

УДК 621.455: 621.387.1

А. С. ДОЛГОВ, Д. А. ОРАНСКАЯ, А. И. ОРАНСКИЙ

Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «ХАИ»

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ЭВОЛЮЦИИ МИКРОСКОПИЧЕСКОГО РЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТИ НА МЕХАНИЗМ И ИНТЕНСИВНОСТЬ РАЗРУШАЮЩИХ ФАКТОРОВ

Теоретически изучается влияние эволюции микроскопического рельефа поверхности в процессе воздействия различных разрушающих факторов на их механизм и интенсивность разрушения. Основное внимание уделено распылению поверхности при бомбардировке медленными атомами. Указаны особенности применения полученных уравнений как при интенсивном нагреве поверхности (сублимация), так и при совместном воздействии высокой температуры и атомной бомбардировки (температурно-стимулированное распыление). Показана правомерность использования анализа модели послойного распыления с учетом атомных ступенек на поверхности и изолированных пятен, принадлежащим другим атомным слоям.

Ключевые слова: микроскопический рельеф поверхности, теория распыления медленными атомами.

Введение

Выбивание атомов падающими на поверхность атомными частицами (распыление) – эффект, представляющий значительный интерес как сам по себе, так и в качестве составной части процессов более общего характера [1-3]. Физический механизм процесса и наблюдаемые характеристики в существенной мере определяются энергией падающих частиц, что и предопределяет использование совершенно различных теоретических концепций для трактовки этого процесса в разных энергетических диапазонах. При этом состояние теории распыления при низких энергиях бомбардировки не создает впечатления целостности и завершенности. Отчасти, это связано с тем, что коэффициенты распыления в этой области энергии низки, что создает затруднения в экспериментальном наблюдении эффекта и, возможно, в некоторых случаях создает впечатление его мало-значительности. Однако, в разработке ряда устройств, предполагающих длительную эксплуатацию, названный эффект выходит на первый план, задавая ресурсные характеристики не только соответствующего элемента конструкции, но и, может быть, крупного агрегата. Это относится к устройствам, работающим в условиях космоса, а также к составляющим энергетики, плазменных или пучковых технологий и др.

Другая сложность теоретического осмысления распыления при низких энергиях – в наличии значительного числа факторов, относительные вклады которых в разных ситуациях могут существенно различаться. В силу этого формирование каких-то

универсальных, единственно состоятельных концепций разрушения при относительно низких энергиях едва ли возможно. Текущей потребностью является внимательный анализ главных аспектов физического механизма распыления. В данной работе обсуждается влияние изменения рельефа поверхности в процессе разрушающего воздействия потока бомбардирующих частиц на механизм и эффективность этого процесса.

1. Исходные представления

Известно, что макроскопически совершенная, даже идеально отполированная поверхность, как правило, характеризуется сложным микроскопическим рельефом, включающим разнообразные геометрические отклонения от идеальных форм.

С другой стороны, сам факт возникновения трансляционной упорядоченности при образовании твердых тел свидетельствует об энергетической предпочтительности геометрически правильного размещения атомов на поверхности. Яркой иллюстрацией этого является эстетически безупречные природные монокристаллы.

Обозначенная закономерность не исключает существование всевозможных «неправильностей», но определяет иерархию устойчивости этих образований. Общая тенденция в том, что чем сильнее отличаются условия размещения какого-то атома от имеющихся в регулярной кристаллической структуре данного материала, тем менее устойчиво соответствующее образование. Не вызывает сомнения, что данное обстоятельство играет свою роль во всевоз-

можных сценариях акта взаимодействия налетающего атома с бомбардируемой поверхностью. Например, учет наличия атомных ступенек выявляет существенные качественные отличия процесса рассеяния атомов от того, что имеет место для микроскопически гладкой поверхности [4]. Применительно к процессу распыления необходимо различение условий выбивания атомов, находящихся в зацеплении с соседями по кристаллической решетке, и тех атомов, у которых число связей с матрицей снижено. Общим правилом является то, что последовательное уменьшение числа атомов, непосредственно соседствующих с рассматриваемым, ступенчатым образом понижает энергию связи атома с поверхностью. Это же обстоятельство может трактоваться как наличие набора парциальных порогов распыления, соответствующих различным вариантам размещения атомов в пределах разрушаемого слоя. Стоит также отметить, что в рамках макроскопических категорий последовательное рассмотрение роли субатомных неоднородностей не представляется возможным: необходим микроскопический анализ.

Для определенности принимаем, что в неискаженном кристалле атомы размещаются в узлах простой кубической решетки. Считаем также, что условная поверхность образца правильно ориентирована относительно кристаллографических направлений (индекс Миллера (100)). Ввиду того, что обсуждается низкоэнергетическое распыление, все основные события, связанные с возможным отрывом от поверхности, сосредоточены в пределах покровных слоев участков, может быть и неодинаково расположенных относительно условной макроскопической поверхности. Участие каждого из более глубоких слоев станет заметным только после его значительного обнажения вследствие существенного разрушения прилегающего слоя.

Уравнение, описывающее изменение средних уровней заполнения регулярных позиций в слое может быть представлено так

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi(n)}{dt} = & -\alpha_4\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 \end{pmatrix} - 4\alpha_3\varphi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \\ & -4\alpha_2\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 \end{pmatrix} - 2\alpha_2\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \\ & -4\alpha_1\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha_0\varphi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1)$$

где φ - символ вероятности конфигурации, представленной в качестве аргумента (единицы соответ-

ствуют заполненным позициям, нули - освободившимся);

α_k - вероятность ухода центрального атома под действием внешнего фактора в расчете на единицу времени; индекс соответствует числу примыкающих атомов слоя; дополнительные целочисленные множители задают статистический вес соответствующей конфигурации, т.е. количество физических идентичных вариантов размещения соответствующего вида. Предполагается макроскопическая однородность распределения, что исключает из рассмотрения зависимости от координат.

Вопрос о взаимном соответствии между многоузельными вероятностями разных порядков и их связи с одноузельными разрабатывался в ряде статей, начиная с работы [5]. Здесь мы ограничиваемся допущением о некоррелированном относительном размещении атомов по позициям слоя, т.е. в соответствии с изложенной постановкой задачи принимаем, что изменения во взаимном расположении определяются только уходом атомов из слоя. Уравнение (1) приобретает вид

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{dt} = & -\alpha_4\varphi^5 - 4\alpha_3\varphi^4(1-\varphi) - 6\alpha_2\varphi^3(1-\varphi)^2 - \\ & - 4\alpha_1\varphi^2(1-\varphi)^3 - \varphi(1-\varphi)^4. \end{aligned} \quad (2)$$

Ради упрощения записи последующих выражений при переходе от (1) к (2) выполнено обезразмеривание уравнения, причем для относительных, безразмерных величин t , α сохранены те же обозначения, что и для соответствующих размерных.

2. Испарительный механизм разрушения

Для достаточно высоких температур механизм постепенного разрушения ряда материалов может квалифицироваться как испарительный (сублимация). Высказанные выше общие замечания об особенностях разрушения поверхности и уравнения (1), (2) сохраняют силу и допускают дополнительную конкретизацию.

Так как акт отрыва атома соответствует разрыву связи с « φ » ближайшими соседями, то, значит, величины α_k записываются в форме фактора Гиббса [6]

$$\alpha_p = \alpha^p, \quad \alpha = \exp\left(-\frac{V}{k_B T}\right), \quad (3)$$

где V - энергия связи с одним соседом в слое.

Уравнение (2) приобретает вид

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\varphi[\alpha\varphi + (1-\varphi)]^4, \quad (4)$$

допускающий прямое интегрирование. Получается

$$-\frac{\frac{11}{6} - \frac{5}{2}(1-\alpha)\varphi + (1-\alpha)^2\varphi^2}{[1-(1-\alpha)\varphi]^3} \Big|_1^\varphi + \ln \frac{1-(1-\alpha)\varphi}{\alpha\varphi} = t. \quad (5)$$

На начальном этапе развития процесса $(1-\varphi) < \alpha$ преобладающий вклад в выражение слева от знака равенства (5) вносит первое слагаемое, определяющее зависимость

$$\varphi \approx (1 + 4\alpha^4 t)^{-\frac{1}{4}}, \quad (6)$$

или

$$1 - \varphi \approx \alpha^4 t. \quad (7)$$

Форма (6), (7) задает медленное изменение уровня покрытия в темпе, определяемом вероятностью выбивания атомов из практически неразрушенного слоя. В области значений φ , значительно уступающих единице, уравнение (4) практически линеаризуется, определяя экспоненциальное опустошение поверхности с временными масштабами, соответствующими наименее устойчивым, одиночным атомам. Этот этап развития процесса представлен логарифмическим слагаемым соотношения (5), которое определяет правило

$$\varphi \approx \frac{e^{-t}}{\alpha}. \quad (8)$$

Дополнительный коэффициент α в знаменателе (8) определяет превышение φ над тем, что дает уравнение (4) в его линейной форме. Причина этого отличия в том, что изучаемый процесс приближается к режиму (8) только в условиях, когда характер повреждения достигает значительных масштабов. Таким образом, множитель $(\alpha^{-1} \gg 1)$ определяет масштаб отсрочки достижения этапа практически полного разрушения слоя.

3. Общие закономерности разрушения слоя

В ситуации, когда разрушение поверхностного слоя связано с бомбардировкой потоком атомных частиц, наряду, может быть, с интенсивным нагревом поверхности, возникает наложение закономерностей термического и кинетического механизмов (см. [7]). При этом набор коэффициентов уравнения (2) в общем случае не следует правилу (3). Тем не менее, согласно сказанному выше, имеются достаточные основания предполагать сохранение иерархических соответствий между значениями α_p .

$$\alpha_4 < \alpha_3 < \alpha_2 < \alpha_1 < 1. \quad (9)$$

Не вызывает также сомнения, что в ряде случаев знаки « $<$ » в соответствиях (9) могут быть заменены знаками сильного неравенства. Таким образом, в уравнении (2) присутствуют слагаемые совершенно разных порядков, причем относительные роли слагаемых существенно изменяются по мере развития изучаемого процесса. Ясно, что когда φ практически не отличается от единицы, определяющая роль принадлежит первому слагаемому (2). Уменьшение φ снижает вклад первого слагаемого вместе с увеличением роли второго, которое через определенное время становится главенствующим. Далее важнейшим становится третье слагаемое и т.д.

Начальному участку изменения соответствует та форма уравнения (2), где все слагаемые, содержащиеся (1-4), могут быть опущены. Это приводит к результату, внешне сходному с записанным ранее (6)

$$\varphi = \frac{1}{(1 + 4\alpha_4 t)^{\frac{1}{4}}},$$

что для оговоренной области изменения t практически без потерь в отношении точности сводится к выражению

$$\varphi(t) = 1 - \alpha_4 t.$$

Длительность этого этапа оценивается величиной $1/4\alpha_3$. Дальнейшее убывание характеризуется временной производной около $-4\alpha_3$, что охватывает сроки порядка $1/6\alpha_2$. Очередной условный отрезок имеет длительность приблизительно $1/4\alpha_1$.

Заключительному этапу соответствует последнее слагаемое уравнения (2), что с учетом малости φ сравнительно с единицей дает равенство

$$\varphi = \frac{\varphi_1 \exp(-(t-t_1))}{1 - 4\varphi_1 [1 - \exp(-(t-t_1))]} \quad (10)$$

Здесь φ_1 - значение функции φ в условный момент t_1 , определяющий начало, также не лишено условности, завершающего этапа. Главной особенностью выражения (10) является экспоненциальное затухание. Длительность этого этапа, в принятом масштабе фиксации времени, порядка единицы.

Нетрудно видеть, что каждый последующий условный временной отрезок короче предыдущего. Фактически это означает, что наблюдаемая быстрота разрушения задается вероятностями повреждения первоначального ненарушенного слоя. Дальнейшее разрушение идет во все ускоряющемся темпе, что имеет результатом практически полное распыление слоя. Названные обстоятельства могут рассматриваться в качестве предпосылки использования моде-

ли послойного распыления, не исключая, конечно, наличия атомных ступенек на поверхности, достаточно обширных изолированных пятен, принадлежащих к другим кристаллическим слоям.

Следует обратить внимание, что уже при $\varphi = 1/2$ главенствующим является последнее слагаемое (2), определяющее стремительное (в соответствующем масштабе) опустошение слоя. Таким образом, относительно устойчивыми против внешних воздействий являются только слои с довольно высокой степенью заполнения

$$\varphi \geq \frac{4\alpha_3}{4\alpha_3 + \alpha_4}.$$

Отметим, что наблюдения качественного характера охватывают и вариант испарительного механизма разрушения, для которого приведены точные соотношения. Таким образом, указанный вариант может рассматриваться как частная иллюстрация более общих построений.

4. Альтернативные процессы

Выполненное рассмотрение не охватывает, конечно, все аспекты процесса распыления. В частности, отдельного обсуждения заслуживает вопрос о роли собственных релаксационных процессов на поверхности, конкурирующих с воздействиями, продуцирующими неравновесие [8, 9]. Результатом совместного действия альтернативных факторов является формирование квазиравновесных атомных микрораспределений в поверхностном слое (слоях), определяющее наблюдаемые свойства поверхности.

Отыскание безупречной формы представления релаксационного выражения – это самостоятельная проблема, которая, вероятно, не имеет универсального решения. Для качественного анализа целесообразно воспользоваться простейшей линейной аппроксимацией, которая будет отвечать главному свойству релаксационного фактора – возвращению структуры к равновесному состоянию. Этому требованию отвечает выражение $(1 - \varphi) / \tau$, что есть аналог соответствующего слагаемого кинетической теории («приближение времени релаксации», τ – «время релаксации» в принятом здесь масштабе).

Преобладающий интерес связан с квазиравновесным режимом, возникающим в присутствии обсуждаемого выражения. При этом уравнение (2), модифицированное добавлением релаксационного слагаемого, сводится к алгебраическому высокой степени, точное решение которого, как известно, не может быть записано, и, впрочем, не является необходимым.

Следует обратить внимание на дополнительные особенности рассматриваемого процесса. Имеются

теоретические построения и соответствующие эксперименты [10, 11], которые указывают на то, что в перестройках поверхностных слоев преобладающая роль принадлежит механизмам ступенчатого осаждения и также ступенчатой десорбции. В терминах наших построений это соответствует вкладам слагаемых, пропорциональных α_2 и α_1 , особенно α_1 . Таким образом, квазиравновесное значение $\varphi \equiv \varphi_0$ приблизительно определяется уравнением

$$\varphi_0^3(1 - \varphi_0) \approx \gamma, \quad (11)$$

$$\gamma \equiv (6\alpha_2\tau)^{-1}. \quad (12)$$

Величина γ остается безразмерной и для физических (размерных) значений α_2 , τ . Она характеризует эффективность релаксационных процессов. При достаточно низких значениях γ физический корень уравнения (2) приблизительно равен $\varphi_0 \approx \gamma^{1/3}$, что в частности, свидетельствует об относительно медленном понижении уровня φ_0 при неограниченном убывании γ . Если же $\gamma \sim 1/3$ то

$$\varphi_0 \approx 1 - \gamma.$$

Когда процесс разрушения поверхности имеет более общий характер, то предположения, приводящие к равенствам (11, 12) могут не выполняться. Требуется более полный анализ модифицированного уравнения (2). В этой ситуации можно ввести в рассмотрение дискретную, нормированную на единицу, функцию распределения вариантов относительного размещения атомов. Вероятности W_n для каждого из вариантов процессов разрушения поверхности определяются отношением соответствующего слагаемого уравнения (2), взятого для значения $\varphi = \varphi_0$, к сумме этих слагаемых.

При этом значения макроскопических характеристик, зависящих от форм микроскопических конфигураций, определяются операцией

$$\bar{f} = \sum_{n=1}^5 f_n W_n. \quad (13)$$

Соотношение (13) применимо к энергиям связи атомов с поверхностью, к соответствующим вероятностям отрыва (константы α_n), порогам распыления и др.

При достаточно низкой интенсивности внешнего воздействия значение φ_0 близко к единице. Это значит, что релаксационные процессы восстанавливают те формы распределения, которые свойственны равновесным объектам; эффективное значение α близко к α_4 .

В условиях интенсивного воздействия (относительно высокие значения α_n) значение ϕ_0 значительно уступает единице, т.е. процессы релаксации отстают от эволюции поверхности, что смещает значение средней (наблюдаемой) величины в сторону, задаваемую характером воздействия. Например, пороговая энергия распыления может приближаться к уровню, характерному для одиночных, т.е. наименее связанных атомов, либо к некоторым промежуточным значениям. Это обстоятельство может выглядеть как аномальное возрастание эффективности распыления в условиях допороговой области энергий. Обсуждаемые механизмы могут служить объяснением превышения уровней разрушения элементов, работающих в напряженных режимах, сравнительно с предсказаниями, основанными на «чистых» лабораторных экспериментах или на анализе, предполагающем неизменность условий разрушения.

Выводы

Выполненный анализ, как и процитированные выше работы, демонстрирует ограниченность упрощенных схем описания процессов взаимодействия с поверхностью. Наибольшие отличия от предсказаний на базе традиционных представлений ожидаются в особо напряженных режимах воздействия: интенсивная бомбардировка, комбинированные формы воздействия.

Данный анализ содержит определенные аналогии с построениями работы [12]. Варьирование температуры может являться одним из важнейших факторов, задающих масштаб наблюдаемых эффектов. Однако тепловое воздействие – обстоятельство, роль которого не просто предсказать. Интенсивный нагрев поверхности усиливает тепловое движение и появление распределений, соответствующих повышенной энергии (менее устойчивых). С другой стороны, тепловое движение ускоряет релаксационные перестройки. В силу этого прогноз влияния изменения температуры на обсуждаемые здесь процессы затруднителен.

Дополнительно следует указать, что изложенные выше соображения и соответствующие приемы анализа допускают значительное развитие как в сторону детализации обсуждаемых физических механизмов, так и в направлении расширения круга изучаемых объектов.

Литература

1. Плешивец, Н. В. Катодное распыление [Текст] / Н. В. Плешивец. – М.: Атомиздат, 1968. – 343 с.
2. Гудман, Ф. Динамика рассеяния газа поверхностью [Текст] / Ф. Гудман, Г. Вахман. – М.: Мир, 1980. – 409 с.
3. Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел [Текст] / под ред. Е. С. Машиковой. – М.: Мир, 1989. – 389 с.
4. Долгов, А. С. Рассеяние атомов на шероховатой поверхности ступенчатого профиля [Текст] / А. С. Долгов, А. А. Гетьман // Физическая инженерия поверхности. – 2010. – № 3. – 249 с.
5. Долгов, А. С. Кинетика миграции взаимодействующих атомов в кристаллической решетке [Текст] / А. С. Долгов, В. Н. Остроушко // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – № 4(10). – С. 1515-1521.
6. Лифшиц, Е. М. Физическая кинетика [Текст] / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
7. Долгов, А. С. Кинетика распыления поверхностей медленными атомными частицами [Текст] / А. С. Долгов // Укр. физ. журнал. – № 5. – С. 759-764.
8. Старк, Д. П. Диффузия в твердых телах [Текст] / Д. П. Старк. – М.: Мир, 1980. – 240 с.
9. Лифшиц, В. Г. Поверхность твердого тела и поверхностные фазы [Текст] / В. Г. Лифшиц // Соровский образовательный журнал. – 1995. – № 1. – 99 с.
10. Латышев, А. В. Многоатомные ступени на поверхности кремния [Текст] / А. В. Латышев, А. Л. Асеев // Укр. физ. журнал. – 1998. – № 10. – С. 1117-1127.
11. Бондаренко, В. Б. Кинетика десорбции из адсорбированных слоев, образованных двумерными островками и двумерным газом [Текст] / В. Б. Бондаренко, М. В. Кузьмин, М. А. Митцев // Физика твердого тела. – 2001. – Вып. 6, № 43. – С. 1122-1134.
12. Пугина, Е. В. Влияние температуры на распыление поверхностных металлических кластеров [Текст] / Е. В. Пугина, В. Г. Корнич, Г. Бетц // Физика твердого тела. – 2007. – Вып. 3, № 49. – С. 552-556.

Рецензент: д-р техн. наук, проф., проф. каф. технологии машиностроения и металлорежущих станков С. С. Добротворский, Национальный технический университет «ХПИ», Харьков, Украина.

АНАЛІЗ ВПЛИВУ ЕВОЛЮЦІЇ МІКРОСКОПІЧНОГО РЕЛЬЄФУ ПОВЕРХНІ НА МЕХАНІЗМ І ІНТЕНСИВНІСТЬ РУЙНУЮЧИХ ФАКТОРІВ

А. С. Долгов, Д. А. Оранська, А. І. Оранський

Теоретично вивчається вплив еволюції мікроскопічного рельєфу поверхні в процесі впливу різних руйнуючих факторів на їх механізм і інтенсивність руйнування. Основну увагу приділено розпорощенню поверхні при бомбардуванні повільними атомами. Вказано особливості застосування отриманих рівнянь як при інтенсивному нагріванні поверхні (сублімації), так і при спільному впливі високої температури і атомного бомбардування (температурно-стимульоване розпилення). Показано правомірність використання аналізу моделі пошарового розпилення з урахуванням атомних сходинок на поверхні і ізольованих плям, що належать іншим атомним шарам.

Ключові слова: мікроскопічний рельєф поверхні, теорія розпилення повільними атомами.

ANALYSIS OF THE INFLUENCE OF EVOLUTION OF MICROSCOPIC SURFACE RELIEF ON MECHANISM AND INTENSITY DESTRUCTIVE FACTORS

A. S. Dolgov, D. A. Oranska, A. I. Oranskiy

Theoretically studied the effect of the evolution of the microscopic surface topography during the impact of various factors on their destructive mechanism and intensity of destruction. Emphasis is placed on the surface of the spray in the bombardment of slow atoms. Peculiarities of application of the derived equations as in intensive heating surface (sublimation), and under the combined action of high temperature and the atomic bombing (temperature-stimulated sputtering). Shows the validity of using stratified analysis model based on sputtering atomic steps on the surface and isolated spots belonging to other atomic layers.

Keywords: microscopic surface relief, the theory of slow sputtering atoms.

Долгов Анатолий Сергеевич – канд. физ.-мат. наук, доц., доцент кафедры двигателей и энергоустановок летательных аппаратов, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков, Украина.

Оранская Дарья Анатольевна – аспирант кафедры физики, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков, Украина, e-mail: oranskaya.darya@yandex.ua.

Оранский Анатолий Иванович – д-р техн. наук, проф., профессор межотраслевого научно-технического центра космической энергетики и двигателей (МНТЦ КЭД), Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков, Украина.