot T))$ coincide on volume order with number of literature sources [4].

At the present stage of development of experiment analysis means on saturation and gas release, in the basis of COMSOL Multiphysics software environment, thermophysical computations of temperature field distribution on sample during impacting electron beam on its surface.

Computation results of temperature field on sample were given in Figure 8. It is shown that generally it reflects experimentally observing effect on sample thickness significant temperature gradient.

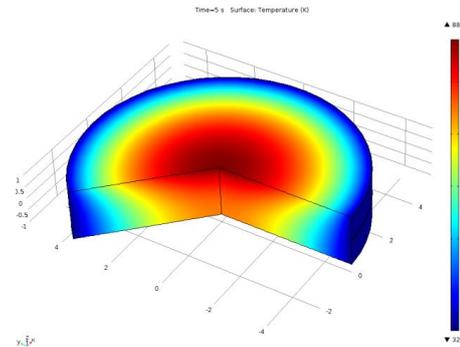


Figure 8 Temperature field on vanadium sample after 5 sec heating. Beam power is 5 W/mm²

The work is supported by the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan as a funded grant project “Experimental modeling of plasma interaction with candidate materials of fusion reactor”.

1 Loarte A., Saibene G., Sartori R. et al. Transient heat loads in current fusion experiments, extrapolation to ITER and consequences for its operation, J. Physica Scripta. 128 (2007) 222 - 228.

2 Skinner C.H., Haasz A.A., Alimov V.Kh., Bekris N., Causey R.A., Clark R.E.H., Coad J.P., Davis J.W., Doerner R.P., Mayer M., Pisarev A., Roth J., Tanabe T., J. Fusion Sci. Technol., 54 (2008) 891.

3 Pitts R.A. et al. — J. of Nuclear Materials, 415 (2011) 957.

4 Reiter F., Forcey K.S., Gerwasini A. A compilation of Tritium - material Interactions Parameters in Fusion reactor materials // Commission of the European Communities, ISPRA. Joint research center report EUR 15217 EN. - 1993. - 54 p.

ANGULAR DISTRIBUTION OF W SPUTTERED BY LOW ENERGY AR

I. Sorokin¹, E. Marenkov¹, K. Nordlund^{1,2}, A. Eksaeva^{1,3}

¹*National Research Nuclear University MEPhI, 115409 Kashirskoe sh. 31, Moscow, Russia*

²*Association Euratom-TEKES, Department of Physics, P.O. Box 43, FI-00014, University of Helsinki, Finland*

³*Forschungszentrum Juelich GmbH, Institut fuer Energie- und Klimaforschung – Plasmaphysik, 52425 Juelich, Germany*

Sputtering of the first wall tokamak materials by low energy of the order of 100 eV but high fluxes, $10^{20} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ is one of the main mechanisms responsible for steady-state first wall erosion. At such low energies sputtering occurs due to few-collision cascades. The resulting angular and energy distributions of sputtered particles are different from cosine and Thompson distributions predicted by kinetic theory of cascades valid at larger energies. Experimental data on the distributions for materials and energies of interest are scarce [1]. At the same time experiments at linear plasma devices demonstrated that the distributions play a substantial role in comprehension of the sputtered particles transport in plasma [2]. In this work we develop an experimental procedure for direct measurements of the angular distributions of the sputtered particles and a method for molecular dynamics calculation of them. The proposed simulation procedure accurately accounts for polycrystalline structure of the samples.

The experiments were conducted as follows. Tungsten (W) sputtering by argon (Ar) ions was considered. Since the sputtering yield at low energy of the ions dramatically falls by two orders of magnitude from 300 to 50 eV [3] high particle fluxes are necessary to provide the required quantity of the sputtered W for further analysis. Therefore, all the experiments were carried out at linear plasma device PR-2 [4] allowing to create high ion fluxes up to 10^{16} - $10^{18} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$. PR-2 (fig. 1) is a mirror machine with magnetic field at the centre of the vacuum chamber up to 0.1 T and a mirror ratio 1.55.

The beam-plasma discharge (BPD) initiated by the electron gun (up to 10 kW) is implemented at the PR-2. The usual diameter of the BPD column (about 3-6 cm) was limited by a diaphragm at the magnetic mirror. The sample is situated behind it at the face of the plasma column. The square of the plasma spot at the centre of the sample was 0.75 cm^2 . The biasing is applied to the sample for controlling of the projectiles energy. The accuracy of this energy is defined by the plasma potential ($\sim 20 \text{ V}$). Parameters of the BPD were fixed for all values of the energy of the argon ions: working pressure - 0.1 Pa, power of the electron gun - 220 W (1.3 kV \times 170 mA), ion flux to the W sample - $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$. Plasma parameters were

controlled by a single Langmuir probe and by magnetic mass-spectrometer measuring the mass-spectrum of the ion flux [5].

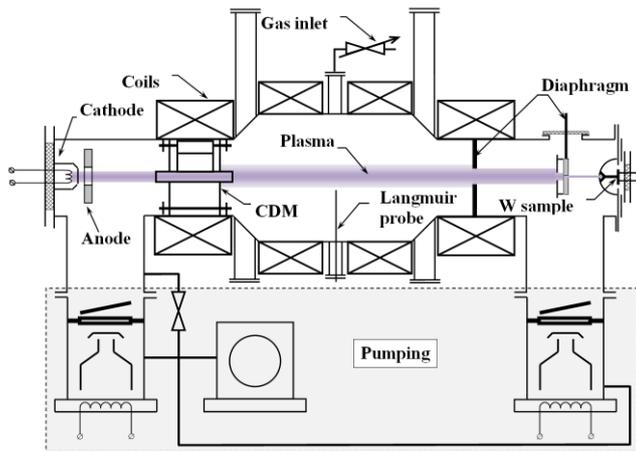


Figure 1. Linear plasma device (mirror machine) PR-2.

The collecting system was mounted around the sample. It consists of two segments of the circle ($R = 7.6$ cm) with hole at the centre. On each half of the segments the copper foils were installed as collectors for the sputtered atoms. The scheme of the collecting system is shown in fig. 2.

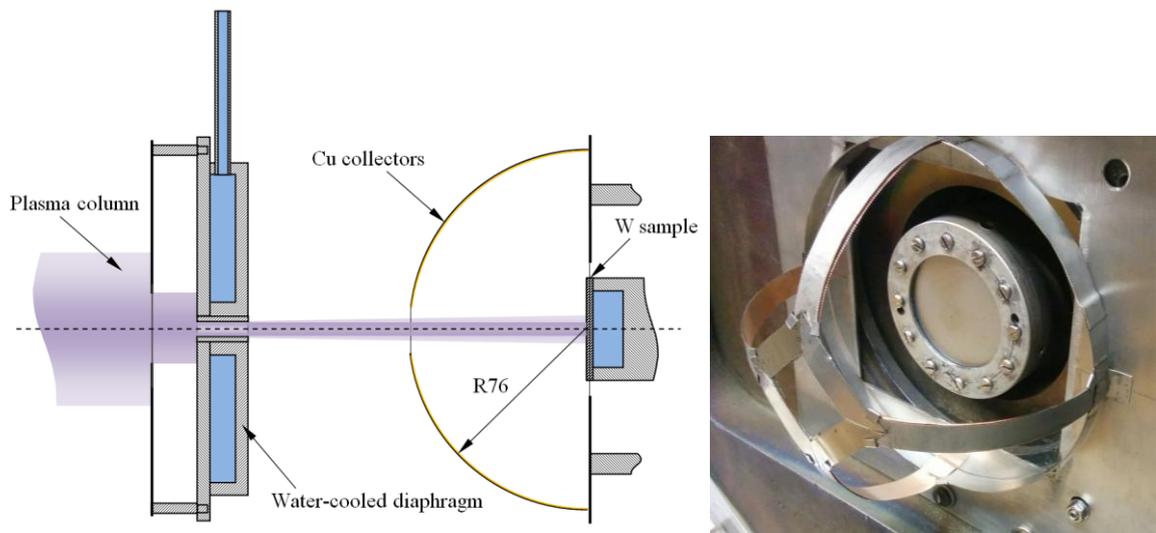


Figure 2. Scheme of the experiment and the photo of the collecting system.

After sputtering process at PR-2 the copper samples were analyzed by an energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS). The relevant exposure time for each ion energy was calculated with respect to a sputtering yield, a value of the ion flux, an expected shape of the angular distribution of W atoms and the approximate detection threshold of W on Cu by EDS (~ 100 nm for $E_e = 5$ keV). The experimental angular distribution of the sputtered W by Ar ions with energy 100, 150 and 200 eV is shown in fig 3.

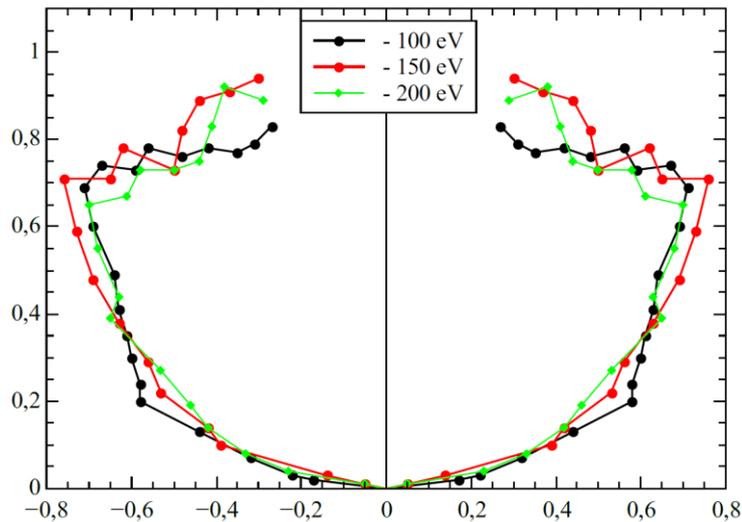


Figure 3. Angular distribution of the sputtered W measured by EDS method.

The shape of the distribution does not depend on the energy of the sputtering ions. The maximum can be found between 40 and 50 degree. All three curves are well approximated by cosine distribution in agreement with [1].

Molecular dynamic simulations were conducted with PARCAS code. The embedded method potential was used to account for W-W interactions while the universal ZBL potential was employed to calculate Ar-W interactions. Usually in MD simulations only one crystal face is considered. However, at low energies the distributions of sputtered atoms depend significantly on the surface crystal face orientation. Notice that in principle one can encounter the planes with arbitrary Miller indices. In order to account for this we have developed an algorithm for the surface “preparation” in the simulations. Calculations show that at the energies larger than 100 eV the angular distribution is cosine. The simulated energy distributions are well approximated by Thompson function.

The situation changes at lower energies. For 85 eV bombardment the angular and energy distributions are different. The angular distribution has a “butterfly” like shape and is in good agreement with experimental results in [1]. The energy distribution has a maximum shifted towards the higher energies compared to the Thompson distribution. This result contradicts the earlier findings [6] where it was shown that the maximum moves towards the lower energies when the projectile energy decreases.

The comparison of the sputtering yield and EDS signal of the tungsten is shown in fig. 4 along with Monte-Carlo simulation made with SRIM package, molecular dynamic simulations in PARCAS code, and experimental data from [3]. We see that all the simulation methods give a similar trend of the sputtering yield change, although the absolute values in

experiments are systematically lower. It may imply that as SRIM data as the potential which was used for MD simulations have higher surface binding energy than it is in reality.

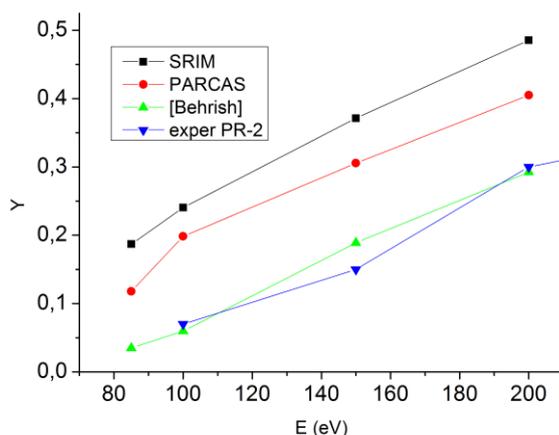


Figure 4. Sputtering yield of W by Ar and EDS signal of tungsten on the copper plate at the maximum of the measured angular distribution.

Summarizing one can say that our experiments for W sputtering by Ar have confirmed that the angular distribution of the sputtered particles remain cosine for actually quite low energies down to 100 eV when the sputtering occurs due to only few-collision cascades. This is in agreement with the performed molecular dynamics simulations. A new algorithm was developed for molecular dynamic simulations of polycrystalline targets and can be used for modeling of angular and energy distributions of the sputtered particles.

The work is supported by Russian President grant 14.Y30.17.3098-MK

1. D. Nishijima, et al. *Journal of Nuclear Materials* (2011).
2. E. Marenkov, et al. *Journal of Nuclear Materials* (2015).
3. R. Behrisch, W. Eckstein (Eds.): *Sputtering by Particle Bombardment*, Topics Appl. Physics 110, 33–187 (2007).
4. Gutorov, K.M., Vizgalov, I.V., Sorokin, I.A., Podolyako, F.S. // *J. Surf. Investig.* 2016. Vol. 10, № 3. P. 612–616.
5. Sorokin I., Vizgalov I., Kolodko D. // *AIP Conference Proceedings*. 2016. Vol. 1771.
6. Brizollara R., et al. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (1988) V. 35. P. 36-42

**МД-МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКОГО РАСПЫЛЕНИЯ ПОРИСТЫХ
SI-СОДЕРЖАЩИХ МАТЕРИАЛОВ ИОНАМИ AR НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ**
**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF PHYSICAL SPUTTERING OF
NANOPOROUS SILICON-BASED MATERIALS WITH LOW ENERGY ARGON**

А.А. Сычева*#, Е.Н. Воронина *#
А.А. Sycheva *#, E.N. Voronina *#

* *Физический факультет, Московский государственный университет имени
М.В. Ломоносова, 119991, Ленинские Горы, 1/2, Москва, Российская Федерация,
e-mail: sycheva.phys@gmail.com;*

*Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына
МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские Горы, 1/2, Москва, Российская Федерация*

Ion-stimulated plasma treatment plays an important part in the patterning of nanoporous low- k SiOCH films developed for advanced interconnects of ULSI devices. In this work, the molecular dynamics method was applied to study physical sputtering of Si- and SiO₂-based nanoporous materials under low-energy Ar irradiation. The simulation results demonstrate the differences in sputtering mechanisms for nanoporous and solid materials of the same composition.

В настоящее время совершенствование технологии производства современных микросхем и улучшение свойств полупроводниковых структур, входящих в их состав, являются одними из наиболее актуальных проблем современной микроэлектроники. Использование нанопористых SiOCH-материалов, обладающих низкой диэлектрической константой в рабочем диапазоне частот (low- k), является одним из возможных решений данных проблем [1]. Важной задачей в рамках исследований механизмов плазменного травления low- k диэлектриков является изучение механизмов физического распыления ионами инертных газов низкой энергии (до 200 эВ). Поскольку для современных low- k пленок значение диэлектрической константы зависит от размера пор, исследование влияния пористости на коэффициент распыления материала и на его морфологию может указать на возможные механизмы изменения химических и физических свойств SiOCH-структур.

В настоящее время существует несколько подходов к моделированию процесса физического распыления, одним из которых является метод молекулярной динамики (МД), основанный на временном интегрировании классических уравнений движения. В рамках данного подхода взаимодействие частиц системы определяется силовым полем, выбор которого существенно влияет на результаты моделирования. В качестве подобных силовых полей могут быть взяты как эмпирические потенциалы, например, Stillinger-Weber [2], так и потенциалы, рассчитанные на основе квантовомеханических

подходов [3]. Другой существенной трудностью при МД-моделировании является корректный учет перераспределения энергии между налетающей частицей и поверхностью материала. К данному моменту предложено несколько способов решения указанной проблемы, среди которых наиболее часто применяются отвод тепловой энергии путем искусственного охлаждения нижних слоев материала [4] и применение термостата, воздействующего на моделируемую систему с определенной периодичностью [5].

В данной работе проводилось моделирование методом МД физического распыления ионами Ar (энергия 100 и 200 эВ, нормальное падение) поверхности аморфных и кристаллических Si/SiO₂ материалов с наноразмерными порами. В рамках исследования были созданы модели двух типов пористых материалов:

- 1) модель 1: радиус пор $R_{\text{pore}} = 8 \text{ \AA}$, максимальный радиус отверстия между порами $R_{\text{int}} = 7 \text{ \AA}$, пористость – 22 % (рис. 1);
- 2) модель 2: $R_{\text{pore}} = 28 \text{ \AA}$, $R_{\text{int}} = 21 \text{ \AA}$, пористость – 44 %.

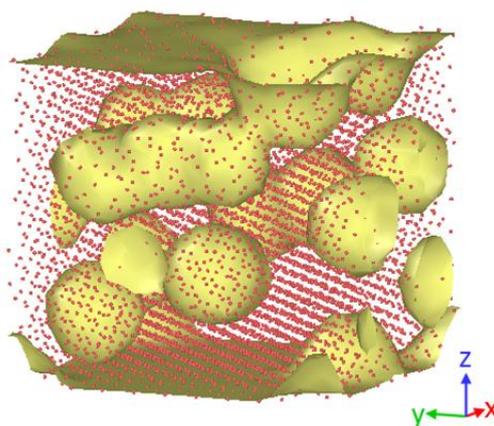


Рис. 1. Модель 1 пористого кристаллического Si

По причине существенного различия в характерных размерах пор были созданы две различные ячейки моделирования: $54,3 \times 54,3 \times 108,6 \text{ \AA}^3$ для модели 1 и $108,6 \times 108,6 \times 162,9 \text{ \AA}^3$ для обеих моделей. Они были построены таким образом, чтобы поверхности (001) кристаллических Si и SiO₂ (α -кварц) располагались перпендикулярно оси Z под вакуумным промежутком высотой $54,3 \text{ \AA}$. Вдоль осей X и Y действовали периодические граничные условия, а на верхней границе ячейки применялись поглощающие граничные условия. Модели аналогичного размера были созданы для сплошных кристаллических и аморфных Si и SiO₂ материалов. В моделях Si межатомное взаимодействие описывалось с помощью потенциала Stillinger-Weber, а для структур из SiO₂ использовалось силовое поле типа Tersoff [6]. Взаимодействие Ar

с атомами Si и O задавалось с помощью потенциала Molière (постоянная экранирования рассчитывалась по модели Фирсова).

Моделирование физического распыления происходило следующим образом. Каждые 7 пкс в верхней части ячейки создавался ион Ag с заданной скоростью вдоль оси Z, перпендикулярной поверхности модели. Подавление перегрева материала осуществлялось благодаря переменному воздействию на систему внешнего термостата в соответствии со следующим алгоритмом: первые 3,5 пкс с момента генерации иона Ag температура системы определялась только кинетической энергией ансамбля; далее к системе применялся термостат Берендсена с заданными значениями температуры (300 К) и параметром релаксации системы (18 фс). Временной шаг интегрирования был выбран равным 0,1 фс. Численное моделирование осуществлялось с помощью программного пакета LAMMPS [7] с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова. В качестве тестового расчета для сплошного кристаллического Si при энергии ионов Ag 200 эВ был получен коэффициент распыления равный 0,16, что хорошо согласуется с результатами экспериментов и других МД расчетов [8].

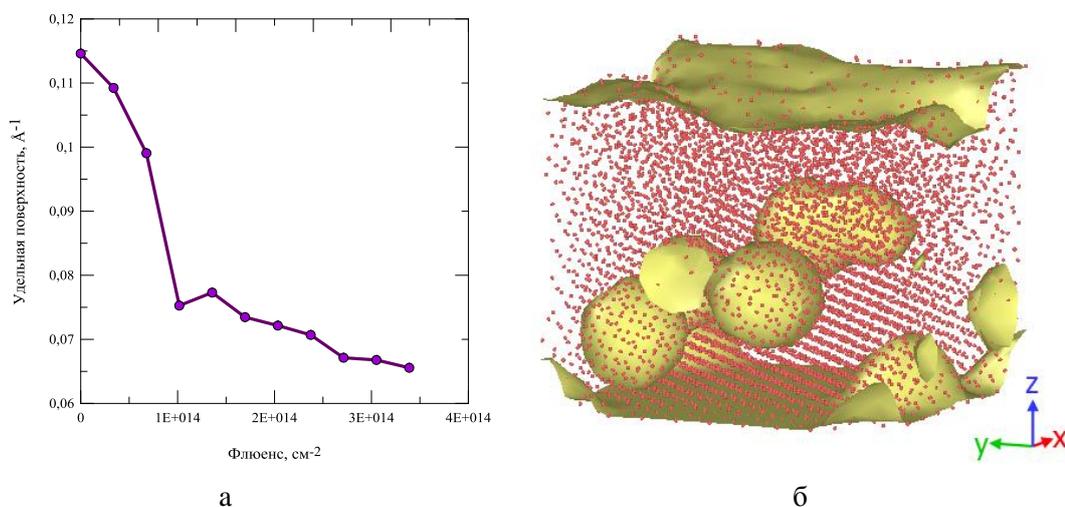


Рис. 2. Изменение структуры модели 1 пористого кристаллического Si в результате воздействия ионов Ag с энергией 200 эВ: а – зависимость удельной поверхности материала от флюенса ионов; б – изображение модели при флюенсе $\sim 10^{14} \text{ см}^{-2}$

Как свидетельствуют результаты моделирования, коэффициент распыления пористой структуры существенно возрастает по сравнению со сплошным материалом. В процессе физического распыления пористых материалов наблюдается сильная деформация открытых пор на поверхности, а также постепенное сжатие пор, находящихся вблизи нее. Количественная оценка дефектов может быть сделана на основе величины удельной поверхности материала, численно равной отношению

суммарной площади поверхности структуры к объему материала без учета пор. На рис. 2а приведена зависимость данной величины от флюенса ионов Ar при энергии 200 эВ для пористого кристаллического Si, рассчитанная с использованием пакета OVITO [9]. Хорошо видно, что при флюенсе $\sim 10^{14}$ см⁻² наблюдается полное схлопывание пор вблизи поверхности материала, что приводит к возникновению аморфного слоя (см. рис 2б), время образования которого зависит от энергии Ar, состава и температуры материала.

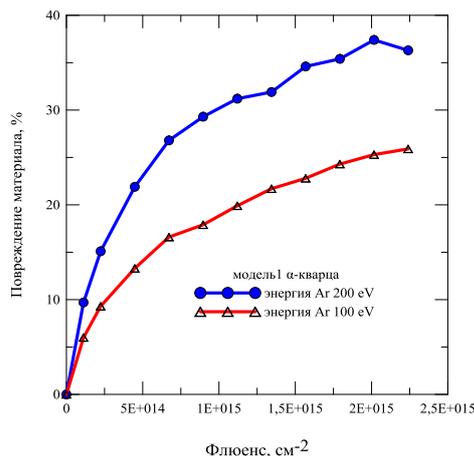


Рис. 3. Зависимость отношения числа дефектов к числу атомов в модели 1 пористого SiO₂ от флюенса ионов Ar с энергией 100 эВ и 200 эВ

Другой важной характеристикой морфологии материала является число точечных дефектов (вакансий и атомов в междоузлии), возникающих в результате облучения. Количественный анализ подобных дефектов был осуществлен по методу Вороного с использованием пакета OVITO, в качестве примера на рис. 3 приведены результаты расчетов для модели 1 α-кварца при энергиях Ar 100 и 200 эВ. Важно также отметить существенное различие в механизмах накопления Ar в приповерхностных слоях для сплошных и пористых материалов. В последнем случае налетающие ионы проникают вглубь через отверстия, соединяющие открытые поры с порами под поверхностью материала, и после образования аморфного слоя остаются в нем.

Данная работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-12-01012.

1. M.R. Baklanov, et al., J. Appl. Phys. 113 (2013) 041101.
2. F.H. Stillinger, T.A. Weber, Phys. Rev. B 31 (1985) 5262.
3. А.А. Сычева, G.G. Balint-Kurti, А.П. Палов, Письма в ЖТФ 40 (2014) 90.
4. M.C. Moore, et al., Nucl. Instr. and Meth. B 225 (2004) 241.
5. M. Timonova, B.-J. Lee, B.J. Thijsse, Nucl. Instr. and Meth. B 225 (2007) 195.
6. S. Munetoh, T. Mootooka, K. Moriguchi, A. Shintani, Comput. Mater. Sci. 39 (2007) 334.
7. S. Plimpton, J. Comput. Phys., 117 (1995) 1.
8. R. Behrisch, W. Eckstein, Sputtering by particle bombardment: experiments and computer calculations from threshold to MeV energies, Berlin, Germany: Springer, 2007.
9. A. Stukowski, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010) 015012.

Секция 2. Рассеяние и проникновение ионов

Section 2. Ion scattering and propagation

NUCLEAR RESONANT ION-ATOM ELASTIC REACTIONS AND THE ION CHANNELING EFFECT: PERSPECTIVES AND APPLICATIONS

S. Petrović*, M. Erić* and M. Kokkoris#

*Laboratory of Physics, Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, PO Box 552, Belgrade, Serbia, e-mail: petrovs@vinca.rs;marko.erich@gmail.com

#Department of Physics, National Technical University of Athens, Zografou Campus 157 80, Athens, Greece, e-mail: kokkoris@central.ntua.gr

This work reports on the application of the nuclear resonant elastic reaction $^{12}\text{C}(p,p_0)^{12}\text{C}$, at 1.737 MeV, for extraction of the dechanneling function fitting parameters and the ratio of the channeling to random energy losses, in the case of proton channeling in a $\langle 100 \rangle$ diamond crystal.

Generally speaking, in the elastic scattering of ions with nuclei of target atoms, both the Coulomb and nuclear forces can be involved. The pure Coulomb interaction results in the famous Rutherford scattering [1]. However, even for the sub-Coulomb projectile energies, the nuclear forces can significantly contribute in the scattering process via the quantum mechanical tunneling mechanism, in which a projectile can penetrate the Coulomb barrier. Thus, the differential scattering cross section can be a non-Rutherford one, especially for the

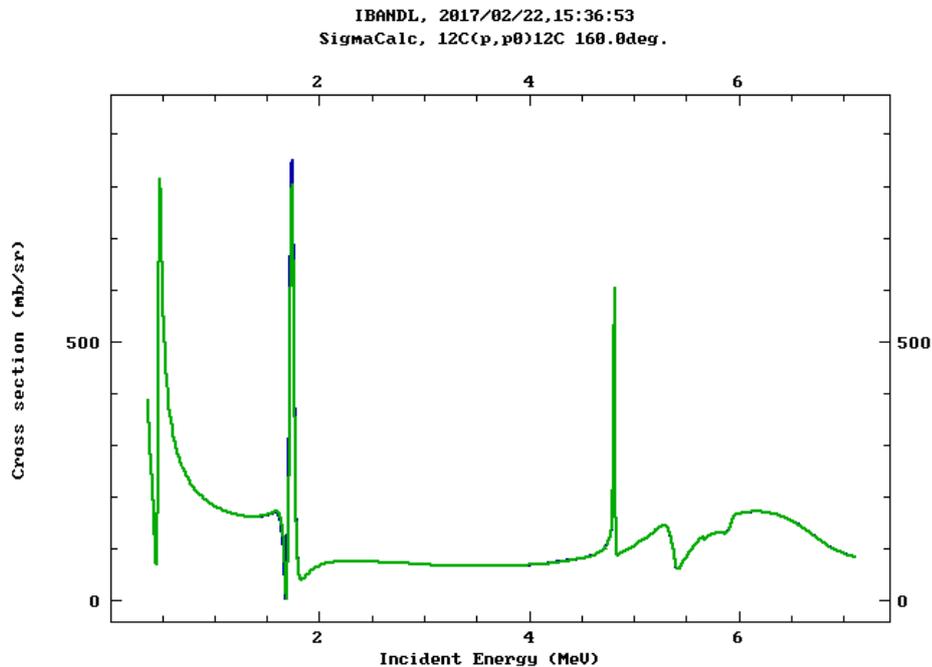


Figure 1. Dependence of the differential cross section for the backscattering angle 160 deg. on the proton energy for the elastic reaction $^{12}\text{C}(p,p_0)^{12}\text{C}$.

light projectiles (proton, deuteron and alpha particles) [2]. Additionally, for the light target nuclei, whose density energy excitation levels are low, i.e., their energy level widths are smaller than the distance between the levels, the strong resonant elastic nuclear reaction can occur. The mechanism of this reaction goes through the de-excitation of the projectile-nucleus compound corresponding to the resonant energy level of the target nucleus [3]. Figure 1 shows the dependence of differential cross section for the backscattering angle of 160 deg. on the proton energy, in the range 0 – 6.5 MeV for the elastic reaction $^{12}\text{C}(p,p_0)^{12}\text{C}$. It clearly shows three strong resonances at 0.475, 1.737, and 4.807 MeV. Data presented here were calculated by using the SigmaCalc program developed by A. Gubrich [4]

Axial ion-crystal channeling effect occurs when an ion beam interacts with a crystal in a such way that it is closely parallel to one of the main crystallographic axis of a crystal. Then, an ion experiences the coherent interaction of the atoms within the atomic strings parallel to the crystallographic axis forming the crystal "channel" (see Fig. 2). The conditions for the channeling can be expressed via the critical angle of ion velocity vector with respect to the crystallographic axis, which is defined by, $\psi_c = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{dE}}$, where Z_1 and Z_2 are atomic numbers of the projectile and target atom, respectively, E is the energy of the projectile and d is the distance between the atom in an atomic string.

Figure 2 schematically shows the axial crystal channeling and dechanneling processes.

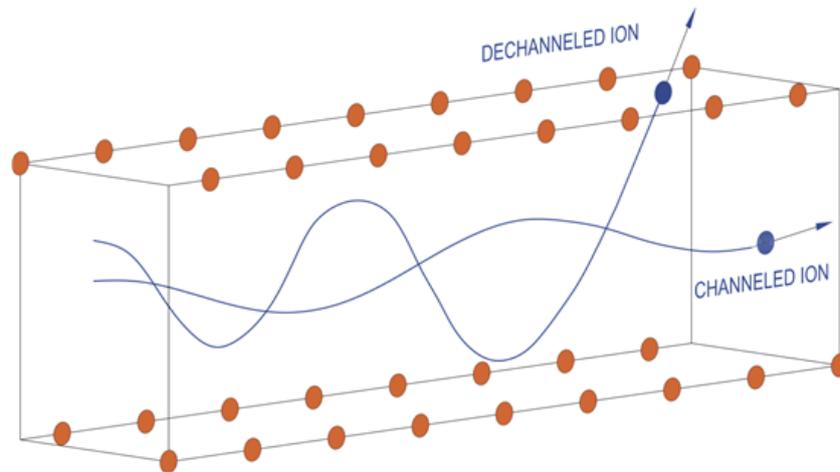


Figure 2. Schematically presented axial crystal channeling and dechanneling processes.

If the angle of ion velocity vector with respect to the crystallographic axis is larger than the critical angle the ion is dechanneled. Study of the ion dechanneling process is connected to the fact that in a typical elastic backscattering experiment in the channeling mode, EBS/C, an ion is first being dechanneled, then elastically backscattered from a target atom, passing back through the target and eventually reach the detector. Dechanneling function represents the number of the dechanneled ions with respect to the total number of channeled ions after some crystal depth. Typically, for the dechanneling function the simple exponential equation: $N_d = N_0(1 - \exp(-kx))$, has been used, where N_d is number of dechanneled ions, N_0 is initial number of ions, x is crystal depth and k is the dechanneling rate. It assumes that probability for the dechanneling is independent on the crystal depth. However, M. Kokkoris et al. demonstrated theoretically and experimentally that this assumption generally cannot hold [5]. Instead, they showed that a new sigmoidal Gompertz type dechanneling function: $N_d = N_0 \frac{e^{-e^{-k(x-x_c)}} - e^{-e^{kx_c}}}{1 - e^{-e^{kx_c}}}$ must be introduced, where x_c is the additional parameter – the dechanneling range, corresponding to the inflection point of the sigmoidal function. Figure 3 clearly shows this fact in the case of EBS/C spectra for 1.8 MeV protons and $\langle 110 \rangle$ Si crystal. Additionally, an important fitting parameter is the ratio

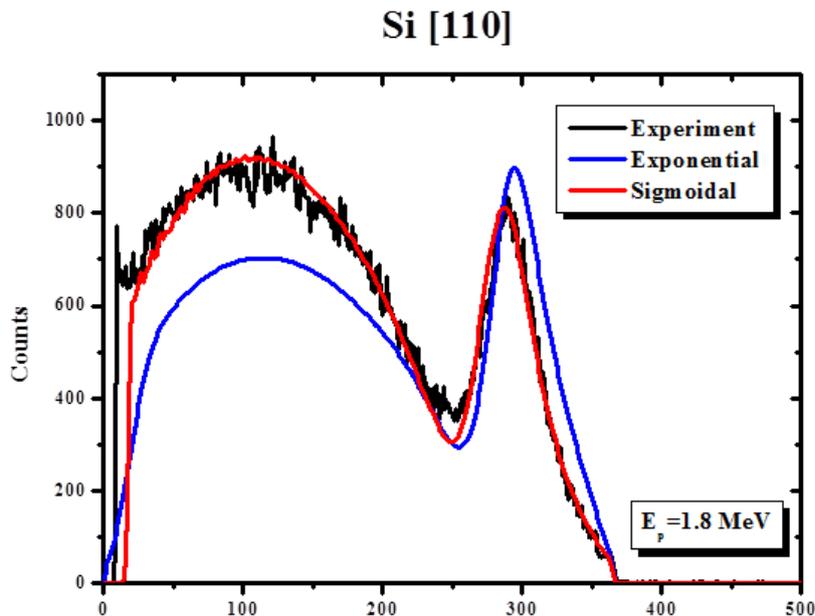


Figure 3. EBS/C spectrum and the simulation results using the exponential and the Gompertz type sigmoidal dechanneling functions for 1.8 MeV protons and $\langle 110 \rangle$ Si crystal.

of the channeling to random energy losses, α , which has been proven to be energy independent in the MeV ion beam energy region [5].

Recently, the computer program, CSIM, was developed at the Laboratory of Physics, Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia [6]. The program takes as inputs the crystal structure of the target, the projectile-atom cross section from the SimgaCalc calculations [4] and the ion beam energy loss from the Ziegler and Biersack's data [7]. Energy loss straggling was taken into account including both the non-statistical energy broadening due to the energy loss and the statistical one, originating from the different energies in the

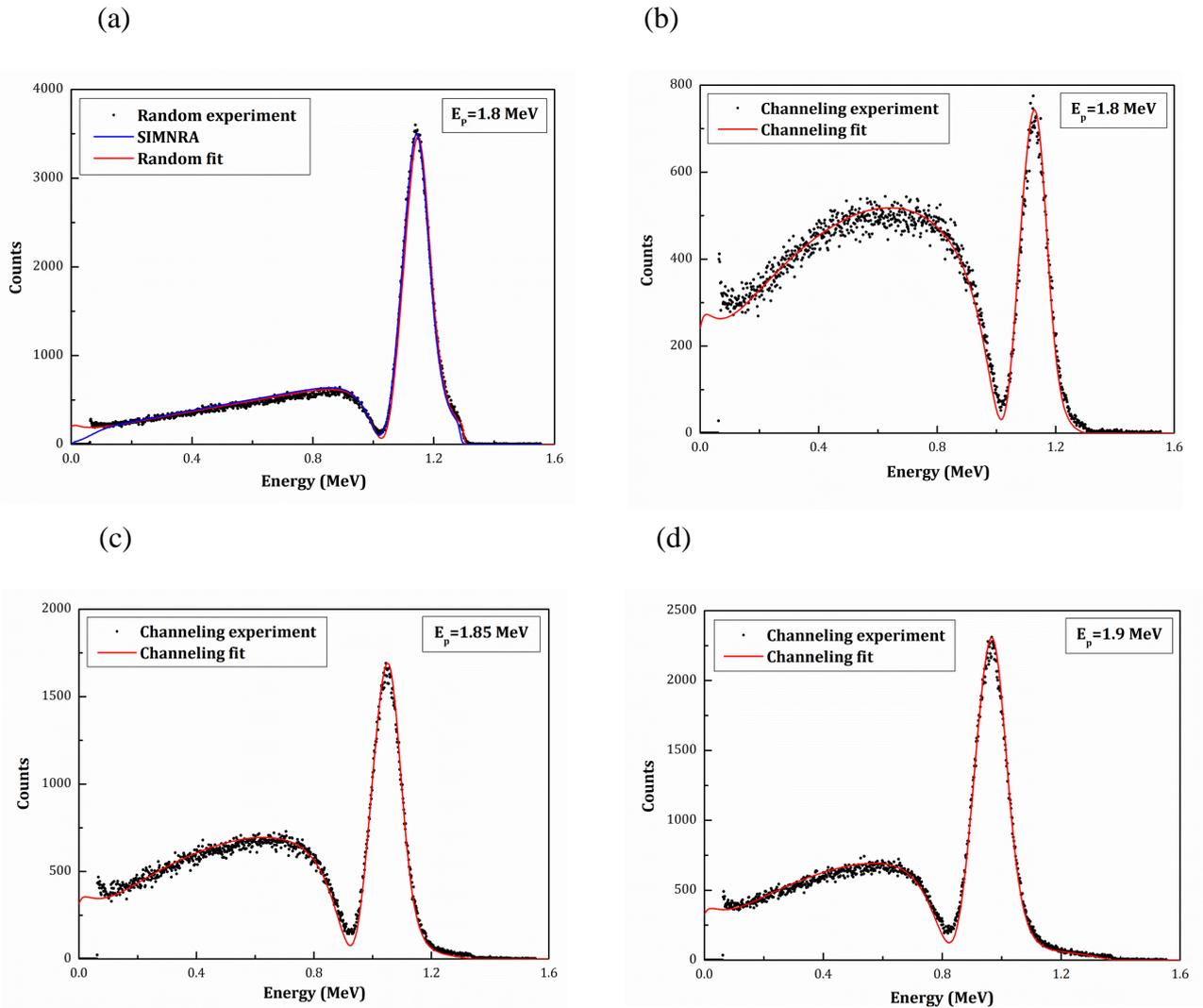


Figure 4. Experimental EBS spectrum for a) 1.8 MeV protons in the random direction with respect to the diamond crystal and the SIMNRA and CSIM fitting curves, and the EBS/C spectra for b) 1.8 MeV c) 1.85 MeV, and d) 1.9 MeV protons in the channeling direction $\langle 100 \rangle$ C crystal and the corresponding CSIM fitting curves.

beam [8, 6]. The detector resolution has been added for the final resolution of the spectrum [6].

Figure 4(a) shows the comparison between the standardly used program SIMNRA [9], the CSIM program [6], and the EBS spectrum for 1.8 MeV protons impinging the diamond crystal in the random direction. The protons were backscattered in the detector at the angle of 160 deg. This figure clearly demonstrates that the CSIM program is excellent in comparison with the standard one showing difference less than 1%.

Figures 4(b)-(d) show spectra for 1.8, 1.85 and 1.9 MeV protons, respectively, for the $\langle 100 \rangle$ diamond crystal and the corresponding CSIM fitting curves. One can observe that the reproduction of the experimental spectra is excellent. As a result, the dechanneling parameters k and x_C , as well as, the parameter α can be determined. The obtained parameters k and x_C show the expected energy trend [10], whereas parameter α is constant [6].

The obtained results for the channeling parameters are presented in Figures 5 and 6 for the parameters k and x_C , respectively and in Figure 7 for the parameter α .

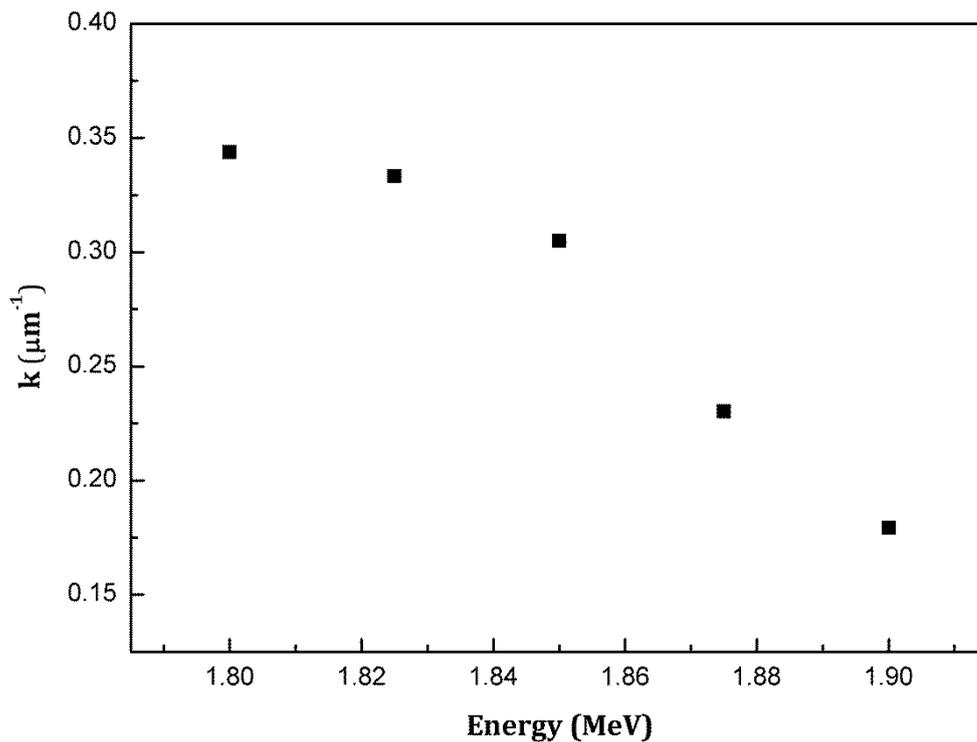


Figure 5. Dependence of the dechanneling rate on the proton energy.

It should be emphasized here that an unambiguous determination of the channeling parameters needed for the reproduction of the EBS/C spectrum requires the corresponding elastic nuclear resonant peak, i.e., the use of the pronounced maxima and minima in the spectrum. Standard EBS and/or EBS/C spectra without the resonant peak are smooth curves

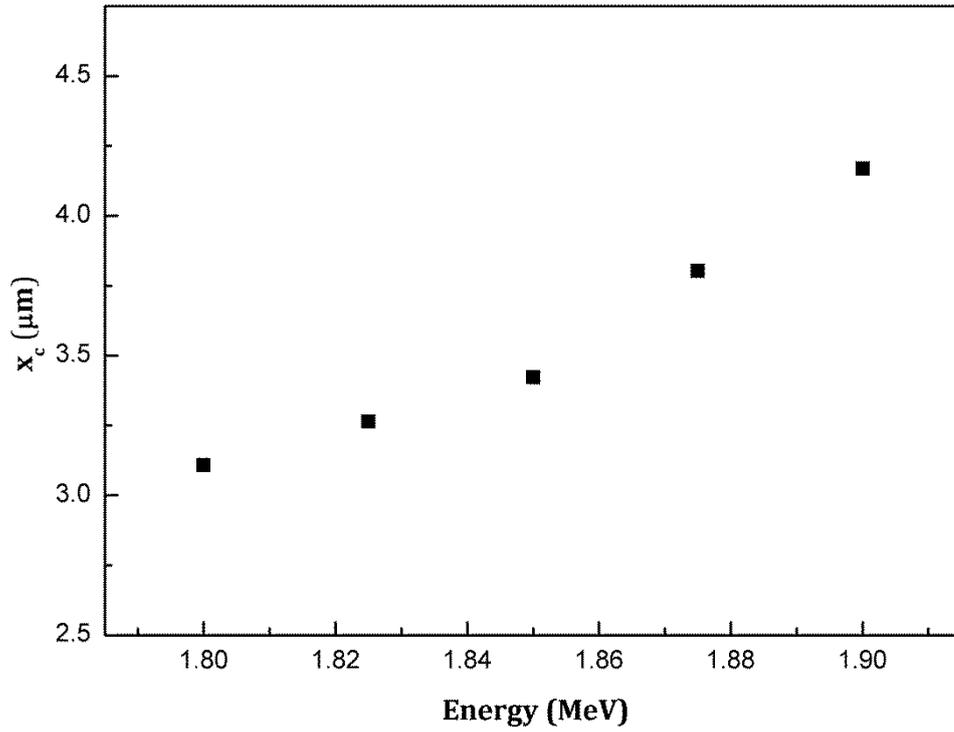


Figure 6. Dependence of the dechanneling rate on the proton energy.

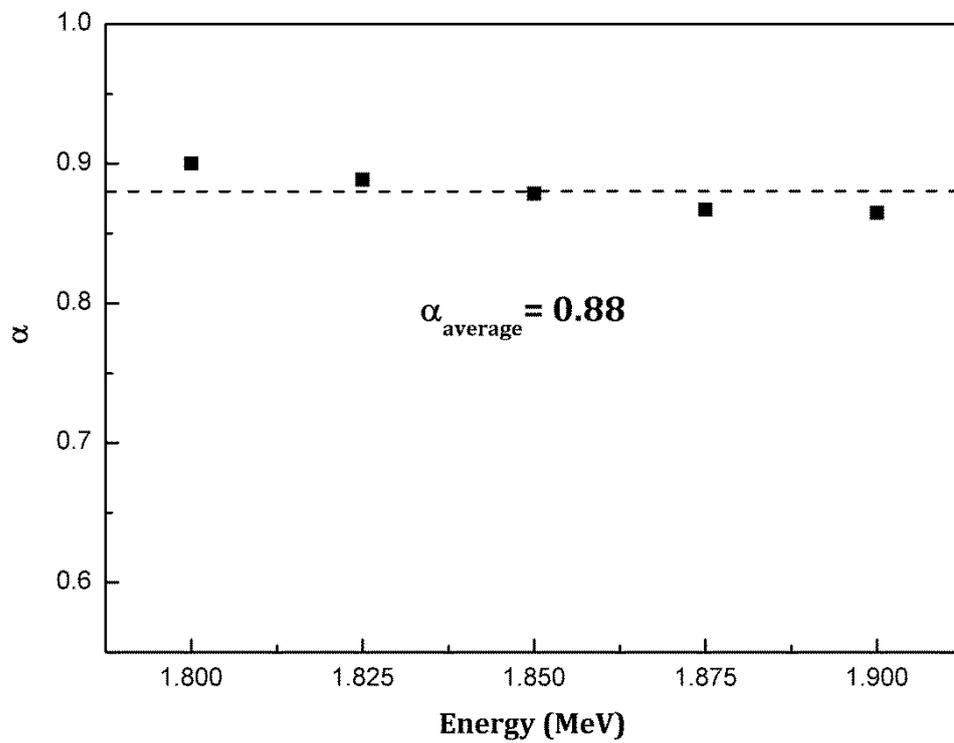


Figure 6. Dependence of the ratio of the channeling to random energy losses on the proton energy.

that cannot guaranty the unique solution for the channeling parameters in the corresponding fitting procedure. This fact, together with the presented possibilities and potentials of the newly developed program code, CSIM, can be viewed as the main results of the reported work.

1. W.-K. Chu, J. W. Mayer and M. A. Niclolet, Backscattering Spectrometry, New York, Academic Press, 1978.
2. M. Nastasi, J. Mayer and Y. Wang, Ion Beam Analysis: Fundamentals and Applications, Boca Raton, Taylor & Francis, CRC Press, 2014.
3. Ed. Y. Wang and M. Nastasi, Handbook of Modern Ion Beam Analysis, Chapter 3, A. F. Gurbich, The Interaction of Charged Particles with Nuclei, Warrendale, Materials Research Society, 2009.
4. A. F. Gurbich, "Ion Beam Analysis Nuclear Data Library," [Online]. Available: <https://www-nds.iaea.org/exfor/ibandl.htm>.
5. M. Kokkoris, G. Perdikakis, S. Kossionides, S. Petrović and E. Simoen, Euro. Phys. J. B, 34 (2003) 257.
6. M. Erich, M. Kokkoris, S. Fazinić and S. Petrović Nucl. Instr. and Meth. B, 381 (2016) 96.
7. J. Ziegler, J. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids vol. 1, New York: Pergamon Press Inc., 1985.
8. Q. Yang, D. O'Connor and Z. Wang, Nucl. Instr. and Meth. B, 61 (1991) 149.
9. M. Mayer, SIMNRA ver. 6.04, 1997. [Online]. Available: <http://www.rzg.mpg.de/~mam/>.
10. S. Petrović, M. Erić, M. Kokkoris and N. Nešković, Nucl. Instr. and Meth. B 256 (2007) 177.

GUIDING AS A GENERAL CONSEQUENCE OF THE CHARGED PARTICLE INTERACTION WITH THE INNER SURFACE OF THE INSULATOR CAPILLARY

Károly Tőkési

*Institute for Nuclear Research, Hungarian Academy of Sciences, Debrecen, Hungary, EU
ELI-ALPS, ELI-HU Non-profit Ltd., Dugonics tér 13, H-6720 Szeged, Hungary, EU*

One of the *unexpected* discoveries in 2002 was that highly charged ions are able to pass through insulator capillaries keeping their initial energy and charge state even if the capillary axis is tilted with respect to the incident beam axis larger than the geometrical limit of the capillary [1]. The fact that most of the guided ions keep their initial charge state suggests that the ions do not touch the inner wall of the capillary during the transport process, i.e. a surprisingly well-tuned electric field is formed in each capillary. The phenomenon is called as ion guiding effect. Guiding sets in when the formed charge patches reach a dynamical equilibrium, i.e. the arriving and leaving ions result in a constant amount of charge on the wall. Arriving ions come from the incident beam, while the charge decreases by transport into the bulk of the wall material, or along the surface towards the capillary exit. Most of the experiments and simulations focus on the transmission of slow highly charged ions (HCIs) through randomly distributed or ordered arrays of nanocapillaries.

Following the pioneering work of Stolterfoht et al. [1] several groups studied the ion guiding through insulating foils like Polyethylene-Terephthalate (PET), silicon dioxide (SiO_2) and aluminum oxide (Al_2O_3) nanocapillaries with aspect ratios around 100. Ikeda et al. investigated ion charge guiding through a single tapered glass capillary [2]. The guiding effect was observed for a micrometer-sized tapered glass capillary. Systematic measurements in collisions between slow HCIs and a macroscopic glass capillary with large aspect ratio and with cylindrical shape was also performed [3,4]. The results strongly support that the guiding effect known from nanocapillaries is also valid up to macroscopic dimensions of the order of mm. The angular distributions of the transmitted ions have almost a similar width as the incident beam. Considerable transmission of guided ions could be observed for tilt angles up to roughly 5° . The charging-up of the insulating wall material could be observed in time-dependent transmission measurements.

For nanocapillaries in foils, depending on the wall material and the corresponding production technique, there have been found large differences in the behavior. While the angular distribution of the HCIs passing through PET capillaries was very broad, and a significant fraction of the projectiles was transmitted through the capillaries even for tilt angles up to 25°

with respect to the incident beam direction, the angular distribution of the guided beam for the case of SiO₂ nanocapillaries was very narrow, with full widths at half maximum (FWHM) of $\sim 1^\circ$ [5].

The theoretical investigation for charged-particle transport through nanocapillaries exists. According to our recent knowledge, guiding can be interpreted in terms of a self-organized charge-up of the capillary wall [6]. Microscopic simulations revealed that after a distributed transient charge-up of the capillary wall a single or a few charge patches near the entrance dominate the guiding in dynamical equilibrium. The charging of the capillary wall acts as a Coulomb mirror which leads to reflections from the wall at distances sufficiently large as to preclude charge transfer or electronic inelastic processes. One consequence of this scenario is that capillary transmission of keV HCl's proceeds not only in their initial charge state but also without any significant energy loss. Later the type of the bombarding beams was extended, thus electrons [7], light ions [8] or even exotic particles [9,10] were proposed or tested to prove the possibility of the guiding effect.

In this work the transmission of 1 MeV proton microbeam through an insulating microcapillary is studied. Straight, single polytetrafluorethylene (PTFE) microcapillary was projected with focused proton beam with different beam intensities. We demonstrate that the guiding effect is a general law when charged particles interact with the inner surfaces of the capillaries.

In order to perform the capillary experiments with proton microbeam a new experimental setup had to be constructed [11]. The Oxford-type scanning nuclear microprobe chamber installed on the 0° beamline of the 5 MV Van de Graaff accelerator of the Atomki, Hungary, was modified. With the new setup we were able to measure the intensity, the energy distribution, the deflection and the charge state of the transmitted beam. The length of the single PTFE (Teflon) capillary was L=44mm, and the inner diameter was d=800 μm. The tilting angle of the sample was 1° relative to the beam axis. The neutrality of their inner wall was ensured by a switching on a thermal electron source before each measurement. The beam spot size was 2 x 2 μm² with divergence less than 0.3°. This beam spot size can be considered point-like with respect to the capillary inner diameter. Different incident beam currents were used and the transmitted current measured on the Faraday-cup at the capillary exit was compared to them.

First we studied the time dependence of the proton microbeam transmission. 25 percent of the incident beam was transmitted through promptly, which started to gradually increase immediately up to over 90 percent. Applying the corresponding beam intensity a stable

transmission was established which is explained by the formed guiding electric field thanks to the accumulated charge on the inner wall of the capillary. Figure 1. show two typical time trends. On Figure 1a. the beam current was 30 pA. The transmission did not remained stable. It suddenly dropped several times due to the discharge of the sample and thus the lack of the guiding electric field. These discharges could not be predicted, they appeared at various transmission values unexpectedly. We note that the same behavior was found with electron projectile and at relatively high impact energies [12]. On Figure 3b. the beam intensity was 22 pA. The transmitted intensity reached about 95% and then remained stable for over 2000 sec. until the beam was turned off.

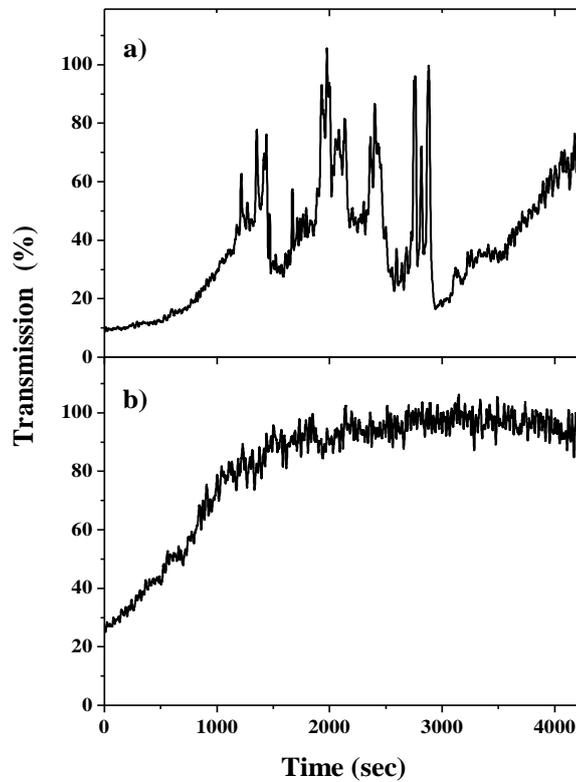


FIG. 1. Time trend of the transmission. A) The current drops due to discharges on the sample. B) After the charge-up process the guiding remained stable until the measurement was stopped. The charge accumulated on the capillary wall is less than 14 nC and the surface charge density is 12 nC/mm^2 .

During the charge-up process, we took up energy spectra of the transmitted beam several times. First when the beam was just entered: here the transmission was about 25 percent. Next steps were near the middle of the range of the transmission, and finally, when stable transmission formed. When the spectra were recorded, the particle detector was rotated into

the beam axis instead of the Faraday-cup, and the beam intensity was reduced down to about 1000 protons/sec by closing the object and collimator slits. After that, the detector was changed back for the Faraday-cup and the slits were opened out to their original state. The transmission continued from where it had been stopped, so this behavior confirms that there was no significant loss of the wall charging during the measurements of the energy spectra. Considering the collected spectra, we identified three completely different stages during the charge-up process in function of the transmission. At the beginning when the transmission was low (25 %) only inelastic contributions with energy lower than 1 MeV were found in the spectrum. This can be explained by the Coulomb scattering on the inner wall atoms. Later, when the transmission started to increase, the elastic (1 MeV) peak appeared besides the inelastically forward scattered region, and became more and more significant. Finally, when the stable transmission evolved, only the elastic peak was visible and the inelastic area was totally absent due to ion guiding (Fig. 2). The elastic and inelastic contributions of the transmitted particles is shown in Fig. 3. as a function of the total transmission rate.

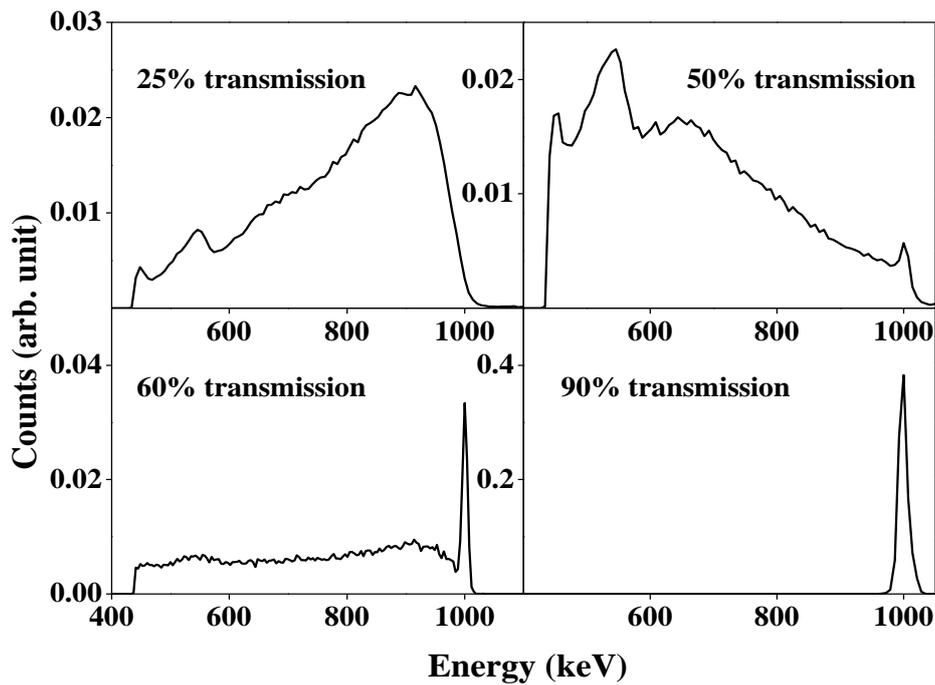


FIG. 2. Evolution of the energy distribution of the transmitted beam.

For the determination of the deflection and the charge state we took pictures of the beam on the fluorescent screen by a digital camera. The deflection of the beam at 1° tilt angle relative to the 0° was measured to be 4 mm. Considering the drift space between the target and the screen this corresponds to 1° tilt angle, i.e. the output beam must be parallel to the capillary

axis. The charged and the neutral particles could be separated by the deflector plates. 2.7 kV high voltage was applied between the two electrodes. The photos proved that the whole beam had been steered due to the high voltage, i.e. the transmitted beam contained only charged particles, i.e. protons.

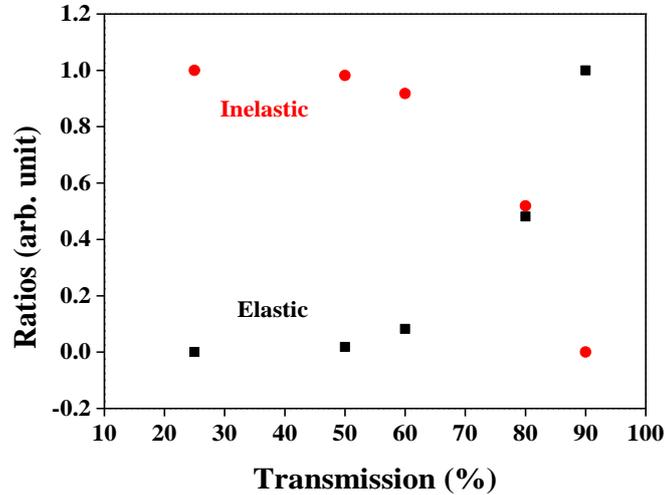


FIG. 3. The change of the ratios of the elastic and inelastic contributions at various transmissions.

In this work, instead of HCl, the combination of MeV proton microbe beam and Teflon microcapillary has been used to study the guiding process. Our experiments have shown the evidence that MeV energy protons can be guided through a single microcapillary, thus significant transmission can take place even through a tilted sample when the sample is geometrically not transparent. The intensity of the transmitted beam was measured by a Faraday-cup placed behind the sample. The energy distributions of the transmitted particles were detected by a particle detector and the measured spectra were analyzed at different stages of the charge-up process. We identified three completely different regions in the transmission as a function of time. At first, at the beginning of the creation of the charge patch on the inner wall of the capillary, the energy spectra of the transmitted protons contained only inelastic contributions. This is due to Coulomb scattering on the inner wall atoms. Later the elastic peak also appears and becomes more and more significant. Finally, in the third region, after the amount of deposited charge on the wall reached a dynamical equilibrium, stable guided transmission was obtained.

The work was done in collaboration with G.U.L. Nagy, I. Rajta. This work was supported by the Hungarian Scientific Research Fund OTKA No. K103917, by the COST Actions CM1405

(MOLIM) and MP1306 by the ELI-ALPS project is also acknowledged. The ELI-ALPS project (Grants No. GOP-1.1.1-12/B-2012-000 and No. GINOP-2.3.6-15-2015-00001) is supported by the European Union and co-financed by the European Regional Development Fund.

- [1] N. Stolterfoht, J.-H. Bremer, V. Hoffmann, R. Hellhammer, D. Fink, A. Petrov, and B. Sulik, *Pys. Rev. Lett.* **88**, 133201 (2002).
- [2] T. Ikeda, Y. Kanai, T. M. Kojima, Y. Iwai, T. Kambara, Y. Yamazaki, M. Hoshino, T. Nebiki, and T. Narusawa, *Applied Phys. Lett.* **89** 163502) (2006).
- [3] R. J. Berezky, G. Kowarik, F. Aumayr, and K. Tőkési, *Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res.* **B267** 317 (2009) .
- [4] K.A. Vokhmyanina, L. A. Zhilyakov, A. V. Kostanovsky, V. S. Kulikauskas, V. P. Petukhov, and G. P. Pokhil, *J. Phys. A* 39, 4775-4779 (2006).
- [5] A. Cassimi, T. Muranaka, L. Maunoury, H. Lebius, B. Manil, B.A. Huber, T. Ikeda, Y. Kanai, T.M. Kojima, Y. Iwai, T. Kambara, Y. Yamazaki, T. Nebiki, and T. Narusawa , *Int. J. Nanotechnol.* 5, 809 - 818 (2008).
- [6] K. Schiessl, W. Palfinger, K. Tőkési, H. Nowotny, C. Lemell, J. Burgdörfer, *Phys. Rev. A* 62 042902 (2005).
- [7] K. Schiessl, K. Tőkési, B. Solleder, C. Lemell and J. Burgdrfer, *Phys. Rev. Lett.* **102** 163201 (2009).
- [8] J. Hasegawa, S. Jaiyen, C. Polee, N. Chankow and Y. Oguri, *J. Appl. Phys.* **110** 044913 (2011).
- [9] D. Tomono, T.M. Kojima, K. Ishida, T. Ikeda, Y. Iwai, M. Tokuda, Y. Kanazawa, Y. Matsuda, T. Matsuzaki, M. Iwasaki and Y. Yamazaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 044501 (2011).
- [10] R.D. Dubois and K. Tőkési, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **279** 186 (2012).
- [11]G. U. L. Nagy, I. Rajta, R. J. Berezky, and K. Tőkési, *AIP Conf. Proc.* 1525 40 (2013).
- [12]B. S. Dassanayake, R.J. Berezky, S. Das, A. Ayyad, K. Tőkési, and J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* **83** 012707 (2011).

INSULATING CAPILLARIES AS SELF-ORGANIZED ELECTROSTATIC LENSES

E. Giglio^a, S. Guillous^a, G.U.L. Nagy^b, H. Zhang^d, A. Cassimi^a, R. D. DuBois^c, K. Tökési^b

^aCentre de Recherche sur les Ions, Matériaux et Photonique (CIMAP),
F-14000, Caen, France

^bInstitute for Nuclear Research, Hungarian Academy of Sciences, 4026
Debrecen, Hungary

^cMissouri University of Science and Technology, Rolla, MO 65409 USA

^dSchool of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou,
China

Under charged particles impact, insulator surfaces accumulate electric charges at the impact points. Those charge patches generate an electric field that, if sufficiently strong, prevents the following beam particles to hit the insulator surface. This basic property led to the discovery that slow ions can pass through insulator capillaries due to the self organized formation of charge patches at the inner wall that guide the ions. The transmitted ions keep their initial charge state, even for geometrical conditions that do not allow it. The phenomenon is called charged particle guiding by insulators and is it has become an intensively studied field since its discovery more than 10 years ago. Many of the experiments and simulations studied the transmission through randomly distributed or ordered arrays of nano-capillaries [1]. Others used macroscopic glass tubes with large aspect ratio in their experiments [2, 3]. A special class of capillaries are conical glass capillaries. They are obtained by locally heating a glass tube and then pulling on the ends. They are typically 70 mm long, with an inlet diameter of 1 mm and an outlet diameter between 20 and 100 μm .

For conical capillaries, experimental and theoretical studies mainly focused on (i) the ion transmission as a function of the tilt angle between the capillary axis and beam axis, (ii) the kinetic energy or charge state of the beam ions [4]. A major issue that experimentalists had to address with tapered capillaries was the Coulomb blocking of the capillaries. Indeed, because of the tapered shape, most of the injected ions hit the inner surface of the capillary, where they deposit a positive charge at the impact point. Combined with a negligible leakage current because of the low conductivity

of glass, of about 10^{-15} S/cm, the accumulated charge rises nearly linearly in time. After a given time, the electric potential of the capillary can exceed the extraction potential of the ion source. As a result, the ions u-turn in the capillary and the transmission stops. In order to avoid the Coulomb blocking of the transmission, many authors grounded electrically the capillaries by covering the outer surface with a conducting paint or by putting the capillaries into a grounded metal cylinder. Others used the spray of secondary electrons, generated by the beam at the collimator plates, to neutralize the outer surface of the capillary.

Few experiments however were done in order to control the rise of potential of the capillary and exploit the relatively high self-organized potential to guide the ions. We found in our theoretical study that if the self-organized potential of the capillary approaches 80% of the extraction potential of the source, then a conical capillary behaves like an electrostatic lens (Einzel lens) and the incoming beam is focused through the micrometer outlet of the capillary [5]. With increasing potential, the focusing point is moved from infinity to the outlet of the capillary. As a result, the transmission rate increases quickly, reaching a transmission rate orders of magnitude above the geometrical one. Being able to use glass capillaries as self-organized electrostatic lenses is not only an interesting fundamental experimental and theoretical problem, it is also certainly useful in ion beam lines where the small size of the capillary may replace advantageously larger Einzel lenses, like for example in Focused Ion Beam (FIB) lines. Further, glass capillaries have also been used for cancer therapy with ions, where the capillary is inserted in the tumour for depositing energy locally with higher precision.



Figure 1: Electrode setup of conical-shaped borosilicate capillaries with deflection plates.

The scope of this talk is a combined experimental and theoretical study of the lens effect in tapered glass capillaries. We present an original experimental technique, based on a freshly designed capillary holder. The potential of the capillary generates an electric field between a pair of deflection plates, see figure 1. The latter allows measuring simultaneously the accumulated charge in the capillary and the transmitted intensity. Linking the transmission rate

to the capillary potential will permit to identify the critical moment where a significant increase of the transmitted intensity can be expected. Also, it permits to identify if a possible blocking of the transmission is indeed due to Coulomb blocking or to unbalances charge patches, by comparing the potential of the capillary to the extraction potential of the ions. The holder is designed such as to screens the capillary from stray electrons, avoiding eventually a spurious neutralization of the capillary. This is an important feature of the setup, as, in our case, the potential of the capillary needs to approach the kV range. Indeed, with such a high potential, the capillary attracts easily stray electrons if not properly shielded [6].

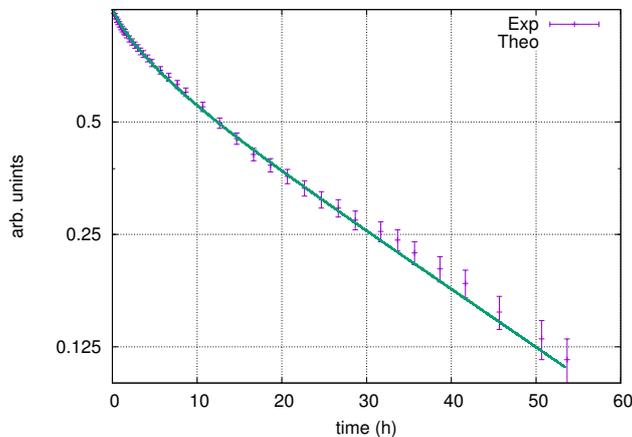


Figure 2: Experimental discharge of a conical glass capillary sitting in our capillary holder, at a temperature of $T=310\text{K}$ (violet error bars). The solid green lines stand for a simulation with our InCa4D numerical code. The simulation is able to fit in detail the experimental data. Best agreement was found for a bulk conductivity $\kappa = 3.1 \times 10^{-13} \text{ S/m}$, which lies within the expected range for the conductivity of borosilicate glass.

Alongside, we have also developed a numerical code, InCa4D [5], for the theoretical support of the study. In order for the simulations to produce reliable predictions, a particular attention was brought to the underlying theoretical model. Indeed, while the guiding of ions through glass capillaries due to charge patches is qualitatively understood, the complex nature of the electric conduction in such insulators makes quantitative predictions still a challenging task as can be seen by the often erratic behaviour of the transmitted beam. The time-evolution of the transmission depends of course on the dynamics of the charge patches, which in return depends on the charge injection rate by the ion beam and the relaxation dynamics of the charge patches. The latter again depends on the possible presence of metal electrodes that

influence the electric field generated by the accumulated charge in the capillary. This is why a combined theoretical and experimental study of the charge relaxation in glass capillaries will be presented in the first part of the talk. We studied two different cases: i) The discharge of a small single charge patch in a glass tube. ii) The discharge of a highly charged conical macrocapillary. In both cases, the electric field, induced by the deposited charges, is monitored by using the ion beam as probe. The Coulomb deflection of the probe beam is followed in time on a position sensitive detector, yielding the relaxation in time of the deposited charge. The same observables were simulated and compared to the experimental data. They eventually validate the theoretical model used in our simulations.

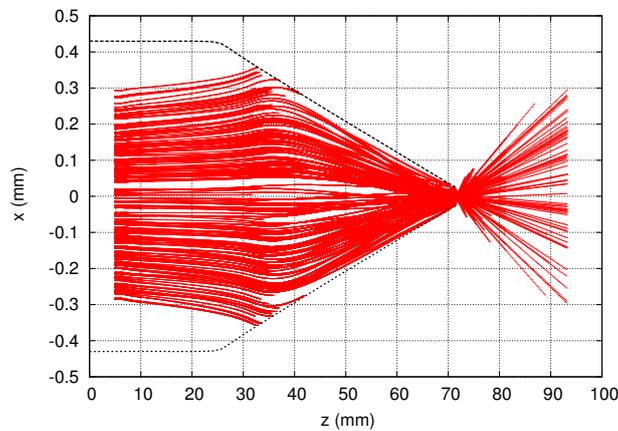


Figure 3: Beam ions trajectories (red lines) through a conical glass capillary, after being charged up by previous ion impacts, highlighting the focusing by the self-organized electric potential. Black dotted lines represents the inner surface of a tapered capillary of length 70 mm and inner diameter of 0.86 mm.

In the second part of the talk, we present a thorough study of the lens effect for conical glass capillaries. The choice of using conical shaped capillaries will be highlighted and justified by the simulations. The theoretical stability of the transmission will be studied as a function of the tilt angle, beam intensity and on the emittance of the injected ion beam. Experimental results showing the lens effect will be presented and discussed alongside the numerical predictions.

References

- [1] N. Stolterfoht, Phys. Rev. A **87** (2013) 032901.
- [2] E. Gruber, G. Kowarik, F. Ladinig, J. P. Waclawek, D. Schrempf, F. Aumayr, R. J. Berezky, K. Tökési, P. Gunacker, T. Schweigler, C. Lemell and J. Burgdörfer, Phys. Rev. A **86** (2012) 062901.
- [3] R.J. Berezky, G. Kowarik, F. Aumayr, and K. Tökési, Nucl. Instr. and Meth. Phys. **B267** (2009) 317.
- [4] A. Cassimi, T. Ikeda, L. Maunoury, C. L. Zhou, S. Guillous, A. Mery, H. Lebius, A. Benyagoub, C. Grygiel, H. Khemliche, P. Roncin, H. Merabet, and J. A. Tanis, Phys. Rev. A **86** (2012) 062902.
- [5] E. Giglio, R.D. DuBois, A. Cassimi, K. Tökési, NIMB Res. B 354 **82** (2015)
- [6] E. Giglio, S. Guillous, A. Cassimi, H. Q. Zhang, G. U. L. Nagy, and K. Tksi, Phys. Rev. A **95**, 030702(R) (2017), "*Evolution of the electric potential of an insulator under charged particle impact*"

**РАДУЖНОЕ РАССЕЯНИЕ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ НА ПОВЕРХНОСТИ
КРИСТАЛЛА**
**RAINBOW EFFECTS IN GRAZING SCATTERING OF ATOMS FROM CRYSTAL
SURFACE**

П.Ю. Бабенко, Д.С. Мелузова, А.П. Солоницына, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев

P.Yu. Babenko, D.S. Meluzova, A.P. Solonitsyna, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия, e-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Rainbow scattering and ion focusing effects were studied using trajectory calculations for scattering of Ar atoms from Al(111), Ag(111) crystal surfaces. Data on rainbow features allows us to obtain the vibration magnitude of surface atoms and also parameters of atom-surface potentials. The values and potential functional dependence versus internuclear distance differ strongly from well known models for collisions in gases. This fact could be explained by considering interaction of an incoming particle with conduction electrons in metals.

1. Введение. Как известно, если пучок атомов, падающих на монокристалл, ориентирован по отношению к атомной цепочке определенным образом, имеет место поверхностное каналирование и эффект фокусировки (эффект сжатия углового распределения рассеянных частиц) [1]. В работе [2] для описания вышеуказанных эффектов применялось приближение парных взаимодействий, однако, как было показано нами позднее [3], при энергиях, меньших 10 кэВ, это приближение не применимо, и нужен расчет траекторий частиц.

2. Геометрия эксперимента. Для сравнения с экспериментом использованы данные, полученные в работах [4-6]. Геометрия эксперимента представлена на рис. 1а. Коллимированный пучок атомов (расходимость менее 0.1 мрэд) с энергией $E_0=1\div 100$ кэВ падает под углом $\alpha=0.5\div 2^\circ$ на поверхность кристалла. Направление x выбирается вдоль одной из кристаллографических осей. Падающий пучок лежит в плоскости (x, z) . Угловое распределение рассеянных частиц характеризуется углами φ и δ .

На рис. 1б приведена расчетная зависимость угла рассеяния φ от прицельного параметра вдоль оси y . Очевидно, при $y=0$ угол рассеяния $\varphi=0$. С ростом y значение φ будет расти. Затем при значении $y=d/2$ (d – расстояние между двумя параллельными цепочками атомов в кристалле), значение φ снова будет равно нулю (из-за симметрии задачи о рассеянии на двух параллельных цепочках атомов). Это означает, что зависимость $\varphi(y)$ имеет экстремум на участке $y=\{0, d/2\}$. При значении азимутального

угла равного φ_r производная $d\varphi/dy=0$, а спектр частиц $dN/d\varphi \sim dy/d\varphi$ будет иметь резкий максимум. Вследствие теплового движения атомов мишени этот пик размывается. На рис. 1в видно, что в спектре рассеянных частиц для системы Ag-Al в зависимости от угла φ наблюдается структура из трех пиков. Появление боковых пиков связано с проявлением радужного рассеяния в поверхностном канале x [110].

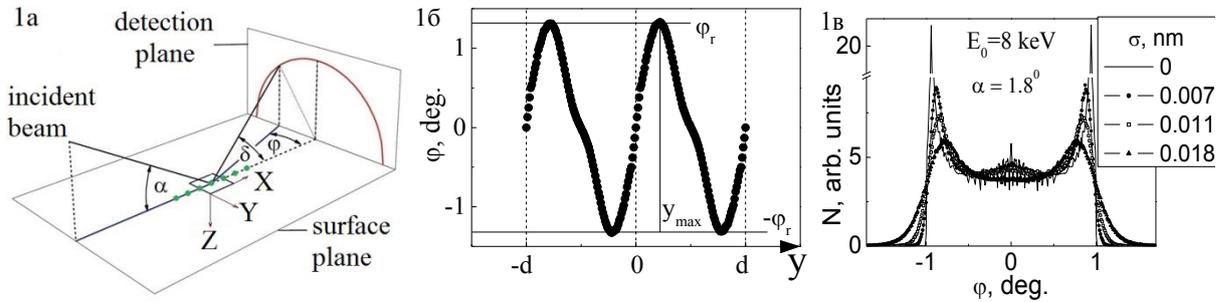


Рис. 1. а) Схема геометрии эксперимента из работы [5].

б) Зависимость азимутального угла рассеяния φ от прицельного параметра y . d - расстояние между цепочками атомов. Углы радужного рассеяния обозначены $\pm\varphi_r$.

в) Расчетные угловые распределения рассеянных атомов Ag в зависимости от азимутального угла рассеяния φ для различных величин амплитуды σ тепловых колебаний атомов кристалла.

3. Моделирование рассеяния частиц при поверхностном каналировании.

В данной работе рассчитывались траектории движения частицы. Пусть x_0 и v – векторы, описывающие положение и скорость налетающей частицы, x_j – координаты частиц мишени, тогда уравнения движения можно записать в виде:

$$\frac{dx_0}{dt} = v \quad \frac{dv}{dt} = \frac{1}{m} \sum_j F(|x_0 - x_j|) \frac{(x_0 - x_j)}{|x_0 - x_j|} \quad (1)$$

здесь m - масса налетающей частицы. Предполагается, что сила есть градиент двухчастичного потенциала и зависит только от расстояния между частицами, множитель в сумме отражает разложение силы по координатным осям. Суммирование ведется по всем учитываемым атомам кристалла. В наших расчетах мы принимали во внимание атомы двух верхних слоев, расположенных на расстоянии до $3d$ от поверхности (всего учитывалось 79 атомов). Учет теплового движения атомов решетки проводился следующим образом. К фиксированному положению атомов кристалла в решетке, добавлялось смещение, характеризуемое амплитудой колебания σ . При этом смещение по трем направлениям задавалось случайным образом в предположении гауссова распределения.

4. Амплитуда тепловых колебаний. Как уже упоминалось, если пренебречь тепловыми колебаниями, расчетный спектр при $|\varphi| > |\varphi_r|$ резко обрывается. Тепловые колебания проводят к появлению крыльев, которые хорошо описываются

распределением Гаусса $N=A \cdot \exp\{-(\varphi-\varphi_c)^2/2w^2\}$ с параметрами φ_c и w . Как показали наши расчеты, параметр w пропорционален закладываемой в расчет амплитуде тепловых колебаний σ . Сравнение с экспериментом позволяет получить значение амплитуды. Для исследованных случаев мы получили Ar-Al $\sigma=0.0123 \pm 0.0007$ nm и Ar-Ag $\sigma=0.012 \pm 0.0013$ nm, что несколько больше амплитуды тепловых колебания внутри кристалла. Полученные результаты неплохо согласуется с данными измерений [7, 8].

5. Радужное рассеяние. Сопоставление с экспериментом.

На рис. 2 приведены результаты сравнения расчета с экспериментом для различных энергий при угле скольжения $\alpha=1.8^\circ$. Как видно, имеется неплохое согласие с экспериментом.

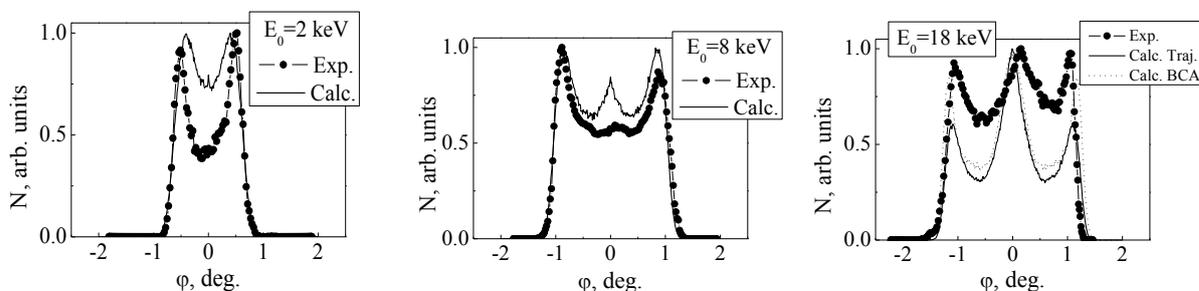
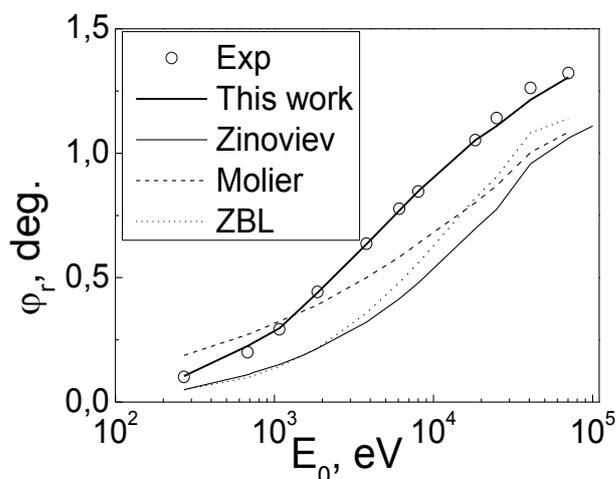


Рис. 2 Экспериментальные и расчетные угловые распределения рассеянных атомов Ar в зависимости от азимутального угла рассеяния для различных начальных энергий. Для энергии 18 кэВ приведены также наши расчеты в бинарном приближении [2,3].

Пик при $\varphi=0$ дают две группы траекторий – одна, когда частицы движутся над цепочкой атомов ($y=0$), другая группа вблизи центра поверхностного канала ($y=d/2$). Как показывают расчеты траекторий при энергиях, больших 8 кэВ, значение y_{\max} , соответствующее углу φ_r , сдвигается от значения $d/4$ в меньшую сторону и частицы начинают испытывать более одного колебания при рассеянии в поверхностном канале. Появляются траектории типа "змейки", плотность траекторий вблизи оси канала повышается, что приводит к появлению дополнительного максимума вблизи $\varphi=0$. С ростом начальной энергии его интенсивность увеличивается и спектр усложняется.

6. Получение информации о потенциале взаимодействия налетающая частица – поверхность.



В работе [5] отмечалась сильная зависимость положения угла φ_r от начальной энергии, и высказывалось предложение использовать эту информацию для получения сведений о потенциале.

Рис. 3. Измеренная зависимость положения радужного пика от начальной энергии [10, 11] и проведенные нами расчеты для потенциалов Мольера [14], ZBL [15], Зиновьева [16] и предложенного в данной работе.

На рис. 3 показаны измеренная зависимость положения радужного пика от начальной энергии [5,6] и проведенные нами расчеты для потенциалов Мольера [9], ZBL [10] и Зиновьева [11]. Как видно из рисунка, имеются сильные отличия от эксперимента, в величинах радужного угла. Для описания эксперимента мы использовали комбинацию экранированного кулоновского потенциала, часто применяемого для описания рассеяния при больших энергиях, и экспоненциального потенциала, применяемого при небольших энергиях соударения. Полученная из наилучшего согласия с экспериментом зависимость имеет вид: $F(R)\{\text{ат.ед.}\}=192.2 \cdot \exp(-1.062 \cdot R) \cdot (1 - 0.234 \cdot R + 0.024 \cdot R^2)$. Отклонения не превышают точности измерений величины φ_r . Полученная зависимость существенно отличается от известных парных потенциалов, что по мнению авторов связано с взаимодействием налетающей частицы с электронами проводимости в металле.

1. E. S. Mashkova and V. A. Molchanov, Medium-Energy Ion Scattering by Solid Surfaces, (Atomizdat, Moscow, 1980), p.174.
2. P. Yu. Babenko, A. N. Zinov'ev, and A. P. Shergin, J. Exp. Theor. Phys. Lett. 101 (2015) 840.
3. A.N. Zinoviev et al. NIMB, 2017, dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2016.12.040
4. P. Tiwald, A. Scholler, H. Winter, K. Tokesi, F. Aigner, S. Grafe, C. Lemell, and J. Burgdorfer, Phys. Rev. B 82 (2010) 125453.
5. A. Schuller, S. Wethekam, A. Mertens, K. Maass, H. Winter and K. Gartner, NIMB 230 (2005) 172.
6. A. Schuller, H. Winter, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 261 (2007) 578.
7. H. Gobel and P. von Blanckenhagen, Phys. Rev. B 47 (1993) 2378.
8. S. Narasimhan, Phys. Rev. B 64 (2001) 125409.
9. G. Moliere, Z. Naturforsch., A2 (1947) 133.
10. J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, The Stopping and Range of Ions in Matter, Vol. 1, (Pergamon, New York, 1985), 321p.
11. A.N. Zinoviev, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 269 (2011) 829.

Systematic studies of ion channeling effects by simulated channeling maps

K. Nordlund and F. Djurabekova

Department of Physics and Helsinki Institute of Physics, P.O. Box 43, FIN-00014 University of Helsinki, Finland

1 Introduction

Ion implantation is widely used in semiconductor industry for materials modification [1–3]. Moreover, radiation damage in nuclear reactors is formed primarily by energetic atomic recoils induced by neutrons [4–6]. It is well established that when energetic ions or atoms are moving in crystals, they may penetrate much deeper if they happen to be directed in some specific crystal directions [7–9]. This “channeling” effect is utilized for instance in certain ion beam analysis methods, and has been studied theoretically by analytical theories [8, 10] and atomistic simulations [7, 9]. The issue is of increased current interest due to the use of increasingly low energies in industrial ion irradiation [11], and also the interest in examining ion modification of single nanostructures, where by necessity the energies are small to maximize the irradiation effects on the nanostructure [12–14]. Some of these studies have shown a large variability in the radiation response of seemingly identical nanorods or nanoparticles [12, 13], an effect difficult to explain by other means than channeling.

Molecular dynamics methods are well suited to study ion penetration in materials at energies where also multiple simultaneous collisions may be significant [9, 15–19]. In particular, molecular dynamics in the “Recoil interaction approximation” (RIA) where only the interactions of the energetic ion with the lattice atoms is taken into account, has been found to be an efficient, yet accurate way for describing ion penetration also at quite low energies [9, 15, 18, 19]. The approach has also been shown to agree well with the binary collision approximation simulations widely used at higher energies [19, 20].

In this Article, we present a molecular dynamics-based approach to calculate ion channeling systematically over all crystal directions, forming a kind of ion ‘channeling map’, and present results for a few systematic cases. More systematic results and also a theoretical treatment is provided in Ref. [21].

2 Method

To examine the channeling effects, we used the MDRANGE code [15] that has been widely used to simulate ion penetration in materials [22, 23], and shown to be able to reproduce very well experimental ion penetration depth profiles even in channeling directions in Si [9, 22, 24–26]. It reads in an arbitrary atom structure, and hence is well suited to study ion channeling in any crystal structure, and any direction in this structure.

We set up the MDRANGE calculations in two different ways to estimate channeling effects. The basic simulation setup was following the practise described in Ref. [15]. In the adaptive time step (Eq. 3 in Ref. [15]), we used the standard values of $k_t = 0.1 \text{ \AA}$ and $E_t = 300 \text{ eV}$, except for H and He ions for which it was necessary to use $E_t = 30 \text{ eV}$ to ensure energy conservation in strong collisions. One of the basic outcomes of channeling is that ions penetrate deeper in the material. Hence using the mean ion projected range R_p is a natural way to estimate the magnitude of ion channeling. However, for nanostructures this approach is not very well suited, since in many cases practically all ions penetrate the structure, making the ion range a meaningless quantity. For such cases, one can instead sum up the total nuclear energy deposition

F_{D_n} from the ion to primary knock-on atoms in the structure. This is the full energy available for further modification of the nanostructure, and hence a natural quantity for quantifying channeling effects in nanostructures. Although it would be possible to consider any shape of a nanostructure, in the current work we studied irradiation of a thin foil of a given thickness t_{foil} for the energy deposition calculations.

In all simulations, we included the non-local electronic stopping power from the ZBL96 parameterization [27]. We also included random thermal displacements for the atoms calculated from the Debye model of lattice vibrations [15]. In the current work, this was implemented at 300 K, or for the case of 1 keV Ge, at 350°C.

The simulation was set up with an MD simulation cell with a 001 surface normal and tilting (θ) and twisting (φ) the incoming ion direction. The range was always calculated as the ion range projected on the initial incoming direction [5]. In simulations of the “foil” samples the ion was defined to have left the sample when the ion projected range $R_p > t_{\text{foil}}$ (in this way, the simulations mimic irradiation of a foil or nanostructure of known thickness as a function of the crystallographic orientation, which often is not known in the experiments). The simulations were carried out in the full range of θ from 0 to 89 degrees, and φ from 0 to 90 degrees, scanning the range at intervals of 1 degrees, respectively. Due to cubic symmetry, it is not necessary to consider values of $\varphi > 90^\circ$. For each (θ, φ) combination, 1000 – 5000 ions were simulated.

The results were gathered as the mean ion range for the bulk penetration cases, and average nuclear energy deposition in the foil cases.

3 Results

The main aim of the current paper is to probe which crystal directions are “channeling” ones. Hence we present a few representative cases in a wide range of ions, energies and elements. The case of 1.7 MeV Au ions on a 20 nm Au foil with 001 surface orientation is shown in Fig. 1 as a function of the tilt (θ) and twist (φ) angle off the 001 crystal direction. The results show that the nuclear energy deposition can vary more than an order of magnitude depending on crystal direction, varying between a minimum about 10 keV for irradiation straight into the 110 channel, to a maximum of around 300 keV in several non-channeling directions. A very notable result is the large areas of planar channeling, i.e. channeling in crystal planes between the principal crystal directions. Planar channeling is well known to be significant for light ion irradiation [22, 28], but observing the high degree of planar channeling also for a heavy ion like Au is somewhat surprising.

As a test of channeling in a bcc metal, we simulated the case of 300 eV D in W, a typical condition in fusion reactors [29, 30]. The results in Fig. 1 b) show that channeling also occurs and is significant for light, low-energy ions in BCC materials. The 100 and 111 channels are very wide, while the 110 is clearly narrower.

Ion implantation is one of the key techniques used in the semiconductor industry for chip manufacturing, and generally there is a desire to avoid channeling effects [22]. Hence knowing the channeling directions in Si and Ge is important. Results of two representative cases are illustrated in Fig. 1 c) and d). The results show a very strong channeling in the 110 channel, consistent with previous experiments and simulations [9, 24–26]. It is noteworthy, however, that all the ions show significant channeling also in several other crystal directions, and that the 211 direction has stronger channeling than the 100 or 111 directions. There are also clear planar channeling effects in both cases.

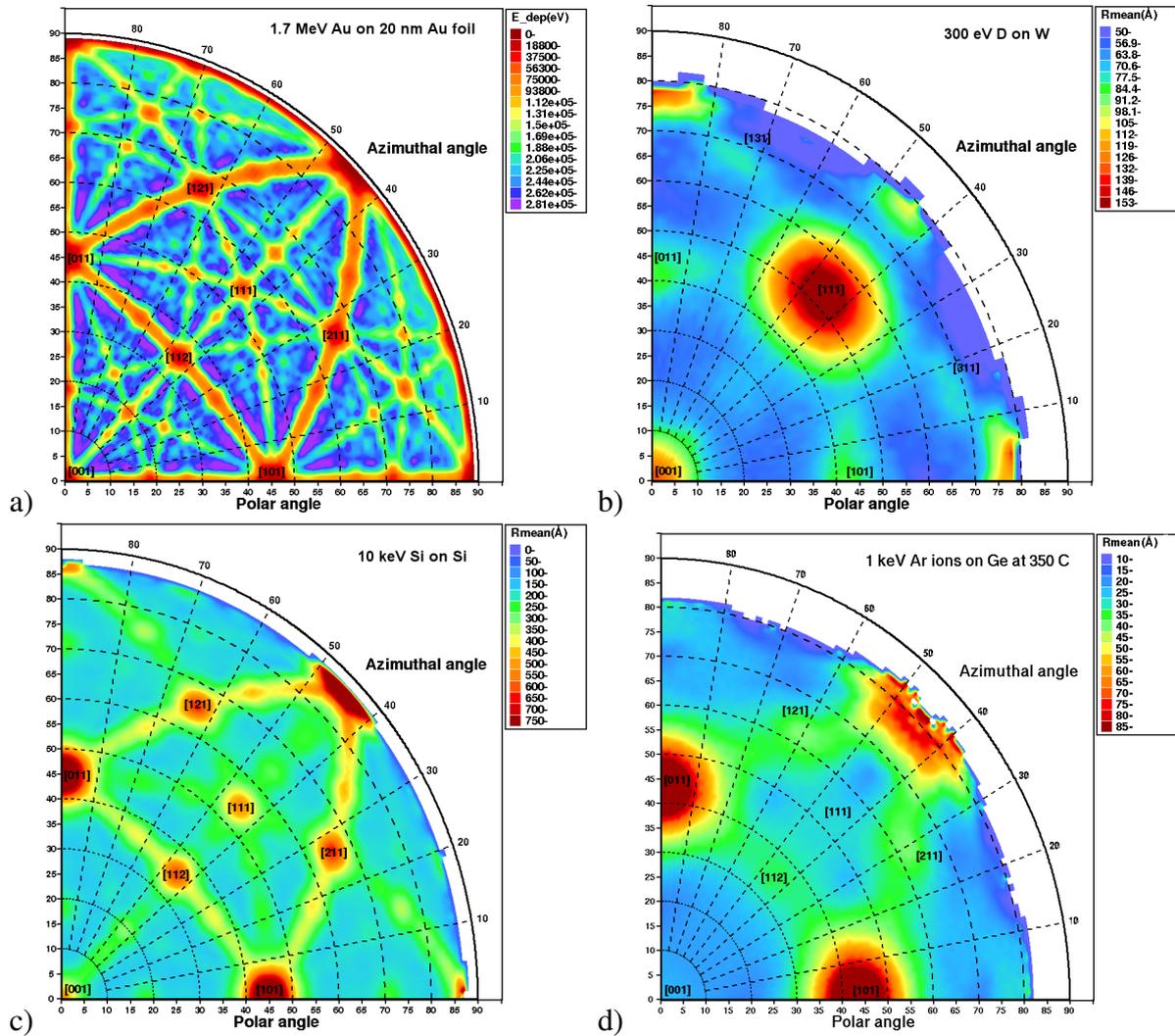


Figure 1: a) Channeling results for 1.7 MeV Au ions on a 20 nm Au foil. The colors show the nuclear energy deposition by primary knock-on atoms to the Au foil as calculated by the MDRANGE range calculation software. The color scale shown to the right gives the energy deposition in units of eV. Miller indices are shown for some of the strong channeling directions. b) Channeling results for 300 eV D in W. c) Channeling results for 10 keV Si ions in Si. d) Channeling results for 1 keV Ar ions in Ge at 350°C. In b)-d) the colors show the mean range of ions as calculated by the MDRANGE range calculation software. The color scale shown to the right gives the mean range in units of Å. The white area corresponds to (θ, φ) combinations where all ions were reflected. The white areas close to $\theta = 90^\circ$ correspond to directions where all ions were reflected and hence ion ranges could not be obtained. a) to c) are from Ref. [21], d) is original work.

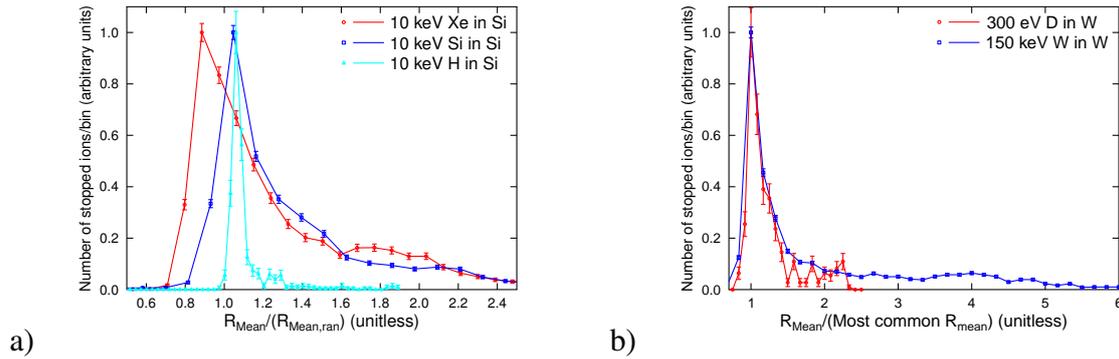


Figure 2: Statistics of the distribution of the mean ion range with pairs of (θ, φ) crystal directions. To allow for comparison of the different cases, the maximum of the distribution is scaled to 1 on both the x and y axes.

4 Analysis of fraction of channeled ions

The channeling maps clearly indicate that ions are channeled in a large fraction of all crystal directions. To analyze this more systematically, we made statistics of the distribution of the nuclear deposited energy and mean ion range for 6 of the channeling maps simulated for each simulated (θ, φ) pair [21]. The results are shown in Fig. 2. From the figures, it is apparent that a significant fraction of all ions are channeled in all the cases shown. The smooth behaviour around the maximum also shows that the borderline for what is a channeling direction is not a unique quantity.

For the mean ion ranges in Si and W (Fig. 2), to obtain a simple estimate of the fraction of channelled ions we integrated the distributions from 1.2 in the relative mean range upwards. The integrals showed that about 42%, 36% and 8% of 10 keV Xe, Si and H ions in Si are channeled, respectively. For ranges in W, the fractions are 27% and 44% for 300 eV D and 150 keV W, respectively.

5 Conclusions

In conclusion, we have developed an MD simulation formalism for studying ion channeling in several different crystal systems. We highlight the observation that under typical ion irradiation conditions, a huge fraction (more than 50% in several cases) of ions are actually channeled. This implies that even when ion irradiations are carried out on polycrystalline samples with random surface orientations, channeling effects on the results can not be *a priori* be assumed to be negligible.

References

- [1] J. W. Mayer and S. S. Lau, *Electronic Materials Science For Integrated Circuits in Si and GaAs* (MacMillan, New York, 1990).
- [2] M. Bruel, B. Aspar, and A.-J. Auberton-Herve, *Jpn. J. Appl. Phys.* **36**, 1636 (1997).
- [3] W. L. Ng, M. A. Lourenio, R. M. Gwilliam, S. Ledain, G. Shao, and K. P. Homewood, *Nature* **410**, 192 (2001).
- [4] R. S. Averback and T. Diaz de la Rubia, in *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenfest and F. Spaepen (Academic Press, New York, 1998), Vol. 51, pp. 281–402.

- [5] R. Smith (ed.), *Atomic & ion collisions in solids and at surfaces: theory, simulation and applications* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997).
- [6] G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science* (Springer, Berlin, 2012).
- [7] O. S. Oen and M. T. Robinson, *Appl. Phys. Lett.* **2**, 83 (1963).
- [8] L. C. Feldman, J. W. Mayer, and S. T. Picraux, *Materials Analysis by Ion Channeling* (Academic, New York, 1982).
- [9] J. Sillanpää, K. Nordlund, and J. Keinonen, *Phys. Rev. B* **62**, 3109 (2000).
- [10] G. Hobler, *Radiat. Eff. Def. Sol.* **139**, 21 (1996).
- [11] The International Technology Roadmap for Semiconductors, available online at www.itrs.net.
- [12] G. Greaves, J. A. Hinks, P. Busby, N. J. Mellors, A. Ilinov, A. Kuronen, K. Nordlund, and S. E. Donnelly, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 065504 (2013).
- [13] H. Holland-Moritz, S. Scheeler, C. Stanglmair, C. Pacholski, and C. Ronning, *Nanotechnology* **26**, 325301 (2015).
- [14] K. Lorenz, E. Nogales, S. M. C. Miranda, and B. Daudin, *Acta Materialia* **61**, 3278 (2013).
- [15] K. Nordlund, *Comput. Mater. Sci.* **3**, 448 (1995).
- [16] K. Nordlund, M. Ghaly, R. S. Averback, M. Caturla, T. Diaz de la Rubia, and J. Tarus, *Phys. Rev. B* **57**, 7556 (1998).
- [17] R. Smith, B. King, and K. Beardmore, *Rad. Eff. Def. in Sol.* **141**, 425 (1997).
- [18] K. M. Beardmore and N. Gronbech-Jensen, *Phys. Rev. B* **60**, 12610 (1999).
- [19] G. Hobler and G. Betz, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **180**, 203 (2001).
- [20] L. Bukonte, F. Djurabekova, J. Samela, K. Nordlund, S. A. Norris, and M. J. Aziz, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **297**, 23 (2013).
- [21] K. Nordlund, F. Djurabekova, and G. Hobler, *Phys. Rev. B* **94**, 214109 (2016).
- [22] P. Oldiges, H. Zhu, and K. Nordlund, in *Proceedings of the 1997 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)* (IEEE, USA, 1997), pp. 245–247.
- [23] H. Y. Chan, K. Nordlund, J. Peltola, H.-J. Gossmann, N. L. Ma, M. P. Srinivasan, F. Benistant, and L. Chan, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **228**, 240 (2005).
- [24] J. Sillanpää, J. Peltola, K. Nordlund, J. Keinonen, and M. J. Puska, *Phys. Rev. B* **63**, 134113 (2000).
- [25] J. Peltola, K. Nordlund, and J. Keinonen, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **217**, 25 (2003).
- [26] J. Peltola, K. Nordlund, and J. Keinonen, *Rad. Eff. & Def. in Sol.* **161**, 511 (2006).
- [27] J. F. Ziegler, 1995, TRIM-95 computer code, private communication.
- [28] J. F. Ziegler and R. F. Lever, *Appl. Phys. Lett.* **46**, 358 (1985).
- [29] ITER Physics Basis Editors, ITER Physics Expert Group Chairs and Co-Chairs and ITER Joint Central Team and Physics Integration Unit, *Nuclear Fusion* **39**, 2137 (1999).
- [30] A. Lasa, C. Björkas, K. Vörtler, and K. Nordlund, *J. Nucl. Mater.* **429**, 284 (2012).

**ЗАХВАТ И ДЕСОРБЦИЯ ВОДОРОДА ИЗ ВОЛЬФРАМА С ПЛЕНКАМИ
ОКСИДОВ БЕРИЛЛИЯ/АЛЮМИНИЯ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ПЛАЗМОЙ**
**HYDROGEN TRAPPING INTO AND RELEASE FROM TUNGSTEN COVERED BY
BERYLLIUM/ALUMINUM OXIDE LAYER UNDER PLASMA IRRADIATION**

Л. Беграмбеков, А. Каплевский, А. Евсин, С. Довганюк, А. Захаров
L. Begrambekov, A. Kaplevsky, A. Evsin, S. Dovganyuk, A. Zakharov

National Research Nuclear University (MEPhI), Moscow, Russia
e-mail: lbb@plasma.mephi.ru

The aim of this work is to check whether the phenomenon of accelerated hydrogen penetration through the surface (APS) occurs on tungsten surface and surface of tungsten covered with beryllium/aluminum layers. It is shown that APS phenomenon takes place on the all above mentioned surfaces. A new technique for low temperature detritiation of tungsten and tungsten with beryllium layer in conditions of fusion devices is presented.

1. Введение

В работах [1, 2] поверхность нержавеющей стали облучалась атомами дейтерия в кислородосодержащей атмосфере и ионами дейтериевой плазмы с примесью кислорода. В обоих случаях проникновение изотопов водорода через поверхность нержавеющей стали значительно активизировалось (явление активированного проникновения через поверхность – АПП) при сравнительно низких температурах (≈ 300 К): увеличивались и захват дейтерия, и десорбция водорода, находящегося в стали. Предположено, что явление АПП является следствием серии поверхностных реакций, активируемых при взаимодействии кислорода и атомов/ионов изотопов водорода со слоем оксида хрома на поверхности нержавеющей стали.

Бериллий и вольфрам, выбранные, соответственно, в качестве материалов первой стенки и дивертора токамака ИТЭР, также имеют оксидные слои на поверхности. Во время работы токамака бериллий будет распыляться и осаждаться на вольфрамовых тайлах, формируя на их поверхности бериллиевые пленки.

Целью данной работы было проверить, развивается ли явление АПП на оксидированной поверхности вольфрама и на поверхности слоя бериллия на вольфраме, также исследовать характер транспорта водорода между вольфрамом и пленкой бериллия в процессе ионной бомбардировки.

2. Экспериментальная методика

Эксперименты проводились в установке «МИКМА» [3], позволяющей облучать образцы плазмой и её компонентами и анализировать процессы захвата и выделения газов из образцов методом термодесорбционной спектрометрии (ТДС). Использовались

образцы вольфрама и вольфрама с пленками бериллия и алюминия. Пленки бериллия осаждались на вольфрамовые образцы в Национальном институте лазерной, плазменной и радиационной физики (Бухарест, Румыния). Пленки толщиной 100 ± 10 нм на обеих сторонах вольфрамовых образцов формировались атомами, которые испарялись с расплавленной бериллиевой мишени. В нашем распоряжении было лишь ограниченное количество образцов с бериллиевым покрытием. Поэтому, после того как мы удостоверились, что результаты экспериментов с образцами вольфрама с слоями бериллия и алюминия похожи, последние использовались для подробного изучения закономерностей явления АПП на вольфраме с поверхностным покрытием.

Пленки алюминия осаждались на вольфрамовые образцы в газовом разряде с накальным вольфрамовым катодом в НИЯУ МИФИ. Напыляемые пленки толщиной 200 ± 10 нм формировались на вольфраме атомами алюминия, распыляемыми с алюминиевой мишени ионами аргоновой плазмы. Изготавливались вольфрамовые образцы, покрытые пленкой алюминия с обеих сторон и только с одной стороны. На этапе подготовки к осаждению покрытий из вольфрамовых образцов при отжиге удалялся “технологический” водород. При напылении на вольфрам поверхностные слои захватывали водород из остаточного газа, а при контакте с атмосферой на их поверхности образовывалась пленка оксида. Измерения методами рентгеновской энерго-дисперсионной спектроскопии (ЭДС), вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) и ТДС показали, что концентрации водорода и кислорода в пленках алюминия составляли 35 и 13 ат. %, а в пленках бериллия 40 и 9 ат. % соответственно.

Образцы вольфрама и вольфрама, покрытого с обеих сторон пленками бериллия/алюминия, имплантировались ионами дейтериевой плазмы. Параметры имплантации были следующими: энергия ионов $E=50$ эВ/ат, плотность потока ионов $j=3.7\times 10^{19}$ ат/м²с, доза облучения $\Phi=1.3\times 10^{23}$ ат/м², температура образцов во время облучения $T=500$ К. Образцы вольфрама с пленкой алюминия на одной из сторон имплантировались дейтерием со стороны, непокрытой слоем алюминия, с аналогичными параметрами за исключением энергии ионов, которая составляла 650 эВ/ат.

После имплантации образцы облучались водородной плазмой с 2% примесью кислорода. Образцы вольфрама с пленкой алюминия на одной из сторон облучались со стороны, покрытой пленкой алюминия. Параметры облучения в $H_2+2\%$ O_2 плазме: $E=50$ эВ/ат, $j=3.7\times 10^{19}$ ат/м²с, $\Phi=1.3\times 10^{23}$ ат/м², $T=500$ К. Затем методом ТДС определялось, как изменилось содержание дейтерия и водорода в образцах.

3. Результаты экспериментов и их обсуждение

3.1. Явление АПП на поверхности вольфрама с пленками бериллия/алюминия и без них

Видно (таблица 1, столбец 4), что в напыляемые слои бериллия и алюминия захватывался водород из остаточного газа. Имплантация дейтерия в вольфрам с пленкой бериллия и алюминия приводит к увеличению в $\approx 2-3$ раза количества захваченных атомов дейтерия по сравнению с вольфрамом без пленок (таблица 1, столбец 2). В то же время, при последующем облучении образцов ионами $H_2 + 2\% O_2$ с энергией 50 эВ/ат (практически не распыляющих поверхность образцов) из вольфрама со слоями бериллия и алюминия удаляется значительное и примерно одинаковое количество атомов дейтерия $(13-15) \times 10^{19}$ ат/м² (таблица 1, столбцы 3 и 5). Из вольфрама при этом также удаляется 7.8×10^{19} ат/м² дейтерия. В то же время, в вольфраме с пленкой алюминия количество атомов водорода увеличивается в ≈ 2.3 раза. Количество атомов водорода в образцах вольфрама и вольфрама с пленкой бериллия уменьшается на $\approx 35\%$. По-видимому, при облучении водородной плазмой скорость захвата водорода была меньше скорости его десорбции. Можно сделать вывод о том, что явление АПП развивается как на оксидированной поверхности вольфрама, так и на поверхностях оксидированных слоёв бериллия и алюминия. Причем, интенсивности явления АПП на поверхности пленок бериллия и алюминия близки. Поэтому в последующих экспериментах использовались пленки алюминия на вольфраме.

Таблица 1. Количество атомов дейтерия и водорода в образцах вольфрама без покрытий (W), и с пленками бериллия (W_{Be}) и алюминия (W_{Al}), после имплантации дейтерия и последующего облучения в $H_2 + 2\% O_2$ плазме.

1	Количество дейтерия в образце, $\times 10^{19}$ ат/м ²		Количество водорода в образце, $\times 10^{20}$ ат/м ²	
	2	3	4	5
Образец	До облучения в $H_2 + 2\% O_2$	После облучения в $H_2 + 2\% O_2$	До облучения в $H_2 + 2\% O_2$	После облучения в $H_2 + 2\% O_2$
W	9.4	1.6	0.6	0.4
W _{Be}	16.0	3.1	6.5	4.1
W _{Al}	28.0	13.0	21.4	48.2

3.2. Особенности явления АПП при внедрении дейтерия в «вольфрамовую» сторону образца и последующего облучения «алюминиевой» стороны $H_2 + 2\% O_2$ плазмой

Таблица 2 показывает, что примерно половина имплантированных в вольфрам атомов дейтерия проникла в пленку алюминия и была удалена с ее поверхности в

процессе облучения в водородной плазме с примесью кислорода. Имея в виду сходство проявлений развития АПП на поверхности алюминиевых и бериллиевых слоёв, можно заключить, что значительная часть дейтерия, находящаяся в вольфраме со слоем бериллия, также будет десорбироваться при его облучении ионами водородной плазмы с примесью кислорода. Следовательно, можно сделать вывод о том, что низкотемпературное облучение дейтериевой плазмой с примесью кислорода может быть использовано для детритизации вольфрамовых тайлов дивертора ИТЭР, в том числе запылённых бериллием, а также бериллиевых тайлов первой стенки.

Таблица 2. Количество атомов водорода и дейтерия в образцах вольфрама с пленкой алюминия после имплантации дейтерия в вольфрам и последующего облучения слоя алюминия в $H_2 + 2\% O_2$ плазме.

Эксперимент	Захват дейтерия, $\times 10^{20}$ ат/м ²	Захват водорода, $\times 10^{21}$ ат/м ²
До облучения в $H_2 + 2\% O_2$	2.9	3.1
После облучения в $H_2 + 2\% O_2$	1.5	3.2

4. Заключение

В работе исследовались особенности развития явления АПП (активированного проникновения изотопов водорода через оксидированную поверхность при облучении кислородом и атомами/ионами водорода) на вольфраме и на вольфраме с поверхностными слоями бериллия и алюминия. Исследовался транспорт изотопов водорода между вольфрамом и пленкой алюминия в процессе её облучения водородной плазмой с примесью кислорода.

Показано, что активированное проникновение изотопов водорода через оксидированную поверхность происходит во всех исследованных случаях. Интенсивности явления АПП на поверхности пленок бериллия и алюминия близки. Облучение оксидированной поверхности алюминиевой пленки низкоэнергетичными ионами $H_2 + 2\% O_2$ плазмы инициировало проникновение предварительно имплантированного в вольфрам дейтерия в алюминиевый слой и затем десорбцию из него половины атомов дейтерия, внедрённых в вольфрам.

Сделано заключение о том, что явление АПП можно использовать для детритизации вольфрамовых тайлов дивертора как покрытых, так и не покрытых слоем бериллия, и бериллиевых тайлов первой стенки ИТЭР.

5. Литература

- [1] O. Dvoichenkova, A. Airapetov. Phys. Procedia 71 (2015) 93-98.
- [2] L. Begrambekov, A. Grunin, etc. J. of Surf. Inv. X-ray, Syn. and Neut. Tech. 9 (2015) 190-195.
- [3] A. Airapetov, L. Begrambekov, S. Bremond, etc., J. Nucl. Mater. 415 (2011) 1042-1045.

THREE-DIMENSIONAL MODELING OF RESONANT CHARGE TRANSFER BETWEEN ION BEAMS AND METALLIC SURFACES

I.K. Gainullin

*Faculty of Physics, Moscow State University; Leninskie gory 1 # 2, Moscow, 119992, Russia,
e-mail: Ivan.Gainullin@physics.msu.ru.*

*This paper addresses the numerical modeling of resonant charge transfer (RCT) during ion-surface interactions. The main novelty of our approach is the usage of original *ab initio* 3D time-dependent Schrodinger equation (TDSE) Solver in combination with 3D pseudopotentials, which describe the metal structure on atomic level. Full 3D modeling enables us to reveal such fundamental RCT aspects as anisotropy of electron propagation in the target and electron delay during grazing scattering. Also we've refined theoretical basis for RCT experiments calculations and achieved the quantitative correspondence to large variety of experimental data. A solid portion of these data, e.g. RCT azimuthal dependence during grazing scattering, hasn't been modeled before.*

The investigation of resonant charge transfer, i.e. energy-conserving one-electron tunneling through the potential barrier between atomic particle and surface, is of fundamental and practical importance in several branches of physics and chemistry [1,2]. Note, that in most cases RCT is dominant channel of electron exchange between atomic particle and bulk metal [3].

In this work we present technique for direct 3D RCT modeling. Some model RCT problems are considered to capture fundamental 3D RCT effects. Also we refine existing theoretical basis and apply 3D RCT modeling technique to calculation of some experiments, which haven't been explained theoretically/numerically.

Our technique is based on direct 3D TDSE solution for one-active-electron, moving in the pseudopotential formed by ionic core and metal surface. We use the original high-performance *ab initio* 3D numerical TDSE solver which utilizes graphical processing units [Ошибка! Закладка не определена.,Ошибка! Закладка не определена.]. The key point is the usage of 3D pseudopotentials, which describes the metal structure on atomic level.

3D pseudopotentials for Cu(100), Cu(110) and Cu(111) surfaces have been calculated by means of density functional theory (DFT), considering the known Cu crystallographic structure. The obtained 3D pseudopotentials (fig. 1) reproduce the major known RCT features. In particular, in the case of "jellium" Cu(110) surface we observe unrestricted electron propagation deep into the metal along the surface normal. For the Cu(100) and Cu(111) surfaces the electron motion along the surface normal is restricted due to projected band gap. The dependence of RCT rate (level width) on ion-surface distance in the case of 3D pseudopotentials is similar to the case of widely used effective 1D pseudopotentials. Also presented 3D pseudopotential for Cu(111) satisfactorily reproduces the energy of surface state -5.33 eV. The details about TDSE solver and 3D pseudopotentials calculation are given in [4].

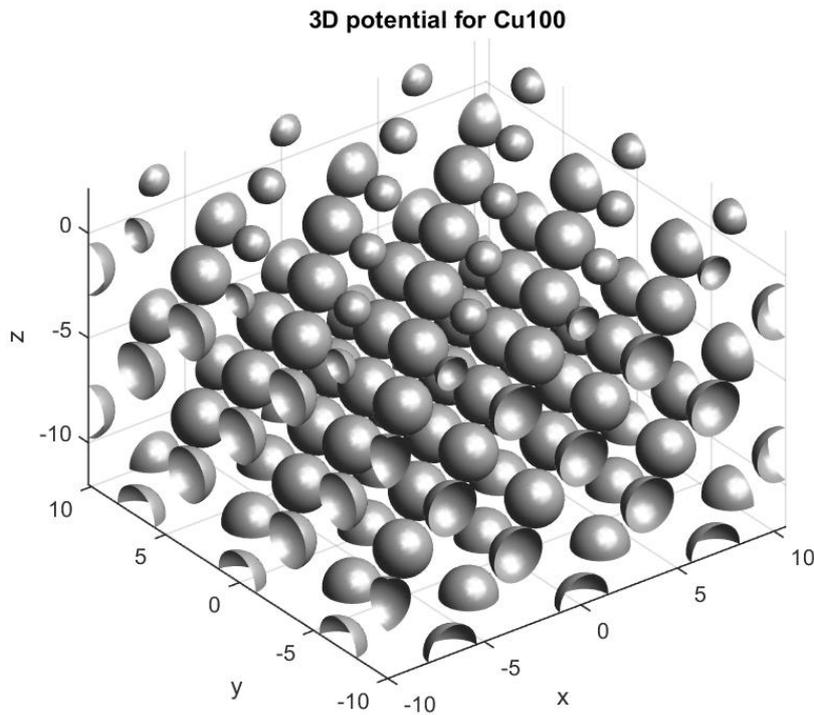


Figure 1. Visualization of 3D pseudopotential for Cu(100). The figure shows isosurfaces for pseudopotential value equal to 0.5 of its maximal absolute value.

We have applied 3D technique to several model problems in order to investigate RCT features, arising from realistic (3D) surface description. For the ion fixed in front of metallic surface, its lateral position was found to have small influence on the RCT rate and character

(fig. 2). The ion interacts with several neighbor surface atoms, hence RCT is "averaged". For the moving ion (non-grazing angles) the RCT was found to depend mainly on the distance of closest approach and ions velocity. The velocity orientation along the crystallographic axis as well as lateral shift of trajectory doesn't influence significantly on the ions final charge state.

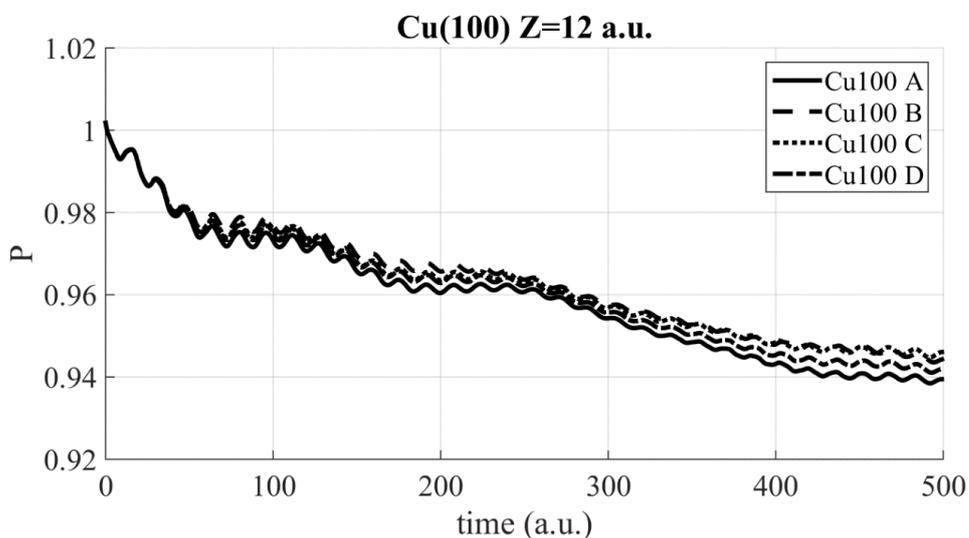


Figure 2. Illustration of ion lateral position influence on RCT process. The figure shows H^+ ion population as function of time for different ion lateral positions. For each calculation ion is fixed near surface at 12 a.u.

An interesting feature is anisotropy of electron propagation inside Cu(110). At fig. 3 one can see that electron propagates along $\langle 001 \rangle$ direction ~ 2 times faster than along $\langle 1\bar{1}0 \rangle$

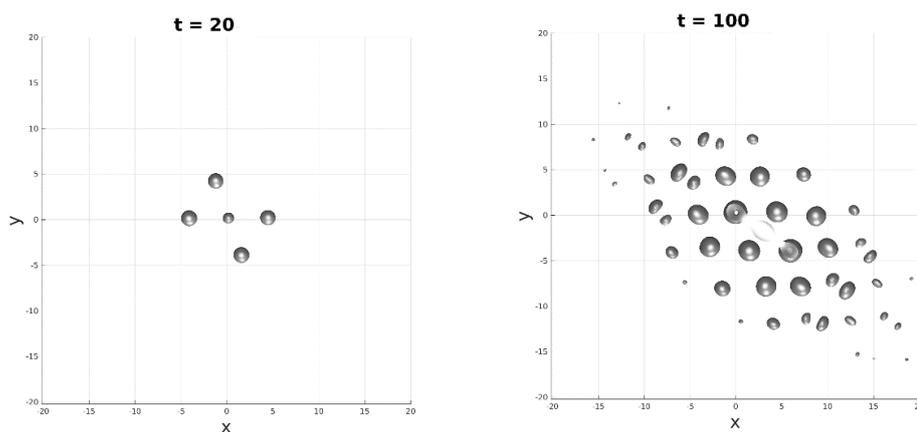


Figure 3. Evolution of electron density for Cu(110). Ion-surface distance is 12 a.u. Figure shows isosurfaces of electron density at sequential time moments (see figure for details).

Figure 4 demonstrates the numerical simulation of RCT ion beam azimuthal dependence. We see that as population on time (or distance to the surface) dependence as well as final ion occupations differs for $\langle 001 \rangle$ and $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ directions. The model calculations imply only electron loss by hydrogen atom on outgoing trajectory.

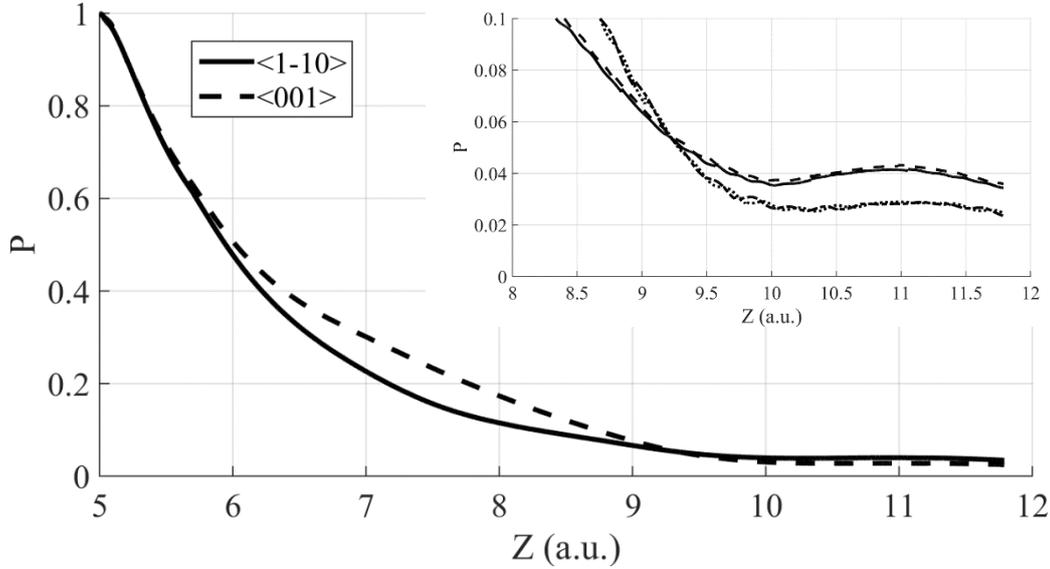


Figure 4. Illustration of ion beam orientation influence in RCT process. Figure shows H^+ ion population dependence on ion-surface distance for different azimuthal angles (close to $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ and $\langle 001 \rangle$ directions in the Cu(110) crystal). The H^+ ion moves away from Cu(110) surface with $V_{\text{norm}} = 0.02$ a.u. and $V_{\text{par}} = 0.5$ a.u.; initial ion-surface distance is 5 a.u. The inset shows the same in larger scale and additional trajectories (described in text).

The author gratefully acknowledges the financial support provided by the Russian Foundation for Basic Research (grant 16-02-00478). The parallel computing facilities were provided by MV Lomonosov Moscow State University

-
- 1 R. Brako and D.M. Newns, Rep. Prog. Phys. **52**, 655 (1989).
 - 2 T. Hecht, H. Winter, A.G. Borisov, J.P. Gauyacq and A.K. Kazansky, Phys. Rev. Lett. **84**, 2517 (2000).
 - 3 H. Winter, Phys. Rep. **367** (2002), 387.
 - 4 I.K. Gainullin. Three-dimensional modeling of resonant charge transfer between atomic particles and metallic surfaces. Submitted to Phys. Rev. A on March 2017.

**ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ БОЛЬШИХ,
СРЕДНИХ И МАЛЫХ ЭНЕРГИЯХ СОУДАРЕНИЯ**
**ATOMIC INTERATOMIC POTENTIALS AT HIGH, MEDIUM AND LOW
COLLISION ENERGIES**

A.N. Zinoviev

Ioffe Institute, 194021, St.Petersburg, Russia, zinoviev@inprof.ioffe.ru

Last achievements in the field are reviewed.

1. Введение.

Потенциалы взаимодействия широко используются в физике плазмы, астрофизике, для диагностики поверхности с использованием различных методов рассеяния частиц, при моделировании прохождения частиц через вещество и при ионной имплантации. Приближение бинарных соударений и методы молекулярной динамики широко используются для описания столкновительных каскадов, и результаты моделирования очень чувствительны к выбору модели потенциала. Сравнение теоретических моделей потенциала с данными эксперимента проводилось давно, в 1986 году [1]. Нам потребовалось вернуться к данному вопросу.

2. Поведение потенциалов при малых и средних энергиях.

В нашей работе [2] был проведен анализ наиболее аккуратных измерений сечений рассеяния атомных частиц [3-5]. Данные для различных энергий соударения хорошо укладываются на единую универсальную кривую в приведенных координатах $\rho = \Theta d\sigma/d\Omega \sin\Theta$ и $\tau = E_{cm} \Theta$ (E_{cm} и Θ – энергия соударения и угол рассеяния в системе центра масс). Это свидетельствует том, что рассеяние носит квазиупругий характер и возможно

применение процедуры, предложенной Фирсовым [6] для получения параметров потенциала из эксперимента. Это было сделано в наших работах [2,7] для 13 систем.

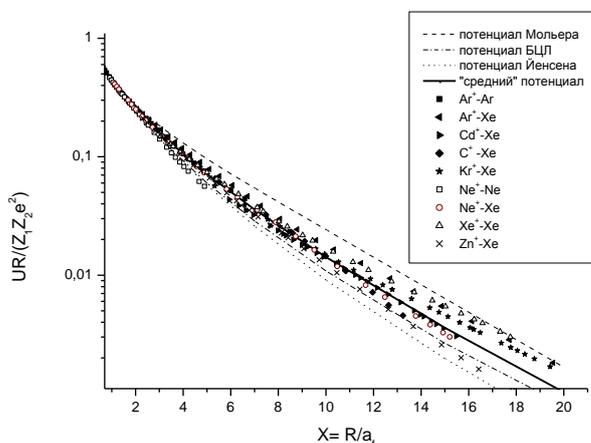


Рис.1. Зависимость полученных потенциалов взаимодействия для различных систем от межъядерного расстояния. a_f –длина Экранирования Фирсова. Приведены также данные теоретических моделей [7-10].

Для потенциала, наилучшим образом описывающего эксперимент была предложена функциональная форма:

$$U(x) = Z_1 Z_2 a / x \exp(-1.575x / (1 + 0.719 x^{1/2} - 0.010 x)). \quad (1)$$

Позднее нами была предложена модель индивидуальных потенциалов, чтобы расширить область применения на большие межъядерные расстояния. [7] Однако, ошибки в случаях, когда экспериментальные отсутствуют превышают 15%. Чтобы решить эту проблему в работе [11], предложено в рамках приближения функционала плотности использовать пакет программ DMol с расширенным набором Хартри-Фоковских волновых функций. В нашей совместной работе с К.Норлундом [12] были вычислены по этой модели потенциалы взаимодействия для 19 систем и проведено детальное сравнение с экспериментом (см.рис.2).

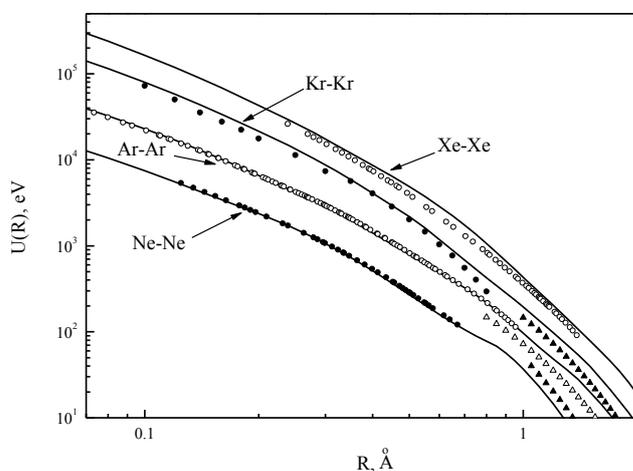


Рис. 2. Сравнение расчета в DMOL приближении – сплошные линии с экспериментом: кружки [2], треугольники [13].

Наблюдается хорошее согласие расчета и эксперимента. С ростом заряда ядра различие появляется. По авторов [12] мнению, этот недостаток можно преодолеть, если

увеличить базис используемых функций и учесть релятивистские поправки. В целом достигнутое согласие теории и эксперимента можно считать весьма хорошим.

3. Поведение потенциала при малых межъядерных расстояниях.

При малых межъядерных расстояниях обычно используется экранированный кулоновский потенциал, предложенный Бором: $U(R) = Z_1 Z_2 / R \exp\{-aR\}$, здесь a – параметр, который мы будем называть константой экранирования. В нашей работе [14] было показано, что константа экранирования, может быть вычислена по формуле:

$$\alpha = - (H_{el}(Z_1+Z_2, 0) - H_{el}(Z_1, \infty) - H_{el}(Z_2, \infty)) / (Z_1 Z_2), \quad (2)$$

где $H_{el}(Z_1+Z_2, 0)$ – энергия электронной подсистемы объединенного атома, $H_{el}(Z_1, \infty)$ и $H_{el}(Z_2, \infty)$ – энергии электронных подсистем разъединенных атомов. Используя расчеты [15], энергия электронной подсистемы может быть записана в виде [14]:

$$H_{el}(Z) = 0.465 Z^{2.432} \text{ (ат.ед.)}. \quad (3)$$

Данная формула выполняется с точностью 1.6% для $Z=2-92$. Полученная зависимость несколько отличается от предсказываемой моделью атома Томаса-Ферми, где $N_{el}(Z) \sim Z^{7/3}$. С учетом (1) для константы экранирования получаем выражение:

$$\alpha = -0.465 ((Z_1+Z_2)^{2.432} - Z_1^{2.432} - Z_2^{2.432}) / (Z_1 Z_2). \quad (4)$$

В случае возбуждения или ионизации частиц при соударении, поскольку энергия электронной подсистемы уменьшается по абсолютной величине, формулы (4) дает верхний предел для константы экранирования.

Для получения сведений о потенциале при больших энергиях соударения использовались данные, получаемые при обратном резерфордском рассеянии. Энергии соударения в данном случае лежат в диапазоне 300 кэВ - 6 МэВ. В работе [16] был получен потенциал для системы $He^+ - Au$ с использованием процедуры Фирсова.

Однако возможен подход, когда используется рассеяние назад и угол рассеяния θ не сильно отличается от 180° . В этом случае значение потенциала при расстоянии наибольшего сближения частиц R_0 определяется по формулам [14]:

$$U(R_0) = 2E \sin(\theta/2) / (1 + \sin(\theta/2)) + 2\alpha Z_1 Z_2 (\sin(\theta/2) - 1) / (1 + \sin(\theta/2)) \approx E, \quad R_0 = f Z_1 Z_2 / E, \\ f = d\sigma/d\Omega / (d\sigma/d\Omega_{Coulomb}) = 1 / (1 + \alpha Z_1 Z_2 / E) \quad (5)$$

В этом случае f не зависит от угла рассеяния и $f \rightarrow 1$ при $E \rightarrow \infty$. Это позволяет нормировать функцию $f(E)$ весьма точно. Использование данного метода получения потенциала позволило расширить область, где известен потенциал, определенный из эксперимента, до $0.005 a_f$. На рис. 3. показана функция $\alpha(x) a_f = -\ln\{U(x) x a_f\} / x$, которая имеет смысл параметра экранирования. Очевидно, что для экранированного кулоновского потенциала $\alpha(x) = \alpha$.

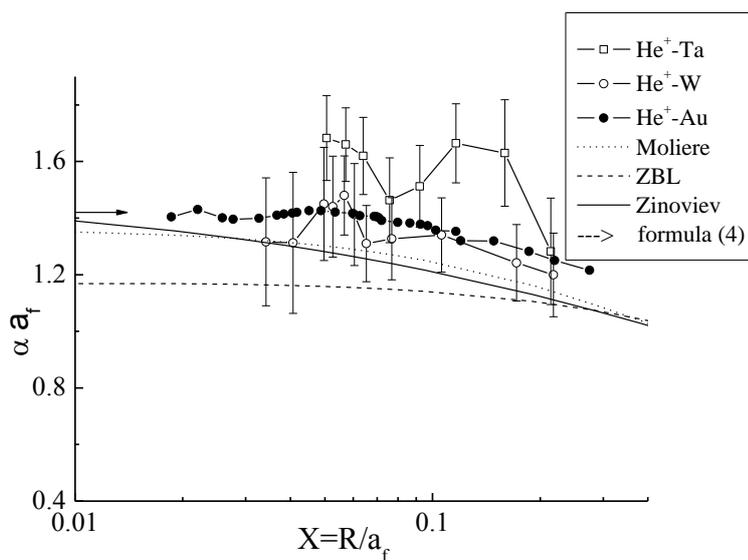


Рис.3. Зависимость константы экранирования от межъядерного расстояния [14].

На рис. 3 стрелкой показано значение, даваемое предложенной нами формулой (4). Имеется прекрасное согласие этого значения как с экспериментальными данными.

Полученные из эксперимента данные также отдают предпочтение потенциалу Мольера

[9] и предложенному нами потенциалу [7] по сравнению с широко используемым потенциалом ZBL [10]. Это неудивительно, так как при определении параметров в модели ZBL использовались данные при меньших энергиях соударения и, соответственно, отвечающих большим расстояниям наибольшего сближения по сравнению с нашей работой [7].

4. Коррекция на электронную экранировку при измерения методом обратного Резерфордского рассеяния.

В работе [17] было показано, что отношение сечений для случаев рассеяния в поле слабо экранированного кулоновского потенциала и кулоновском потенциала имеет вид: $d\sigma/d\Omega / (d\sigma/d\Omega_{\text{Coulomb}}) = 1/(1 + Z_1 Z_2 \cdot \alpha / E)$. Значения α приведены на рис.4.

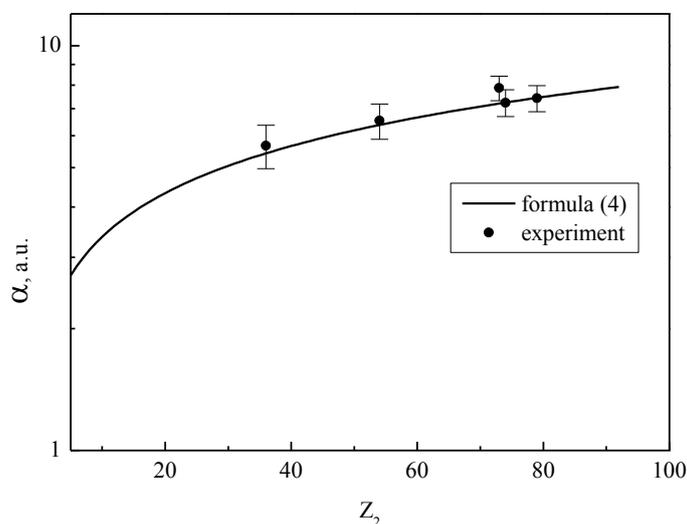


Рис. 4. Значения α для столкновений ионов He^+ с атомами с зарядом ядра Z [14].

В ситуации, когда поле сильно отличается от кулоновского, мы предлагаем проводить вычисление сечения с использованием потенциала, предложенного в [2,7].

5. Влияние электронной экранировки на сечения ядерного синтеза.

Полученные данные позволяют также оценить рост сечения ядерного синтеза, связанный с наличием экранировки в потенциале. Как известно, сечение ядерной реакции может быть записано в виде: $\sigma(E) = S(E)E^{-1} \eta(E)$, здесь $S(E)$ так называемый астрофизический фактор, слабо меняющийся при изменении E . Величина сечения определяется вероятностью туннелирования сквозь потенциальный барьер $\eta(E)$:

$$\eta = \exp \left(- \frac{2}{\hbar} \int_{R_1}^{R_2} \{2m[U(R) - E]\}^{1/2} dR \right). \quad (6)$$

Присутствие электронов при измерении сечений в лабораторных условиях существенно изменяет вероятность туннелирования и, соответственно, сечение по сравнению со случаем взаимодействия голых ядер (рис. 5).

Учет экранировки [14] позволяет иметь хорошее согласие с экспериментом [18].

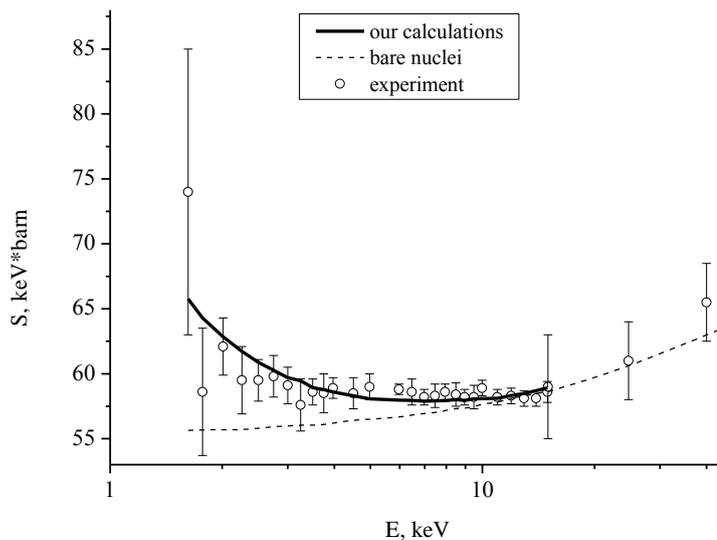


Рис. 5 Астрофизический фактор для d^+d реакций.

6. Поведение потенциала при рассеянии частицы на поверхности.

Делаются попытки получения сведений о потенциалах из рассеяния частиц на поверхности. Часто варьировалась модель потенциала для наилучшего описания экспериментах [19]. Шульга предложил оригинальный метод определения потенциала на основе анализа энергии захвата иона в поверхностный полуканал и получил сведения о потенциалт для системы Ag-Cu [20].

В работах [21,22] показано, что при рассеянии атомов на поверхности кристалла под небольшими углами скольжения $0.5-3^\circ$ имеется зависимость положения радужного пика в азимутальном угловом распределении рассеянных частиц от начальной энергии. Как видно из рисунка, имеется сильные отличия от эксперимента, как в величинах радужного угла, так и в функциональной зависимости от начальной энергии. Для описания эксперимента мы [23] использовали комбинацию экранированного кулоновского потенциала, часто используемого для описания рассеяния при больших энергиях, и экспоненциального потенциала, часто применяемого при небольших энергиях соударения. При использовании атомных единиц полученная зависимость имеет вид: $F(R)\{\text{ат.ед.}\}=192.2 \cdot \exp(-1.062 \cdot R) \cdot (1-0.234 \cdot R+0.024 \cdot R^2)$ и хорошо согласуется с экспериментом. Отклонения не превышают точности измерений величины φ_r . Полученные данные существенно отличаются от известных парных потенциалов, что по мнению авторов связано с взаимодействием налетающей частицы с электронами проводимости в металле.

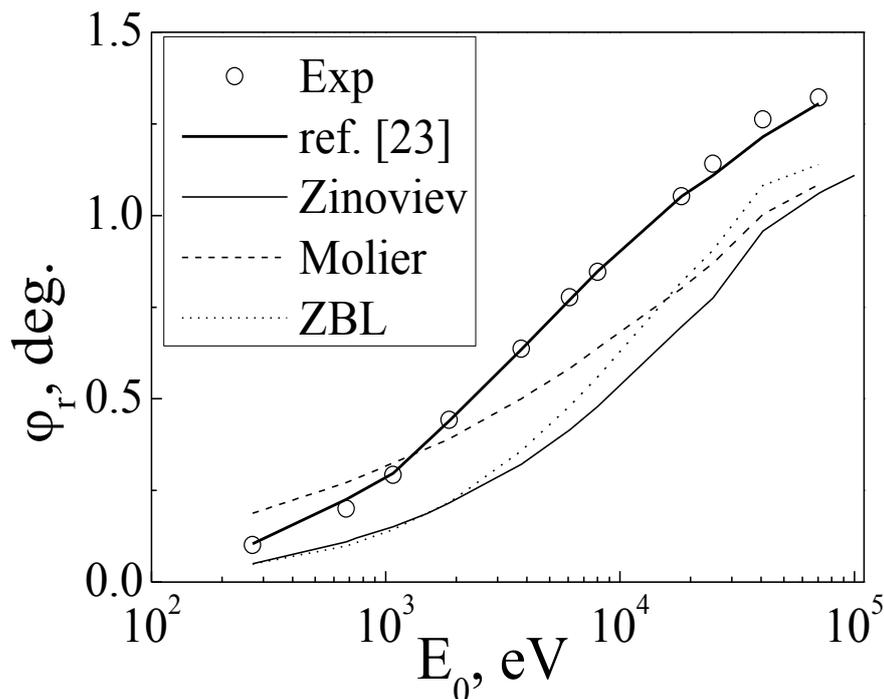


Рис. 6. Измеренная зависимость положения радужного пика от начальной энергии [10, 11] и проведенные нами расчеты для потенциалов Мольера [9], ZBL [10], Зиновьева [7] и предложенного в работе [23].

1. D. J. O'Connor, J.E. Biersack Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B15 (1986) 14.
2. A.N. Zinoviev, Tech.Phys. 53 (2008) 13.
3. P. Loftager, F. Besenbacher, O.S. Jensen, V.S. Sorensen, Phys. Rev. A20 (1979) 1443.
4. H. Hartung, B. Fricke, W.-D. Sepp. et al. Phys. Lett. 119 (1987) 457.
5. V.V. Afrosimov, Yu.S. Gordeev, A.N. Zinov'ev, JETP 66 (1974) 1933.
6. O.B. Firsov, JETP 33 (1957) 696.
7. A.N. Zinoviev, NIMB 269 (2011) 829.
8. H.Z. Jensen, Phys. B 18 (1932) 722.
9. G. Moliere, Zs. Naturforsch. Bd 2a. (1947) 133.
10. J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids. v1, Pergamon Press, N.Y. (1983).
11. K. Norlund, N. Runeberg, D. Sundholm, NIMB 132 (1997) 45.
12. A.N. Zinoviev, K. Norlund NIMB (2017) to be published.
13. V. Leonas, Uspekhi Fiz.Nauk, 107 (1972) 29.
14. A.N. Zinoviev NIMB (2017) dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2017.01.009
15. T.A. Carlson et al., Atomic Data 3 (1971) 1.
16. А.Н.Зиновьев, Д.С.Мелузова, Поверхность 6 (2016) 9.
17. F.Besenbacher, P.Loftager, W.Moller, Phys.Rev A21 (1980) 1891.
18. F. Schumann, S.Zavatarelli, L.Gialanella et al., Eur. Phys. J. A 2 (1998) 3376.
19. J.W.Rabalais Principles and Applications of Ion Scattering Spectroscopy. Wiley-Inc. 2003.
20. В.И.Шульга ЖТФ, т.52 (1982) 534.
21. P. Tiwald, A. Scholler, H. Winter et al Rev. B 82 (2010) 1254532.
22. P. Yu. Babenko, A. N. Zinov'ev, and A. P. Shergin, JETP. Lett. 101 (2015) 840.
23. A.N. Zinoviev et al. NIMB (2017) dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2016.12.040

**ВЗАИМОСВЯЗЬ ПРОЦЕССОВ, ВЫЗЫВАЮЩИХ НЕУПРУГИЕ ПОТЕРИ
ЭНЕРГИИ ИОНОВ**
**INTERRELATION OF PROCESSES LEADING TO INELASTIC ENERGY
LOSSES OF IONS**

Ю.А.Белкова, Н.В.Новиков, Я.А.Теплова

Yu. A.Belkova, N.V.Novikov, Ya A.Teplova

*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В.Скобельцына,
Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова,
119992 Москва, Россия, teplova@anna19.sinp.msu.ru*

The method for calculating of inelastic energy loss of heavy ions in matter is proposed. It allows to divide the inelastic energy losses of ions into two interrelated components: due to charge exchange process, which determines the formation of the average charge of the ions, passing through matter, and due to ionization and excitation of target atoms, depending on the average ion charge.

В экспериментах по прохождению ионов с энергией E через газовую или твердую мишени измеряют сумму потерь энергии от разных элементарных процессов [1, 2]. Если считать упругие и неупругие взаимодействия ионов с мишенью независимыми, то потери энергии ионов, прошедших слой вещества толщиной t , можно представить в виде суммы:

$$S = S_n(E) + S_e^*(E, Z, t), \quad (1)$$

где упругие потери энергии $S_n(E)$ вычисляются теоретически на основе законов сохранения импульса и энергии и не зависят t . Второе слагаемое $S_e^*(E, Z, t)$ описывает потери энергии иона с зарядом ядра Z от неупругих взаимодействий с электронами среды. Кроме потерь энергии от процессов ионизации атома мишени, которые вносят основной вклад в $S_e^*(E, Z, t)$, это слагаемое учитывает также потери энергии в процессе перезарядки быстрой частицы (потери и захвата ионом одного или нескольких электронов) и возбуждение атома мишени в столкновениях с ионом. Если t превышает $T(E, Z)$, обозначающую толщину мишени, необходимую для установления равновесного зарядового распределения ионов, то неупругие потери энергии частицы не зависят от t :

$$S_e^*(E, Z, t) \rightarrow S_e(E, Z) \text{ при } t \geq T(E, Z), \quad (2)$$

и можно записать

$$S = S_n(E) + S_e(E, Z). \quad (3)$$

Эмпирические оценки упругих $S_n(E)$ и неупругих $S_e(E, Z)$ потерь энергии ионов присутствуют в программном комплексе SRIM [3].

В данной работе предлагается выделить потери энергии ионов в процессе перезарядки и аппроксимировать неупругие потери энергии ионов соотношением:

$$S_e^*(E, Z, t) = S_i(E, Z = 1) \times [Q(E, Z, t)]^{p(E, Z)} + S_{q\pm 1}^*(E, Z, t), \quad (4)$$

где $S_i(E, Z = 1)$ – потери энергии протонов в процессах ионизации и возбуждения атома мишени в газах, $Q(E, Z, t)$ – средний заряд ионов, $p(E, Z)$ – безразмерный параметр, $S_{q\pm 1}^*(E, Z, t)$ – потери энергии ионов в процессе их перезарядки. Согласно полученным ранее результатам [4]:

$$S_{q\pm 1}^*(E, Z, t) = \sum_q \Phi_q(E, t) \left[\sigma_{q, q+1}(E, Z) \left(\frac{mV^2}{2} + |\varepsilon_q| \right) + \sigma_{q, q-1}(E, Z) \left(\frac{mV^2}{2} - |\varepsilon_{q-1}| \right) \right], \quad (5)$$

где q – заряд иона, $\sigma_{q, q+1}(E, Z)$, $\sigma_{q, q-1}(E, Z)$ – сечения потери и захвата ионом одного электрона, $\Phi_q(E, t)$ – зарядовые фракции, $\varepsilon_q, \varepsilon_{q-1}$ – величины энергии связи валентного электрона иона с зарядом q и $q - 1$ соответственно, V – скорость иона, m – масса электрона. Средний заряд ионов определяется как

$$Q(E, Z, t) = \sum_{q=0}^Z q \Phi_q(E, t). \quad (6)$$

Приближение (4) позволяет учесть взаимосвязь процессов перезарядки ионов и процессов ионизации и возбуждения атома мишени в неупругих потерях энергии, поскольку процесс перезарядки связан с формированием среднего заряда ионов, от которого зависят сечения ионизации и возбуждения атома мишени.

Для толщины $t \geq T(E, Z)$ зарядовое распределение ионов становится равновесным:

$$\Phi_q(E, t) \rightarrow F_q(E), \quad (7)$$

$$Q(E, Z, t) \rightarrow \bar{q}(E, Z) = \sum_{q=0}^Z q F_q(E), \quad (8)$$

где $F_q(E)$ и $\bar{q}(E, Z)$ – равновесные зарядовые фракции и средний заряд ионов в равновесном зарядовом распределении соответственно. Неупругие потери энергии ионов при $t \geq T(E, Z)$ не зависят от толщины мишени t :

$$S_e(E, Z) = S_i(E, Z = 1) \times [\bar{q}(E, Z)]^{p(E, Z)} + S_{q\pm 1}(E, Z), \quad (9)$$

где $S_{q\pm 1}(E, Z)$ определяется аналогично (5) с учетом соотношения (7). Для протонов с энергией $E \geq 50$ кэВ выполняется соотношение $\bar{q}(E, Z=1) \approx 1$, что позволяет из эмпирических величин неупругих потерь энергии $S_e(E, Z=1)$ [3] и экспериментальных значений $\sigma_{0,1}(E, Z=1)$ и $\sigma_{1,0}(E, Z=1)$ в газах [5] вычислить параметр $S_i(E, Z=1)$

$$S_i(E, Z=1) = S_e(E, Z=1) - S_{q\pm 1}(E, Z=1). \quad (10)$$

Используя далее для газов и твердых мишеней значения сечений $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z)$ для ионов с $Z \geq 5$ [6] и эмпирические величины неупругих потерь энергии $S_e(E, Z)$ [3], из соотношения (9) можно вычислить безразмерный параметр:

$$p(E, Z) = \ln \left[\frac{S_e(E, Z) - S_{q\pm 1}(E, Z)}{S_i(E, Z=1)} \right] / \ln [\bar{q}(E, Z)]. \quad (11)$$

С увеличением E ион теряет большую часть своих электронов и вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии уменьшается $S_{q\pm 1}(E, Z)/S_e(E, Z) \rightarrow 0$. В этой области энергии, в соответствии с приближением Бете – Блоха, $p(E, Z) \rightarrow 2$.

На рис.1 представлены результаты расчетов параметра $p(E, Z)$ для ионов азота в кремнии и азоте. Для быстрых ионов азота $p(E, Z)=2$ в области энергии $E \geq 10$ МэВ/нуклон. В интервале энергии $E \approx 0.1 - 1$ МэВ/нуклон $p(E, Z) \geq 2$ и функция $p(E, Z)$ от E имеет максимум. Это связано с влиянием двухступенчатых переходов, когда атом мишени в результате взаимодействия с ионом переходит в конечное состояние через промежуточное возбужденное состояние дискретного или непрерывного спектра. Сечение таких процессов имеет более сильную зависимость от заряда иона q по сравнению с первым порядком теории возмущения.

Уменьшение величины параметра $p(E, Z)$ в области медленных столкновений ($E < 0.1$ МэВ/нуклон) связано с молекулярными эффектами, когда для описания процессов возбуждения и ионизации атома мишени необходимо учитывать движение электрона в поле двух кулоновских центров, что соответствует описанию неупругих потерь энергии в области малой энергии [7], $S_e(E, Z) \propto Z$.

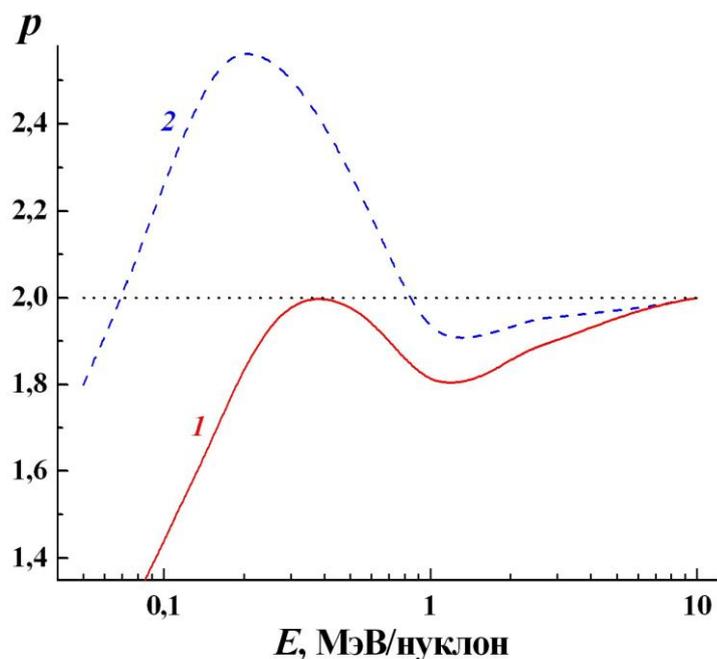


Рис.1. Результаты расчета параметра $p(E, Z)$ для ионов азота ($Z=7$): 1 – в кремнии (Si); 2 – в неоне (Ne).

Результаты расчетов для ионов азота (рис. 1) показывают, что величина $p(E, Z)$ значительно отличается в твердых и газообразных мишенях. Это связано с изменением неупругих потерь энергии ионов при переходе от газовой мишени к твердой, что объясняется в (4) несколькими факторами – модификацией сечений перезарядки [4], увеличением среднего заряда (6) и ослаблением зависимости $S_i(E, Z)$ от Z из-за уменьшения параметра $p(E, Z)$.

Предложенный метод расчета заключается в разделении неупругих потерь энергии быстрой частицы на две взаимосвязанные компоненты, которые обусловлены процессами перезарядки ионов, а также процессами ионизации и возбуждения атомов мишени. Это позволяет вычислить суммарные неупругие потери энергии в газовой или твердой мишени, которые соответствуют экспериментальным данным для $S_e(E, Z)$.

1. Я.А. Теплова, В.С. Николаев, И.С. Дмитриев, Л.Н. Фатеева, ЖЭТФ 42 (1962) 44.
2. И.А. Ахизер, Л.Н. Давыдов, УФН. 120 (1979) 239.
3. J.F. Ziegler, SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org).
4. Yu.A. Belkova, N.V. Novikov, Ya.A. Teplova, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 343 (2015) 110.
5. N.V. Novikov, Ya.A. Teplova, Database on charge – changing cross sections in ion–atom collision. <http://cdfc.sinp.msu.ru/services/cccs/cccs.htm>.
6. N.V. Novikov, Ya.A. Teplova, Physics Letter. A. 378 (2014) 1286.
7. О.Б.Фирсов, ЖЭТФ. 366 (1959) 1517.

ПРОХОЖДЕНИЕ ВОЛН И ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ПОРИСТЫЕ СТРУКТУРЫ WAVE AND PARTICLE PROPAGATION THROUGH POROUS STRUCTURES

Г.М. Филиппов¹, В.А. Александров², И.В. Лысова³, А.В. Степанов¹
G.M. Philippov¹, V.A. Aleksandrov², I.V. Lysova³, A.V. Stepanov¹

¹)ЧГСХА, Чебоксары, РФ, filipov38-gm@yandex.ru;

²)ЧГУ имени И.Н. Ульянова, Чебоксары, РФ;

³)ЧГПУ имени И.Я. Яковлева, Чебоксары, РФ

In this work we study charged particles propagation through porous structures is investigated in order to clarify the channeling parameters, and also to study the possibility of perforating thin films. We consider the passage of a quantum wave packet of a multiply charged ion through a single nanopore and an ordered lattice of nanopores. The calculation is performed by numerically solving the non-stationary Schrödinger equation.

В работе исследуются процессы прохождения заряженных частиц через пористые структуры с целью выяснения параметров каналирования, а также возможностей по перфорированию тонких пленок. Работа является обобщением и расширением имеющихся данных [1-3] на случай прохождения частиц и волн различной природы через пористые пленки. Рассматривается прохождение квантового волнового пакета многозарядного иона через одиночную нанопору и упорядоченную решетку из нанопор. Расчет производится посредством численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера.

В дополнение к этому рассматривается классическое каналирование атомных частиц в нанопоре конического сечения, а также перфорация тонкой пленки тяжелым многозарядным ионом методом молекулярной динамики.

Рассмотрим вначале квантовую задачу. Волновой пакет частицы массой M , зарядом Q , движется вдоль оси x со скоростью v . Волновая функция (ВФ) в начальный момент времени $t=0$ имеет вид

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4} \sqrt{d_1 d_2}} \exp \left\{ ipx - \frac{1}{2} \left[\frac{x^2}{d_1^2} + \frac{y^2 + z^2}{d_2^2} \right] \right\},$$

где импульс частицы $p = Mv$. Волновой пакет частицы проникает через круглое отверстие радиусом R в полупрозрачной перегородке толщиной a , потенциал в которой постоянен и равен U_0 . Центр пакета движется по оси поры, так что задача является аксиально-симметричной.

Решая нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi + QU(\mathbf{r})\Psi,$$

можно найти динамику волнового пакета и определить вероятности прохождения и отражения квантовой частицы от поры, а также распределение плотности вероятности обнаружения частицы в различных точках пространства. Поскольку масса частицы $M \gg 1$ (порядка 10^5 а.е.), вводим «медленное» время $\tau = \frac{t}{M}$. В результате получаем

уравнение Шредингера для частицы с массой, равной массе электрона (1 а.е.) в «медленном» времени и «сильном» потенциале MU

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \Psi + MQU(\mathbf{r})\Psi, \quad \Psi|_{\tau=0} = \Psi_0(\mathbf{r}).$$

Решаем двумерное (с учетом аксиальной симметрии) нестационарное уравнение Шредингера на сетке с помощью разностной схемы 2-го порядка типа Кранка-Николсона и получаем эволюцию состояния во времени. Результаты предварительных расчетов для электрона ($M=1$ а.е., $Q=-1$ а.е.), движущегося с $v=1$ а.е. через круглое отверстие радиусом $R=10$ а.е. приведены на рис. 1. Начальные ширины гауссова пакета частицы $d_1=d_2=20$ а.е. На скриншотах по горизонтали отложена продольная координата в рабочей цилиндрической области, ограниченной бесконечно высокими стенками (нулевые граничные условия), а по вертикали – поперечная. Приведены рельефы плотности вероятности в плоскости (x,y) , отображенные методом градаций яркости. Верхний край рисунка – ось цилиндра, вниз отложена поперечная координата. В виде прямоугольников показана рабочая цилиндрическая область и барьер, а в виде эллипса – положение пакета (на половине плотности вероятности) в случае свободного движения.

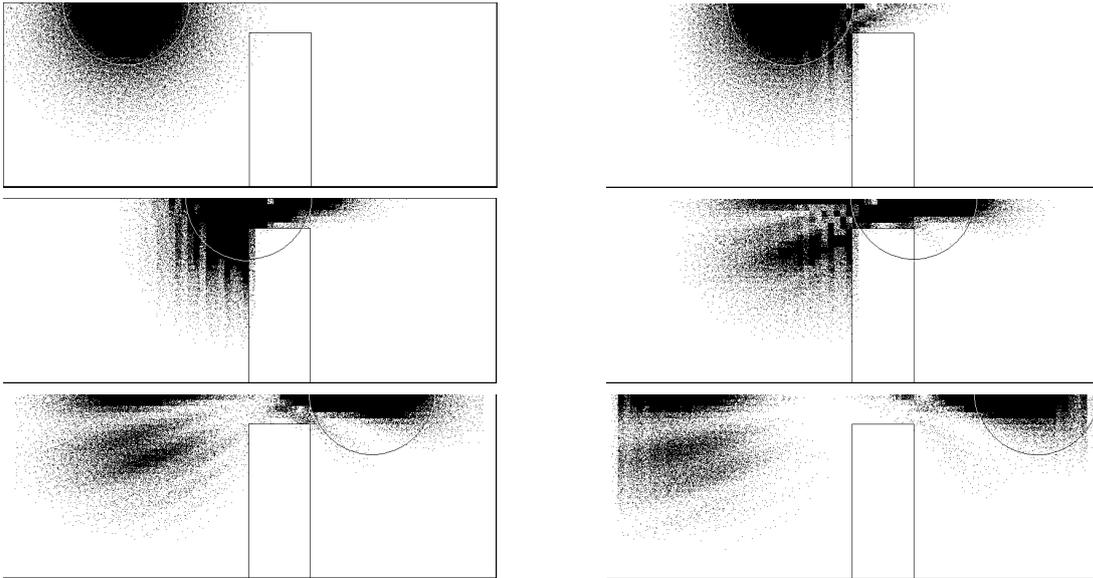


Рис. 1. Эволюция ВФ электрона, проходящего со скоростью $v=1$ а.е. через пору радиуса $R=10$ а.е.

Вероятность прохождения волнового пакета через пору равна 0.2255. Процесс туннелирования через перегородку в нашем случае несущественен (менее 0.002), поскольку выбраны параметры потенциального барьера $a=20$ а.е., $U_0=1$ а.е. После прохождения волновой пакет частицы локализуется в окрестности оси симметрии системы.

На рис. 2 показана зависимость вероятности прохождения волнового пакета электрона, движущегося с $v=1$ а.е. и обладающего начальной гауссовой шириной 20 а.е., через пору, в зависимости от ее радиуса.

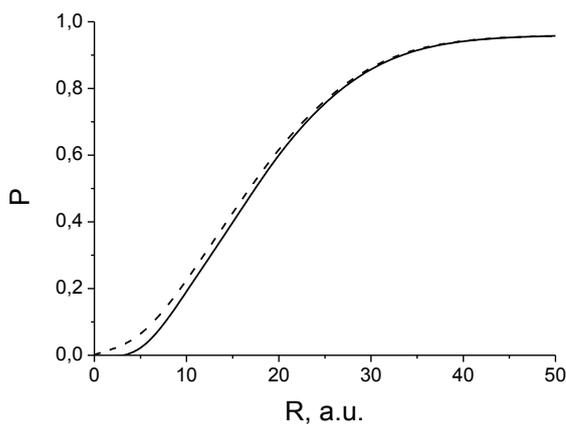


Рис. 2. Вероятность прохождения пакета электрона полная (штрихи) и в пределах $[0, 1.1R]$ (сплошная кривая) через пору в зависимости от ее радиуса. Скорость электрона $v=1$ а.е., толщина пленки 20 а.е., потенциал в пленке 1 а.е.

В работе планируется исследовать влияние упорядоченности пористой структуры в нанопленке на параметры прохождения пучков заряженных частиц. Будет рассмотрена структура типа «дифракционной решетки» с набором параллельных щелей и структура типа «двумерной решетки» с упорядоченным набором круглых нанопор.

В связи с проблемой перфорирования тонкой пленки многозарядным ионом в работе рассматривается задача о поляризационных силах, возникающих в поре при прохождении в ней многозарядного иона. Как было выяснено в предыдущей работе [2], поляризационные силы оказываются важнейшими при рассмотрении данного явления. Для пакета прямоугольной формы наибольшее значение силы поляризационного происхождения естественным образом достигается при условии соприкосновения границы пакета с внутренней поверхностью поры. Для гауссова пакета дело обстоит сложнее, поскольку заряд в нем распределен неравномерно, четкая граница пакета в данном случае отсутствует. Тем не менее, удастся определить ту степень проникновения пакета «по ту сторону» границы поры, которая будет соответствовать максимальной силе воздействия электрического поля многозарядного иона на граничную поверхность поры. Представим себе, что пакет имеет гауссово распределение в поперечной по отношению к оси поры плоскости, в то время как вдоль поры он распределен равномерно. Задача в данном случае эквивалентна более простой задаче о гауссовом пакете, располагающем-

ся вблизи плоской поверхности диэлектрика. Поведение поляризационной силы в данном случае для простейшей модели диэлектрика было рассмотрено нами в работе [4]. В случае точечного заряда потенциал поляризационного поля дается выражением

$$\varphi^{(pol)}(\mathbf{x}) = -Z \int_0^{\infty} dk_{\parallel} J_0(k_{\parallel} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) e^{-k_{\parallel}(z+z_0)} \frac{\varepsilon_{\omega}(\mathbf{k}_{\parallel}) - 1}{\varepsilon_{\omega}(\mathbf{k}_{\parallel}) + 1} \Big|_{\omega \rightarrow 0} .$$

Здесь $\mathbf{x}_0 = (\mathbf{r}_0, z_0)$ – точка, где располагается точечный заряд Z , $\varepsilon_{\omega}(\mathbf{k}_{\parallel})$ – образ Фурье оператора диэлектрической проницаемости диэлектрика. Диэлектрик занимает полупространство $z < 0$. В простейшем приближении, с учетом пространственной дисперсии,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\omega} &= 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \Theta(k_c - k_{\parallel}) \rightarrow \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \Theta(k_c - k_{\parallel}) = \\ &= \frac{-\omega_0^2}{2\omega^2 - \omega_0^2} \Theta(k_c - k_{\parallel}) \rightarrow \Theta(k_c - k_{\parallel}) \text{ at } \omega \rightarrow 0 \end{aligned} .$$

В этом случае потенциал поляризационного поля оказывается равным

$$\varphi^{(pol)}(\mathbf{x}) = -Z \int_0^{k_c} dk_{\parallel} J_0(k_{\parallel} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) e^{-k_{\parallel}(z+z_0)} .$$

При этом сила притяжения заряда к поверхности и ее максимальное значение равны

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x} = \mathbf{x}_0) &= -Z^2 \frac{\partial}{\partial z} \varphi^{(pol)}(\mathbf{x})_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} = Z^2 \int_0^{k_c} dk_{\parallel} k_{\parallel} e^{-2k_{\parallel}z_0} \\ F_{\max} &= Z^2 \int_0^{k_c} dk_{\parallel} k_{\parallel} = \frac{Z^2}{2} k_c^2 . \end{aligned}$$

Учитывая затем, что заряд распределен по гауссовому закону, можно определить то расстояние центра пакета от поверхности диэлектрика, на котором достигается максимальное значение поляризационной силы. Это значение оказывается иногда значительно превышающим среднеквадратичную ширину пакета. В работе планируется данное исследование провести и для случая цилиндрической симметрии, непосредственно применимо в задаче о воздействии гауссова пакета многозарядного иона на пору, в которой он распространяется.

1. Г.М. Филиппов, В.А. Александров. Расчет вероятности образования пор при падении многозарядного иона на ультратонкую пленку//Известия РАН, сер. физическая, 2016, т. 80, № 2, с. 139-142.
2. В.А. Александров, Г.М. Филиппов. Рассеяние частицы на атоме в кристаллической структуре//Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2017, №6, с. 1-5.
3. Г.М. Филиппов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2016, №6, с.21-25.
4. G.M. Filippov. NIM B 355 (2015) 311-315.

**ОТРАЖЕНИЕ ИОНОВ ВОДОРОДА ОТ ПЕРВОЙ СТЕНКИ
ТОКАМАКА РЕАКТОРА**
**HYDROGEN IONS REFLECTION FROM THE TOKAMAK REACTOR
FIRST WALL**

П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.П. Солоницына, А.М. Девятков, А.Н. Зиновьев
P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, A.P. Solonitsyna, A.M. Deviatkov, A.N. Zinoviev

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия, e-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Reflection coefficients and angular distributions of scattered particles in bombarding various practically applicable targets with H, D atoms have been calculated in a wide range of incident angles and energies. In the case of glancing angles and crystalline targets, the reflection coefficient of almost 100% has been observed. This effect should be taken into account in calculating energy input into the divertor material and in designing protective screens for spacecrafts.

1. Введение. В монографии [1] приведено большое количество данных о коэффициенте отражения атомов R_N от поверхности твердых тел при падении налетающих частиц по нормали к поверхности. В книге имеется много ссылок на расчетные работы, число экспериментальных данных существенно меньше [2-7], а для скользящих углов падения и того меньше.

Поскольку первую стенку токамака реактора ITER планируется делать из вольфрама (W), наше исследование посвящено вычислению коэффициентов отражения и угловых распределений атомов водорода и дейтерия при столкновении с кристаллическим и аморфным вольфрамом. Информация о величине коэффициентов отражения также может оказаться существенной при конструировании экранов космических аппаратов для их защиты от солнечного ветра.

2. Описание компьютерного моделирования. Моделирование рассеяния ионов поверхностью кристаллов проводилось с помощью программы, в которой рассеяние рассматривается как результат последовательности парных соударений. Использовался алгоритм схожий с алгоритмом, предложенным в [8].

В качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался потенциал [9], наилучшим образом описывающий имеющиеся экспериментальные данные по рассеянию частиц:

$$U = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \cdot \exp \left\{ \frac{-x}{c_1 + c_2 \cdot x^{1/2} + c_3 \cdot x} \right\},$$

где Z_1, Z_2 – заряды ядер, e – заряд электрона, r – межъядерное расстояние, $x=r_0/a_f$, $a_f = 0.8853 \cdot (Z_1^{0.5} + Z_2^{0.5})^{-2/3}$ – длина экранирования Фирсова, и $c_1=0.582$, $c_2=0.654$, $c_3=-0.03$.

Коэффициенты отражения для аморфных мишеней вычислялись с помощью программы SRIM [10], а угловые распределения частиц получены обработкой результатов кода SRIM специальным программным обеспечением, разработанным авторами статьи. В большинстве расчетов учитываются тепловые колебания, которые оказывают существенное влияние на угловые распределения рассеянных частиц.

3. Расчет коэффициентов отражения и угловых распределений.

В этом исследовании мы не учитывали зарядовые состояния налетающей частицы и рассеянных частиц. Угловые распределения рассеянных частиц характеризуются углами φ и δ (см. Рис. 1).

На Рис. 2 приведены коэффициенты отражения для системы D-W(100) для энергий $E_0=0.1 \div 10$ кэВ и углов $\alpha=1 \div 90^\circ$. Пучок направлен вдоль атомной цепочки. Данные для водорода и дейтерия похожи, так как при вычислениях предполагалось, что потенциал не зависит от массы, а потери энергии при прохождении атомов в кристалле не учитывались. Рис. 3 иллюстрирует результаты, полученные для аморфного вольфрама с помощью программы SRIM.

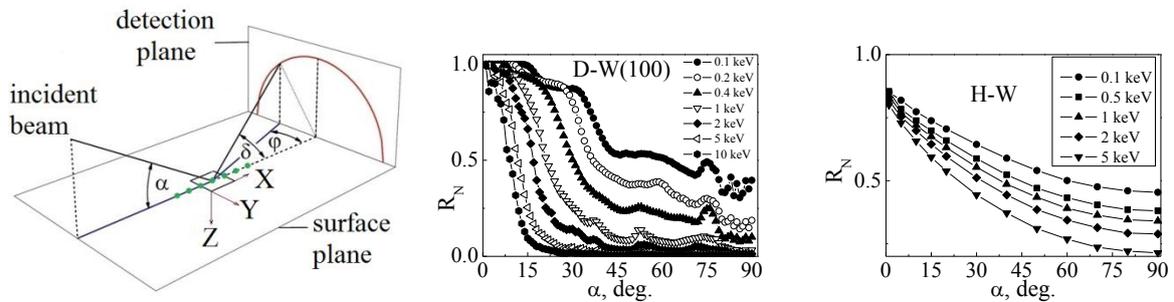


Рис. 1. Геометрия эксперимента и расчета. Рис. 2. Рассчитанные коэффициенты отражения R_N в зависимости от угла скольжения α . Рис. 3. Рассчитанные программой SRIM коэффициенты отражения в зависимости от угла скольжения.

На Рис. 4 приведено сравнение данных для энергии $E_0=400$ эВ, типичной для частиц в пристеночной области токамака. Как видно из Рис. 4, данные для кристаллической и аморфной мишеней существенно разнятся. Для кристаллической мишени наблюдается близкая к 1 величина коэффициента отражения вплоть до углов падения $\alpha=20^\circ$. Этот эффект следует учитывать при оценке энергетической нагрузки на дивертор, если он будет сделан из кристаллического материала. При больших углах коэффициент отражения уменьшается быстрее, чем в случае с аморфной мишенью из-

за каналирования частиц в материале. При соответствующих значениях углов наблюдаются пики, связанные с эффектом блокировки. Измерения для поликристаллической мишени [4] хорошо согласуются с нашими вычислениями для аморфной мишени.

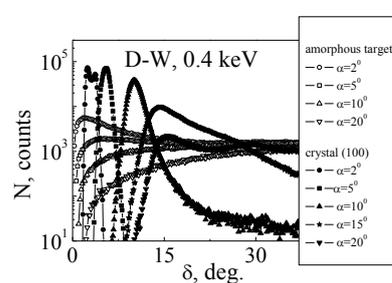
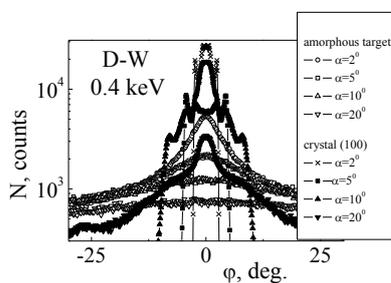
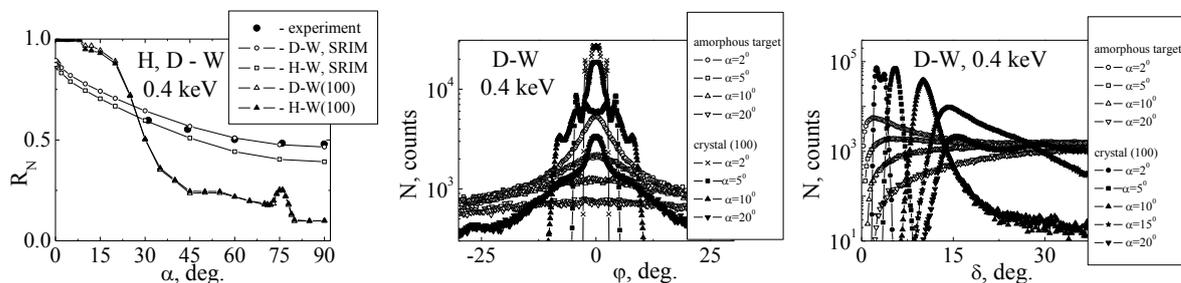


Рис. 4. Зависимость R_N от угла α . Экспериментальные данные из работы [4]. Расчеты выполнены с помощью нашей программы и программы SRIM. Рис. 5. Распределения по азимутальному углу ϕ , частиц рассеявшихся на кристаллической и аморфной мишени. Рис. 6. Распределения по углу δ частиц, рассеявшихся на кристаллической и аморфной мишени.

Угловые распределения рассеянных частиц в зависимости от азимутального угла ϕ для системы D-W представлены на Рис. 5. Распределение по азимутальному углу ϕ для кристаллической мишени имеет характерные радужные пики [11]. Угловое распределение уширяется с увеличением угла падения α . Однако, этот эффект исчезает при угле $\alpha > 20^\circ$ так как при таких условиях частицы не захватываются в поверхностный канал. Вид угловых распределений изменяется, когда наблюдается коэффициент отражения, близкий к 100%.

На Рис. 6 приведено распределение рассеянных частиц по углу δ . При рассеянии от кристаллической мишени распределение по углу δ имеет острый максимум, вызванный рассеянием в поверхностном канале, а в случае аморфной мишени все угловые распределения гладкие. В случае кристалла проявляется эффект блокировки при малых углах рассеяния δ . Как видно из Рис. 5 и Рис. 6, угловые распределения для кристаллической и аморфной мишеней становятся похожими друг на друга при углах $\alpha > 20^\circ$.

4. Коэффициент отражения для системы D-C. В этом случае вычисления проводились только для аморфной мишени (Рис. 7). Графит часто используется как материал дивертора и первой стенки токамака. Возможно сравнение вычислений с экспериментом [3]. Видно, что коэффициенты отражения существенно растут при уменьшении угла скольжения α . Код SRIM при малых энергиях дает меньшие значения, и хорошо описывает зависимость коэффициентов отражения от угла скольжения только при энергиях близких к 10 кэВ.

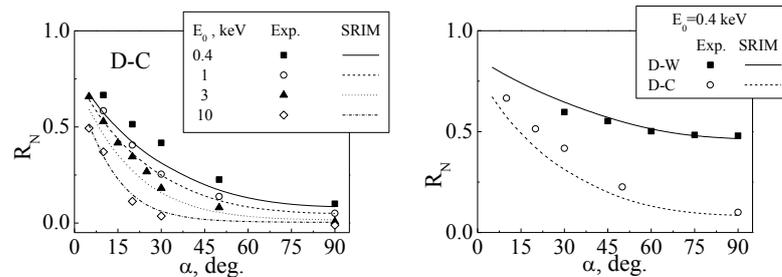


Рис. 7. Зависимость R_N от угла α . Экспериментальные данные из работы [3] показаны точками, наш расчет программой SRIM показан линиями. Рис. 8. Зависимость R_N от угла α . Экспериментальные данные для системы D-C из работы [3] и для системы D-W показаны точками, наш расчет программой SRIM показан линиями.

На Рис. 8 представлены экспериментальные зависимости коэффициентов отражения от угла скольжения для атомов дейтерия с энергией 0.4 кэВ, рассеянных на углероде [3] и вольфраме [4]. На этом же рисунке приведены наши расчеты с помощью программы SRIM. Видно, что зависимость коэффициента отражения от угла скольжения слабее для тяжелой мишени. Лучшее согласие расчета и эксперимента наблюдается для мишени из вольфрама. Коэффициент отражения больше для тяжелой мишени.

5. Заключение.

1. Выполненные вычисления показывают существенное различие коэффициентов отражения для кристаллических и аморфных мишеней.
2. Близость коэффициентов отражения водорода и дейтерия для кристаллических мишеней к 100% следует принимать во внимание для снижения энерговыделения в диверторе и при разработке защитных экранов для космических аппаратов.
3. Для проверки работоспособности нашей программы желательно появление экспериментальных данных.

1. W. Eckstein, Computer Simulation of Ion-Solid Interactions (Springer, Berlin, 1991), p.104.
2. M. Braun and E. W. Thomas, J. of Appl. Phys., 53 (1982) 6446.
3. C.K. Chen, B.M.U. Scherzer and W. Eckstein, Appl. Phys. A, 33 (1984) 265.
4. V.V. Bandurko, N.N. Koborov, V.A. Kurnaev, V.M. Sotnikov and O.V. Zabeyda, J. of Nucl. Mater., 176-177 (1990) 630.
5. C.K. Chen, W. Eckstein and B.M.U. Scherzer, Appl. Phys. A, 31 (1983) 37.
6. E.S.Mashkova, Rad. Eff., 54 (1981) 1.
7. J. Boittiger, H. Wolder Jorgensen and K. B. Winterbon, Rad. Eff. 11 (1971) 133.
8. M.T. Robinson, I.M. Torrens, Phys. Rev. B, 9 (1974) 5008.
9. A.N. Zinoviev, NIMB 269 (2011) 829.
10. J.F. Ziegler, J.P. Biersack, SRIM - <http://www.srim.org>.
11. P.Yu. Babenko, A.N. Zinoviev, A.P. Shergin, NIMB 354 (2015) 137.

ВЛИЯНИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ ПОВЕРХНОСТИ НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИОНОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ

INFLUENCE OF SURFACE POTENTIALS OF IONS INTERACTION

С.С. Волков^{1,2}, А.А. Аристархова¹, Ю.Е. Дмитриевский¹, Т.И. Китаева¹, С.В. Николин³,
Н.Л. Пузевич², М.Ю. Тимашев¹, А.Б. Толстогузов¹, В.В. Трухин¹
S.S. Volkov^{1,2}, A.A. Aristarhova¹, Yu.E. Dmitrevsky¹, T.I. Kitaeva¹, S.V. Nikolin³,
N.L. Puzevitch², M.Yu. Timashev¹, A.B. Tolstogouзов¹, V.V. Truchin

¹Рязанский государственный радиотехнический университет, г. Рязань, Россия

²Рязанское высшее воздушно-десантное командное училище

³АО «Плазма», г. Рязань, 390000, Россия, ул. Циолковского, 24

The features of impact energy, the charged electric potentials and surface potentials of the interaction of ions with surface atoms of the surface on the processes of ion scattering and sputtering.

В работах с поверхностью часто появляется необходимость использования характеристики, называемой «потенциал поверхности», содержащей в зависимости от изучаемых процессов различный физический смысл. При отсутствии уточнений возникают неопределенности, особенно вследствие широкого смысла самого понятия «потенциал», включая потенциалы взаимодействия для отдельных частиц, атомов и поверхности. В то же время уточнения не всегда возможны из-за недостаточной исследованности потенциальных характеристик поверхности в комплексе. В изучении процессов взаимодействия ионов с поверхностью в основном считается достаточным ограничиться межатомными потенциалами взаимодействия в сферически изотропной форме. Электрические зарядовые потенциалы ограничиваются либо зарядкой всего объекта или части поверхности в диэлектриках, либо двойным зарядовым слоем электронного газа и атомов теоретического характера. Целью данной работы являлось исследование проявления различных потенциальных особенностей поверхности в процессах взаимодействия ионов с поверхностью при отражении и распылении. Большой интерес представляет потенциальный барьер на внутренних межфазных границах и его видоизменения при переходах одной из фаз в тонкую пленку с выраженными особенностями для мелкоразмерных структур. Данная работа выполнена как анализ результатов разнообразных экспериментальных исследований рассеяния ионов, распыления вторичных ионов и атомов отдачи, наблюдения послеэмиссии, возникающей при разных энергетических воздействиях, определения контактной разности потенциалов межфазных границ и потенциалов монослойных пленок с изучением их атомного состава. В качестве исследуемых объектов использовались технологические материалы из разных технологических производственных процессов. В работе исследованы и обобщены материалы по электростатическим зарядовым потенциалам, по энергетическим потенциалам, обу-

словливающим направленное движение электрических зарядов (электронов), по потенциалам взаимодействия ионов с поверхностью, по потенциальным характеристикам, обусловленным теоретической моделью энергетического распределения валентных электронов в металле.

Исследования рассеяния и распыления ионов проводились на экспериментальных и промышленных спектрометрах ионного рассеяния и вторично-ионной масс-спектропии. Потенциальные характеристики зарядового характера лучшим образом проявляются при низкоэнергетических воздействиях, изучались ионными пучками ионов гелия, неона, аргона гипертермальных энергий - ниже 100 эВ и ниже 10 эВ при токах до 10^{-8} А/см². Для наблюдения атомов отдачи использовались пучки с энергиями более 200 эВ и до 5 кэВ. Опыты с распылением ионов осуществлялись вместе с анализами составов технологических объектов (металлов и полупроводников) в технологии производства интегральных схем. В аналитическом оборудовании обеспечивались чистые условия подготовки поверхности исследуемых объектов транспортировкой в контейнерах с инертным газом или азотом. Условия по чистоте соответствовали производственным условиям технологических процессов, в частности, производства эмиттеров, интегральных схем, чистых и сверхчистых материалов. Вакуумные условия в физико-аналитическом оборудовании обеспечивались на уровне 10^{-9} Па.

Для исследования потенциалов межфазных границ, в том числе на монослойно-размерных уровнях использовался метод контактной разности потенциалов (метод Андерсена). Этот метод одновременно позволяет наблюдать и измерять отражение электронов при энергиях меньше 1 эВ, существенно зависящим от порогового потенциала поверхности. Такой метод оказывается эффективным при настройке измерительной электронной пушки в режим насыщения катода пушки при отсутствии адсорбатов на катоде пушки. Подобные условия позволяют обеспечить вольфрамовый ленточный катод при температуре более 2300 °С при вакууме лучше 10^{-7} Па.

Исследования рассеяния ионов низких энергий и контактной разности потенциалов, в том числе на системах с монослойными адсорбированными пленками Cs – [W], Ва – [W], Ва – [Ge], Рb – [РbО] показали, что при массивных покрытиях на границе раздела образуется энергетическая разность потенциалов, однонаправленно действующая на свободные электроны при электростатически нейтральных пленках. Энергетический потенциал электростатически нейтрального проводника (металла) переносит заряды через границу раздела при контактировании материалов. Материалы, разделенные тонким диэлектриком, обладают энергетическим потенциалом, сравнимым с

энергетическим химическим потенциалом и способным обеспечивать аналогичную химическим элементам, зарядовую емкость. Это положение легко проверяется с помощью двух разных материалов, разделенных тонким сегнетоэлектриком и способных создавать импульс тока (при малой площади) при отсутствии электростатической заряженности. Заметим, что пористые активные поверхности химических элементов составляют десятки сотни м. кв., то есть обладают сравнимой плотность тока по площади. Энергетические потенциалы позволяют объяснить появление сил, создающих электрический ток в замкнутом внешнем контуре при нейтральных электродах с диэлектрическим разделителем.

При уменьшении толщины пленок до монослойных, что определяется и контролируется рассеянием ионов инертных газов, межфазная граница превращается в квантовую яму. При достаточной чистоте и регулярности структуры адсорбента такая квантовая яма клинообразного типа обеспечивает хорошую продольную поверхностную проводимость. Поперечная проводимость при одной (поверхностной пленке) обращается в уменьшение работы выхода поверхности. Формализованно выражаясь, улучшается проводимость адсорбент – вакуум. Большой интерес представляет такая система при размещении материала с адсорбатом и того же материала без адсорбата в электролит с положительными и отрицательными ионами. При этом если потенциальную яму (не обязательно квантовую) сформировать в соответствии с полупроводниковой терминологией, дырочную с изгибом зон вверх, что соответствует большой работе выхода (по терминологии эмиссионной), то эта яма будет притягивать электроны из адсорбента и заряжаться электростатически отрицательно. Положительные ионы электролита будут нейтрализовывать эту зарядку и обеспечат длительное движение зарядов по всему контуру. Эти процессы были смоделированы на примере Pb – PbO и контролировались оже-спектроскопией, рассеянием ионов и вторично-ионной масс-спектроскопией. При этом электродвижущей силой оказывается энергетический потенциал между двумя нейтральными (электростатически) материалами на границе «дырочной» ямы с адсорбентом. Природа электродвижущей силы обусловлена силами химического сродства нейтральных атомов. Она проявляется в виде сил, создающих электрически зарядовую контактную разность потенциалов, которая компенсирует действие ее создавшую энергетическую разность потенциалов в статических системах.

Большое внимание, уделяемое в литературе, зарядовым потенциалам поверхности или разности зарядовых потенциалов, сосредоточено на двойном электрическом слое и на электростатической зарядке избыточными зарядами. Причиной образования

двойного слоя считается вытекание (на величину примерно постоянной решетки) свободного электронного газа, электронов проводимости. Зарядка избыточными зарядами представляет собой емкостное явление, в котором избыточные заряды располагаются на поверхности, связаны своими полями с зарядами противоположного электрода и рассчитываются по известным емкостным законам.

Из анализа взаимодействия ионов инертных газов с поверхностью вольфрама и арсенида галлия при адсорбции цезия и бария на субмонослойном уровне можно предположить, что свободные электроны вольфрама свободны при перемещении от атома к атому, но не свободны от атомов. Наличие каких-либо избыточных свободных электронов внутри проводящего материала (металла) не согласуются с практикой работы электростатических устройств и с электростатикой в целом. С другой стороны, возникает новый вопрос о движущей силе, перемещающей электрические заряды внутри проводника и создающей электрический ток. При упомянутой форме свободы электронов в передаче силы на электроны проводимости участвуют остовные атомы, ограничивающие движение электронов по своим объединенным орбиталям и формирующие упругие свойства электронному газу проводимости эквивалентные упругости межатомных взаимодействий. В такой модели сила воздействия энергетического потенциала может передаваться по жестким орбиталям остовных атомов металла. Как известно прочностные механические свойства металлических монокристаллов существенно анизотропны. При этом прочностные свойства обусловлены потенциалами взаимодействия орбиталей с остовными атомами, имеющими тоже явно анизотропный характер. Можно предполагать, что потенциалы взаимодействия налетающих ионов с атомами кристаллической поверхности тоже анизотропны. При рассеянии ионов поверхностями кристаллических металлов с начальными энергиями ниже 100 эВ в спектре наряду с пиком парного соударения появляется пик отраженных ионов без потерь энергии. Теоретический анализ и компьютерное моделирование показало, что пик без потерь энергии обусловлен коллективными эквипотенциалами атомов, характеризующими энергии связи атомов. При этом энергия связи, определяемая статистическими методами, не превышает для большинства металлов величин 4 – 6 эВ. Возникшее противоречие может быть объяснено анизотропией потенциала взаимодействия в пределах расхождений значений полученных по ионному рассеянию и статистическими методами.

**ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ РАЗМЕРОВ НАНОСИСТЕМЫ НА
ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЗАРЯДОВОГО ОБМЕНА С
ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ ИОНОМ**
**NANOSYSTEM SIZE INFLUENCE ON FEATURES OF ELECTRON EXCHANGE
WITH NEGATIVE ION**

И.К. Гайнуллин, О.В. Поддельская
I.K. Gainullin, O.V. Poddelskaya

** Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, 119992, Ленинские горы, МГУ, д.1, стр.2, Москва, Россия, e-mail: ivan.gainullin@physics.msu.ru;*

The electron exchange between negative hydrogen ion and nanosystems, like thin metallic films or thin island films, is considered. The quantum calculations show that electron transfer rate depends on ion-surface distance and structure of discrete energy levels inside the nanosystem. The latter depends on nanosystem size. Such features of electron exchange as electron transfer rate, probability of electron transfer, propagation velocity and average coordinate of electron location inside the film are calculated by means of time-dependent Schrodinger equation. It is interesting to note, that these features can be rather well approximated by means of simple linear model of electron propagation.

Введение

Резонансный электронный обмен между атомными частицами и поверхностью твердых тел представляет интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения [1]. Для фундаментальной науки важно изучение влияния на электронный обмен скорости и траектории подлета атомной частицы, состава и структуры поверхности. В прикладной науке электронный обмен учитывается при диагностике состава и структуры поверхности с помощью ионных пучков. Изучением электронного обмена с атомных частиц с поверхностью интенсивно занимаются около двух десятилетий. Развитая теория и методики расчета дают хорошее совпадение с экспериментами по электронному обмену ионов с массивными металлическими образцами (bulk metal, т.е. не наноструктурированный металл). Здесь можно выделить две основные модели: 1) для систем в которых движение (модель желе) происходит адиабатическое туннелирование электрона в глубь металла; 2) для систем, в которых движение электрона перпендикулярно поверхности запрещено (запрещенная зона, L-gap), распад электрона осуществляется по поверхности через мнимые и поверхностные состояния, в данном случае возможно проявление неадиабатических эффектов.

В случае, когда на поверхность неоднородна, а содержит наноструктуры мы имеем дело с электронным обменом с наносистемами, который изучен существенно в меньшей степени. Для фундаментальной науки электронный обмен с наносистемами представляет в силу проявления неадиабатических и квантово-размерных эффектов [2,3,4,5]. С прикладной точки зрения данный процесс интересен для микроэлектроники, напыления тонких пленок, создания сенсоров.

В данной работе проводится численное моделирование резонансного электронного туннелирования внешнего электрона отрицательного иона водорода на тонкую пленку Al, для случая когда ион H⁻ зафиксирован на определенном расстоянии до пленки. Варьируемыми параметрами являются толщина пленки T, радиус островковой пленки R, расстояние от иона до поверхности пленки Z. Задача модельная, но важна для разработки методологии и анализа реальных экспериментов. Изучается зарядовый обмен и его основные характеристики, такие как эффективность электронного перехода (ширина ионного уровня), вероятность зарядового обмена (процент электронной плотности, перешедшей с отрицательного иона в пленку), скорость распространения (поток вероятности), средняя координата нахождения электрона внутри пленки, характерное время электронного перехода t_{\min} (время за которое достигается максимальная вероятность зарядового обмена). Показывается, что данные характеристики могут быть с хорошей точностью быть аппроксимированы с помощью простой линейной модели распространения электрона. В данной работе используется атомная система единиц: 1 а.е. расстояния = $5.292 \cdot 10^{-11}$ м, 1 а.е. времени = $2.419 \cdot 10^{-17}$ с, 1 а.е. скорости = $2.188 \cdot 10^6$ м/с.

В общем случае зарядовый обмен описывается нестационарным уравнением Шредингера
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi$$
 где $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$ - волновая функция электрона, $U = U(\vec{r}, t)$ - потенциальная энергия электрона, m - масса электрона, \hbar - постоянная Планка.

При решении задачи используется метод Распространения Волновых Пакетов (РВП). Его суть состоит в изучении изменения во времени волнового пакета электрона, участвующего в процессе перезарядки, то есть в прямом решении на пространственно-временной сетке нестационарного уравнения Шредингера для внешнего электрона, находящегося в поле иона и кластера атомов [4,5].

Численная схема метода РВП позволяет вычислить автокорреляционную функцию системы, квадрат модуля которой есть вероятность нахождения электрона на ионе. Основные величины, характеризующие перезарядку, E и Γ определяются в результате аппроксимации автокорреляционной функции системы суперпозицией нескольких экспонент [6,7].

Была рассмотрена задача зарядового обмена между отрицательным ионом водорода и тонкими металлическими пленками. Распространение электрона внутри пленки можно разбить на последовательные этапы, каждый из которых имеет наглядную физическую интерпретацию. Основные характеристики зарядового обмена, такие как эффективность электронного перехода, вероятность зарядового обмена, скорость распространения и средняя координата нахождения электрона внутри пленки находятся с помощью квантово-механических расчетов. В работе показано, что они могут быть с хорошей точностью быть аппроксимированы с помощью простой линейной модели распространения электрона.

Распространение электрона перпендикулярно поверхности пленки (средняя координата нахождения электрона) аппроксимируется моделью равноускоренного движения, в которой величина постоянного ускорения определяется текущим этапом распространения электрона внутри пленки (см. рис. 1 слева).

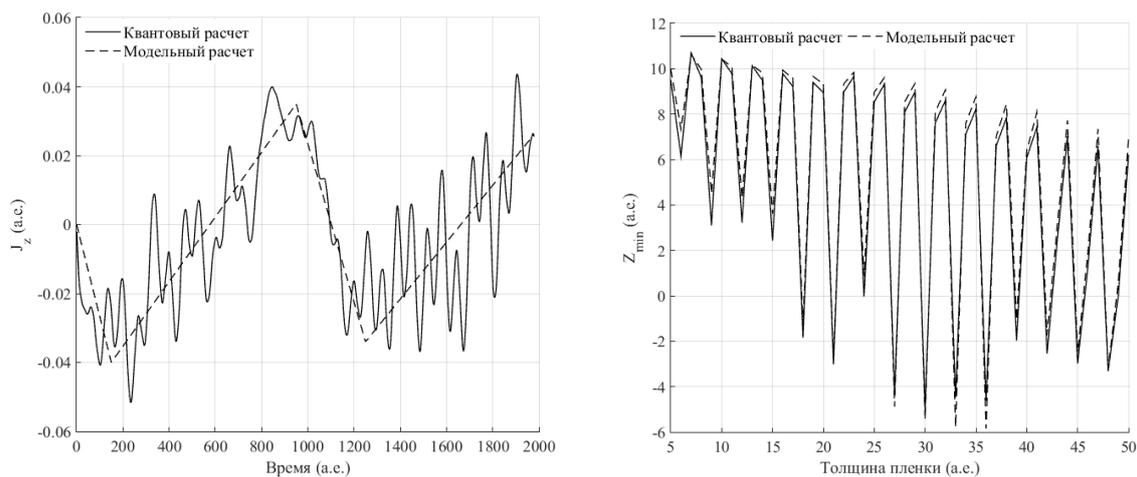


Рисунок 1. Слева – скорость распространения электрона перпендикулярно поверхности в зависимости от времени. Справа – средняя координата нахождения электрона в зависимости толщины пленки.

В отдельные моменты времени средняя координата нахождения электрона $\langle z \rangle$ может быть рассчитана как среднее значение (взвешенная сумма) между координатами иона и пленки с весом пропорциональным вероятности нахождения электрона на ионе/пленке $\langle z \rangle = z_{ion} \cdot P_{ion} + z_{film} \cdot (1 - P_{ion})$ (см. рис. 1 справа).

Время достижения минимального значения заселенности иона, т.е. максимальной степени перехода электрона в наносистему, линейно коррелирует с размерами наносистемы (см. рис. 2 слева).

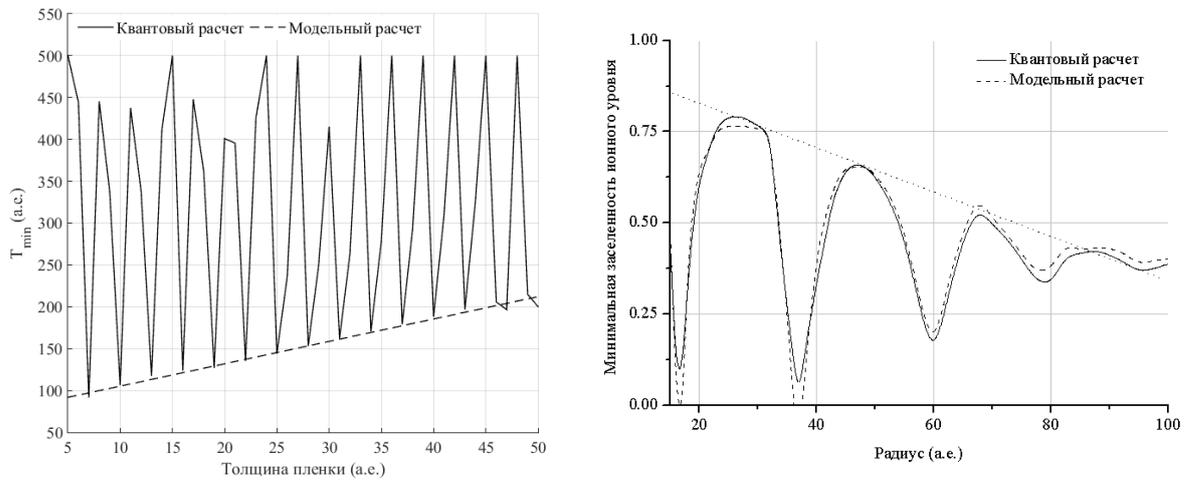


Рисунок 2. Слева – характерное время электронного перехода как функция толщины пленки. Справа – минимальная заселенность ионного уровня (равная 1 – вероятность электронного обмена) как функция радиуса островковой пленки.

Вероятность зарядового обмена (перехода электрона в наносистему) пропорциональна произведению эффективности электронного перехода (ширины уровня) на время взаимодействия $\Delta P = 1 - P_{ion} = 0.15 + 0.02 \cdot \Gamma \cdot (t - 150a.e.)$ (см. рис. 2 справа).

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 16-02-00478).

1. К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин, А.В. Зотов, М. Катаяма, Введение в физику поверхности. М.: Наука, 2006.
2. I.K. Gainullin and I.F. Urazgildin, Physical Review B. 74, 205403 (2006).
3. I.K. Gainullin, M.A. Sonkin, Phys. Rev. A 92 (2015) 022710.
4. D.K. Shestakov, T. Yu. Polivnikova, I.K. Gainullin and I.F. Urazgildin, Nucl. Inst. Meth. B. 267, 2596 (2009).
5. E.R. Amanbaev, I.K. Gainullin, E.K. Zykova, I.F. Urazgildin, TSF 519, 4737 (2011).
6. I.K. Gainullin and M.A. Sonkin, Comp. Phys. Comm. 188, 68 (2015).
7. I.K. Gainullin, Comp. Phys. Comm. 210, 72 (2017).

**УПРУГИЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ АТОМНЫХ
ЧАСТИЦ**
ELASTIC ENERGY LOSS UNDER INTERACTION OF ATOMIC PARTICLES

В.В. Евстифеев, Н.В. Костина

V.V. Evstifeev, N.V. Kostina

*Кафедра физики, Пензенский государственный университет,
Красная 40, Пенза, Россия, physics@pnzgu.ru*

Features of transmission and the energy storage under elastic interactions of ions Nb^+ ($E_0=0,1\div 3$ keV) with atoms of the single crystal Nb (001) in each act of collision, have been investigated by the molecular dynamics method. It is established that the energy recoil accumulation occurs in the region of the most dense packing for atoms mainly in the first two monolayers of the crystal.

В работе [1] исследованы закономерности передачи и накопления энергии в упругих взаимодействиях при движении ионов Nb^+ в монокристалле ниобия, позволившие установить места накопления энергии и тем самым указать на «очаги» распыления металла при ионной бомбардировке. Были рассчитаны пространственные распределения энергии отдачи в объеме мишени для начальной энергии ионов Nb^+ $E_0=1,5$ и 3 кэВ. Обнаружена анизотропия распределения энергии отдачи, обусловленная кристаллической структурой мишени, и выявлено, что наибольшие значения энергии отдачи приходится на плотноупакованные ряды кристалла, перпендикулярные ее поверхности. Это находится в соответствии с существующими в литературе данными, свидетельствующими о том, что распыление монокристаллов сопровождается ориентационными эффектами. В работе [1] также установлено, что максимум энергии отдачи приходится на второй атомный слой. (В ОЦК-решетке его образуют атомы, расположенные в центре элементарной кубической ячейки). Данный результат не противоречит заключению ряда авторов о том, что распыление атомов начинается из внешних слоев. В частности, в работе [2] считается, что возбуждение распыленных атомов происходит в актах их выбивания в режиме линейных каскадов из одного или двух внешних монослоев металла.

В настоящем сообщении продолжены исследования упругих потерь энергии ионов Nb^+ , бомбардирующих монокристалл ниобия, с целью изучения динамики передачи энергии в каждом акте столкновения и влияния величины энергии E_0 на пространственные распределения энергии отдачи. Поверхностная грань (001) монокристалла Nb подвергалась бомбардировке ионами Nb^+ с энергией $E_0=0,1$ и $0,5$ кэВ. Падение ионов происходило в плоскости (100) под углом 55° . Расчеты проводили методом молекулярной динамики с использованием потенциала Циглера-Бирзака-Литтмарка с радиусом обрезания $2,5 \text{ \AA}$. Из-за сложности расчетов в модели сделано серьезное упрощение – не учитывались объемные силы связи атомов в кристалле. Как и в работе [1] мишень разбивалась на цилиндрические зоны высотой $H = 12 \text{ \AA}$ и радиуса $R = n\Delta R$ (где $n = 1, 2, 3, \dots$ – номер зоны, ΔR – ширина зоны). Величина $\Delta R = 0,2 \text{ \AA}$ выбиралась произвольно.

Изучены динамика движения иона и передача им энергии в каждом акте взаимодействия с одним или одновременно с несколькими атомами кристаллической решетки, сопровождающемся уменьшением его энергии. На рис. 1 приведены рассчитанные распределения энергии отдачи E_R по цилиндрическим зонам, а на рис. 2 зависимости энергии отдачи E_N от глубины залегания атомного слоя. Из рис. 1 видно, что для $E_0=0,1$ кэВ ориентационный эффект практически исчезает, что связано с отсутствием проникновения ионов вглубь мишени. Величина энергии отдачи мала и в основном передается атомам первого (поверхностного) слоя. Атомы второго слоя получают незначительную долю энергии (рис. 2).

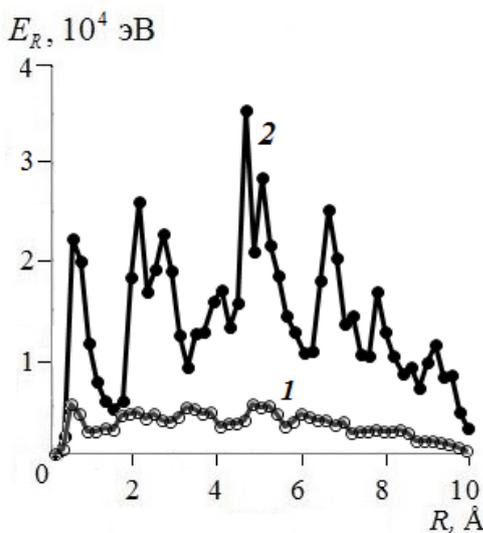


Рис. 1 Распределение энергии отдачи E_R по цилиндрическим зонам; начальная энергия E_0 , кэВ: 1 – 0,1; 2 – 0,5.

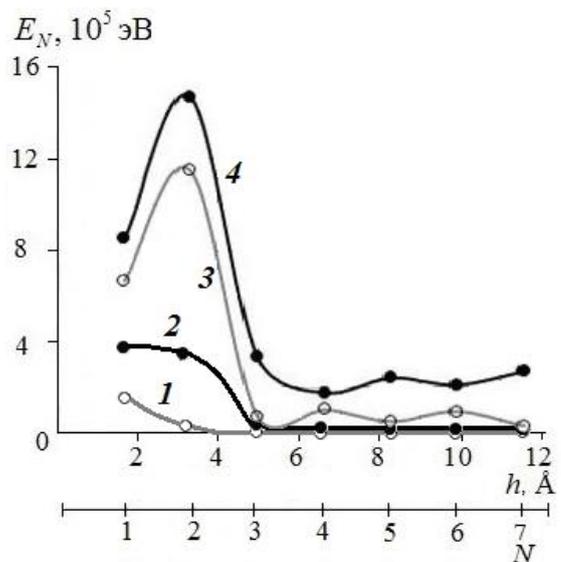


Рис. 2 Зависимость энергии отдачи E_N от глубины залегания атомного слоя; начальная энергия E_0 , кэВ: 1 – 0,1; 2 – 0,5; 3 – 1,5; 4 – 3.

Динамику столкновения иона с атомами решетки и передачу энергии в каждом акте взаимодействия можно проследить по данным расчета, представленным в таблице 1. В первой колонке этой таблицы приведена последовательность $k = 1, 2, 3, \dots$ поэтапного расчета взаимодействия иона Nb^+ с атомами Nb от начала его движения до остановки или до выхода из мишени через переднюю (фронтальную) или заднюю (тыльную) ее поверхности. Во второй колонке приведены значения z -координаты (перпендикулярной поверхности мишени), соответствующей положению иона на данном этапе расчета относительно фронтальной поверхности, для которой $z = 0$. Если центр иона находится перед фронтальной поверхностью, то $z > 0$, а если за ней, то $z < 0$. В третьей колонке указано число атомов N_a , участвующих одновременно во взаимодействии с ионом на данном этапе расчета. В четвертой колонке приведены отношения энергий E_k/E для каждого этапа расчета. (E_k - энергия, переданная атомам на k -том этапе расчета, E - энергия иона, оставшаяся после предыдущих этапов ($E = E_0 - (E_1 + E_2 + \dots + E_{k-1})$)).

Анализ результатов расчета показывает, что в процессе взаимодействия обнаруживаются места наибольшей передачи энергии, которые могут стать «очагами» распыления металла. Ионы с энергией $E_0=0,1$ кэВ, передав часть энергии, главным образом, атомам первого слоя, разворачиваются и уходят за пределы зоны взаимодействия. При этом их центры не достигают границы $z = 0$. Ионы с энергией $E_0=3$ кэВ проходят всю толщину кристалла ($h = 10 \text{ \AA}$) и выходят из него с тыльной стороны, отдав при этом наибольшую долю энергии атомам второго слоя. (Отметим, что приведенные в таблице 1 данные для всех энергий E_0 отобраны с одним и тем же параметром удара).

Таблица 1

k	$E_0=0,1$ кэВ			$E_0=0,5$ кэВ			$E_0=3$ кэВ		
	$z, \text{ \AA}$	N_a	E_k/E	$z, \text{ \AA}$	N_a	E_k/E	$z, \text{ \AA}$	N_a	E_k/E
	от 4,34 до 1,702	0	0	от 4,34 до 2,362	0	0	от 4,34 до 1,702	0	0
1	1,109	1	0,038	1,072	1	0,0066	1,043	1	0,000014
2	0,700	2	0,086	0,529	1	0,018	0,389	2	0,000075
3	0,377	3	0,018	0,019	3	0,009	-0,260	4	0,00013
4	0,163	3	0,135	-0,474	3	0,07	-0,897	3	0,00063
5	0,040	3	0,288	-0,953	4	0,06	-1,527	4	0,0078
6	0,055	3	0,167	-1,025	2	0,74	-2,177	3	0,530
7	0,284	3	0,169	-0,885	2	0,26	-2,912	2	0,068
8	0,606	2	0,338	-0,753	3	0,02	-3,646	4	0,002
9	1,008	2	0,285	-0,648	3	0,087	-4,361	3	0,007
10	1,438	1	0,050	-0,566	3	0,22	-5,044	4	0,020

11	от 1,871 до 5,339	0	0	-0,470	3	0,30	-5,722	5	0,006
12				-0,332	2	0,30	-6,391	4	0,006
13				-0,163	3	0,23	-7,050	4	0,020
14				0,017	2	0,17	-7,706	4	0,012
15				0,203	1		-8,309	2	0,127
16				0,400	1		-8,893	3	0,089
17				0,613	1		-9,479	4	0,009
18				0,834	1		-10,063	4	0,003
19				1,059	1				
20				от 1,285 до 5,127	0	0			

В таблице 2 представлено в процентах от общего числа падающих частиц количество ионов, застрявших, отраженных и прошедших сквозь мишень. Из таблицы следует, что с увеличением энергии E_0 число отраженных ионов уменьшается, зато увеличивается число ионов, прошедших сквозь мишень.

Таблица 2

Ионы E_0 , кэВ	Отношение количества ионов, застрявших в мишени и покинувших ее, к количеству упавших ионов, %			
	0,1	0,5	1,5	3
Застрявшие в мишени	1,9	48,53	54,5	28
Отраженные от мишени	98,1	51,4	25,3	15,6
Прошедшие сквозь мишень	0	0	18,3	49
Вышедшие через боковую поверхность	0	0,07	1,9	7,4

Итак, проведенные численные эксперименты показывают, что при упругих взаимодействиях в области энергий $E_0=0,1\div 3$ кэВ накопление энергии отдачи происходит в области наиболее плотной упаковки атомов в основном в первых двух внешних монослоях кристалла, где и образуются «очаги» распыления. В случае малых энергий бомбардирующих частиц величина энергии отдачи резко уменьшается, ионы, не достигнув поверхности, разворачиваются и уходят от мишени. Это, по-видимому, позволит в дальнейшем рассчитать пороговые энергии распыления.

[1] В.В. Евстифеев, Н.В. Костина, Т.В. Карабаева, Поверхность. 1 (2017) 104.

[2] R. Keely, Phys. Rev. 2 (1982) 700.

**ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ КРИСТАЛЛА НА ЭНЕРГИЮ ОТДАЧИ ПРИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С БОМБАРДИРУЮЩИМИ ИОНАМИ**
**THE INFLUENCE OF CRYSTAL ORIENTATION ON THE RECOIL ENERGY
UNDER INTERACTION WITH THE BOMBARDING IONS**

В.В. Евстифеев, Н.В. Костина

V.V. Evstifeev, N.V. Kostina

Кафедра физики, Пензенский государственный университет,

Красная 40, Пенза, Россия, physics@pnzgu.ru

Spatial distributions of the recoil energy under ions movement in the crystal have been calculated by the method of molecular dynamics. The influence of crystal orientation on the value of the recoil energy and its spatial distribution has been revealed.

Ориентация кристалла относительно пучка бомбардирующих ионов может оказывать влияние на величину и пространственные распределения энергии отдачи внутри кристалла. С целью установления зависимости энергии отдачи от угла падения α ионов и азимутального угла Φ поворота мишени были рассчитаны методом молекулярной динамики энергия отдачи ионов Nb^+ , бомбардирующих поверхность

грань (001) монокристалла ниобия с энергией $E_0=1,5$ кэВ, и пространственные распределения этой энергии.

На рис. 1 показаны рассчитанные распределения энергии отдачи E_R по цилиндрическим зонам [1]. Распределения 1 и 2 получены для углов падения $\alpha = 20$ и 55° в случае, когда плоскость падения ионов совпадала с кристаллографической плоскостью (010) мишени (азимутальный угол $\Phi = 0^\circ$). Распределение 3 получено для $\alpha = 55^\circ$ для случая, когда плоскость падения составляла угол $\Phi = 45^\circ$ относительно кристаллографической плоскости (010).

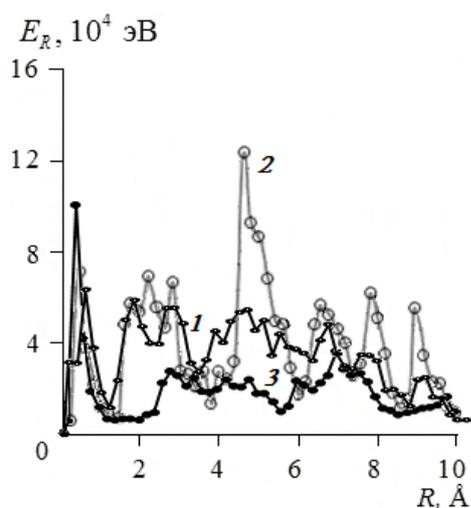


Рис. 1 Распределения энергии отдачи E_R по цилиндрическим зонам ($Nb^+ \rightarrow Nb(001)$, $E_0 = 1,5$ кэВ):
1 – $\alpha=20^\circ$, $\Phi=0^\circ$; 2 – $\alpha=55^\circ$, $\Phi=0^\circ$;
3 – $\alpha=55^\circ$, $\Phi=45^\circ$.

Из сравнения кривых 1 и 2 следует, что увеличение угла падения α не вызывает качественного изменения структуры пространственных распределений, но приводит к увеличению энергии отдачи. Ориентационные эффекты сохраняются: максимумы энергии отдачи, соответствующие местам расположения плотноупакованных атомных рядов, вытянутых вдоль направления [001] (перпендикулярных плоскости (001)), наблюдаются в обоих распределениях. (Поворот мишени вокруг оси симметрии z на угол $\Phi = 90^\circ$ не влияет на результаты расчета).

Совершенно иначе обстоит дело, когда осуществляется поворот мишени на угол $\Phi = 45^\circ$. В этом случае наблюдаются существенные изменения не только величины, но и формы кривой распределения энергии отдачи по зонам: исчезает структура пространственного распределения и уменьшается величина энергии отдачи (кривая 3).

Изменение ориентации кристалла приводит также к существенным различиям зависимостей энергии отдачи E_N от глубины залегания атомного слоя (таблица 1: $N = 1, 2, 3, \dots$ – номер слоя; h – расстояние от поверхности до центра атома N -го слоя). На рис. 2 представлены эти зависимости для $\alpha = 20$ и 55° ($\Phi = 0^\circ$, кривые 1 и 2) и $\alpha = 55^\circ$ ($\Phi = 45^\circ$, кривая 3). Из сравнения кривых 2 и 3 видно, что в случае $\Phi = 45^\circ$

Таблица 1

Слой N	Глубина $h, \text{Å}$
1	1,47
2	3,12
3	4,77
4	6,42
5	8,07
6	9,72
7	11,37

максимальная энергия отдачи передается атомам первого (поверхностного) слоя, тогда как для $\Phi = 0^\circ$ наибольшую энергию получают атомы второго слоя ($N=2$). Последующим атомным слоям передается уже незначительная энергия. Когда $\alpha = 20^\circ$ (кривая 1) четыре внешних атомных слоя ($N=1\div 4$) получают значительную энергию отдачи (второй и третий слои - максимальную), а последующие слои - незначительную.

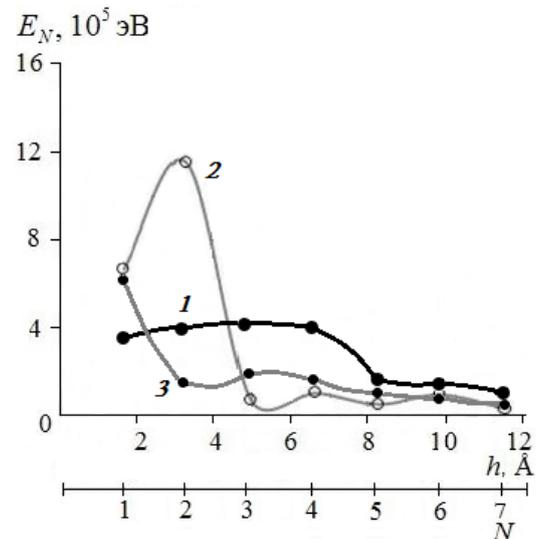


Рис. 2 Зависимость энергии отдачи E_N от глубины залегания атомного слоя ($E_0 = 1,5 \text{ кэВ}$): 1 – $\alpha=20^\circ, \Phi=0^\circ$; 2 – $\alpha=55^\circ, \Phi=0^\circ$; 3 – $\alpha=55^\circ, \Phi=45^\circ$.

Для наглядного представления пространственных распределений энергии отдачи $E(R, h)$ по объему мишени на рис.3 показаны эти распределения для разных ориентаций кристалла относительно падающего пучка.

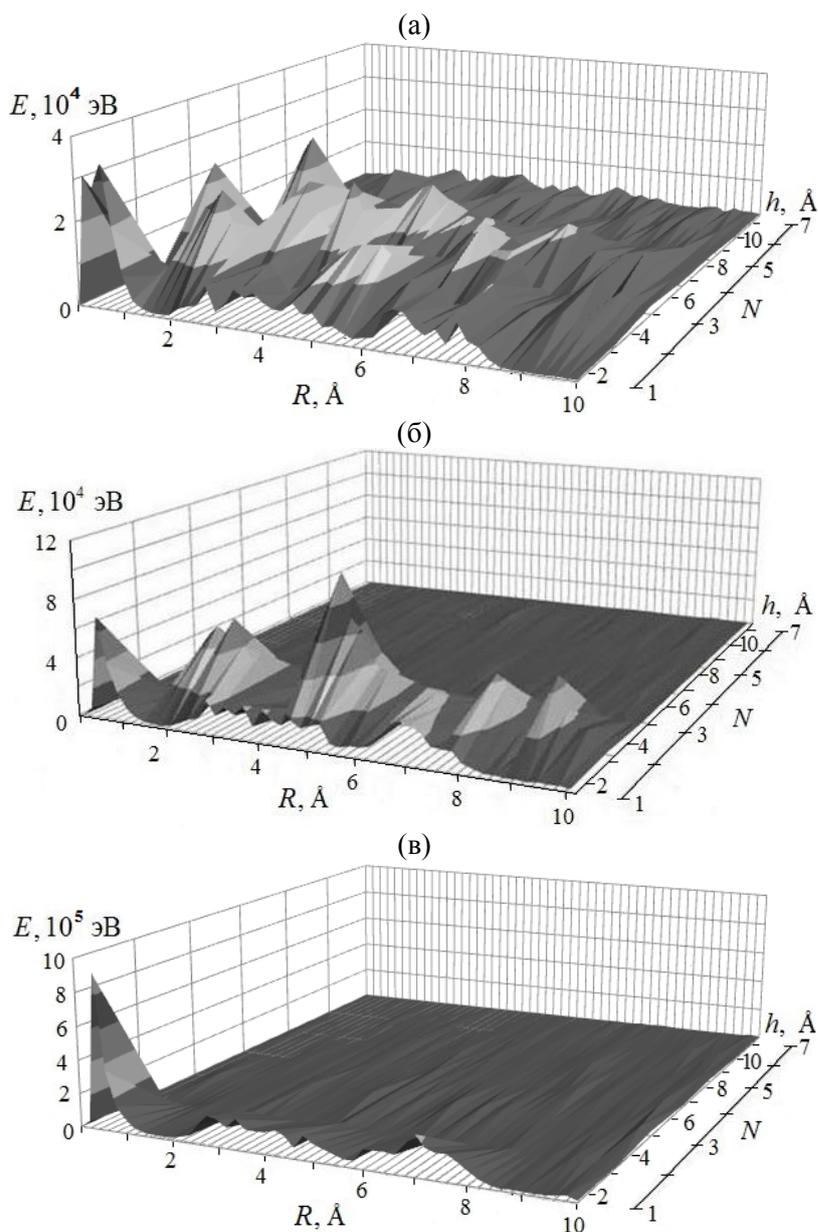


Рис. 3 Пространственные распределения энергии отдачи $E(R, h)$ по объему мишени ($E_0 = 1,5$ кэВ): (а) – $\alpha=20^\circ$, $\Phi=0^\circ$; (б) – $\alpha=55^\circ$, $\Phi=0^\circ$; (в) – $\alpha=55^\circ$, $\Phi=45^\circ$.

Таким образом, ориентация кристалла относительно пучка является одним из определяющих факторов, приводящих к изменению величины энергии отдачи и ее пространственного распределения в объеме кристалла.

[1] В.В. Евстифеев, Н.В. Костина, Т.В. Карабаева, Поверхность. 1 (2017) 104.

ЭНЕРГИЯ АТОМА, ЭЛЕКТРОННАЯ ЭКРАНИРОВКА И ПОПРАВКИ ПРИ ИЗМЕРЕНИЯХ МЕТОДОМ ОБРАТНОГО РЕЗЕРФОРДОВСКОГО РАССЕЯНИЯ.

ATOM ENERGY, ELECTRON SCREENING, AND SCREENING CORRECTIONS IN THE RUTHERFORD BACKSCATTERING SPECTROMETRY

A.N. Zinoviev

Ioffe Institute, 194021, St.Petersburg, Russia, zinoviev@inprof.ioffe.ru

Simple formulae for estimating the atom energy and screening constant have been proposed. The screening constant formula fits well the experimental data on interaction potentials. The paper proposes an approach to correcting the Rutherford backscattering measurements for the screening effect.

1. Введение.

Коррекция на электронную экранировку важна при применении метода обратного Резерфордского рассеяния, который широко используется для анализа элементного состава поверхностных слоев. При энергиях ниже 1 МэВ или при анализе тяжелых элементов требуется вводить поправки, связанные с отличием потенциала взаимодействия частиц от кулоновского потенциала.

Учет электронной экранировки также чрезвычайно важен при измерениях сечений реакций синтеза в лабораторных условиях [1-3]. Небольшая поправка на электронную экранировку сильно меняет вероятность туннелирования частицы сквозь потенциальный барьер и в разы меняет сечение. Поскольку рассеяние частиц и процесс туннелирования описываются одним и тем потенциалом, изучая рассеяние атомных частиц можно проверить теоретические представления об электронной экранировке.

2. Энергия электронной подсистемы и ее связь с константой экранирования.

Вначале рассмотрим выражение для полной энергии электронной подсистемы атома $H_{el}(Z)$. Нами было показано, что результаты вычисления [4] этой величины с точностью 1.1% для $Z=5-92$ хорошо описываются формулой (см. рис. 1):

$$H_{el}(Z) \text{ (in a.u.)} = 0.465 Z^{2.432} \quad (1)$$

Для $Z=2-92$ точность немного ухудшается - 1.6%. Полученная зависимость отличается от предсказываемой моделью атома Томаса-Ферми, где $H_{el}(Z) \sim Z^{7/3}$.

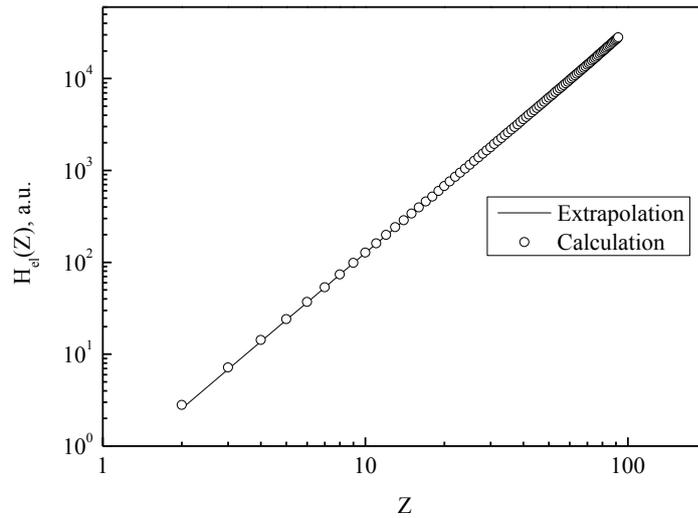


Рис. 1 . Энергия электронной подсистемы в зависимости от заряда ядра атома.

Потенциал взаимодействия двух атомов при $R \rightarrow 0$ может быть записан как

$$U(R \rightarrow 0) \approx Z_1 Z_2 / R + H_{el}(Z_1 + Z_2, 0) - H_{el}(Z_1, \infty) - H_{el}(Z_2, \infty), \quad (2)$$

где $H_{el}(Z_1 + Z_2, 0)$ – энергия электронной подсистемы объединенного атома, $H_{el}(Z_1, \infty)$ и $H_{el}(Z_2, \infty)$ – энергии электронных подсистем разъединенных. Если записать потенциал в форме, предложенной Бором $U(R) = Z_1 Z_2 / R \cdot \exp\{-\alpha R\}$, здесь α – параметр, который мы будем называть константой экранирования, то при $R \rightarrow 0$

$$U(R) \approx Z_1 Z_2 / R - Z_1 Z_2 \cdot \alpha. \quad (3)$$

Сравнивая выражения (2) и (3), легко получить

$$\alpha = - (H_{el}(Z_1 + Z_2, 0) - H_{el}(Z_1, \infty) - H_{el}(Z_2, \infty)) / (Z_1 Z_2). \quad (4)$$

Формула (4) может быть переписана как

$$\alpha = - 0.465 ((Z_1 + Z_2)^{2.432} - Z_1^{2.432} - Z_2^{2.432}) / (Z_1 Z_2) \quad (5)$$

Если зависимость $H_{el}(Z)$ описать менее точным выражением, $H_{el}(Z) = k_1 Z^2 + k_2 Z^3$, то подставляя в (4), имеем $\alpha = 2 k_1 + 3 k_2 (Z_1 + Z_2)$ или с учетом подобранных численных коэффициентов имеем

$$\alpha = 2.815 \{1 + 0.022 \cdot (Z_1 + Z_2)\} \quad (6)$$

Это выражение выполняется с точностью 2.4 % для систем атомов с $Z_{1,2} = 5-92$. В случае возбуждения или ионизации частиц при соударении, поскольку энергия электронной подсистемы уменьшается по абсолютной величине, формулы (5,6) дают верхний предел для константы экранирования.

3. Сравнение с экспериментом.

В работах [5-7] на основе измерения рассеяния частиц, были получены сведения о потенциалах взаимодействия для столкновений $\text{He}^+ - \text{Au}$, W , Ta и достаточно малых расстояниях наибольшего сближения $R > 0.005a_f$. Здесь $a_f = 0.8853(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}$ - длина экранирования Фирсова. С помощью преобразования $\alpha(x)a_f = -\ln\{U(x)x a_f\}/x$, где $U(x)$ - потенциал взаимодействия атомов, $x=R/a_f$, мы можем сравнить результаты эксперимента с предсказаниями по формуле (6) (см. рис. 2). Формула (6) дает для указанных случаев значения 1.395, 1.406, 1.464 соответственно для систем $\text{He}^+ - \text{Ta}$, $\text{He}^+ - \text{W}$ и $\text{He}^+ - \text{Au}$, что хорошо согласуется с экспериментом.

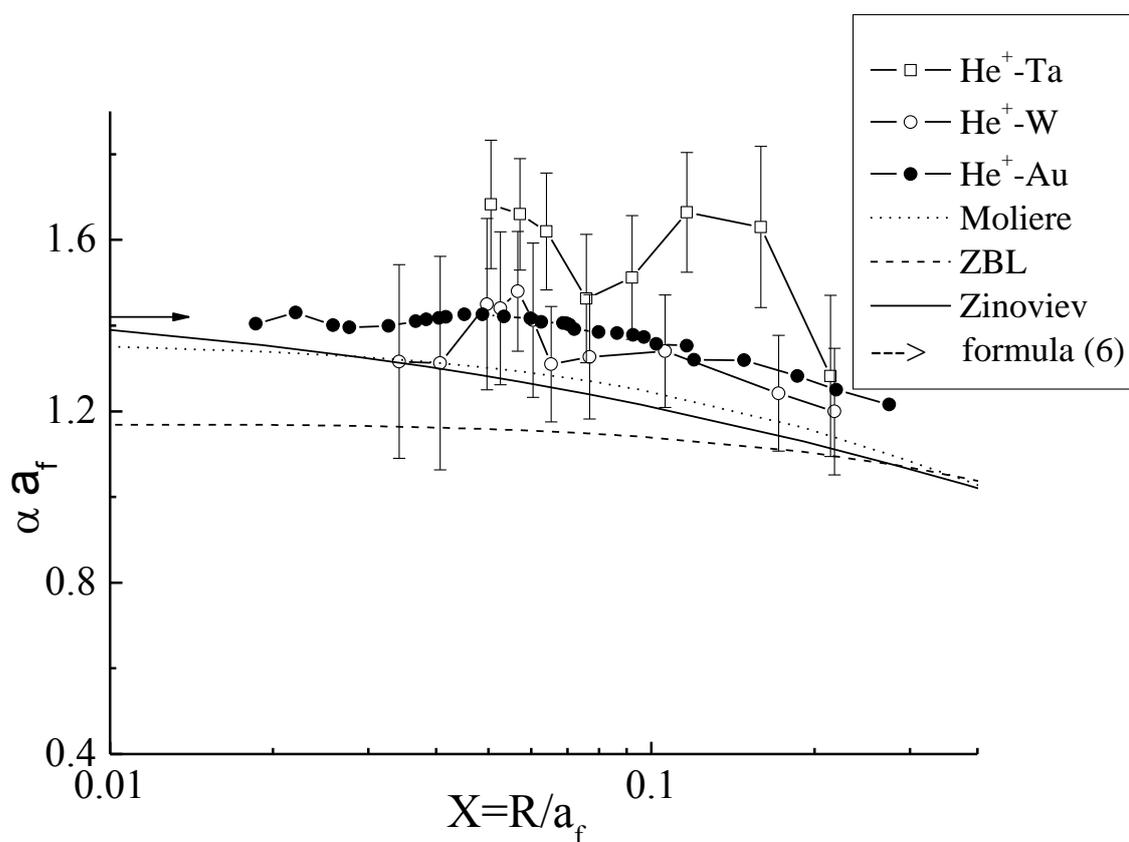


Рис. 2. Значения $\alpha \cdot a_f$ в зависимости от расстояния наибольшего сближения.

Данные для случая $\text{He} - \text{Au}$ взяты из работы [5]. Данные для $\text{He}^+ - \text{Ta}$ and $\text{He}^+ - \text{W}$ были получены в работе [6] путем обработки измерений выполненных в [7]. Линии на рисунке показывают предсказания для потенциалов, предложенных Мольером [8], Циглером и др. (ZBL) [9] и Зиновьевым [10], соответственно. Стрелка указывает значения, даваемые формулой (6).

4. Коррекция на электронную экранировку при измерении методом обратного Резерфордовского рассеяния.

В работе [11] было показано, что отношение сечений для случаев рассеяния в поле слабо экранированного кулоновского потенциала и кулоновском потенциала имеет вид:

$$d\sigma/d\Omega / (d\sigma/d\Omega_{\text{Coulomb}}) = 1/(1 + Z_1 Z_2 \cdot \alpha / E), \quad (7)$$

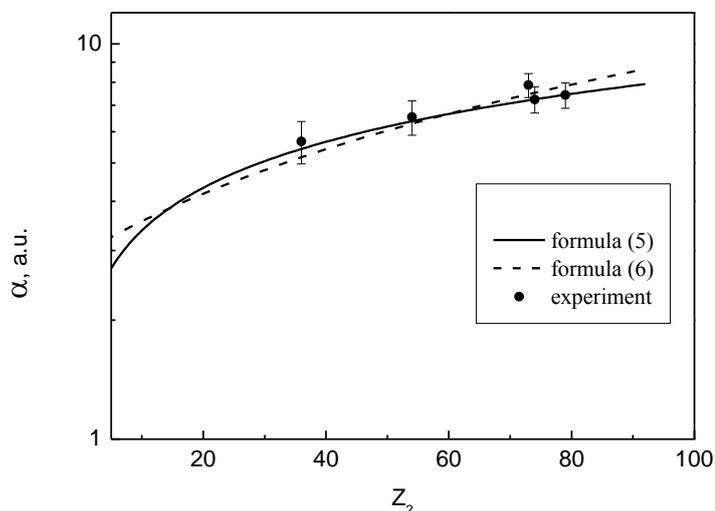


Рис. 3. Значения α для столкновений ионов He^+ с атомами с зарядом ядра Z , даваемые формулами (4,6). Экспериментальные точки получены обработкой данных из работ [5-7, 12].

Рис. 3 показывает сравнение величины α для столкновений ионов He^+ с атомами с различными Z . Константа экранирования не зависит от x в области $x < 0.06$ (см. рис. 2). Данные для систем He^+ -Kr и He^+ -Xe измерены только для $x > 0.3$ и $x > 0.1$ соответственно [12]. Экстраполяция этих данных приводит к дополнительным ошибкам, которые учтены в суммарных ошибках, указанных на рис. 3

В ситуации, когда поле сильно отличается от кулоновского, мы предлагаем проводить вычисление сечения с использованием потенциала, предложенного в [10].

1. G. Adelberger et al., Rev. Mod. Phys. 83 (2011) 195.
2. H.J. Assenbaum, K. Langanke, C. Rolfs, Z. Phys. A. 327 (1987) 461.
3. LUNA Collaboration, R. Bonetti *et al.*, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 5205.
4. T.A. Carlson et al., Atomic Data 3 (1971) 1.
5. A.N. Zinoviev, NIMB 354 (2015) 308.
6. А.Н. Зиновьев, Д.С. Мелузова, Поверхность. 6 (2016) 9.
7. F. Schumann, S.Zavatarelli, L.Gialanella et al., Eur. Phys. J. A 2 (1998) 3376.
8. G. Moliere, Zs. Naturforsch. Bd 2a. (1947) 133.
- 9 J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids. N.Y., 1985.
10. A.N. Zinoviev, NIMB 269 (2011) 829.
11. F. Besenbacher, P. Loftager, W. Moller, Phys.Rev A21 (1980) 1891.
12. K. Gartner, K. Hehl, Phys. Stat. Sol B 94 (1979) 231.

ПРОБЕГИ ИОНОВ Na⁺ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ ТОНКИЕ ПЛЕНКИ МЕДИ

PATH OF THE IONS Na⁺ PASSING THROUGH THIN COPPER FILMS

З.А. Исаханов, Б.Е. Умирзаков, К.Г. Эшбоев
Z.A. Isakhanov, B.E. Umirzakov, K.G. Eshboev

*Ташкентский государственный технический университет,
Университетская 2, Ташкент, Узбекистан, E-mail: ftmet@rambler.ru*

This work is devoted to the study of dependencies transmission coefficients (η), absorption (γ) and secondary ion-ion emission (τ) of the energy and the various angles beam incidence of primary ions Na⁺ and runs of ions in the solid film. The depth of penetration of the ions in the crystal can control choosing the angle incidence of the primary beam.

В настоящее время получение более надежных данных о пробегах ионов в ориентированных кристаллах по различным кристаллографическим направлениям, позволяет глубже понять механизмы прохождения (внедрения) атомных частиц в кристаллы сравнительно тяжелых ионов представляет большой научный и практический интерес. Для подробного исследования дифференциальных характеристик процесса прохождения, т.е. углового и энергетического распределения ионов, прошедших через тонкие слои кристаллов большое значение имеет одновременное изучение изменения интегральных характеристик этого явления от угловых параметров пучка бомбардирующих ионов.

В данной работе представлены зависимость коэффициентов вторично ионно-ионной эмиссии и от энергии и углов падения пучка первичных ионов Na⁺ и пробеги ионов меди. Монокристаллические нанопленки Cu(100) толщиной $\sim 400 \text{ \AA}$ бомбардировались ионами Na⁺ в интервале энергий от 2 до 30 кэВ (рис.1). Представленные кривые соответствуют углам падения $\varphi = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ и 60° . Плоскость падения пучка первичных ионов в этом случае совпадала с плоскостью {001} монокристалла меди. Анализ показал, что при углах 0° и 45° направления пучка ионов совпадает с осью [100] и [110] кристаллической решетки меди. При такой ориентации атомы верхележащих слоев кристалла заслоняют атомы нижних слоев и, соответственно, ион по пути движения существенно мало претерпевают соударений с атомами кристаллической решетки. При этом вероятность жестких соударений мало и ион, в основном, взаимодействует с атомами цепочки под скользящими углами и отклоняется на малые углы рассеяния, теряя очень малую долю своей энергии. При этом ион может продолжить свой путь значительно дальше вдоль атомных цепочек

кристалла, вследствие того что атомы цепочки действуют на ион так, что он фокусируется вдоль канала, а это, в свою очередь, приводит к аномальному большому проникновению иона в кристалл. Таким образом, подбирая угол падения первичного пучка можно управлять глубиной проникновения ионов в кристалл и получить материал с заданными физическими свойствами.

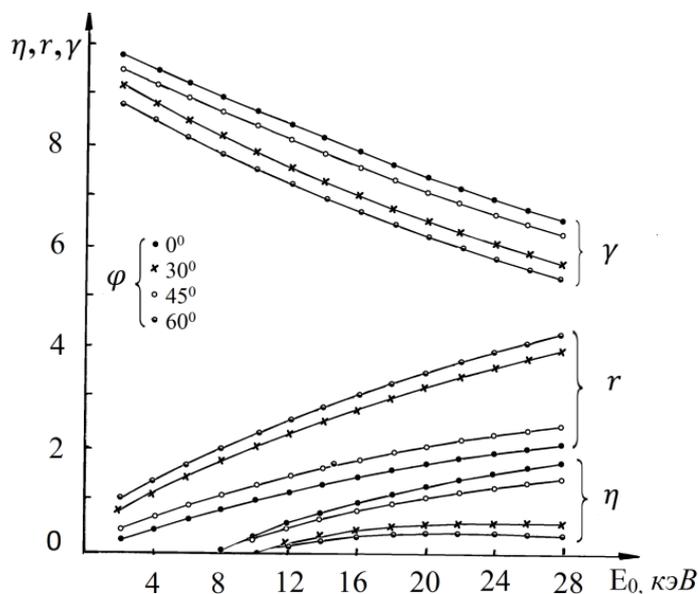


Рис.1. Зависимость коэффициентов ВИИЭ r, η, γ при простреле монокристаллической пленки Cu(100) толщиной $\sim 400 \text{ \AA}$, ионами Na^+ от энергии при различных углах падения φ .

Путем измерения ионного тока на задней стороне при различных толщинах бомбардируемой пленки в зависимости от энергии пучка первичных ионов, нами определены пробеги ионов Na^+ в тонких пленках меди (рис.2).

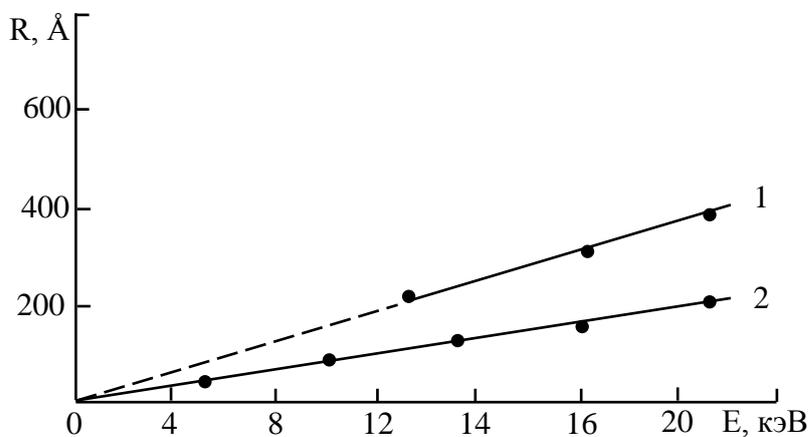


Рис.2. Кривые пробегов ионов в тонких пленках меди: 1 - Na^+ - экспериментальная; 2 - Ne^+ - расчетная.

Там же для сравнения представлена энергетическая зависимость пробегов ионов Ne^+ построенное с помощью табличных данных Буренкова и др [1]. Видно, что ход кривых 1 и 2 совпадает между собой, но значения величин пробегов экспериментальных точек лежат гораздо выше, чем теоретическое, т.е. разница между ними, по меньшей мере, около 50%. Такое большое расхождение, по-видимому, обусловлено структурой получаемой пленки. Электронно-микроскопическое исследования характеристик пленки показали, что полученные пленки резко отличается по структуре от аморфных и ближе к крупно-зернистым поликристаллам. В этом случае в кристалле, как обычно, будут иметь место монокристаллические блоки с направлениями и каналами, которые приводит к частичному каналированию пучка ионов при прохождении. Последний случай, в свою очередь, приводит к повышению пробегов ионов в таком кристалле, по сравнению с аморфным телом [2].

Следует отметить, что если сравнить многочисленные экспериментальные данные с теоретическими исследованиями, то можно заметить, что экспериментальные профили распределения внедренных атомов всегда сдвинуты вглубь образца. Действительно, кривые зависимости проекционного пробега определенные другими исследователями в неориентированных кристаллах кремния от массы внедряемых ионов, глубина проникновения ионов с энергиями 20-40 кэВ достигает примерно $\sim 400 \text{ \AA}$, что в два раза больше толщины медной пленки, использованной нами при простреле ионами Na^+ в области энергий 20-40 кэВ.

На основании вышеизложенного исследования можно заключить, что найденные нами пробеги ионов Na^+ в поликристаллических пленках меди передают реальную картину и не связаны с неоднородностью толщины пленки или присутствием кристаллических трещин в пленке. Если была бы в пленке трещин, тогда мы могли обнаружить наличие таких микротрещин по появлению в энергетическом спектре прошедших ионов пика, соответствующего ионам с энергией равной начальной энергии ионов.

1. Буренков А.Ф., Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Темкин М.М. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей. Изд-во БГУ, Минск, 1980.
2. Isakhanov Z.A., Mukhtarov Z.E., Umirzakov B.E. and Ruzibaeva M.K. Optimum ion implantation and annealing conditions for stimulating secondary negative ion emission // Journal Technical Physics. St.-Petersburg, 2011. - V. 56, - № 4, - pp. 546 – 549.

ПРАВИЛО РАВНОРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ И ЯДЕРНЫХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

RULE OF EQUAL DISTRIBUTION OF ELECTRONIC AND NUCLEAR LOSS OF ENERGY OF CHANNELED PARTICLES

В.П. Кошчев*, Ю.Н. Штанов#, Д.А. Моргун##
V.P. Koshcheev*, Yu.N. Shtanov#, D.A. Morgun##

*НИУ МАИ, филиал «Стрела», г. Жуковский, Моск. обл., Россия, koshcheev1@yandex.ru;

#Филиал ТИУ в г. Сургуте, г. Сургут, Россия

##Сургутский государственный университет, г. Сургут, Россия

Показано, что правило равнораспределения справедливо не только в отношении электронных, но и в отношении ядерных потерь энергии каналированных частиц. В докладе, также, представлены результаты расчета потерь энергии каналированных частиц с помощью программы TROPICS [1].

In this paper it is shown that the equipartition rule is valid not only for electronic, but also for nuclear losses of energy of channeled particles. The report also presents the results of calculating energy losses due to the use of TROPICS programs [1].

Потенциальная энергия взаимодействия быстрого иона с атомами кристалла состоит из двух слагаемых

$$U = U_{nucl.} + U_{el.} \quad (1)$$

Потенциальная энергия взаимодействия быстрого иона с ядрами атомов кристалла имеет вид:

$$U_{nucl.} = \sum_n \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|}, \quad (2)$$

где $Z_1 e$ и $Z_2 e$ – заряд иона и ядра атома кристалла; $\vec{r}_n = \vec{r}_{n0} + \delta\vec{r}_n + \Delta\vec{r}_n + \Delta\vec{r}$; вектор $\delta\vec{r}_n$ описывает смещение ядра n -го атома кристалла из узла кристаллической решетки благодаря тепловым колебаниям; вектор $\Delta\vec{r}_n$ описывает изменение положения ядра n -го атома кристалла из-за его взаимодействия с быстрым ионом; вектор $\Delta\vec{r}$ описывает изменение положения ядер атомов кристалла, которое связано с возбуждением коллективных колебаний ядер из-за их взаимодействия с кулоновским полем быстрого иона. Вектор \vec{r}_{n0} определяет положение n -го узла кристаллической решетки. Если атомы упорядочены в виде изолированной атомной цепочки, то $\vec{r}_{n0} = (0; 0; n_z a_z)$, где n_z – любое целое число, а a_z – расстояние между атомами в атомной цепочке. Если атомы

упорядочены в виде изолированной атомной плоскости, то $\vec{r}_{n0} = (0; n_y a_y; n_z a_z)$. Если атомы упорядочены в узлах кристаллической решетки, то $\vec{r}_{n0} = (n_x a_x; n_y a_y; n_z a_z)$.

Потенциальная энергия взаимодействия быстрого иона с атомными электронами кристалла имеет вид:

$$U_{el.} = - \sum_n \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|}, \quad (3)$$

где $\vec{r}_{nj} = \vec{r}_n + \delta\vec{r}_{nj} + \Delta\vec{r}_{nj} + \Delta\vec{r}_e$; вектор $\delta\vec{r}_{nj}$ определяет положение j -го электрона по отношению к положению n -го атомного ядра; вектор $\Delta\vec{r}_{nj}$ описывает изменение положения j -го электрона n -го атома кристалла из-за его взаимодействия с быстрым ионом; вектор $\Delta\vec{r}_e$ описывает изменение положения электронов кристалла, которое связано с возбуждением коллективных колебаний электронов из-за их взаимодействия с кулоновским полем быстрого иона.

Движение одного быстрого иона будем описывать с помощью классического уравнения движения

$$d(m\dot{\vec{r}})/dt = \vec{f}, \quad (4)$$

где $m = \gamma m_0$; $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$; $\beta^2 = \dot{\vec{r}}^2/c^2$; m_0 – масса покоя быстрого иона; c – скорость света; $\vec{f} = -grad U$. Систему координат выберем таким образом, чтобы ось OX была перпендикулярна, а ось OY была параллельна атомным плоскостям, но перпендикулярна направлению падения ионов на кристалл, которое происходит в направлении оси OZ . В случае осевого каналирования ось OZ направим параллельно атомным цепочкам.

Потери энергии каналированных частиц на электронах и ядрах кристалла рассмотрим следуя работе [2], где были вычислены потери энергии каналированных частиц на электронах кристалла. Полную энергию быстрого иона в кристалле, которая вычисляется вдоль регулярной траектории, запишем в виде

$$E = \gamma m_0 c^2 + U. \quad (5)$$

Скорость изменения полной энергии имеет вид

$$\frac{dE}{dt} = \sum_n \left((\Delta\dot{\vec{r}}_n + \dot{\vec{r}}) \cdot grad \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|} - \sum_{j=1}^{Z_2} (\Delta\dot{\vec{r}}_{nj} + \Delta\dot{\vec{r}}_e + \Delta\dot{\vec{r}}_n + \dot{\vec{r}}) \cdot grad \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|} \right), \quad (6)$$

где $\Delta\dot{\vec{r}}_{nj} = d(\Delta\vec{r}_{nj})/dt$.

Правая часть формулы (6) вычисляется при условии, что $\Delta\vec{r}_n = 0; \Delta\vec{r}_{nj} = 0; \Delta\vec{r} = 0; \Delta\vec{r}_e = 0$, так как скорость изменения полной энергии это работа, взятая с обратным знаком, которая производится над всеми электронами и ядрами кристалла при их перемещении на бесконечно малое расстояние в единицу времени в электрическом поле быстрого иона. Учтём, что атомные электроны и ядра приобретают дополнительный импульс в результате столкновения с быстрым ионом

$$m\delta\dot{\vec{r}} = m_e\Delta\dot{\vec{r}}_{nj}; \quad m\delta\dot{\vec{r}} = M\Delta\dot{\vec{r}}_n, \quad (7)$$

где $\delta\dot{\vec{r}} = \{\delta\dot{x}, \delta\dot{y}, 0\}$, $\delta\dot{x} = d(\delta x)/dt$, m_e – масса электрона, а M – масса атома кристалла.

Траектории электронов и ядер атомов кристалла, совершающих коллективные колебания, найдем с помощью приближенных уравнений движения

$$\Delta\ddot{\vec{r}}_e + \omega_e^2\Delta\vec{r}_e = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} dV \frac{\delta\vec{f}_{el.}(x, y, t)}{m_e}; \quad \Delta\ddot{\vec{r}} + \omega^2\Delta\vec{r} = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} dV \frac{\delta\vec{f}_{nucl.}(x, y, t)}{M}, \quad (8)$$

где ω_e, ω – частоты осцилляций электронов и ядер атомов кристалла, совершающих коллективные колебания, численные значения которых не окажут влияния на конечный результат; ΔV – объем, в пределах которого электроны и ядра совершают коллективные колебания.

Преобразуем формулу (6) к виду

$$\left(\frac{dE}{dt}\right) = \left(\frac{m}{M}\delta\dot{\vec{r}} + \Delta\dot{\vec{r}}\right) \cdot grad \sum_n \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|} - \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|} \right) - \left(\frac{m}{m_e}\delta\dot{\vec{r}} + \Delta\dot{\vec{r}}_e\right) \cdot grad \sum_n \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|}. \quad (9)$$

Усредним формулу (9) по тепловым колебаниям атомных ядер и квантовым флуктуациям местоположения атомных электронов кристалла

$$\left(-\frac{dE}{dt}\right)_{e,T} = \frac{m}{M} \langle \delta\dot{\vec{r}} \rangle_{e,T} + \langle \Delta\dot{\vec{r}} \rangle_{e,T} + \frac{m}{m_e} \langle \delta\dot{\vec{r}}_{el.} \rangle_{e,T} + \langle \Delta\dot{\vec{r}}_{el.} \rangle_{e,T}, \quad (10)$$

где $\vec{f}_{el.} = -gradU_{el.}$.

С помощью (7) и (8) формулу (10) можно записать в виде

$$\left(-\frac{dE}{dt}\right)_{e,T} = \left(-\frac{dE}{dt}\right)_{el.} + \left(-\frac{dE}{dt}\right)_{nucl.}, \quad (11)$$

где $\left(-\frac{dE}{dt}\right)_{el.} = \frac{1}{2m_e} \left(D_{xx}^{el.} + D_{yy}^{el.} + \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} [D_{xx}^{el.} + D_{yy}^{el.}] dV \right)$ – потери энергии каналированных частиц на электронах, а $\left(-\frac{dE}{dt}\right)_{nucl.} = \frac{1}{2M} \left(D_{xx} + D_{yy} + \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} [D_{xx} + D_{yy}] dV \right)$ – потери энергии каналированных частиц на ядрах; $D_{xx} = D_{xx}^{nucl.} + D_{xx}^{el.}$ $D_{xx}^{nucl.} = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\delta f_x^{nucl.}(t) \delta f_x^{nucl.}(t')} dt'$ – ядерный и $D_{xx}^{el.} = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\delta f_x^{el.}(t) \delta f_x^{el.}(t')} dt'$ – электронный коэффициенты диффузии.

Так как компоненты электронного и ядерного коэффициентов диффузии равны между собой в случае, если регулярное расположение атомов в кристаллографической плоскости заменить на хаотическое, то можно получить формулу Линдхарда для электронных потерь энергии быстрых ионов в плоскостных каналах кристалла и формулу для потерь энергии каналированных частиц на ядрах атомов кристалла

$$\left(-\frac{dE}{dt}\right)_{el.} \approx \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e \beta c} \left(\frac{\langle n(x) \rangle_T + n_0}{2} \right) L_e; \quad \left(-\frac{dE}{dt}\right)_{nucl.} \approx \frac{4\pi (Z_1 Z_2 e^2)^2}{M \beta c} \left(\frac{\langle N(x) \rangle_T + N_0}{2} \right) L_n,$$

где $\langle n(x) \rangle_T = \int \langle n(x, y, z) \rangle_T dy dz / a_y a_z$ – плотность электронов в плоскостном канале кристалла, усредненная по тепловым колебаниям атомов; $n_0 = \int \langle n(x) \rangle_T dx / a_x$ – среднее значение электронной плотности; $\langle N(x) \rangle_T = N_0 a_x \exp(-x^2 / 2\sigma_x^2) / \sqrt{2\pi\sigma_x^2}$ – плотность ядер в кристаллографической плоскости, усредненная по тепловым колебаниям атомов кристалла; средние значения электронной и ядерной плотности связаны между собой соотношением $n_0 = N_0 Z_2$; L_e и L_n – электронный и ядерный кулоновские логарифмы, соответственно.

1. <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/tropics/index.html>
2. В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Т.А. Панина // Известия РАН. Серия физическая. – 2009. – Т.73. – №11. – С.1586–1590.
3. В.П. Кощев, Ю.Н. Штанов, Д. А. Моргун, Т. А. Панина // Письма в ЖТФ. – 2015. – Т. 41. – В. 19. – С. 55–63.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАДУЖНОГО РАССЕЯНИЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ
ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАЛЕТАЮЩИЙ АТОМ-ПОВЕРХНОСТЬ
USING THE RAINBOW SCATTERING EFFECT FOR OBTAINING THE
PROJECTILE-SURFACE INTERACTION POTENTIAL**

Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев

D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, С.-Петербург, Россия, e-mail: dmeluzova@gmail.com

A procedure for deriving information on the projectile-surface interaction potential from the rainbow scattering data has been suggested.

При скользящем падении атомов на поверхность кристалла под небольшим углом скольжения ($0.5-2.5^\circ$) происходит рассеяние частицы в поверхностном полуканале. В распределениях рассеянных частиц по азимутальному углу наблюдаются максимумы, связанные с радужным рассеянием [1, 2]. Как было упомянуто в работах [1, 3], положение радужного угла, при котором наблюдается максимум, сильно зависит от энергии соударения частиц. Как было упомянуто в работе [3], общепринятые модели потенциала не позволяют объяснить наблюдаемые значения радужного угла и его зависимость от энергии соударения. Представляется актуальным разработать процедуру получения потенциала непосредственно из экспериментальных данных.

При численном моделировании траекторий частиц, уравнения движения частицы могут быть записаны, следующим образом:

$$\frac{d\vec{x}_0}{dt} = \vec{v}$$
$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m} \sum_j F(|\vec{x}_0 - \vec{x}_j|) \frac{(\vec{x}_0 - \vec{x}_j)}{(|\vec{x}_0 - \vec{x}_j|)} \quad (1)$$

здесь – m - масса налетающей частицы, \vec{x}_0 и \vec{v} – векторы, описывающие положение и скорость налетающей частицы, \vec{x}_j – координаты частиц мишени.

Предполагается, что сила есть градиент двухчастичного потенциала и зависит только от расстояния между частицами, множитель в сумме есть ничто иное, как направляющие косинусы, раскладывающие силу по координатным осям. Суммирование ведется по всем учитываемым атомам кристалла. В наших расчетах мы

принимали во внимание атомы двух верхних слоев, расположенных на расстоянии до $3d$ (всего учитывалось 79 атомов).

Поскольку $\sin\varphi_r = v_y(\infty)/v_0$, $dx = v_0 dt$. Тогда уравнения (1) можно переписать в виде:

$$\sin\varphi_r = \int_{-\infty}^{+\infty} F_y dx \frac{1}{(2E_0)} \quad (2)$$

где $E_0 = mv_0^2/2$ – начальная энергия частицы, x – координата вдоль атомной цепочки.

Зависимость проекции силы F_y от координаты x носит осциллирующий характер, при этом вклад в рассеяние вносят более 20 атомов цепочки до поворота траектории и столько же атомов на выходящей части траектории. Интеграл от F_y определяет финальные значения проекции скорости на ось y , а следовательно, значение радужного угла рассеяния φ_r , при этом $\sin\varphi_r = v_y/v_0$, где v_0 – начальная скорость.

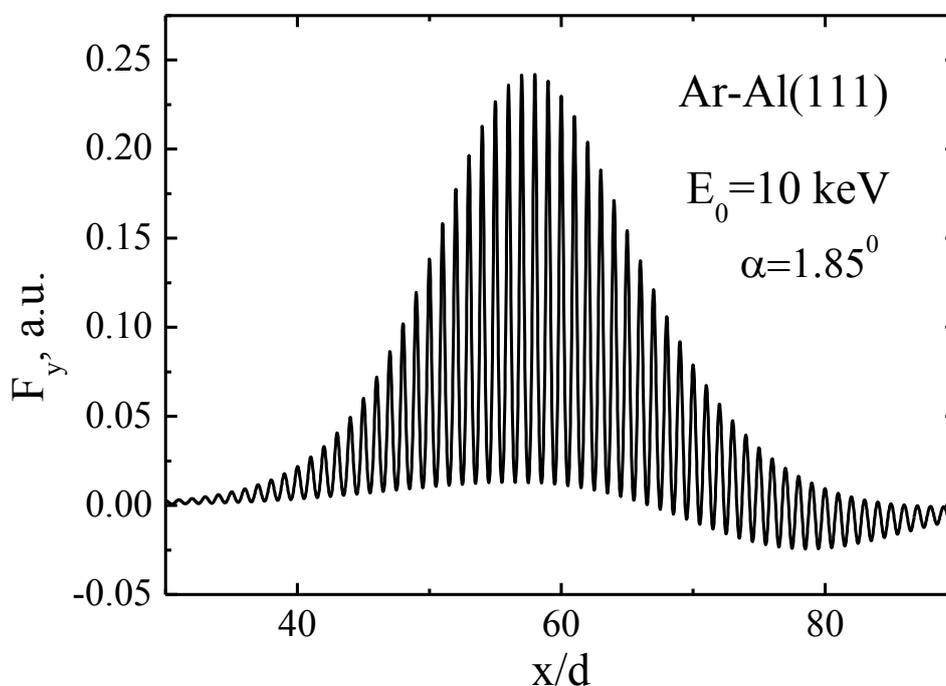


Рис. 1. Зависимость проекции силы на ось y от координаты x . Ось x направлена вдоль цепочки атомов, а ось y лежит в плоскости кристалла. d – расстояние между атомами. α – угол скольжения.

Представляется возможным перейти от интегрирования по оси x к интегрированию по межъядерному расстоянию. Для этого диапазон межъядерных расстояний от 0 до 10 а.е. делился на интервалы с шагом 0.05 а.е. Тогда формулу (2) можно переписать в виде:

$$2E_0 \sin\varphi_r = \int_{R_0}^{\infty} B(R) dR, \quad R = \min|\vec{x}_0 - \vec{x}_j|, \quad B(R) = \sum_k F_y(R) \quad (3)$$

Функция $B(R)$ учитывает значение проекции силы на ось u для данного диапазона R , суммирование производится по всем участкам траектории, когда достигается расстояние R . Таким образом, величина $\sin\varphi_T$ может быть представлена в виде интеграла по диапазону реализуемых межъядерных расстояний (см. рис. 2). На этом же рисунке показана также разность $\Delta B = B(R, E_0) - B(R, E_0 + \Delta E)$, $\Delta E = 0.05 \cdot E_0$. Как видно из рис. 2, в величине ΔB останется в основном только вклад для части траектории, близкой к достижению расстояния наибольшего сближения налетающей частицы с поверхностным атомом R_0 . Относительная роль вклада данного участка траектории I_1 и вклада всего остального участка I_2 показана в Таблице.

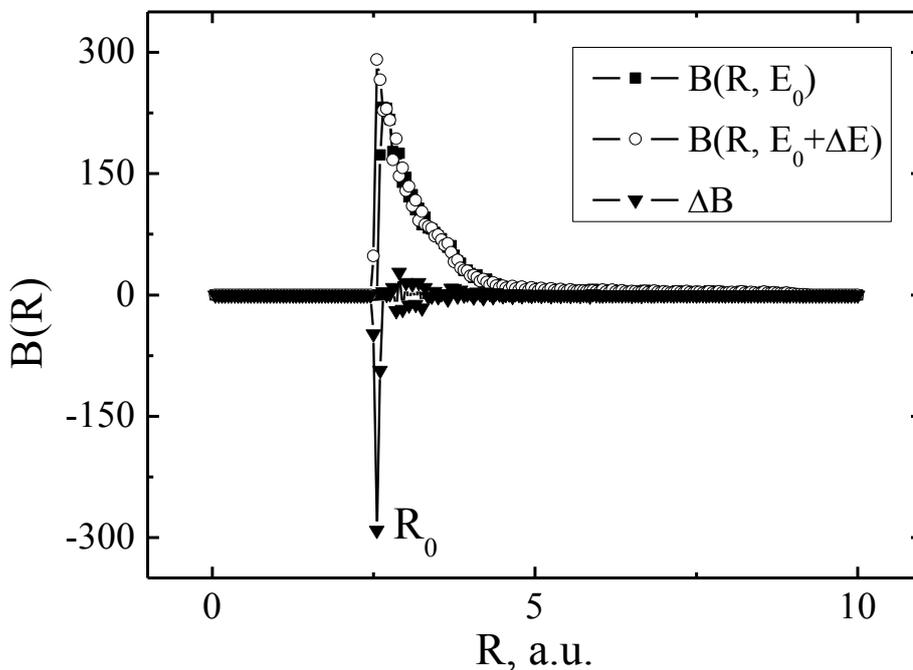


Рис. 2. Зависимость функции $B(R)$ для двух близких энергий. $E_0 = 10$ кэВ. Для сопоставления показана разница $\Delta B = B(R, E_0) - B(R, E_0 + \Delta E)$, $\Delta E = 0.05 E_0$.

Таблица. Вклады области вблизи $R_0 - I_1$ и остальной части траектории в величину ΔB .

E_0 кэВ	R_0 а.е.	I_1	I_2	I_2/I_1 %
3	4.2	-9.649	5.733	59.42
5	3.3	-13.210	3.658	27.69
7.5	2.8	-17.286	2.833	16.39
10	2.55	-21.351	2.126	9.96
15	2.25	-30.116	1.751	5.81
25	1.95	-48.700	2.403	4.93
40	1.7	-68.470	-3.864	-5.64

Таким образом, величина ΔB в основном определяется областью, близкой к R_0 . Если ввести пробную зависимость $F(R)$ и умножить ее на величину $k(R)$, то из полученных уравнений можно получить зависимость $k(R)$. Проведением последующих итераций можно проверить сходимость процедуры. Результаты расчета для системы Ar-Al представлены на рис. 3.

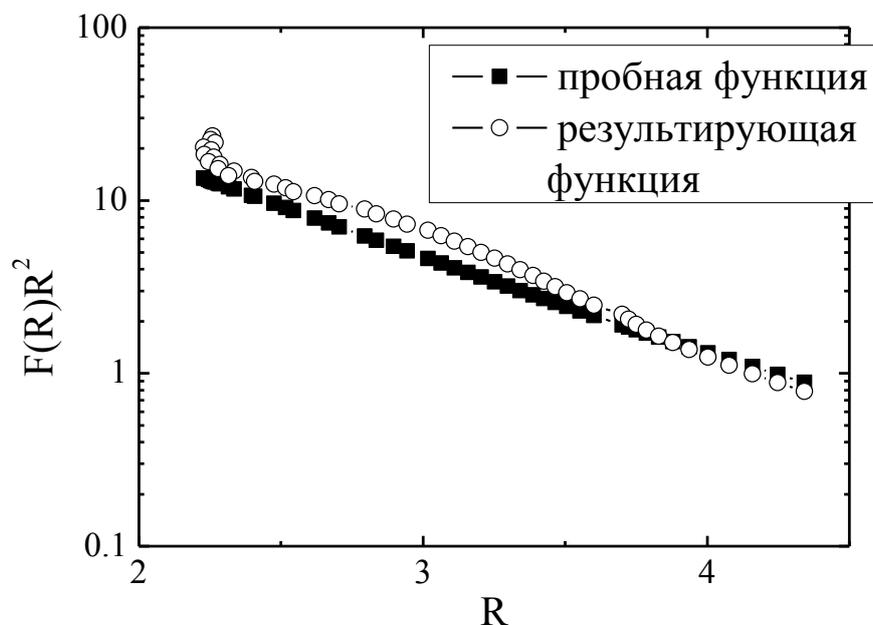


Рис. 3 Пробная функция $F(R)R^2$ и функция $F(R)k(R)R^2$.

1. P. Tiwald, A. Schuller, H. Winter, K. Tokesi, F. Aigner, S. Grafe, C. Lemell, J. Burgdorfer, Phys. Rev. B. 82 (2010) 125453.
2. P.Yu. Babenko, A.N. Zinov'ev, A.P. Shergin, JETPL 101 (2015) 840.
3. P.Yu. Babenko, D.S. Meluzova, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev, NIMB (2017) dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2016.12.040.

РОЛЬ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ СИЛ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ ИОНОВ В МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОТРУБКАХ

ROLE OF POLARIZATION FORCES ON THE CHANNELING OF IONS IN MULTI WALLED NANOTUBES

А.С. Сабиров
A.S. Sabirov

*Чувашский государственный университет имени И.Н.Ульянова,
428015, Московский пр-т, 15, Чебоксары, Россия, kansas57@rambler.ru*

The polarization potential of the interaction of a fast charged particle with the walls of a multi walled nanotube and the energy lost due to excitation of surface modes of electromagnetic oscillations are estimated. The nanotube is modeled as a set of cylindrical layers with a given dielectric function. It is noted that the resulting polarization forces, under certain conditions can significantly affect the trajectories of channeled particles.

Заряженная частица, движущаяся вблизи нанотрубки, вызывает возмущение ее электронной подсистемы, что приводит к возникновению поляризационных сил, действующих на саму частицу [1-2]. Учет этих сил важен при расчете траекторий заряженных частиц, каналирующих в нанотрубке. Наиболее часто для оценки поляризационных полей в нанотрубке применяются модель электронной жидкости [1,3] и метод описания нанотрубки в виде цилиндрического слоя с заданной диэлектрической функцией [4-6]. В данной работе для расчета поляризационных полей в многослойных нанотрубках применяется диэлектрический формализм.

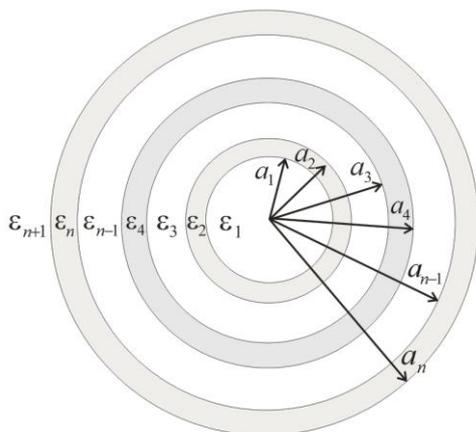


Рис. 1. Схематическое расположение цилиндрических слоев в поперечном сечении.

Направим ось z вдоль оси нанотрубки. Стенки нанотрубки представим в виде цилиндрических слоев, которые в поперечном сечении нанотрубки представляют собой области в виде колец (рис. 1). Пусть эти кольца ограничены концентрическими окружностями радиусов $r = a_j$, где $j = 1, \dots, n$. Будем полагать, что электромагнитные свойства среды в каждом слое определены

соответствующей диэлектрической функцией $\epsilon_j = \epsilon_j(\omega)$, учитывающей временную дисперсию. В промежутках между стенками нанотрубки $\epsilon_j = 1$, а в области стенок

$\varepsilon_j = \varepsilon(\omega)$. Собственные электрические возбуждения в проводящей среде в рамках квазистатического приближения могут быть получены как решения уравнения Лапласа $\Delta\Phi = 0$ при соответствующем выборе граничных условий.

В силу симметрии задачи, решения будем искать в виде разложения:

$$\Phi(z, r, \varphi, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ikz) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(im\varphi) \tilde{\Phi}_{mk}(\omega, r).$$

Тогда компонента $\tilde{\Phi}_{mk}(\omega, r)$ будет удовлетворять уравнению:

$$\frac{d^2 \tilde{\Phi}_{mk}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d \tilde{\Phi}_{mk}}{dr} - \frac{m^2}{r^2} \tilde{\Phi}_{mk} - k^2 \tilde{\Phi}_{mk} = 0.$$

Решения данного уравнения в каждой области даются выражениями:

$\tilde{\Phi}_{mk}^{(j)} = A_{mk}^{(j)} I_m(kr) + B_{mk}^{(j)} K_m(kr)$, где $I_m(x)$ и $K_m(x)$ — модифицированные функции

Бесселя. Требование конечности решений приводит к условиям $B_{mk}^{(1)} = 0, A_{mk}^{(n+1)} = 0$. Из непрерывности тангенциальных составляющих электрического поля и нормальной составляющей вектора электрического смещения следует, что искомые решения уравнения Лапласа должны удовлетворять следующим условиям сшивания на границе:

$$\tilde{\Phi}_{mk}^{(j)} \Big|_{a_j-0} = \tilde{\Phi}_{mk}^{(j)} \Big|_{a_j+0}, \quad \varepsilon_j \frac{\partial \tilde{\Phi}_{mk}^{(j)}}{\partial r} \Big|_{a_j-0} = \varepsilon_{j+1} \frac{\partial \tilde{\Phi}_{mk}^{(j)}}{\partial r} \Big|_{a_j+0}.$$

В результате, для определения коэффициентов $A_{mk}^{(j)}, B_{mk}^{(j)}$, получаем систему $2(n+1)$ однородных алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases} A_{mk}^{(n+1)} = 0 \\ B_{mk}^{(1)} = 0 \\ A_{mk}^{(j)} I_m(ka_j) + B_{mk}^{(j)} K_m(ka_j) - A_{mk}^{(j+1)} I_m(ka_j) + B_{mk}^{(j+1)} K_m(ka_j) = 0 \\ A_{mk}^{(j)} \varepsilon_j I_m(ka_j) + B_{mk}^{(j)} \varepsilon_j K_m(ka_j) - A_{mk}^{(j+1)} \varepsilon_{j+1} I_m(ka_j) + B_{mk}^{(j+1)} \varepsilon_{j+1} K_m(ka_j) = 0 \end{cases},$$

где $j = 1, \dots, n$. Возможные моды электромагнитных возбуждений получаются из равенства нулю определителя этой системы. На рисунках 2 и 3 приведены результаты модельного расчета с использованием диэлектрической функции вида $\varepsilon(\omega) = 1 - \omega_0^2/\omega^2$, выполненные для случаев двух- и трехслойной нанотрубок, соответственно. Внутренние радиусы слоев равны 9, 17 и 25 а.е, а толщина цилиндрического слоя выбиралась равной 2 а.е. Сплошные линии соответствуют кривым дисперсии поверхностных возбуждений в многослойных нанотрубках, пунктирная – однослойной, в отсутствие внешних слоев. Добавление внешних слоев приводит к расщеплению дисперсионных кривых однослойной нанотрубки $\omega = \omega(k)$.

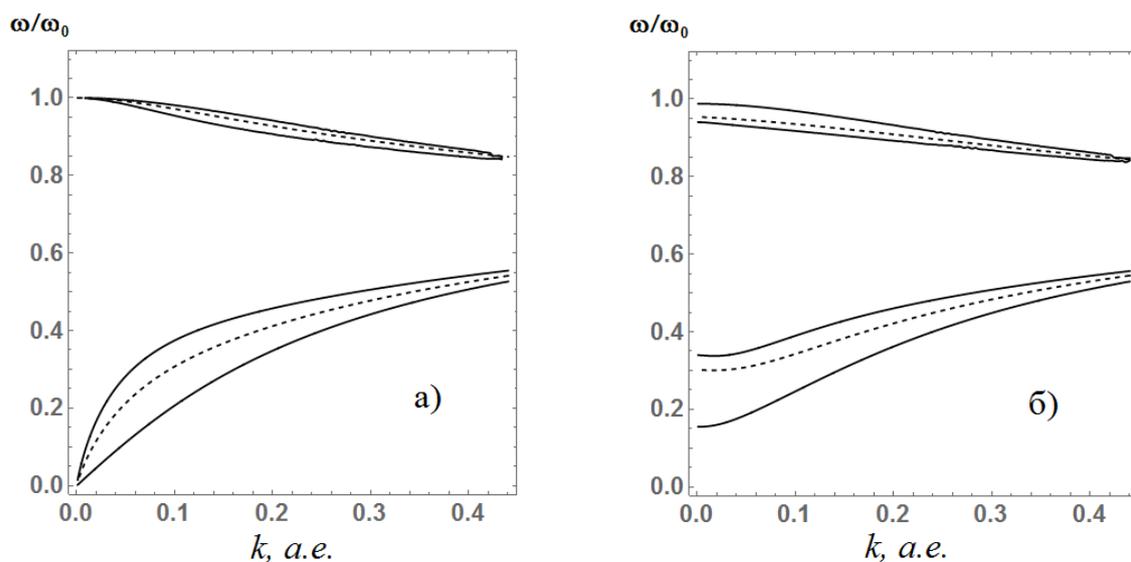


Рис. 2. Кривые дисперсии поверхностных плазмонов для двухслойной нанотрубки при а) $m=0$ и б) $m=1$.

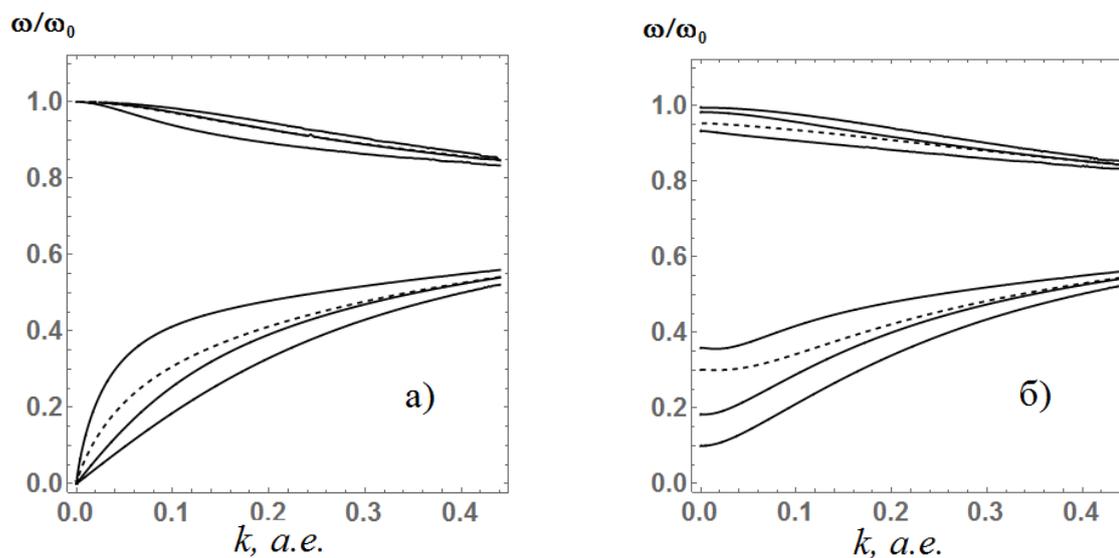


Рис. 3. Кривые дисперсии поверхностных плазмонов для трехслойной нанотрубки при а) $m=0$ и б) $m=1$.

В работе рассчитаны поляризационный потенциал взаимодействия быстрой заряженной частицы со стенками многослойной нанотрубки при ее каналировании в нанотрубке и потери энергии на возбуждение поверхностных мод электромагнитных колебаний.

1. D.Borka, S.Petrović, N.Nešković, D. J.Mowbray, Z. L.Mišković, Phys. Rev. A 73 (2006) 062902.
2. D.J.Mowbray, Z.L.Mišković, F.O.Goodman, Yiu-Nian Wang, Phys. Rev. B 70 (2004) 195418.
3. D. J.Mowbray, S.Segui, J.Gervasoni // Phys. Rev. B 82 (2010) 035405.
4. Y.H.Tu, C.M.Kwei, Y.C.Li, C.J.Tung // Phys. Rev. B.74 (2006) 045403.
5. S.Segui, J.L.Gervasoni, N.R.Arista // Rad. Phys. and Chem. 76 (2007) 582.
6. А.С.Сабиоров, Поверхность. Рентгеновские, синхр. и нейтронные исследования, 3 (2014) 102.

SCATTERING OF HYDROGEN ION BEAM FROM TUNGSTEN FUZZ

D. SineInikov, D.Bulgadaryan, V. Kurnaev, N. Efimov

* *National Research Nuclear University MEPhI, 115409, Moscow, Kasirskoe st. 31;
dinsin@mail.ru*

1 Introduction

Tungsten is the main candidate for plasma facing material in the divertor zone of a thermonuclear reactor due to high melting temperature, high thermal conductivity and low sputtering erosion yield. However, its surface can be modified by "fuzz" nanostructure, which can form in linear simulators and tokamaks [1] under helium irradiation fluence as high as $\sim 10^{25} \text{ m}^{-2}$, sample temperature in the range of 1000-2000 K and energy $> 20 \text{ eV}$. Such structure significantly changes the plasma-wall interaction balance, especially the interaction of plasma components with the surface.

The fuzzy structure was investigated by means of hydrogen and argon ion scattering spectroscopy with energies in the range of 5-25 keV. The analyzed depth for bulk tungsten is from 5 to 20 nm for such energy range, but for thin porous structure it can be much deeper.

2 Experimental setup

The scheme of experiments is shown in fig. 1. Monoenergetic ion beam generated by duoplasmatron ion source 1 and mass-separated by electromagnet 2 in "Large MEPhI mass-monochromator" setup [2] interacts with the fuzzy sample 4. Scattered on 38° ion beam is separated by energy with energy analyzer 5 and detected with SEM 6. The interaction chamber 3 is pumped by turbomolecular pump with an output of 800 l/s that allows obtaining the pressure of $\sim 10^{-8}$ Torr during target irradiation. Ion current density varied from several nA/cm² to 1 $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ depending on type of the ion beam: H⁺, H₂⁺, H₃⁺ and Ar⁺. Ion current to a target is controlled by Keithley 6485 picoammeter and recorded during experiment for ion fluence calculating.

Fuzzy samples were prepared by irradiation of tungsten sample in helium plasma with fluence $\sim 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ when at the surface 1000-2000 K. Scanning electron microscope analysis showed that diameter of fuzz nanostructures is $\sim 20\text{-}80 \text{ nm}$ and thickness of fuzzy layer is $\sim 1 \mu\text{m}$. As it was shown in [3] the density of the fuzzy structure is about 5% of bulk tungsten density.

3 Experimental results

Energy spectra of scattered protons for several ion beam energies is shown in fig.2. One can

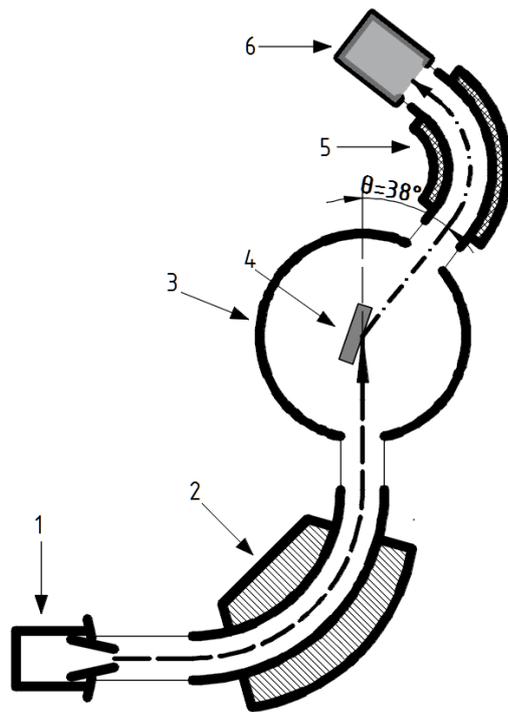


Fig. 1 Scheme of the experiment :

- 1 - ion source
- 2 - Separating electromagnet
- 3 - interaction chamber
- 4 - sample
- 5 - energy analyzer
- 6 - secondary electron multiplier as ion detector

see that with the increasing of ion beam energy the spectra transform to two-peak structure. One of the reason could be the transition of the protons through the fuzzy layer and their scattering from the bulk tungsten: with increasing beam energy there is more bulk tungsten contribution to the spectrum. It is interesting to note, that even as low as 13 keV protons beam can pass through $\sim 1 \mu\text{m}$ fuzzy layer (a low energy shoulder in spectrum) that corresponds to $\sim 6 \mu\text{m}$ total path in fuzz for the geometry of experiment, while maximum analyzed depth for bulk tungsten layer is about 10 nm.

Since the growth of fuzzy structures on plasma facing surface in fusion devices may lead to negative consequences, some methods of tungsten surface recovery are developed [4]. In this work the fuzzy sample was sputtered by 18 keV Ar^+ ion beam with fluence $2 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-2}$. This fluence is enough for the sputtering of 10 nm bulk tungsten layer, but, taking in account high porosity of the fuzz, the fluence was enough for sputtering of 1 μm fuzzy layer. In fig. 3 one can see the evolution of the double peak spectrum from fuzz to ordinary energy spectrum of protons scattered from tungsten surface. The position of the peak corresponding to scattering from the bulk tungsten practically has not changed during the destruction process, that means that energy losses in fuzzy structures for protons with 25 keV is about $500 \text{ eV} / 6 \mu\text{m} \approx 0,1 \text{ eV/nm}$, while energy losses in bulk tungsten are 150 eV/nm. This allows evaluation of the average tungsten fuzz target density as compared with bulk tungsten as $\sim 1/1500$.

The energy spectra of scattered Ar^+ ion beam from fuzz and bulk tungsten are shown in fig. 4. The spectra are rather similar except of the scattered Ar^+ peak region. The right part of the peak corresponds to multiple scattering and this parts are very similar for fuzz and bulk

tungsten, while the left part correspond to single scattering and this process not so probable for fuzzy structure.

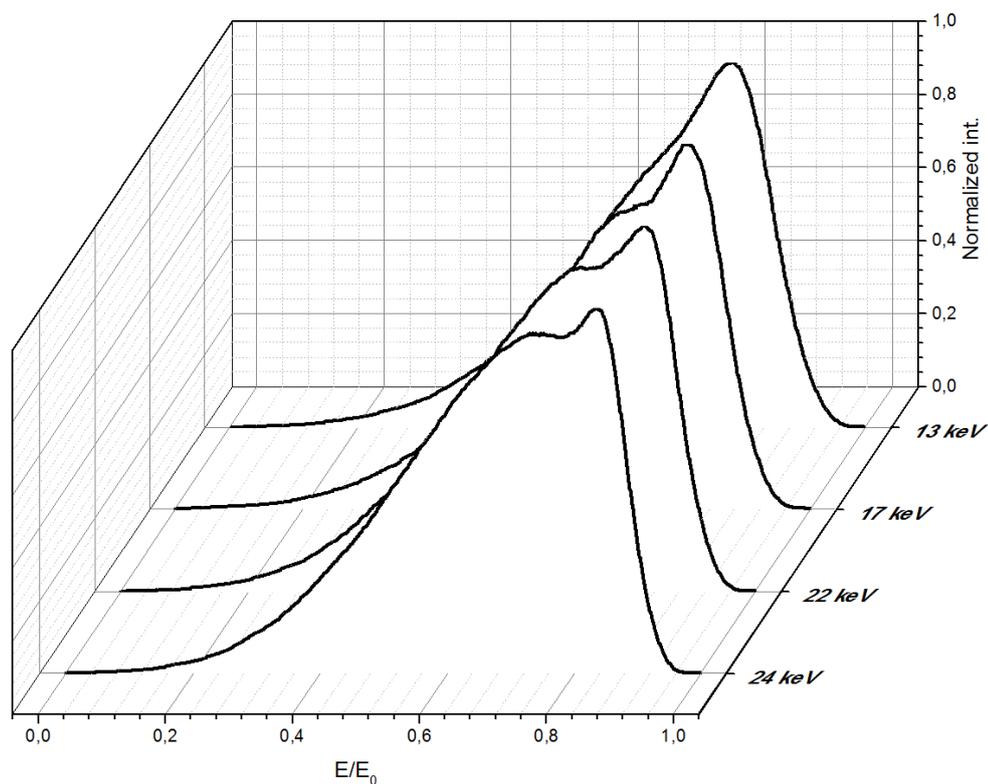


Fig. 2. Normalized energy spectra of scattered H⁺ for several initial energies.

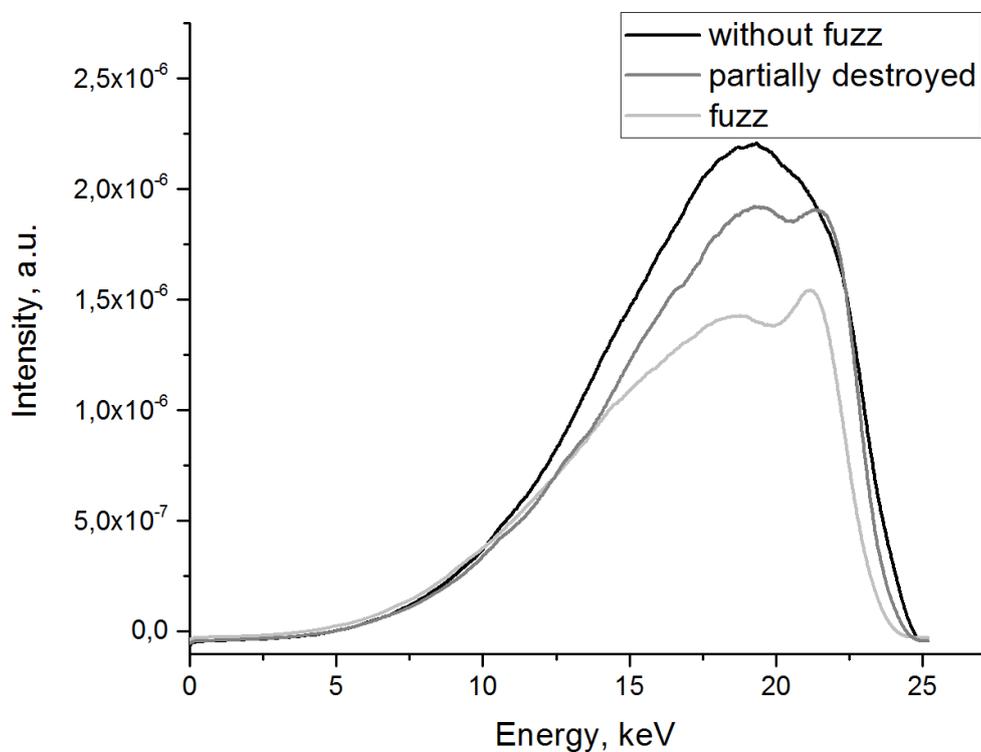


Fig. 3. Evolution of scattered H⁺ energy spectra during fuzz destruction by Ar⁺ beam.

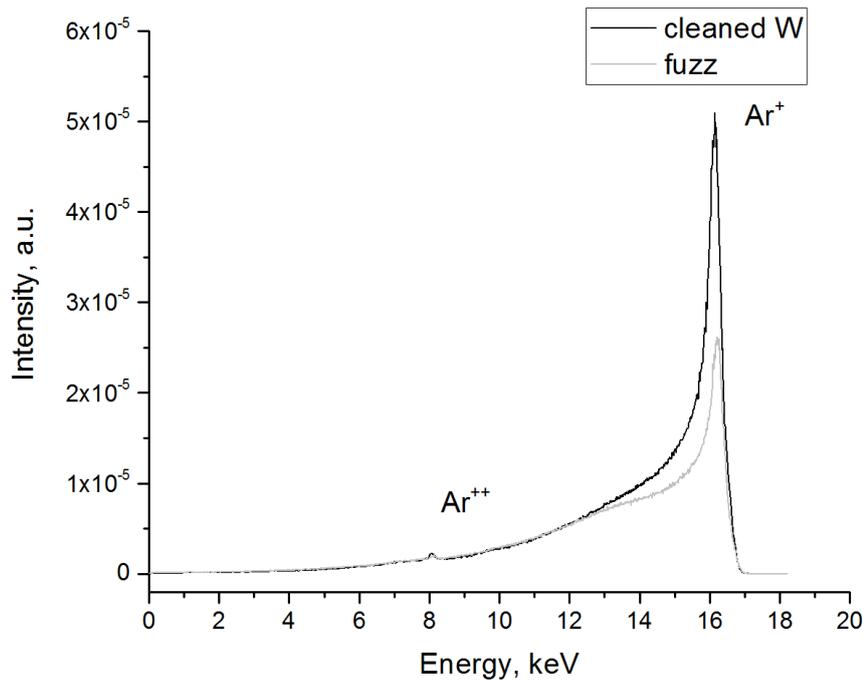


Fig. 4. Energy spectra of scattered Ar ions before and after fuzz destruction.

4 Conclusion

It is shown that spectra of protons scattered from fuzzy tungsten sample have two peak structure: corresponding to scattering from fuzz layer and from the bulk material under fuzz layer. It is shown that energy losses of protons in fuzzy tungsten structure is by three orders of magnitude lower than in bulk tungsten. The scattering of Ar^+ ions showed that single scattering from the fuzz is less probable in comparison with bulk tungsten sample, nevertheless, the spectra of particles multiple scattered from fuzz and bulk tungsten are very similar.

5 Reference

- [1] G.M. Wright et al., "Comparison of tungsten fuzz growth in Alcator C-Mod and linear plasma devices", PSI, Aachen, 05/22/2012
- [2] Bulgadaryan et al., Facility and the method for MEIS analysis of layers redeposited in plasma devices (2016) *Journal of Physics: Conference Series*, 748 (1), art. no. 012016.
- [3] M.J. Baldwin, R.P. Doerner, Formation of helium induced nanostructure 'fuzz' on various tungsten grades, *Journal of Nuclear Materials*, 404, (3), 2010, p. 165-173
- [4] S. Takamura, "Recovery of Tungsten Surface with Fiber-Form Nanostructure by the Argon Plasma Irradiation at a High Surface Temperature" *Pl. and Fus. Res.: Rap. Comm.*, Vol. 6, 1202005 (2011)

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Пленарное заседание</i>	15
P.Sigmund and A.Schinner. Stopping of slow ions revisited.....	17
K.Nakajima, K.Yamamoto, K.Narumi, Y.Saitoh, K.Hirata, and <u>K.Kimura</u>. Molecular imaging using transmission secondary ion mass spectrometry.....	20
G. Silva Vignoli Muniz, A. Agnohotri, R. Martinez, A. Domaracka, H. Rothard, G. Strazzulla, M.E. Palumbo and P. Boduch. Swift heavy ions, ices and astrophysics: irradiation of water ices and complex organic molecules.....	25
<i>Секция №1. Распыление, структура поверхности, десорбция</i>	29
C.Bundesmann, R.Feder, T.Lautenschläger, M.Mateev, D. Spemann. Systematics in ion beam sputter deposition.....	31
<u>N.Ishikawa</u>, T.Taguchi and N.Okubo. Structure of hillocks at surface of ceramics irradiated with swift heavy.....	37
R. Martinez, Th. Langlinay, C.R. Ponciano, E.F. da Silveira, M.E. Palumbo, G. Strazzulla, J.R. Brucato, H.Hijazi, A.N. Agnihotri, P. Boduch, A. Cassimi, A.Domaracka, F.Ropars, H.Rothard. Astrophysical silicates: contribution of ion induced sputtering to surface modification and exospheres of solar system objects.	42
<u>R.Stadlmayr</u>, B.M.Berger, D.Blöch, D.Mayer, B.Stechauner and F.Aumayr. Erosion of fusion relevant surfaces by using a quartz crystal microbalance.....	46
N.Toyoda and I.Yamada. Atomic layer etching with gas cluster ion beams.....	50
<u>С.Н.Капустин</u>, В.И.Матвеев. Особенности ионного распыления фуллеренов.....	56
И.И.Амиров, <u>В.И.Бачурин</u>, М.О.Изюмов, Н.О.Шуваев. Распыление кремния и диоксида кремния низкоэнергичными ионами плотной азотной и аргоновой плазмы.....	60
<u>M.V.Sorokin</u>, A.S.El-Said, R.A.Wilhelm, R.Heller, S.Facsco, F.Aumayr. Structuring of the lithium fluoride surface by highly charged ions.....	64
<u>Т.Г.Авачева</u>, А.Д.Маслов, А.П.Авачев. Анализ АСМ-изображений структуры поверхности полупроводниковых материалов корреляционными методами.....	67
Н.Н.Андрианова, А.М.Борисов, В.А.Казаков, <u>Е.С.Машкова</u>, М.А.Овчинников, С.В.Савушкина. Изменение структуры и морфологии поверхности углеродного волокна при распылении ионами инертных газов...	70
А.Д.Бакун, А.С.Гусев, Н.И.Каргин, <u>И.А.Матющенко</u>, С.Ф.Тимашев. Анализ влияния ионно-кластерной обработки на состояние поверхности оптической стеклокерамики методом фликкер-шумовой спектроскопии.....	73
В.И.Бачурин, И.В.Журавлев, Д.С.Кибалов, В.К.Смирнов. Угловая и энергетическая зависимости селективности распыления кремния и диоксида кремния ионами азота.....	76

<u>О.С.Васильев, П.В.Борисюк, Т.И.Козлова, Ю.Ю.Лебединский.</u> Исследование эволюции электронных свойств нанокластерных пленок на основе металлов Та и Мо, сформированных с помощью метода магнетронного распыления.....	79
<u>Н.В.Волков, Д.А.Сафонов.</u> Распыление монокристаллов кремния под воздействием пучков ионов гелия и аргона со средней энергией 10 кэВ.....	83
<u>Г.Н.Дудкин, В.М.Быстрицкий, Б.А.Нечаев, В.Н.Падалко, Е.Б.Кашкаров, С.И.Кузнецов.</u> Контроль поверхности мишеней в экспериментах по исследованию $d(d,n)^3\text{He}$ – реакции при сверхнизких энергиях столкновения..	87
<u>В.К.Егоров, Е.В.Егоров, М.С.Афанасьев.</u> Изучение псевдоэпитаксиальных пленок золота и висмута на слюдяных подложках.....	91
<u>А.Е.Иешкин, С.Е.Свяховский, В.С.Черныш.</u> Создание оптически гладкой поверхности на сколе пористого кремния при облучении газовыми кластерными ионами.....	96
<u>S.A.Krat, Yu.M.Gasparyan, Ya.A.Vasina, A.A.Pisarev.</u> Hydrogen co-deposition with metals in plasma discharge.....	99
<u>N.V.Mamedov, V.A.Kurnaev, D.N.Sinelnikov, D.V.Kolodko, I.A.Sorokin.</u> LEIS analysis of the W surface during water vapor adsorption.....	103
<u>K.S.Nazarov, R.Kh.Khisamov, Yu.M.Yumaguzin, R.R.Mulyukov.</u> Multiple-point surface formation on nanostructured nickel by ion-beam sputtering.....	107
<u>A.V.Nazarov, V.S.Chernysh, K.Nordlund, F.Djurabekova, J.Zhao.</u> Anisotropic patterns of atoms sputtered from single crystals by gas cluster ions.....	111
<u>А.В.Назаров, В.С.Черныш, К.Нордлунд, Ф.Джурабекова, Дж.Джао.</u> Моделирование угловых распределений атомов, распылённых пучком газовых кластерных ионов.....	114
<u>А.Н.Пустовит.</u> Эмиссионная теория распыления аморфных материалов. Зависимость коэффициента распыления от угла падения первичного ионного пучка.....	117
<u>А.Н.Пустовит.</u> Эмиссионная теория распыления аморфных материалов. Самораспыление.....	120
<u>А.В. Румянцев, Н.И. Боргардт, Р.Л. Волков, Г.В. Чемаров.</u> Вторичное распыление кремния, осажденного на поверхность образца при воздействии фокусированным ионным пучком.....	123
<u>S.A. Ryabtsev, Yu.M. Gasparyan, O.V. Ogorodnikova, Z.R. Harutyunyan, A.A. Pisarev.</u> Deuterium re-emission and thermal desorption from iron and Eurofer.....	127
<u>В.Н.Самойлов, А.И.Мусин.</u> Эффекты фокусировки атомов, эмитированных с грани (001) Ni, с разрешением по углам и энергии.....	130
<u>М.Скаков, Т.Кульсартов, Т.Туленбергенев, И.Соколов, Б.Рахадилев, Д.Гановичев, Ю.Гордиенко.</u> Результаты исследований проведения экспериментов по газовой выделению из предварительно насыщенных образцов на плазменно-пучковой установке.....	134

<u>I.Sorokin</u>, E.Marenkov, K.Nordlund, A.Eksaeva. Angular distribution of W sputtered by low energy Ar.....	138
А.А.Сычева, <u>Е.Н.Воронина</u>. МД-моделирование физического распыления пористых Si-содержащих материалов ионами Ag низких энергий.....	142
<i>Секция №2. Рассеяние и проникновение ионов</i>	147
<u>S.Petrović</u>, M.Erić and M.Kokkoris. Nuclear resonant ion-atom elastic reactions and the ion channeling effect: perspectives and applications.....	149
К.Тókési. Guiding as a general consequence of the charged particle interaction with the inner surface of the insulator capillary.....	156
E.Giglio, S.Guillous, G.U.L.Nagy, H.Zhang, A.Cassimi, R.D.DuBois, К. Тókési. Insulating capillaries as self-organized electrostatic lenses.....	162
<u>П.Ю. Бабенко</u>, Д.С. Мелузова, А.П. Солоницына, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев. Радужное рассеяние атомных частиц на поверхности кристалла.....	167
<u>K.Nordlund</u> and F.Djurabekova. Systematic studies of ion channeling effects by simulated channeling maps.....	171
<u>Л.Б. Беграмбеков</u>, А.С. Каплевский, А.Е. Евсин, С.С. Довганюк, А.М. Захаров. Захват и десорбция водорода из вольфрама с пленками оксидов бериллия/алюминия при облучении плазмой.....	176
I.K.Gainullin. Three-dimensional modeling of resonant charge transfer between ion beams and metallic surfaces.....	180
А.Н.Зиновьев. Потенциалы взаимодействия атомных частиц при больших, средних и малых энергиях соударения.....	184
Ю.А.Белкова, <u>Н.В.Новиков</u>, Я.А.Теплова. Взаимосвязь процессов, вызывающих неупругие потери энергии ионов.....	190
<u>Г.М.Филиппов</u>, В.А.Александров, И.В.Лысова, А.В.Степанов. Прохождение волн и частиц через пористые структуры.....	194
<u>П.Ю.Бабенко</u>, А.П.Шергин, А.П.Солоницына, А.М.Девятков, А.Н.Зиновьев. Отражение ионов водорода от первой стенки токамака реактора.....	198
С.С.Волков, А.А.Аристархова, Ю.Е.Дмитревский, Т.И.Китаева, С.В.Николин, Н.Л.Пузевич, М.Ю.Тимашев, А.Б.Толстогузов, В.В.Трухин. Влияние потенциалов поверхности на взаимодействие ионов с поверхностью.....	202
<u>И.К.Гайнуллин</u>, О.В.Поддельская. Влияние геометрических размеров наносистемы на основные характеристики зарядового обмена с отрицательным ионом.....	206
В.В.Евстифеев, Н.В.Костина. Упругие потери энергии при взаимодействии атомных частиц.....	210
В.В.Евстифеев, Н.В.Костина. Влияние ориентации кристалла на энергию отдачи при взаимодействии с бомбардирующими ионами.....	214

А.Н.Зиновьев. Энергия атома, электронная экранировка и поправки при измерениях методом обратного резерфордовского рассеяния.....	217
З.А.Исаханов, Б.Е.Умирзаков, К.Г.Эшбоев. Пробеги ионов Na^+ при прохождении через тонкие пленки меди.....	221
В.П.Кощев, Ю.Н.Штанов, Д.А.Моргун. Правило равномерного распределения электронных и ядерных потерь энергии каналированных частиц.....	224
Д.С.Мелузова, П.Ю.Бабенко, А.П.Шергин, А.Н.Зиновьев. Использование радужного рассеяния для получения потенциала взаимодействия налетающей атом-поверхность.....	228
А.С.Сабилов. Роль поляризационных сил при каналировании ионов в многослойных нанотрубках.....	232
D.Sinelnikov, D.Bulgadaryan, V.Kurnaev, N.Efimov. Scattering of hydrogen ion beam from tungsten fuzz.....	235