

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання комплексної практичної роботи:

«Комп'ютерне моделювання процесів іонної імплантації, розпилення та іонно - променевого перемішування» з навчальних дисциплін «Радіаційна стійкість матеріалів», «Фізика взаємодії прискорених частинок з твердим тілом», «Плазмова та радіаційна поверхнева взаємодія матеріалів в екстремальних умовах» для студентів денної та заочної форми навчання за спеціальністю «Прикладна фізика та наноматеріали»

Затверджено
редакційно-видавничою
радою університету,
протокол № 2 від 26.06.2025 р.

Харків
НТУ «ХПІ»
2025

Методичні вказівки до виконання комплексної практичної роботи «Комп’ютерне моделювання процесів іонної імплантації, розпилення та іонно-променевого перемішування» з навчальних дисциплін «Радіаційна стійкість матеріалів», «Фізика взаємодії прискорених частинок з твердим тілом», «Плазмова та радіаційна поверхнева взаємодія матеріалів в екстремальних умовах» для студентів денної та заочної форми навчання за спеціальністю «Прикладна фізика та наноматеріали» / уклад. Зубарев Є.М., Малихін С.В., Сіпатов О.Ю., Конотопський Л.Є. – Харків: НТУ «ХП», 2025. – 21 с.

Укладачі: Є. М. Зубарев

С. В. Малихін

О. Ю. Сіпатов

Л. Є. Конотопський

Рецензент: В.В. Старіков

Кафедра фізики металів та напівпровідників.

Вступ

Дане видання є методичними вказівками до комплексної практичної роботи «Комп'ютерне моделювання процесів іонної імплантації, розпилення та іонно-променевого перемішування» за курсом «Радіаційна стійкість матеріалів»

Мета роботи – придбання навичок моделювання процесів, що відбуваються під час іонної імплантації, за допомогою програмного пакету *SRIM*. *SRIM* – це комплект програм, який дозволяє обчислювати місце зупинки та пробіг іонів з енергією від 10 еВ/аом до 2 ГеВ/аом (аом – атомна одиниця маси) у твердих тілах за допомогою квантово-механічного опису іонно-атомних зіткнень. Надалі, під словом "іон" мається на увазі рухомий атом, а під словом "атом" - атом мішені. Взаємодія іона і атома в процесі зіткнення описується екранованим кулонівським потенціалом з урахуванням перезарядки і кореляційних взаємодій між електронними оболонками, що перекриваються.

Іон також взаємодіє з віддаленими атомами мішені, породжуючи електронні збудження та плаزمони усередині неї. Ці процеси враховуються перед початком розрахунку електронною структурою мішені і структурою її міжатомних зав'язків. Зарядовий стан іона всередині мішені описується виходячи з концепції ефективного заряду, що включає залежність зарядового стану іона від його швидкості та віддалене екранування за рахунок електронного газу. Вичерпний опис алгоритму обчислень викладено у навчальному посібнику Дж.Ф. Зіглера, Дж.П. Бірсака та У. Літмарка - "*The Stopping and Range of Ions in Solids*" [1]. У цьому навчальному посібнику у простій навчальній формі викладено фізику проникнення іонів у тверде тіло, наведено тексти програм з поясненням їхнього фізичного змісту. Основою створення програм *SRIM* послужила оригінальна робота Дж.Ф. Зіглера "*Stopping and Range of Ions in Matter*" [2], у якій описана теорія гальмування прискорених іонів у твердому тілі.

TRIM (The Transport of Ions in Matter) – «переміщення іонів у речовині» – це найбільш повна програма в програмному забезпеченні *SRIM*. Вона включає розрахунки руху іона в мішені методом Монте-Карло та детальні обчислення енергії, що передається кожному атому мішені, з яким стикається іон. *TRIM* дозволяє моделювати взаємодію зі складними мішенями, що містять до восьми шарів різного складу. Вона може розрахувати кінцевий тривимірний розподіл іонів, а також усі кінетичні явища, пов'язані з енергетичними втратами іону: пошкодження мішені, розпилення, іонізацію та генерацію фононів. Також детально відстежується рух та взаємодія всіх каскадних атомів у мішені. Робота програм побудована таким чином, що її можна у будь-який момент перервати та відновити. Результати розрахунків автоматично зберігаються і їх можна переглядати за необхідності (для переходу до перегляду збережених результатів обчислень потрібно лише 5 секунд). Обчислення проводяться дуже ефективно завдяки статистичним алгоритмам, що дозволяють іону здійснювати стрибки між зіткненнями, що розраховуються, і усереднюють результати зіткнень за пропущеним інтервалом.

1. Типи обчислень

Програма *TRIM* дозволяє користувачеві нехтувати деякими деталями зіткнень для збільшення швидкості обчислень. У режимі "*Full Damage Cascades*" (*Всі каскадні пошкодження*) повністю враховуються процеси проникнення іона в мішень, включаючи субкаскади, утворені вибитими атомами. Режим "*Quick*" (*Швидкий*) ігнорує каскади атомів мішені та обмежується обчисленням траєкторії іонів. Режим "*Sputtering*" (*Розпилення*) використовує спеціальні залежності, пов'язані з розпиленням атомів мішені. Нарешті, програма *TRIM* може бути запущена в примусовому режимі, описаному нижче, для розрахунку нейтронних, електронних і фотонних каскадів.

1.1 Ion Distribution and Quick Calculation of Damage (Розподіл іонів та швидкий розрахунок пошкоджень)

Ця опція повинна застосовуватися, коли неважливими є деталі пошкодження мішені або розпилення. Розрахунок пошкоджень у цьому режимі – це швидкі статистичні оцінки на основі моделі Кінчіна-Піза [3]. В цьому режимі коректно обчислюється остаточний розподіл іонів у мішені, їх іонізаційні втрати, енергія, яку було передано атомам віддачі, кількість розсіяних іонів і іонів, що пройшли через усю мішень. Можна отримати такий же набір результатів для будь-якого іона в режимі ***Full Damage Cascade (Всі каскадні пошкодження)***, описаному нижче, оскільки для іонів та атомів віддачі використовуються окремі генератори випадкових чисел.

1.2 Detailed Calculation with full Damage Cascades (Детальний розрахунок з урахуванням усіх каскадних ушкоджень)

У цьому режимі відстежується кожен атом віддачі доти, доки його енергія не впаде нижче за найменшу порогову енергію зміщення будь-якого атома мішені. Отже, аналізуються всі пошкодження мішені, що утворилися внаслідок зіткнень. Винятком є масивні каскади, що рідко зустрічаються і в яких міститься більше за 2000 атомів. У цьому випадку пам'ять програми переповнюється і з'являється повідомлення про перевищення порога 2000 атомів на один каскад. Після появи повідомлення обчислення продовжуються.

1.3 Calculation of Surface Sputtering (Розрахунок розпилення поверхні)

Всебічний розгляд процесу розпилення проводиться в режимі «Детальний розрахунок з урахуванням всіх каскадних пошкоджень», що вже обговорювався. Тим не менш, до програми *TRIM* включений принцип «шляху вільного пробігу», відповідно до якого іони роблять великі стрибки між зіткненнями, а будь-які пошкодження мішені розсіяні біля атомів, що зміщуються. При розпиленні необхідно враховувати кожен приповерхневу взаємодію, і специфіка таких обчислень змушує *TRIM* детально оцінювати кожне атомне зіткнення. У цьому режимі для прискорення обчислень необхідно обмежувати глибину мішені, що розглядається. Наприклад, для

важких іонів ($Z > 5$) достатньою може бути глибина мішені в 30 Å, оскільки внесок у розпилення дають лише приповерхневі каскади. Для більш легких іонів точну оцінку розпилення можна досягти при товщині мішені до 500 Å.

2. Типи розрахункових залежностей

У процесі розрахунку програма *TRIM* зображує на екрані монітора двовимірну проекцію іона, що рухається, і всіх каскадів пошкодження. Це дозволяє швидко визначити, чи відповідають розрахунки тому, що вам необхідно. Під час обчислень можна перемикатися від одного зображення до іншого. Координатна система *TRIM* визначена таким чином, що вісь X спрямована вглиб мішені, а осі Y та Z є поперечними координатами. Доступні такі варіанти графічних зображень:

- Проекція на площину XY .
- Проекція на площину XZ .
- Лише іони у площині XY .
- Проекція на площину YZ .
- Усі чотири перераховані вище проекції розраховуються одночасно.
- У жодній з перерахованих вище проекцій немає анімованих зображень.

Останній варіант дозволяє триразово прискорити обчислення, тому багато користувачів запускають програму *TRIM* з одним із варіантів зображення, а потім вимикають його.

3. Опис іонів

Інформація про іон вводиться у рядку "*ION DATA*" вікна *TRIM INPUT* програми *TIN.exe*.

3.1 *Identify the ion* (Ідентифікуйте іон)

Вводиться або атомний номер іона, або вибирається назва зі списку елементів, або вказується його хімічний символ. За допомогою кнопки "*PT*" (*Periodic Table*) виводиться зручна періодична таблиця елементів. Коли нова

інформація вводиться в будь-яке з трьох вікон, що описують іон, автоматично коригується вміст інших.

3.2 Enter the ion mass (Введіть масу іона)

TRIM пропонує масу іона найбільш поширеного ізотопу обраного елемента. Маса найпоширенішого ізотопу будь-якого елемента відображається у вікні періодичної таблиці елементів. Проте, можна запровадити будь-яку масу іона (в атомних одиницях маси – аом).

3.3 Enter the ion energy (units = keV) (Введіть енергію іона (у кеВ))

TRIM приймає будь-які величини до 2 ГеВ/аом. При енергіях вище 1 МеВ/аом не враховуються втрати енергії у ядерних реакціях. Тому значні непружні втрати енергії іона можуть виявитися неврахованими.

3.4 Angle of Incidence of Ion (Кут падіння іона)

Це можливість зміни кута падіння іона на поверхню мішені. За умовчанням іон рухається вздовж нормалі поверхні мішені і кут його падіння щодо осі *X* вважається рівним 0°. Цей кут може набувати будь-якого значення від 0° до 89,9°. Передбачається, що зміна напрямку руху іона лежить у площині *XY*.

4. Опис мішені

Програма *TRIM* може застосовуватись для складних мішеней, що складаються з послідовних шарів. Кожен шар описується зазначенням елементів, що входять до нього, їх відносною концентрацією, товщиною шару і його густиною, зазначенням фазового стану (твердого або газоподібного). Каталог дозволяє автоматично вставляти поширені сполуки, включаючи біологічні матеріали. Для цих сполук можна використовувати спеціальні сили гальмування. Інформація про мішень вводиться в середній частині вікна *TRIM INPUT* програми *TIN.exe*. У лівому вікні представлений список шарів мішені. Один із шарів завжди виділений підсвічуванням. Елементи цього шару перераховані у правому вікні. Клік мишею по будь-якому шару мішені призводить до його виділення, а елементи, що входять до нього, зображуються

в правому вікні. При виборі матеріалу мішені, що міститься у базі даних, автоматично вводяться: *атомний номер, маса в атомних одиницях маси, густина, енергія зміщення (енергія утворення пари Френкеля), решіткова та поверхнева енергія зв'язку*. Якщо матеріал досліджуваної мішені має складний склад, відсутній у базі даних, його можна вписати за допомогою опції **Add New Element to Layer (Додати новий елемент в шар)**. При цьому необхідно вказати співвідношення компонентів в атомних частках або відсотках. За вказаним співвідношенням *TRIM* автоматично розраховує густину складної мішені. Однак необхідно пам'ятати, що розрахункова густина може суттєво відрізнятися від дійсної густини. Це пов'язано, перш за все, з тим, що реальний питомий об'єм однієї молекули сполуки, що утворився, може відрізнятися від суми питомих об'ємів вихідних компонентів. В останньому випадку слід користуватися табличним значенням густини для даної сполуки. **Ім'я шару (layer name)** використовується програмою *TRIM* у графіках та файлах результатів. Рекомендується надавати шарам якісні виразні назви, наприклад, SiO_2 або Silicon. **Ширину шару (layer width)** визначає протяжність даної ділянки мішені вздовж осей X, Y і Z. Задається в одиницях, що вибираються з списку, що випадає. Коли вибрано вікно *Авто (Auto)*, **густина шару (Layer density)** розраховується як середньозважена за елементами шару. Щоб вказати на газовий шар замість твердого шару за промовчанням, необхідно зробити клік мишкою по віконце *газ (gas)*. Шар або елемент можна видалити натисканням кнопки "X", що знаходиться ліворуч від його назви.

5. Енергії зв'язку атомів мішені

Введення цих даних, як правило, виходить за межі компетенції більшості користувачів програми *TRIM*. Взагалі всі необхідні величини відомі тільки для невеликої кількості мішеней. За промовчанням *TRIM* пропонує розумну величину цих енергій.

5.1 Displacement Energy (Енергія зміщення) – це енергія, необхідна атому віддачі, для подолання ґратових сил та зміщення з початкового

положення на відстань більшу, ніж одна міжатомна. Передбачається, що якщо атом віддачі не зміститься більше, ніж на один період грати, то він повернеться у вихідне положення і віддасть свою надлишкову енергію фононам. Типові значення енергії становлять близько 15 еВ для напівпровідників і близько 25 еВ для металів. Для таких неміцних матеріалів, як полімери, більш точними можуть бути менші значення – 2÷5 еВ. Користувачі, які знаються на фізиці зсувів, можуть вказати енергію зміщення кожного виду атомів мішені. Для мішеней з кількома шарами, що містять однаковий елемент, наприклад, діоксид кремнію SiO₂ на Si, необхідно вказати атоми Si двічі і позначити їх по-різному, щоб підкреслити різницю енергій зміщення в різних шарах.

5.2 Surface Binding Energy (Поверхнева енергія зв'язку) – це ключовий параметр для розрахунку коефіцієнта розпилення – середньої кількості атомів мішені, що залишають поверхню при падінні одного іона. Ця енергія необхідна атомам мішені для відриву від поверхні (одиниця виміру – еВ). Зазначимо, що це не традиційна хімічна енергія зв'язку поверхневих атомів, оскільки вона включає всі нелінійні ефекти на поверхні, такі як радіаційні ушкодження, релаксація, шорсткість і таке інше. Зазвичай хорошою оцінкою цієї енергії є теплота сублимації. Для одноелементних мішеней TRIM за замовчуванням користується таблицею енергій кожного елемента. Під час спеціалізованих розрахунків розпилення в меню *Plots* доступні специфічні залежності, що свідчать про вплив малих змін поверхневої енергії зв'язку на коефіцієнт розпилення.

5.3 Lattice Binding Energy (Енергія зв'язку атомів у ґратах) – це енергія, яку втрачає кожен атом віддачі, коли залишає своє місце у ґратах і відскакує вглиб мішені. Зазвичай вона становить близько 1÷3 еВ, але для більшості сполук вона невідома. Імовірно, ця енергія передається фононам. На жаль, енергія зв'язку атомів у ґратах дуже істотна при розрахунках коефіцієнта розпилення. Зміна цієї енергії зв'язку від 1 до 3 еВ може знизити вихід розпилених атомів майже вдвічі.

6. Параметри обчислень

6.1 *Number of Ions (Кількість іонів)*

Дозволяє встановити кількість іонів, для яких буде проведено розрахунки. Кількість іонів, яка може бути потрібною декільком дивними користувачам, може досягати 9999999. Зазвичай за замовчуванням встановлюється 99999 іонів, і розрахунок переривається самим користувачем, коли набирається достатня статистика. Деякі користувачі дають перевагу зупиняти розрахунок після проходження заданої кількості іонів (вікно ***Total Number of Ions***) (***Загальна кількість іонів***) у нижній частині ***TRIM INPUT***), щоб безпосередньо порівнювати результати різних розрахунків. Якщо повторювати обчислення, не змінюючи параметри, результати кожного іона повторюватимуться до того часу, доки зміниться джерело випадкових чисел (обговорюється нижче). Якщо завершити обчислення при досягненні вказаної кількості іонів і знову запустити TRIM, можна збільшити загальну кількість іонів. Кількість іонів також можна змінювати під час роботи програми TRIM.

6.2 *Automatic Saving of Calculations (Автоматичне збереження розрахунків)*

Оскільки деякі розрахунки можуть продовжуватися цілими днями, то TRIM передбачає автоматичне збереження проміжних результатів через заданий інтервал часу. Файли, що зберігаються, мають розширення *.SAV і за замовчуванням знаходяться в директорії ***TRIM RESTORE***. Кількість інтервалів можна змінювати під час обчислень за допомогою опції редагування ***Edit TRIM Calc***.

6.3 *Random Number Seed (Джерело випадкових чисел)*

При однаковому початковому встановленні TRIM завжди буде робити ідентичні розрахунки до тих пір, поки не зміниться початкове число. Можна ввести будь-яке ціле число від 0 до 999999999. За замовчуванням встановлено число 742938285, яке є майже містичним у теорії випадкових чисел і кращим за інші запропоновані числа. Однак, якщо необхідно порівняти результати

трьох подібних, але різних розрахунків, то непогано взяти три джерела випадкових чисел.

7. Фізичні основи програми TRIM

7.1 Фізика каскадів зіткнень

Найпростіший шлях до розуміння каскадів зіткнень - це запуск програми *TRIM* в режимі *full cascade calculation* (всі каскадні пошкодження) і натискання клавіші "C", в результаті якого енергія кожного атома, що зіштовхується, і іона буде записуватися в файл "*COLLISION.TXT*". Зазначимо, що можна натиснути цю клавішу під час розрахунків енергії гальмування на початку програми, і запис файлу "*COLLISION.TXT*" розпочнеться з першого іона. Цей файл може вийти досить великим, тому для першої експериментальної спроби достатньо декількох хвилин обчислень. Потім необхідно зупинити виконання програми та відредагувати файл "*COLLISION.TXT*" за допомогою якогось текстового редактора. З'являться таблиці для кожного іона, що стикається з різними атомами мішені, та докладні результати для зіткнень каскадів. У таблиці поміщаються ті зіткнення, у яких сталося хоча одне зміщення, тобто, записується не кожне зіткнення. У файлі "*COLLISION.TXT*" наводиться, по-перше, поточна енергія іона і глибина, потім поточна швидкість втрати енергії іона за рахунок електронів мішені, тобто, енергія електронного гальмування, позначена як "*Se*" в $\text{eV}/\text{\AA}$. Після цього визначається решітковий атом, який отримав поштовх і почав каскад віддачі, відповідно до його енергії віддачі. Таким чином, кожен каскад включає зміщенні зіткнення, вакансії, заміщені зіткнення та міжвузловинні атоми, як це описано нижче. Кількість зіткнень, що зміщують атоми з вузлів кристалічної ґрати показує, скільки атомів решітки рухається в каскаді з енергією, що перевищує енергію їх зміщення, величина якої вибиралася на самому початку роботи програми *TRIM*. Наступним пунктом таблиці є *ґраткові вакансії*. Вакансія – це порожнеча, що залишається після відходу атома віддачі з вузла ґрат. Далі в таблиці наводяться зіткнення, що

призводять до заміщення атомів, які зменшують кількість вакансій. Якщо атом, що рухається, передає нерухомому решітковому атому енергію, що перевищує енергію зміщення, а енергія, що залишилася в нього, недостатня для подальшого просування, то у разі їх ідентичності, він заміщає вибитий атом і вакансія не утворюється. Незважаючи на зовнішню складність цього процесу, він може знизити загальну кількість вакансій аж до 30 %. Підсумовування дає:

$$\textit{Displacements} = \textit{Vacancies} + \textit{Replacement Collisions}$$

$$\textit{Зміщення} = \textit{Вакансії} + \textit{Заміщені зіткнення}.$$

Нарешті, у таблиці наводиться перелік *власних міжвузловинних атомів* (ВМА). Коли атом віддачі зупиняється, не змістивши атом, він стає *міжвузловинним*. Це можна підсумувати так:

$$\textit{Vacancies} = \textit{Interstitials} + (\textit{Atoms which leave the target volume})$$

$$\textit{Вакансії} = \textit{ВМА} + (\textit{Атоми, що залишили мішень}).$$

Якщо атом каскаду залишає мішень, він більше не розглядається. А саме він відбраковується, якщо йде через фронтальну або тильну поверхню мішені. Однак *TRIM* безперервно відстежує атоми, що йдуть убік, навіть коли вони виходять за межі екрана. Але якщо вони йдуть через поверхню мішені, вони відкидаються і не враховуються. Таким чином, у мішені утворюються вакансії, а на деякій відстані від них зупиняються атоми віддачі, що породили їх. Зрозуміло, що якщо атом віддачі залишає мішень, то кількість міжвузловинних атомів буде менше кількості вакансій через втрату цього атома. Заміщені зіткнення не входять у це рівняння, оскільки кожне зіткнення, що призводить до заміщення, зменшує як кількість вакансій, так і кількість міжвузловинних атомів, не порушуючи рівновагу. Нарешті, атом, який зупинився у верхньому моношарі мішені, завжди передбачається гратковим, якщо він належав цьому шару, тобто він не є ні заміщеним, ні міжвузловинним атомом. Розрахунок каскадів, зміщень, заміщених зіткнень тощо проводиться за певних припущеннях, які докладно викладені нижче.

Припустимо, що атом, що падає, має атомний номер Z_1 і енергію E . Він стикається в мішені з атомом, що має атомний номер Z_2 . Після зіткнення іон, що падає, має енергію E_1 , а його партнер зі зіткнення – енергію E_2 . Для мішені заздалегідь вказується енергія зміщення – E_d , енергія зв'язку решіткового атома з його вузловою позицією – E_b і кінцева енергія атома, що рухається в решітці – E_f , оскільки при меншій енергії атом вважається таким, що зупинився. **Зміщення** відбувається, коли $E_2 > E_d$, тобто, атом, що ударяється, отримує достатню енергію для виходу з вузла. **Вакансія** утворюється, якщо і $E_1 > E_d$ і $E_2 > E_d$, тобто обидва атоми мають достатню енергію, щоб залишити вузол. Це означає, що обидва атоми стають атомами каскаду, що рухаються. Енергія E_2 атома Z_2 зменшується на величину E_b перед тим, як він здійснить наступне зіткнення. Якщо $E_2 < E_d$, то атом, що ударяється, не має достатньої енергії для вибивання нерухомих атомів, і буде коливатися навколо вузлової позиції, розсіюючи енергію E_2 у вигляді фононів. Якщо $E_1 < E_d$, а $E_2 > E_d$ і $Z_1 = Z_2$, то атом, що прилетів, залишиться у вузлі, зіткнення називатиметься **заміщенням**, а енергія E_1 розсіється у вигляді **фононів**. Атом у вузлу грати буде замінений таким же, але атомом, що прилетів. Такий тип зіткнень звичайний для великих каскадів в одноелементних мішенях. Якщо $E_1 < E_d$, а $E_2 > E_d$ при $Z_1 \neq Z_2$, то атом Z_1 перетвориться на **міжвузловинний** атом, що зупинився. Нарешті, якщо $E_1 < E_d$ і $E_2 < E_d$, то атом Z_1 стане міжвузловинним атомом, а сумарна енергія $E_1 + E_2$ розсіється як фононів. Якщо мішень складається з декількох різних елементів, і кожен має свою енергію зміщення, то E_d буде змінюватися для кожного атома каскаду, що потрапляє в різні атоми мішені. Для розрахунку пошкоджень мішені в режимі швидкий (**Quick**) в **TRIM** застосовується аналітичне рішення Кінчіна-Піза, модифіковане двома пізнішими авторами. Короткий опис цього дано у підручнику [1]. Допомога у розумінні цього підходу можуть надати також роботи [4–6].

7.2 Фізика розпилення

Розпилення – це процес видалення приповерхневих атомів із мішені. Коли каскад передає атому мішені енергію, що перевищує **поверхневу енергію**

зв'язку, атом може розпилитись. Щоб дійсно розпилитися, нормальна до поверхні складова швидкості атома повинна забезпечити енергію, що перевищує *поверхневу енергію зв'язку* при перетині поверхні. Розпилення поверхні характеризується *коефіцієнтом розпилення*, який визначається як середня кількість атомів мішені, розпилених іоном, що падає. Якщо мішень складається з кількох елементів, то вводяться окремі (парціальні) коефіцієнти розпилення кожному за елемента.

Поверхнева енергія зв'язку – surface binding energy (SBE), – атома з поверхнею відома лише для деяких матеріалів, але загальноприйнята оцінювати її за величиною теплоти сублімації. Типовими значеннями поверхневої енергії зв'язку є наступні: Ni (4,46 eV), Cu (3,52 eV), Pd (3,91 eV), Ag (2,97 eV), Pt (5,86 eV) та Au (3,80 eV). Ці величини пропонуються за умовчанням під час підготовки до обчислень.

Можна розрахувати розпилення шляхом проведення нормального розрахунку у режимі *детальний розрахунок з урахуванням всіх каскадних ушкоджень (Detailed Calculation with full Damage Cascades)*. Однак у режимі "*Sputtering*", зіткнення іон-мішень розраховуються для кожного моношару. Це може бути особливо важливим при розпиленні легкими атомами.

Якщо потрібно створити файл даних "*SPUTTER.TXT*", то буде зроблено опис кожного розпиленого атома. Ця вимога може бути висунута або під час запуску програми *TRIM*, або під час обчислень після натискання клавіші "S". Натискання клавіш "*Alt+S*" під час обчислень дозволяє побачити залежність коефіцієнта розпилення від величини поверхневої енергії зв'язку. Ці ж "*гарячі*" клавіші дозволяють перемикатися до стандартних залежностей та зображень. Зауважимо, що «*гарячі*» клавіші не впливають на перебіг обчислень і не створюють файл *SPUTTER.TXT*.

Важливими для процесу розпилення є ті каскади, які досягають поверхні мішені. Тому зазвичай для моделювання розпилення досить використовувати лише тонку мішень (розрахунок розпилення дуже детальний і займає більше часу, ніж розрахунок каскадів ушкоджень). Для важких іонів, наприклад,

важче, ніж 20 аом, зазвичай виявляється достатньою товщина мішені 40÷50 Å. Використання дуже тонкої мішені зменшує час, що витрачається на розрахунок каскадів, які не дають внесок у розпилення. Для легких іонів, наприклад, іонів He, необхідно використовувати більш товсті мішені, товщина яких може досягати 300÷500 Å, так як легкі іони можуть розсіюватися у зворотному напрямку з більшої глибини та викликати розпилення, виходячи до поверхні мішені. Необхідну для розрахунку глибину мішені можна оцінити шляхом швидкого прогону програми для кількох малих товщин і визначення глибини, коли коефіцієнт розпилення стає постійним.

Для каскадів з дуже малою енергією, що дають найбільший внесок у розпилення, у програмі застосовується модель розсіювання твердих сфер, описана у роботі [7].

На закінчення кілька зауважень щодо достовірності результатів. Коефіцієнт розпилення дуже залежить від величини поверхневої енергії зв'язку (*SBE*), яка вводиться при обчисленнях. Необхідно усвідомлювати, що для реальної поверхні ця величина змінюється під час іонного бомбардування внаслідок розвитку поверхневої шорсткості та зміни поверхневої стехіометрії у випадку сполук. Далі, розпилення відбувається головним чином із верхнього моношару мішені. Для таких мішеней, як Ni або більш важких, електронні втрати енергії атома мішені, що рухається крізь верхній моношар, порядку поверхневої енергії зв'язку. Отже, шорсткості моношарової висоти можуть змінити величину коефіцієнта розпилення.

Чутливість коефіцієнта розпилення до величини поверхневої енергії зв'язку можна відтворити під час обчислень за допомогою графічного меню. Залежність коефіцієнта розпилення від поверхневої енергії зв'язку має точність близько 30%. *Наявність поверхневої шорсткості не враховується величиною поверхневої енергії зв'язку, що відповідає енергії сублімації, і тому реальні коефіцієнти розпилення можуть бути більшими за розрахункові.*

8. Вихідні файли даних TRIM

8.1 *Файли усереднених даних*

Ці текстові файли створюються за командою “*T*” у меню залежностей (*Menu of Plots*). У програмі *TRIM* розподіл розрахованих подій по глибині виходить шляхом їх усереднення в рамках кожного зі 100 рівновеликих шарів, на які розбивається вся мішень. Зазвичай результати зберігаються в одиницях Подія/(Å·Іон). Створюються такі файли:

<i>TDATE.TXT</i> –	Деталі поточного розрахунку та опис наведених далі файлів.
<i>RANGE.TXT</i> –	статочний розподіл іонів та атомів віддачі.
<i>E2RECOIL.TXT</i> –	Розподіл енергії, переданої атомам віддачі.
<i>VACANCY.TXT</i> –	Розподіл вакансій.
<i>NOVAC.TXT</i> –	Розподіл заміщених зіткнень (без утворення вакансій).
<i>IONIZ.TXT</i> –	Розподіл іонізацій.
<i>PHONON.TXT</i> –	Розподіл фононів.
<i>LATERAL.TXT</i> –	Розподіл поперечно розсіяних іонів.

8.2 *Файли кінетики окремих іонів та атомів віддачі*

Можна створювати файли для різних типів зіткнень, у тому числі для іонів та атомів, що залишають мішень. Ці файли містять детальні числові таблиці. Їх можна вимагати у початковому меню програми *TRIM* або під час обчислень. Наприклад, натискання “гарячої” клавіші “*B*” під час обчислень дозволяє викликати або приховати файл *назад розсіяних іонів*, який називається *BACKSCAT.TXT*. Нижче наведено список доступних імен файлів та їх опис:

<i>RANGE_3D.TXT</i> –	Остаточне тривимірне розташування всіх іонів, що зупинилися в мішені. Цей файл можна вимагати під час налаштування програми.
-----------------------	--

<i>BACKSCAT.TXT</i> –	Кінетичні характеристики всіх обернено розсіяних іонів (енергія, розташування та траєкторія).
<i>TRANSMIT.TXT</i> –	Кінетичні характеристики іонів, що пройшли через мішень (енергія, розташування та траєкторія).
<i>SPUTTER.TXT</i> –	Кінетичні характеристики всіх розпилених атомів мішені.
<i>TRIMOUT.TXT</i> –	Підсумкова таблиця обернено розсіяних іонів, іонів, що пройшли через мішень, і розпилених атомів.
<i>COLLISON.TXT</i> –	Таблиця всіх іонно-атомних зіткнень, що призводять до пошкодження мішені. На вимогу, цей файл може містити різні описані величини.

У комплект TRIM включено програму, яка здійснює статистичний аналіз іонів, що пройшли через мішень. Це програма ***TRANSMIT.BAS***, яку можна запустити інтерпретатором ***Basic***. Лістинг цієї програми досить просто змінити для аналізу інших текстових (*.TXT) файлів, наприклад, обернено розсіяних іонів або розпилених атомів.

Порядок виконання завдання

1. Отримати у викладача завдання та необхідні дані.
2. За допомогою програми ***TRIM*** провести розрахунок проникнення іонів в однокомпонентну мішень (Si). Побудувати розподіл імплантованих частинок, радіаційних дефектів, пружних та непружних втрат енергії за глибиною мішені. Порівняти отримані залежності з результатами розрахунків шляхом моментів функцій розподілу.
3. Розрахувати залежність коефіцієнта розпилення від енергії іонів, які бомбардують, і кута їх падіння на поверхню мішені. Побудувати кутові та енергетичні залежності коефіцієнта розпилення та енергії розпилених атомів.

4. Провести розрахунок іонно-променевого перемішування у шаруватих системах метал/кремній. Побудувати розподіл зміщених атомів металу та кремнію поблизу міжфазних меж розділу багат шарового періодичного покриття.

Рекомендується всі розрахунки та графічні побудови проводити за допомогою програми Origin.

Контрольні питання

При здачі практичного завдання необхідно вивчити такі теоретичні питання:

1. Потенціали іон-атомної взаємодії.
2. Диференціальний та повний переріз розсіювання.
3. Пружні та непружні втрати енергії прискореної частинки у твердому тілі.
4. Залежність ядерної та електронної гальмівної здатності речовини від енергії іонів
5. Вплив каналювання на розподіл пробігів іонів та виділення енергії.
6. Каскади атомних зіткнень.
7. Розпилення твердих тіл іонним бомбардуванням.
8. Іонно-променево перемішування на міжфазних межах розділу.

Перелік посилань

1. Ziegler J. F. The Stopping and Range of Ions in Solids / Ziegler J. F., Biersack J. P. and Littmark U. – New York: Pergamon Press, 2003.
2. Ziegler J. F. The Stopping and Range of Ions in Matter. – New York: Pergamon Press, Vol. 2–6, 1977–1975.
3. Thomson M.W. Defects and radiation damage in metals – Cambridge: University Press , 1969. - 356 p.
4. Kinchin G. H. The displacement of atoms in solids by radiation / G. H. Kinchin, R. S. Pease // Rep. Prog. Phys. – 1955. – Vol. 18. – P. 1–51.

5. Sigmund P. A note on integral equations of the Kinchin-Pease type / P. Sigmund // *Radit. Eff.* – 1969. – Vol. 1, I. 1. – P. 15–18.
6. Norgett M. J. A proposed method of calculating displacement dose rates / M. J. Norgett, M. T. Robinson and I. M. Torrens // *Nucl. Eng. Design.* – 1974. – Vol. 33. – P. 50–54.
7. Biersack J. P. Sputtering Studies with the Monte Carlo Program TRIM.SP / J. P. Biersack, W. Eckstein // *Appl. Phys.* – 1984. – Vol. A34. – P. 73-94.

Зміст

Вступ	3
1. Типи обчислень	4
1.1 <i>Ion Distribution and Quick Calculation of Damage</i> (Розподіл іонів та швидкий розрахунок пошкоджень)	4
1.2 <i>Detailed Calculation with full Damage Cascades</i> (Детальний розрахунок з урахуванням всіх каскадних пошкоджень)	4
1.3 <i>Calculation of Surface Sputtering</i> (Розрахунок розпилення поверхні)	4
2. Типи розрахункових залежностей	6
3. Опис іонів	6
3.1 <i>Identify the ion</i> (Ідентифікуйте іон)	6
3.2 <i>Enter the ion mass</i> (Введіть масу іона)	7
3.3 <i>Enter the ion energy (units = keV)</i> (Введіть енергію іона (у кеВ))	7
3.4 <i>Angle of Incidence of Ion</i> (Кут падіння іона)	7
4. Опис мішені	7
5. Енергії зв'язку атомів мішені	8
5.1 <i>Displacement Energy</i> (Енергія зміщення)	8
5.2 <i>Surface Binding Energy</i> (Поверхнева енергія зв'язку)	9
5.3 <i>Lattice Binding Energy</i> (Енергія зв'язку атомів у ґратах)	9
6. Параметри обчислень	10
6.1 <i>Number of Ions</i> (Кількість іонів)	10

6.2 <i>Automatic Saving of Calculations</i> (Автоматичне збереження розрахунків)	10
6.3 <i>Random Number Seed</i> (Джерело випадкових чисел)	10
7. Фізичні основи програми <i>TRIM</i>	11
7.1 Фізика каскадів зіткнень	11
7.2 Фізика розпилення	13
8. Вихідні файли даних <i>TRIM</i>	16
8.1 Файли усереднених даних	16
8.2 Файли кінетики окремих іонів і атомів віддачі	16
Порядок виконання завдання	17
Контрольні питання	18
Список літератури	18
Зміст	19

Навчальне видання

Методичні вказівки

до виконання комплексної практичної роботи «Комп'ютерне моделювання процесів іонної імплантації, розпилення та іонно-променевого перемішування» з навчальних дисциплін «Радіаційна стійкість матеріалів», «Фізика взаємодії прискорених частинок з твердим тілом», «Плазмова та радіаційна поверхнева взаємодія матеріалів в екстремальних умовах» для студентів денної та заочної форми навчання за спеціальністю «Прикладна фізика та наноматеріали»

Укладачі:

ЗУБАРЄВ Євгеній Миколайович

МАЛИХІН Сергій Володимирович

СПАТОВ Олександр Юрійович

КОНОТОПСЬКИЙ Леонід Євгенович

Відповідальний за випуск ст. викладач Л. Є. Конотопський

Роботу до видання рекомендував доц. Дроздов А.М.

В авторській редакції

План 2025 р., поз. 572.

Підп. до друку _____ Гарнітура Times New Roman.

Видавничий центр НТУ «ХП»,

вул. Кирпичова, 2, м. Харків, 61002

Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 5478 від 21.08.2017 р.

Електронна версія