

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ Si ПРИ РАСПЫЛЕНИИ ИОНАМИ Ar<sup>+</sup>

*Д.О. Харченко, В.О. Харченко*

*Институт прикладной физики НАН Украины, Сумы, Украина*

*E-mail: dikh@ipfcentr.sumy.ua*

Проведено численное моделирование изменения морфологии поверхности кремния при распылении ионами аргона. На основе совместного использования процедуры Монте-Карло и континуального подхода установлена диаграмма устойчивости поверхностных структур, имеющих наноразмерный масштаб. Выявлены скейлинговые характеристики длины волны структур при выборе их ориентации. Получены значения показателя роста, продольного и поперечного показателей шероховатости в областях диаграммы устойчивости, отвечающих различным типам структур.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время особую актуальность приобретают задачи, связанные с изучением взаимодействия пучков заряженных частиц с веществом. Это обусловлено, в первую очередь, с практическим решением ряда проблем стабильности фаз материалов, находящихся в условиях облучения [1]. Среди таких задач обычно выделяют исследования процессов в объеме, на поверхности или в приповерхностных слоях. В данной работе внимание уделено процессам, протекающим в приповерхностных слоях и на поверхности.

Следует отметить, что использование технологий на основе облучения образцов ионными пучками в интервале энергий от 0.1...2 кэВ позволяет продуцировать структуры наноразмеров на поверхности мишени. Эти наноструктуры эффективно используются в современной электронике. Поэтому изучение особенностей их формирования на поверхности различных материалов представляет одно из перспективных направлений современной физики. На протяжении последних двух десятилетий экспериментально было установлено, что наноразмерные образования при ионном распылении могут быть обнаружены в аморфных материалах ( $SiO_2$ ) [2], металлах ( $Ag$ ) [3], ( $Cu$ ) [4], полупроводниках ( $Ge$ ,  $Si$ ) [5-8] и т. д. Ранее было показано, что при ионном распылении формируются волновые структуры (ripples), характеризующиеся размерами от 0.1 до 1 мкм и наноструктуры (nanodots/nanoholes) с линейным размером от 35 до 250 Å [9].

Известно, что изменение угла распыления приводит к переориентации волновых структур. Такая переориентация может быть управляема энергией ионного пучка [10, 11]. Помимо существующих методов молекулярной динамики и кинетического Монте-Карло удобным и приемлемым подходом является метод, развитый в работах Бредли и Харпера [12], на основе теории об изменении морфологии поверхности Кардара-Паризи-Жанга [13], Вольфа-Виллиана [14], Курамото-Сивашинского [15]. В рамках этих подходов были установлены основные механизмы формирования структур на поверхности материала. Эти модели были обобщены с учетом флуктуаций

энергий ионов в пучке, а также флуктуаций угла распыления. Было выяснено, что если первые обеспечивают статистическое описание процесса формирования структур, то вторые способны критическим образом повлиять на изменение морфологии поверхности облучаемого материала и кинетику самого процесса структурообразования [16]. Однако основные усилия были сконцентрированы на исследовании решений уравнений типа Курамото-Сивашинского, принципиально объясняющих природу формирования структур на поверхности облучаемого материала.

В данной работе внимание уделяется применению континуальной теории, состоящей в самосогласованном соответствии с моделированием Монте-Карло, к формированию поверхностных структур нанометрового масштаба при распылении кремния ионами аргона. Этот процесс протекает в анизотропной системе и сопровождается образованием «дырочных» и полосовых структур с размерами от 10 до 500 нм. В рамках использования двухуровневой схемы описания формирования структур нами будут установлены области основных параметров системы, сводящихся к энергии пучка и углу распыления, в которых реализуются различные типы структур и их переориентация. При анализе скейлингового поведения длины волны образующихся структур будет показано, что существует два типа скейлинга на больших и малых энергиях ионного пучка, связанных с переориентацией структур. Кроме того, будет проанализирована динамика образования наноструктурных выделений и установлены масштабно-инвариантные законы роста поверхности и изменения ее шероховатости.

Структура работы является следующей. В разд. 2 представлена основная континуальная модель в рамках модели Бредли-Харпера. В разд. 3 на основе использования методов кинетического Монте-Карло и континуального подхода проводится анализ изменения морфологии поверхности кремния при распылении ионами аргона. Здесь обсуждаются основные результаты относительно устойчивости структур и скейлинговых соотношений. Выводы собраны в разд. 4.

## 2. МОДЕЛЬ

Для количественного анализа изменения морфологии поверхности при ионном распылении рассмотрим поверхность, каждая точка которой описывается радиусом-вектором  $\mathbf{r}$ . Изменение высоты поверхности во времени  $t$  будем характеризовать полем  $z = h(\mathbf{r}, t)$ . Для описания его динамики обычно используется континуальный подход, основанный на теории Брэдли-Харпера [12], которая позже получила развитие в работах Цуэрно и Барабаши [10].

В рамках обобщенного геометрического подхода полагается, что направление ионного пучка совпадает с плоскостью  $x-z$  при угле распыления  $\theta \in [0, \pi/2]$  от нормали незеродированной поверхности. Тогда распределение приходящей энергии вследствие проникновения иона в глубь образца имеет гауссовский вид [12]:

$$E(\mathbf{r}) = E / \left( (2\pi)^{3/2} \sigma \mu^2 \right) \exp(-z^2/2\sigma^2 - (x^2 + y^2)/2\mu^2),$$

где  $E$  соответствует кинетической энергии налетающих ионов,  $\sigma$  и  $\mu$  задают ширину распределения в параллельном и перпендикулярном направлениях по отношению к падающему пучку. Параметры  $\sigma$  и  $\mu$  зависят от свойств мишени и энергии ионов в пучке. Скорость эрозии  $v = p \int_{\mathbb{R}} d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{r}) E(\mathbf{r})$  определяется величиной

$$\Phi(x, y, h) = J \cos \left( \arctan \left[ \sqrt{(\nabla_x h)^2 + (\nabla_y h)^2} \right] \right),$$

играющей роль поправки к локальному наклону равномерного потока  $J$  [17], материальная константа  $p = 3/(4\pi^2)(NU_0C_0)^{-1}$  задается поверхностной энергией связи, атомной плотностью мишени  $N$  и константой  $C_0$ , пропорциональной квадрату эффективного радиуса потенциала межчастичного взаимодействия [17-19]. Динамика поля высоты задается уравнением

$$\partial_t h \approx -v(\theta - \nabla_x h, \nabla_x^2 h, \nabla_y^2 h) \quad [10-13, 20].$$

В линейном случае приходим к уравнению вида  $\partial_t h = -v_0 + \gamma \nabla_x h + v_x \nabla_x^2 h + v_y \nabla_y^2 h$ , где  $v_0$  – скорость эрозии поверхности;  $\gamma = \gamma(\theta)$  – константа, описывающая эрозию, зависящую от наклона;  $v_{x,y} = v_{x,y}(\theta)$  – поверхностные натяжения вдоль каждого из направлений. При наличии эффектов, связанных с поверхностной диффузией, это уравнение дополняется составляющей  $-\nabla \cdot \mathbf{j}_s$ , где диффузионный поток  $\mathbf{j}_s = K \nabla(\nabla^2 h)$  определяется коэффициентом  $K > 0$ , зависящим от температуры в виде  $K = D_s \kappa \rho / n^2 T$ ,  $D_s = D_0 e^{-E_a/T}$  – коэффициент поверхностной диффузии;  $E_a$  – энергия активации,  $\kappa$  – поверхностная свободная энергия;  $\rho$  – поверхностная плотность диффундирующих атомов;  $n$  – число атомов на единицу объема мишени.

В результате предположения о гладкости изменяющейся поверхности при учете нелинейных

составляющих в исходном разложении приходим в общем случае к анизотропному уравнению Курамото-Сивашинского для  $h' = h + v_0 t$  в виде [10,12]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \frac{\partial h}{\partial x} + v_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + v_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \quad (1)$$

$$+ \frac{\lambda_x}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \frac{\lambda_y}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 - K \nabla^4 h + \xi(x, y, t),$$

где штрих опущен для удобства. В уравнении (1) учтена стохастичность налетающих ионов на поверхность образца, описываемая случайной дельта-коррелированной компонентой, обладающей гауссовыми свойствами:

$$\begin{aligned} \langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle &= 0, \\ \langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle &= 2J \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (2)$$

Коэффициенты в (1) характеризуются глубиной проникновения ионов  $a$ , шириной распределения энергии и углом распыления [10]:

$$\gamma = F_0 \frac{S}{f^2} \left\{ a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2 (a_\sigma^2 - 1) - a_\sigma^4 s^2 \right\}; \quad (3)$$

$$\begin{aligned} v_x &= F_0 a \frac{a_\sigma^2}{2f^3} \left\{ 2a_\sigma^4 s^4 - a_\sigma^4 a_\mu^2 s^2 c^2 \right. \\ &\quad \left. + a_\sigma^2 a_\mu^2 s^2 c^2 - a_\mu^4 c^4 \right\}; \end{aligned} \quad (4)$$

$$v_y = -F_0 a \frac{c^2 a_\sigma^2}{2f}; \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \lambda_x &= F_0 \frac{c}{2f^4} \left\{ a_\sigma^8 a_\mu^2 s^4 (3 + 2c^2) \right. \\ &\quad \left. + 4a_\sigma^6 a_\mu^4 c^4 s^2 - a_\sigma^4 a_\mu^6 c^4 (1 + 2s^2) \right. \\ &\quad \left. - f^2 (2a_\sigma^4 s^2 - a_\sigma^2 a_\mu^2 (1 + 2s^2)) - a_\sigma^8 a_\mu^4 c^2 s^2 - f^4 \right\}; \end{aligned} \quad (6)$$

$$\lambda_y = F_0 \frac{c}{2f^2} \left\{ a_\sigma^4 s^2 + a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2 - a_\sigma^4 a_\mu^2 c^2 - f^2 \right\}. \quad (7)$$

В указанных выражениях используются следующие константы:

$$F_0 \equiv \frac{J E \rho a}{\sigma \mu \sqrt{2\pi f}} \exp \left( \frac{-a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2}{2f} \right); \quad (8)$$

$$\begin{aligned} a_\sigma &\equiv \frac{a}{\sigma}, & a_\mu &\equiv \frac{a}{\mu}, \\ s &\equiv \sin(\theta), & c &\equiv \cos(\theta), \\ f &\equiv a_\sigma^2 s^2 + a_\mu^2 c^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Для дальнейшего анализа необходимым является знание параметров, определяющих тип материала мишени, температуры, потока ионов, угла распыления и энергии ионного пучка.

### 3. ИЗМЕНЕНИЕ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ Si ПРИ ИОННОМ РАСПЫЛЕНИИ

В задаче об изменении структуры поверхности конкретного материала мишени такие величины, как глубина проникновения и ширина распределения энергии ионов в продольном и поперечном направлениях к пучку могут быть рассчитаны методами молекулярной динамики или Монте-Карло. Эта процедура реализована в пакете прикладных программ TRIM. Поскольку, с точки зрения эксперимента, управляющими являются параметры, связанные с энергией ионного пучка, характеристиками потока и углом распыления, поэтому в последующем результаты будут представлены в отношении изменения энергии пучка и угла распыления. В численном моделировании образец кремния будем облучать ионами  $Ar^+$ . При этом считаем плотность потока и температуру постоянными заданными величинами:  $J = 43.7 \text{ ион/нм}^2\text{с}$ ,  $T = 550 \text{ К}$ . Для чистого кремния параметр решетки  $a_{si} = 0.5437 \text{ нм}$ , энергию связи будем считать величиной порядка свободной энергии  $U_0 \approx \kappa = 7.7 \text{ эВ/нм}^2$ , и примем  $C_0 \approx 0.29 \text{ нм}$ ,  $N = 25 \text{ атом/нм}^3$ , коэффициент распыления положим равным  $Y_0 = 1.76 \text{ атом/ион}$  во всех последующих экспериментах (точные вычисления для угла  $\theta = 0^\circ$  дают  $Y_0 = 2 \text{ атом/ион}$ , при  $\theta = 67^\circ$  имеем  $Y_0 = 0.92 \text{ атом/ион}$ ). Оценка, проведенная в работе [21], дает  $K = C^{-1} \cdot 8.49 \cdot 10^3 \text{ нм}^4/\text{с}$ , где  $C = 0.04$  учитывает 4% покрытие поверхности.

Результаты моделирования пакетом TRIM проникновения ионов  $Ar^+$  в глубь образца кремния при  $\theta = 0^\circ$  приведены на рис. 1.

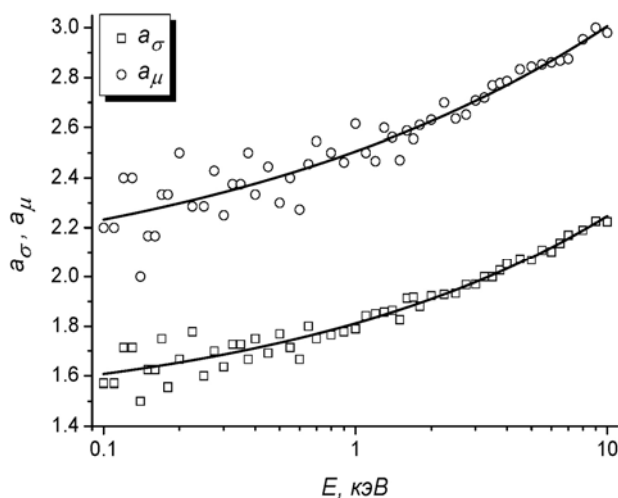


Рис. 1. Зависимость безразмерных глубин проникновения ионов  $Ar^+$  в образец Si

Интервал энергий ограничен экспериментально реализуемыми значениями  $E \approx 0.1 \dots 10 \text{ кэВ}$  для кремниевой мишени. Из рисунка видно, что с

ростом энергии облучения безразмерные глубины  $a_\mu$  и  $a_\sigma$  растут по степенному закону, что уже предполагает отклонения от стандартной теории Бредли-Харпера, где полагается прямо пропорциональный рост указанных величин.

Результаты моделирования Монте-Карло далее в виде мультимасштабной схемы используются в континуальном модифицированном подходе Бредли-Харпера. В частности, по полученным зависимостям  $a_\mu$  и  $a_\sigma$  рассчитывается диаграмма устойчивости решений. Для этого анализируются изменения знака параметров  $\nu_x$ ,  $\nu_y$ ,  $\lambda_x$  и  $\lambda_y$ .

Поскольку  $\nu_x$  и  $\nu_y$  характеризуют устойчивость решения  $\langle h \rangle = A \exp(i[k_x x + k_y y - \omega t] + rt)$  линейризованного уравнения (1) для среднего, где частота  $\omega$  и параметр устойчивости  $r$  задаются выражениями

$$\begin{aligned} \omega &= -\gamma(\theta)k_x, \\ r &= -\nu_x(\theta)k_x^2 - \nu_y(\theta)k_y^2 - K(k_x^2 + k_y^2)^2, \end{aligned} \quad (10)$$

то, очевидно, что их отрицательные значения определяют неустойчивости в соответствующем направлении.

Из (5) вытекает, что  $\nu_y < 0$ , т.е. неустойчивость вдоль этого направления существует всегда. Вклад нелинейных компонент уравнения (1) характеризует эффекты, проявляющиеся на поздних стадиях распыления, и отвечает локальным изменениям формы поверхности в присутствии уже существующих неустойчивостей. Величина  $K$  дает стабилизирующий вклад в структуру поверхности.

Диаграмма устойчивости в плоскости  $(E, \theta)$  приведена на рис. 2. При переходе через штрихпунктирную линию величина  $\nu_x$  меняет знак. Таким образом, на ранних стадиях (в линейном режиме) в области малых углов (А) неустойчивость поверхности проявляется как в одном, так и в другом направлениях. В области больших углов (Е) неустойчивость в линейном режиме сохраняется только вдоль направления Y. Локальные изменения на больших временах проявляются при пересечении сплошной линии, отвечающей изменению знака параметра нелинейности  $\lambda_x$ . Штриховая линия разделяет области, в которых параметры  $\nu_x$  и  $\nu_y$  различаются по величине. Типичные структуры, реализуемые в областях А-Е, показаны на рис. 2 вверху. Видно, что в областях А и В реализуются островковые структуры типа «дыр» (holes), разделенные узкими перегородками. Вытянутость структур вдоль одного из двух направлений определяется тем, какая из величин  $\nu_x$  или  $\nu_y$  имеет меньшее значение. В области Е вследствие положительности  $\nu_x$  стабильность структур сохраняется вдоль X-направления, поэтому реализуемые структуры представляют полоски (ripples), ориентированные вдоль этого направления.

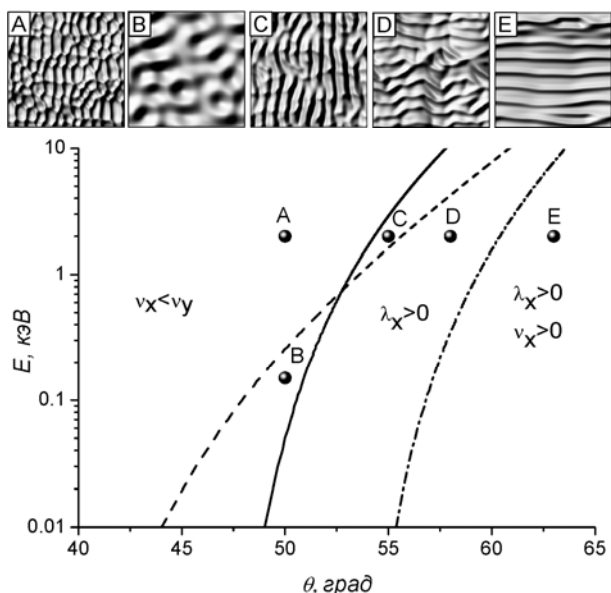


Рис. 2. Диаграмма устойчивости и типичные структуры, реализуемые в областях диаграммы

В областях С и D по сравнению с областями А и В знак множителя  $\lambda_x$ , задающего нелинейные эффекты вдоль X-направления, противоположен знаку  $\lambda_y$ . Это приводит к тому, что неустойчивые в линейном приближении структуры вдоль обоих пространственных направлений претерпевают локальные изменения только вдоль Y-направления. В связи с этим структуры имеют вид деформированных полос. Полученная картина согласуется с результатами экспериментальных исследований [22], где установлена соответствующая фазовая диаграмма в линейном режиме при распылении Si(001) ионами аргона с указанными выше параметрами пучка. Однако область реализации устойчивой плоской поверхности в исследуемой теоретической модели не наблюдается в связи с тем, что параметр  $v_y$  всегда отрицателен.

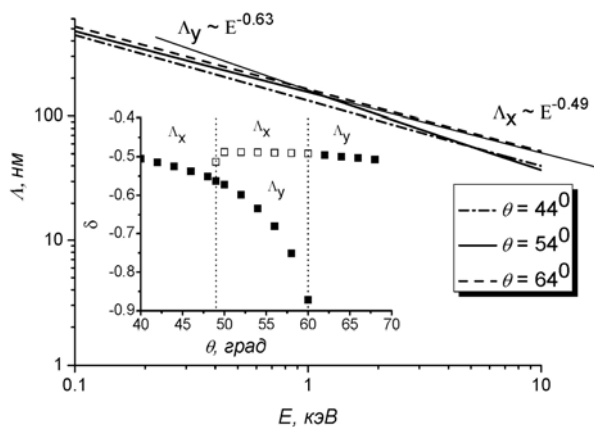


Рис. 3. Зависимость длины волны структуры выбранной ориентации от энергии пучка. На вставке указана зависимость показателя степенной асимптотики  $\Lambda \propto E^\delta$  в зависимости от угла распыления

Из стандартной теории известно, что в зависимости от значений  $v_x$  и  $v_y$  в системе реализуется выбор структур в соответствующем направлении. Длина волны структур в X- или Y-направлениях задается выражением:

$$\Lambda_{x,y} = 2\pi\sqrt{K/|v_{\min x,y}|}, \quad (11)$$

где  $v_{\min x,y} = \min(v_x, v_y)$ . Соответствующие

зависимости длины волны выбранных структур при различных углах распыления приведены на рис. 3. Из него видно, что длина волны степенным образом спадает с ростом энергии ионов и характеризуется нанометровым диапазоном от 50 до 500 нм, что соответствует экспериментальным данным по распылению Si ионами Ar<sup>+</sup>. В области малых и больших углов распыления имеем линейную зависимость в двойных логарифмических осях. Однако в области диаграммы устойчивости (см. рис. 2), когда пересекается штриховая линия, наблюдается смена ориентации структур в направлении меньшего  $v_x$  или  $v_y$  – зависимость

$\Lambda(E)$  (см. рис. 3) претерпевает излом. Таким образом, здесь при малых энергиях структуры ориентированы вдоль X-направления, а при больших энергиях наблюдается ориентация вдоль Y-направления. В соответствии с результатами, представленными на рис.1, и анализом выбранных по ориентации структур при малых энергиях наблюдается спадание длины волны с ростом энергии с одним показателем, а при больших энергиях с другим. В общем случае можно записать  $\Lambda \propto E^\delta$ , где показатель  $\delta$  определяется как угол наклона зависимости  $\Lambda(E)$  до излома и после него. Результаты вычислений приведены на вставке рис. 3. Из нее следует, что при малых углах распыления показатель  $\delta$  сводится к значению -0.5. Однако с ростом угла его величина падает. В области углов, где реализуется смена ориентации структур, имеем два значения для  $\delta$ : на малых энергиях асимптотика длины волны близка к  $\Lambda \propto E^{-1/2}$  (структуры ориентированы вдоль Y-направления), на повышенных энергиях существенное отклонение от теоретически предсказанной асимптотики с  $\delta \in [-0.5, -1]$  для структур с ориентацией вдоль X-направления. В области больших углов также наблюдается асимптотика  $\Lambda \propto E^{-1/2}$ . Такие отклонения связываются с нелинейным характером зависимости безразмерных глубин проникновения от энергии (см. рис. 1). Следует отметить, что в зависимости от потока и температуры длина волны выбранной структуры имеет известные асимптотики:  $\Lambda \propto J^{-1/2}$ ,  $\Lambda \propto T^{-1/2} \exp(-E_a/2T)$ .

Рассмотрим динамику изменения морфологии поверхности. Для этого проанализируем область А диаграммы на рис. 2, где реализуются островки «дырок». Исследуем сначала изменение количества таких островков со временем.

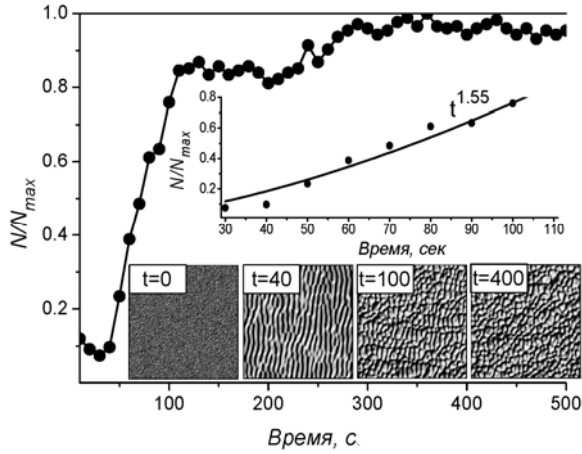


Рис. 4. Изменение количества «дырочных» островков при  $E=2$  кэВ,  $\theta = 50^\circ$  и временные срезы поверхности

Для этого поверхность  $h(x, y)$  в каждый момент времени разрезалась на среднем уровне высоты, при этом вычислялось количество островков и их средняя площадь. Считая форму такого выделения сферической, определяли средний радиус выделения. Типичное изменение числа островков со временем и эволюция поверхности показаны на рис. 4. Видно, что поверхность, изначально имеющая гауссов профиль (начальные условия), меняет свою морфологию вследствие образования «дырочных» структур. Количество островков  $N(t)$ , отнесенное к максимальному значению  $N_{\max}$ , сначала растет по степенному закону  $N(t) \propto t^{1.55}$  (стадия роста структур), а затем их среднее количество не меняется со временем (стационарный режим). Характерный средний размер  $\langle R \rangle$  (радиус) островков на временах порядка 80 мин, в зависимости от энергии представлен на рис. 5. Поскольку  $\langle R \rangle$  связан с длиной волны  $\Lambda$  прямо пропорционально и  $\langle R \rangle \leq \Lambda/2$ , то  $\langle R \rangle$  спадает с ростом энергии аналогично зависимостям на рис. 3.

Рассмотрим далее скейлинговые характеристики роста поверхности и характеристики ее шероховатости. Для этого проанализируем корреляционную функцию высоты  $C_h(\mathbf{r}, t) = \langle (h(\mathbf{r} + \mathbf{r}', t) - h(\mathbf{r}', t))^2 \rangle$ . В рамках гипотезы масштабной инвариантности ее можно представить в виде

$$C_h(\mathbf{r}, t) = 2W^2(t)\phi\left(\frac{r}{\zeta(t)}\right), \quad (12)$$

где  $W^2 = \langle (h(\mathbf{r}) - \langle h(\mathbf{r}) \rangle)^2 \rangle$ ,  $W$  – ширина поверхности раздела;

$$\phi(u) \approx \begin{cases} u^{2\alpha}, & \text{при } u \ll 1, \\ \text{const}, & \text{при } u \gg 1. \end{cases} \quad (13)$$

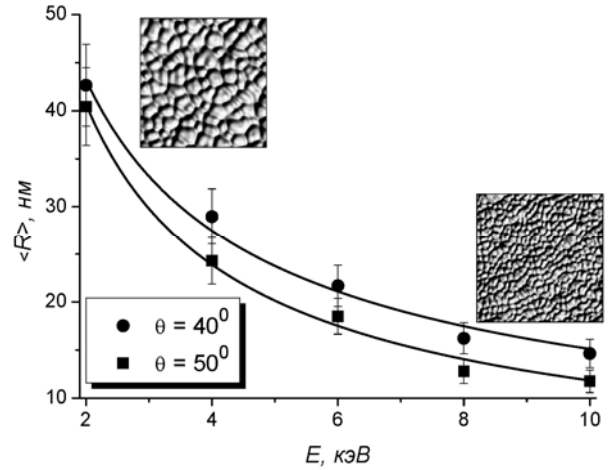


Рис. 5. Зависимость среднего размера островков от энергии ионов в стационарном режиме

В рамках этой гипотезы предполагается  $C_h(\mathbf{r}, t) \approx 2W^2(t)[1 - \exp[-(r/\zeta)^{2\alpha}]$  [23], а следовательно, возможно существование таких асимптотик:  $W^2(t) \propto t^{2\beta}$ ,  $\zeta(t) \propto t^{1/z}$ , где  $\beta$  – показатель роста,  $z = \alpha/\beta$  – динамический показатель. С другой стороны, можно предположить [24]:

$$C_h(\mathbf{r}, t) = r^{2\alpha}\psi\left(\frac{t}{r^z}\right), \quad (14)$$

где

$$\psi(v) \approx \begin{cases} v^{2\beta}, & \text{при } v \ll 1, \\ \text{const}, & \text{при } v \gg 1. \end{cases} \quad (15)$$

Таким образом, приходим к скейлинговым соотношениям:  $C_h(t) \propto t^{2\beta}$ ,  $C_h(r) \propto r^{2\alpha}$ , позволяющим определить показатели роста  $\beta$  и шероховатости  $\alpha$ .

В работе [16] было показано, что показатель роста на стадиях роста может существенно изменяться на разных временных интервалах, при этом показатель шероховатости не испытывает сильных изменений во времени. На больших временах  $\beta$  достигает стационарного значения. В анизотропных системах он может достигать аномально больших значений на стадиях роста [25]. С практической точки зрения, важным является анализ роста поверхности на истинно масштабно-инвариантном интервале, соответствующем большим временам. Поэтому далее определим  $\beta$  в разных областях диаграммы устойчивости (см. рис. 2) на временах, отвечающих стационарному режиму. Также следует отметить, что поскольку образуемые структуры являются анизотропными, то уместно использовать два показателя шероховатости: вдоль X- и Y-направлений [26]. Значения показателей роста и шероховатости в длинноволновом пределе при выбранном уровне энергии  $E=2$  кэВ приведены в таблице. Из нее видно, что в области  $v_x < v_y$  реализуется соотношение  $\alpha_x > \alpha_y$ , поскольку структуры ориентированы вдоль Y-направления. В

областях  $v_x > v_y$  имеем  $\alpha_x < \alpha_y$  вследствие ориентации структур вдоль X-направления.

Значения показателей шероховатости и роста

$\theta$ , град	$\alpha_x$	$\alpha_y$	$\beta$
50	0.90	0.82	0.23
55	0.94	0.90	0.22
58	0.90	0.95	0.21
63	0.89	0.99	0.17

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе численного моделирования с использованием методов Монте-Карло и континуального подхода Бредли-Харпера проанализирована кинетика формирования наноразмерных структур на поверхности кремния при облучении ионами аргона. В рамках использованной модели установлено, что в такой системе возможными являются поверхностные структуры, представляющие островки «дырок» и полосовые структуры. Выяснено, что с изменением угла распыления переориентация структур приводит к изменению скейлинговой характеристики зависимости длины волны от энергии ионов. При исследовании динамики образования островков установлено, что на временных масштабах зарождения реализуется степенной рост, на больших временах количество островков является постоянной величиной. При анализе скейлинговых характеристик корреляционной функции поля высоты получены значения показателя роста, продольного и поперечного показателей шероховатости. Установлено, что соотношения между продольным и поперечным показателями шероховатости определяются соотношениями между соответствующими поверхностными натяжениями. Полученные в работе результаты согласуются с известными экспериментальными данными по распылению кремния ионами аргона в приведенном интервале энергий, температур и плотности пучка.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. В.Н. Воеводин, И.М. Неклюдов. *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов*. К.: «Наукова думка», 2006.
2. T.M. Mayer, E. Chason, A.J. Howard // *J. Appl.*

- Phys.* 1994, v. 76, p. 1633-1643.
3. S. Rusponi, C. Baragno, U. Valbusa // *Phys. Rev. Lett.* 1997, v. 78, p. 2795-2798.
4. S. Rusponi, G. Costantini, C. Boragno, U. Valbusa // *Phys. Rev. Lett.* 1998, v. 81, p. 2735-2738.
5. E. Chason, T.M. Mayer, B.K. Kellerman, et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1994, v. 72, p. 3040-3043.
6. J. Erlebacher, M.J. Aziz, E. Chason, et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1999, v. 82, p. 2330-2333.
7. W.-Q. Li, L.J. Qi, X. Yang, et al. // *Appl. Surf. Sci.* 2006, v. 252, p. 7794-7800.
8. W.J. MoberlyChan, D.P. Adams, M.J. Aziz, et al. // *MRS Bulletin.* 2007, v. 32, p. 424-432.
9. S. Facsko, T. Dekorsy, C. Koerdt, et al. // *Science.* 1999, v. 285, p. 1551-1553.
10. R. Cuerno, A.-L. Barabasi // *Phys. Rev. Lett.* 1995, v. 74, p. 4746-4749.
11. M. Makeev, A.-L. Barabasi // *Appl. Phys. Lett.* 1997, v. 71, p. 2800-2802.
12. R.M. Bradley, J.M.E. Harper // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 1988, v. 6, p. 2390-2395.
13. M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang // *Phys. Rev. Lett.* 1986, v. 56, p. 889-892.
14. D.E. Wolf, J. Villian // *Europhys. Lett.* 1990, v. 13, p. 389-394.
15. Y. Kuramoto, T. Tsuzuki // *Prog. Theor. Phys.* 1976, v. 55, p. 356-369.
16. D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, I.O. Lysenko, S.V. Kokhan // *Phys. Rev. E.* 2010, v. 82, p. 061108(13).
17. M.A. Makeev, A.-L. Barabasi // *NIMB.* 2004, v. 222, p. 316-334.
18. P. Sigmund // *J. Matter. Sci.* 1973, v. 8, p. 1545.
19. P. Sigmund // *Phys. Rev.* 1969, v. 184, p. 383-416.
20. J.W. Cahn, J.E. Taylor // *Acta Metall. Matter.* 1994, v. 42, p. 1045-1063.
21. J. Erlebacher, M. Aziz, E. Chason, et al. // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 2000, v. 18, p. 115-120.
22. C.S. Madi, B. Davidovich, H. Bola George, et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2008, v. 101, p. 246102(4).
23. S.K. Sinha, E.B. Sirota, S. Garott, H.B. Stanley // *Phys. Rev. B.* 1988, v. 38, p. 2297-2311.
24. L. Giada, A. Giacometti, M. Rossi // *Phys. Rev. E.* 2002, v. 65, p. 036134(11).
25. V.O. Kharchenko // *Functional materials* (be published).
26. A. Keller, R. Cuerno, S. Facsko, W. Moller // *Phys. Rev. B.* 2009, v. 79, p. 115437(7).

Статья поступила в редакцию 17.02.2011 г.

#### МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІНИ МОРФОЛОГІЇ ПОВЕРХНІ Si ПРИ РОЗПИЛЕННІ ІОНАМИ Ar<sup>+</sup>

Д.О. Харченко, В.О. Харченко

Проведено числове моделювання зміни морфології поверхні кремнія при розпиленні іонами аргона. На підґрунті сумісного використання процедури Монте-Карло та континуального підходу встановлено діаграму стійкості поверхневих структур, які мають нанорозмірний масштаб. З'ясовано скейлінгові характеристики довжини хвилі структур при виборі їх орієнтації. Отримано значення показника росту, поздовжнього та поперечного показників шорсткості в областях діаграми стійкості, що відповідають різним типам структур.

#### MODELING MORPHOLOGY CHANGE FOR Si SURFACE AT Ar<sup>+</sup> ION SPUTTERING

D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko

We study morphology change of silicon surface at sputtering by argon ions. Using both Monte-Carlo and continual approach a stability diagram for surface patterns having nano-scale range is calculated. We have obtained scaling characteristics for wave-length of patterns when they change their orientation. Scaling exponents characterizing growth processes and both lateral and longitudinal roughness are obtained for domains of the stability diagram related to different kind of patterns.