

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ФИЗИЧЕСКОГО РАСПЫЛЕНИЯ ТВЁРДЫХ ТЕЛ

В. С. Оразаев

*Белорусский государственный университет, г. Минск;
vadim_orazaev_1998@mail.ru;
науч. рук. – А. В. Леонтьев, канд. физ.-мат. наук, доц.*

В данной статье приведены результаты расчета коэффициента физического распыления твердых тел методом Монте-Карло с помощью SRIM-2013 и сделано сравнение их с экспериментальными данными. Показано, что при моделировании распыления лёгкими ионами необходимо рассчитывать 10^4 - 10^5 псевдоисторий. При расчёте распыления тяжёлыми ионами и ионами средних масс достаточным числом псевдоисторий является 10^3 - 10^4 .

Ключевые слова: SRIM-2013; метод Монте-Карло; физическое распыление.

ВВЕДЕНИЕ

Явление распыления твёрдых тел под действием бомбардировки его поверхности потоком ионов получило название физического распыления. Различают три режима распыления: прямого выбивания, линейных и нелинейных каскадов [1]. Коэффициент распыления – отношение числа выбитых атомов к числу падающих ионов. Для моделирования физического распыления твердых тел широко используется программный комплекс SRIM-2013 [2], реализующий метод Монте-Карло [3].

Целью данной работы является тестирование данного комплекса для расчета коэффициентов физического распыления твердых тел ионной бомбардировкой.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Для сравнения численных расчетов коэффициента распыления с экспериментом выбраны литературные данные по распылению кремния ионами сурьмы, мышьяка, фосфора и бора [4]. Расчетные данные приведены ниже в табл. 1. Для случая распыления ионами мышьяка и особенно сурьмы экспериментальные результаты и теоретические расчеты значительно расходятся. Особенно это заметно при распылении кремния ионами сурьмы, где экспериментально наблюдаемый максимум зависимости $Y(E)$ не воспроизводится, где Y – коэффициент распыления, а E – энергия ионов.

Таблица 1

Программный расчёт коэффициентов распыления кремния ионами сурьмы, мышьяка, фосфора и бора

Ион	Энергия иона				
	10 кэВ	30 кэВ	50 кэВ	70 кэВ	100 кэВ
Sb	1,97	2,78	3,22	3,49	3,78
As	1,75	2,37	2,55	2,66	2,73
P	1,42	1,46	1,32	1,28	1,13
B	0,5853	0,3882	0,27	0,2468	0,1629

В таблицах 2 и 3 приведены расчеты и экспериментальные [5] данные по распылению ряда металлов ионами серебра с энергией 1 кэВ.

Таблица 2

Программный расчёт коэффициентов распыления меди, серебра, молибдена, никеля и платины ионами гелия, неона, аргона, криптона и ксенона ($E = 1$ кэВ)

Мишень	Ион				
	He	Ne	Ar	Kr	Xe
Cu	0,4012	3,51	3,76	2,51	1,9
Ag	0,2606	2,67	3,75	3,87	2,62
Mo	0,098	1,16	1,59	1,46	0,8056
Ni	0,3273	2,62	2,94	1,79	1,37
Pt	0,1082	1,59	2,77	3,44	3,23

Таблица 3

Экспериментальные значения коэффициентов распыления меди, серебра, молибдена, никеля и платины ионами гелия, неона, аргона, криптона и ксенона с энергией 1 кэВ [5]

Мишень	Ион				
	He	Ne	Ar	Kr	Xe
Cu	0,65	2,75	3,64	3,62	3,42
Ag	1,8	2,4	3,8	4,7	Данных нет
Mo	Данных нет	0,43	1,14	1,41	1,53
Ni	0,22	1,45	1,86	1,89	2
Pt	0,08	0,85	2	2,35	2,52

Анализ таблиц 2 и 3 показывает, что имеют место существенные расхождения между экспериментальными результатами и расчётными данными. Отметим, что различные методы экспериментального определения коэффициента распыления при одних и тех же условиях также отличаются друг от друга [1]. Поэтому необходимо проводить процедуру корректировки программных расчётов на экспериментальные данные. Такая процедура заключается в подборе таких параметров как пороговая энергия смещения, энергия связи и теплота сублимации. Данная возможность присутствует в программном комплексе SRIM-2013.

В данной работе рассмотрено влияние числа псевдоисторий на результаты вычислений. Для примера рассмотрены случаи распыления кремния легкими ионами (режим прямого выбивания), ионами средних масс и тяжёлыми ионами (режим линейных каскадов). Результаты расчётов представлены на рисунках 1, 2, 3.

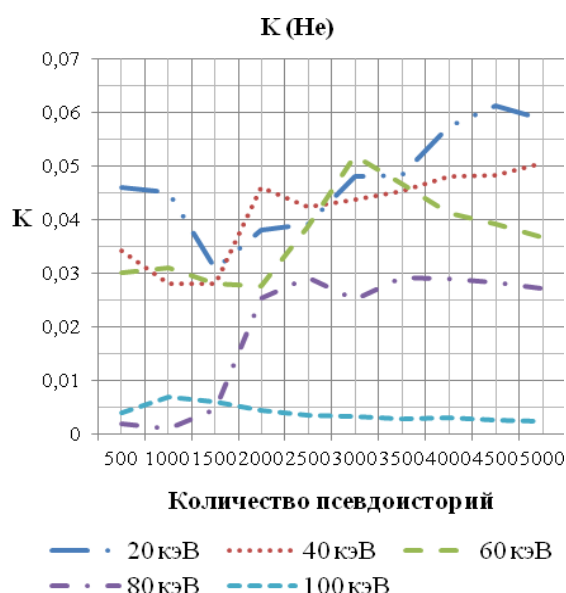


Рис. 1. Зависимость значения коэффициента распыления Si ионами He от статистики при разных значениях энергии

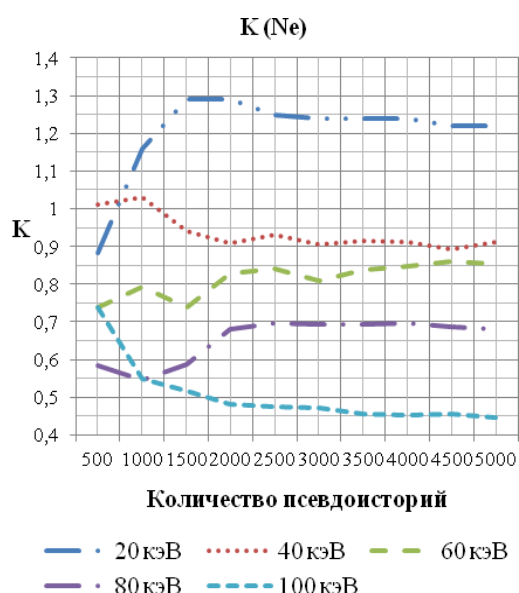


Рис. 2. Зависимость значения коэффициента распыления Si ионами Ne от статистики при разных значениях энергии

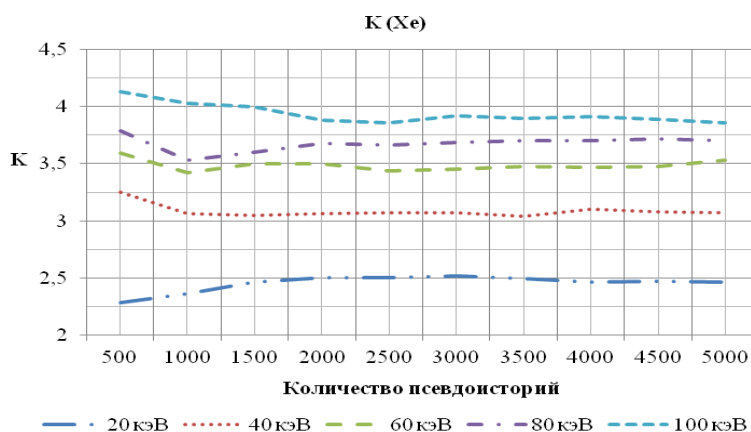


Рис. 3. Зависимость значения коэффициента распыления Si ионами Xe от статистики при разных значениях энергии

Как показывают графики, для получения достоверных коэффициентов при распылении ионами больших масс количество повторений экспериментов требуется гораздо меньше (около 2000 псевдоисторий), что нельзя сказать о лёгких ионах. Это связано с тем, что для них доминирует режим прямого выбивания.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В процессе выполнения работы показано что:

1. При моделировании распыления тяжёлыми ионами требуется корректировка программных расчётов на эксперимент, а при моделировании лёгкими ионами корректировка практически не нужна.
2. При моделировании распыления лёгкими ионами необходимо рассчитывать 10^4 – 10^5 псевдоисторий. При расчёте распыления тяжёлыми ионами и ионами средних масс достаточным числом псевдоисторий является 10^3 – 10^4 .
3. Полученные результаты позволят тратить меньше времени при расчётах коэффициента распыления.

Библиографические ссылки

1. Характеристики ионного распыления [Электронный ресурс]. URL: <http://256bit.ru/spektr/izmeren20.html> (дата обращения: 05.12.2018).
2. SRIM– [Электронный ресурс]. URL: <http://srim.org> (дата обращения: 05.12.2018).
3. Метод Монте-Карло [Электронный ресурс]. URL: <https://habrahabr.ru/post/274975> (дата обращения: 05.12.2018).
4. Экспериментальные расчеты коэффициентов распыления кремния ионами сурьмы, мышьяка, фосфора и бора [Электронный ресурс]. URL: <http://mash-xxl.info/pics/485531> (дата обращения: 12.12.2018).
5. Экспериментальные данные расчета коэффициентов распыления меди, серебра, молибдена, никеля и платины ионами гелия, неона, аргона, криптона и ксенона при энергии 1кэВ [Электронный ресурс]. URL: <https://studopedia.info/3-121164.html> (дата обращения: 12.12.2018).