

ВАКАНСИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ ЭВОЛЮЦИИ КРИСТАЛЛОВ И ТОНКИХ ПЛЁНОК ПОД ВЛИЯНИЕМ ВНЕШНЕЙ НАГРУЗКИ

VACANCY MECHANISMS OF EVOLUTION OF CRYSTALS AND THIN FILMS UNDER THE INFLUENCE OF EXTERNAL LOAD

А.В.Редьков / avredkov@gmail.com

С.А.Кукушкин / sergey.a.kukushkin@gmail.com

A.V.Redkov, S.A. Kukushkin

Институт Проблем Машиноведения РАН, Санкт-Петербург

В работе рассмотрена эволюция поверхности кристаллов и тонких пленок под воздействием потока частиц и механической нагрузки. Возникновение неустойчивости на плоской поверхности кристалла может вызвано наличием вакансий в объеме кристалла, которые диффундируют к поверхности кристалла или к микропорам в его объеме. Показано, что описанный эффект может вызывать появление шероховатости и волнистости на поверхности кристалла с характерными масштабами, определяемыми свойствами потока частиц. Получено аналитическое выражение для критерия возникновения неустойчивости и описаны различные последствия развития неустойчивости. Результаты могут быть использованы для оценки условий роста тонких плёнок, при которых поверхность устойчива к возникновению шероховатости по вакансионному механизму. Также исследована эволюция микропор, содержащихся в объеме кристалла, под воздействием растягивающих механических напряжений.

The paper considers the evolution of crystal surface and thin films under the influence of a flow of particles and mechanical load. The appearance of instability of flat surface may be caused by the presence of vacancies in the bulk of the crystal, which can diffuse to the surface or to micropores in the bulk crystal. It is shown that the described effect can cause the appearance of roughness and waviness on the crystal surface with characteristic scales determined by the particle flow. An analytical expression is obtained for the criterion for the occurrence of instability. The results can be used to assess the growth conditions of thin films under which the surface is resistant to roughness by the vacancy mechanism. Evolution of pores in the bulk crystal under tensile stress is also studied.

Ключевые слова: *вакансия, кристалл, пора, разрушение, морфологическая неустойчивость*

Keywords: *vacancy, crystal, pore, destruction, morphological instability*

ВВЕДЕНИЕ

Ввиду широкого применения различных кристаллических покрытий и тонких пленок в промышленности и технологии, представляется важным изучение процессов, которые приводят к изменению их морфологии и разрушению. Подобные процессы могут проходить вследствие различных внешних факторов: нагрева, лазерного излучения, механической нагрузки. Помимо перечисленных факторов, в вакуумно-физических установках большую роль также могут играть пучки ионов, молекул, или иных частиц, падающих на поверхность. Их исследованию также посвящено большое количество работ [1,2] Отметим, что при изучении воздействия пучка частиц на поверхность обычно рассматривают частицы высоких энергий, в диапазоне 0.1 - 100 кЭв [3], которые значительно превышают энергии связей в кристалле (единицы эВ). Выбор этого диапазона обусловлен тем, что при столкновении таких частиц с поверхностью эффективно происходит нагрев, «выбивание» атомов из поверхности [3], образование в объеме

различных дефектов и др. Однако, в [4] было показано, что и низкоэнергетичные частицы могут оказывать существенное влияние на морфологию поверхности. Так в [4] было продемонстрировано, что под действием потока частиц с низкой энергией, сопоставимой с энергией активации миграции вакансий (доли-единицы эВ), может происходить дрейф вакансий к поверхности к месту падения пучка за счет последовательных перескоков, вызванных вакансионно-фононным взаимодействием (рис. 1). Такой механизм может привести к постепенному изменению рельефа поверхности даже при эффективном охлаждении образца и малых интенсивностях пучка.

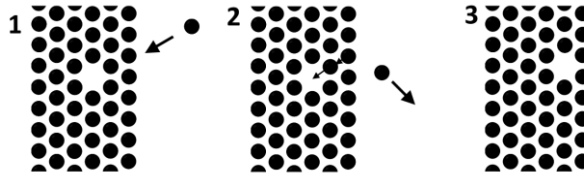


Рис.1. Фононный механизм дрейфа вакансий к поверхности кристалла под воздействием падающих частиц, предложенный в [4].

В настоящем докладе приведены расширенные результаты по анализу этого процесса и показано, что предложенный в [4] вакансионный механизм может в некоторых случаях привести к росту сколь угодно малых возмущений на поверхности тонкой пленки или кристалла, и таким образом, привести к развитию шероховатости, а в других случаях, наоборот, приводит к сглаживанию поверхности. Также рассмотрен рост пор под воздействием упругих напряжений в кристалле.

РЕЗУЛЬТАТЫ

В докладе показано, как происходит изменение морфологии поверхности кристаллических тел под локальным воздействием пучка низкоэнергетических частиц, и при равномерном облучении всей поверхности кристалла. Показано, что такое изменение может происходить вследствие рассеяния генерируемых у поверхности колебаний решетки на вакансиях, которое вызывает дрейф вакансий к месту падения пучка. Продемонстрированы два режима: баллистический и диффузионный, показаны их отличия и найдена зависимость скорости изменения профиля поверхности от времени. Показано, что длина свободного пробега фононов l и некоторые другие характеристики процесса, например, величины Q (интенсивностью зарождения фононов под воздействием пучка) и p (вероятность перескока вакансии при взаимодействии с фононом), могут быть найдены из анализа этой зависимости. Обнаруженный механизм изменения морфологии наиболее эффективен, если к кристаллу приложены растягивающие напряжения, увеличивающие концентрацию вакансий. Рассмотрен процесс развития шероховатости на поверхности упруго-напряженного кристалла и показано, что сколь угодно малое возмущение формы поверхности может при определенных условиях неограниченно разрастаться вследствие неоднородного потока вакансий к поверхности. Неустойчивость возникает на пространственных частотах, меньших критической ω_{cr} , которая определяется интенсивностью зарождения фононов Q у поверхности под воздействием падающего пучка частиц, концентрацией вакансий n_0 , величиной и знаком механических напряжений σ_0 , а также другими параметрами системы согласно выражению:

$$\omega_{cr} = \sqrt[3]{\frac{2\sigma_0\Omega Qpn_0}{DC_0\theta}}$$

где Ω – объем, занимаемый вакансией, p – вероятность перескока вакансии при взаимодействии с фононом, D -коэффициент диффузии кристалла по объему, θ – поверхностная энергия кристалла, C_0 – поверхностная концентрация адатомов.

В случае, если механические напряжения имеют отрицательный знак (являются сжимающими), то дрейф вакансий приводит к уменьшению шероховатости. Это явление может быть использовано при выборе рабочих режимов обработки и роста кристаллов и тонких плёнок с целью получения гладких поверхностей и подавления развития морфологической неустойчивости по другим механизмам даже в области низкочастотных возмущений. Помимо этого, результаты могут применяться для формирования ансамбля пор в кристалле заданного размера.

А.В. Редьков благодарит за поддержку Совет по грантам Президента РФ (проект МК-1574.2019.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. A.A. Manenkov, A.M. Prokhorov, Laser-induced damage in solids, *Physics-Uspekhi* 29 (1986) 104.
2. W.L. Chan, E. Chason, Making waves: kinetic processes controlling surface evolution during low energy ion sputtering, *Journal of Applied Physics* 101 (2007) 121301.
3. K. Nordlund, J. Keinonen, M. Ghaly, R.S. Averback, Recoils, flows and explosions: surface damage mechanisms in metals and semiconductors during 50 eV–50 keV ion bombardment, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 148 (1999) 74.
4. A.V. Redkov, A.V. Osipov, S.A. Kukushkin, Evolution of crystal morphology under flow of low-energy particles: vacancy mechanism, *Materials Physics and Mechanics* 29 (2016) 82-92