

І.О. ЛИСЕНКО

Інститут прикладної фізики НАН України

(Вул. Петропавлівська, 58, Суми 40000; e-mail: lysenko.i@ipfcentr.sumy.ua)

## ФОРМУВАННЯ СТІЙКИХ ПОВЕРХНЕВИХ СТРУКТУР ПРИ ІОННОМУ РОЗПОРОШЕННІ В РАМКАХ АНІЗОТРОПНОЇ МОДЕЛІ КУРАМОТО–СІВАШИНСЬКОГО

УДК 539.24

---

*Розглянуто процеси зміни морфології поверхні з утворенням стаціонарних структур при іонному розпорошенні. Проведено лінійний аналіз на стійкість та визначено області параметрів, у яких можливе структуроутворення. Чисельно отримано всі можливі картини поведінки поверхні за умови наявності параметра стабілізації, що враховує перерозподіл вибитих атомів. Методами числового аналізу виконано аналіз динаміки дефектів для кожного типу поверхневих структур та побудовано відповідні часові залежності.*

*Ключові слова:* іонне розпорошення, структуроутворення, стаціонарні структури, важкі іони, потік іонів, дефект, гексагональні структури, лінійні структури.

### 1. Вступ

Вивчення зміни морфології поверхні матеріалу при розпорошенні його високоенергетичними частинками є актуальною задачею для сучасної статистичної фізики і матеріалознавства. Розпорошення є одним з найбільш поширених методів для отримання тонких плівок і напівпровідників, травлення зразків при виробництві інтегральних схем і пристроїв пакування. Він широко використовується в галузях мікро- та наноелектроніки. Експериментально та теоретично показано, що за певних умов на поверхні під час розпорошення можуть виникати наноструктури [1–10]. Чисельні експериментальні дослідження дозволили встановити основні параметри, які визначають характер поведінки зразка при розпорошенні. Вони зводяться до потоку іонного пучка, енергії налітаючих іонів, кута розпорошення та температури. Експериментальні дослідження процесів самоорганізації на металічних поверхнях і напівпровідниках показали, що залежно від енергії налітаючого пото-

ку, при розпорошенні можлива поява стаціонарних структур типу хвиль/рябь з певною орієнтацією (при енергіях іонів  $10^2$ – $10^5$  eV) та ізотропних структур типу наноточки або наноотвори (при енергіях іонів до  $10^2$  eV) [11–17]. Поле висоти отриманих поверхневих структур змінюється в межах від 0,1 до 1 мкм, з характерним розміром хвильових структур від 3,5 до 25 нм та наноотворів – від 35 до 250 Å [17].

Основні теоретичні підходи для дослідження зміни морфології поверхні ґрунтуються на моделі Кардара–Парізі–Занга [18]. Її було розвинено Вольфом і Вілліаном [19] та узагальнено Курамото і Сівашинським [20]. Вперше описана модель була застосована Бредлі і Харпером до дослідження росту поверхневих структур при розпорошенні [3]. Більш ґрунтовні дослідження проводилися Цуерно, Барабаші і Макеевим [4, 5]. Було показано, що ефективний опис процесів структуроутворення в таких системах може бути задовільно описаний рівнянням Курамото–Сівашинського для поля висоти опромінюваної поверхні. Введення флуктуацій поля висоти поверхні у вигляді

© І.О. ЛИСЕНКО, 2016

аддитивного ланжевенівського джерела з інтенсивністю пропорційною потоку частинок, дозволяє досліджувати статистичну природу поверхневих ефектів та визначити головні детерміністичні процеси морфологічних нестійкостей для різних стадій еволюції. Загалом, джерело шуму також може бути і мультиплікативним та задавати, наприклад, розкид кута розпорошення [21]. У найпростішому випадку, узагальнена модель Бредлі-Харпера передбачає формування лише трьох типів поверхневих структур. Однак, якщо врахувати нелінійність та анізотропію, то спектр можливих типів структур розширюється [22]. Варто зазначити, що стандартний розв'язок рівняння Курамото-Сівашинського, який задає профіль поверхні опромінюваної системи та відповідні структури, не передбачає формування пласкої поверхні та утворення сталих структур, що не змінюються з часом. Однак, цього можна досягти, якщо ввести складову, що визначає релаксацію поверхні [23, 24]. У випадку розпорошення, зазначена складова враховує можливий перерозподіл деяких вибитих атомів по поверхні. Дослідження еволюції такої системи у ізотропному випадку проведено раніше [25].

Відкритим залишається питання дослідження можливих типів стаціонарних структур та їх властивостей, коли динаміка висоти поверхні при розпорошенні описується нелінійним, анізотропним рівнянням Курамото-Сівашинського з аддитивним шумом, що моделює флуктуації поля висоти поверхні. При цьому анізотропія викликана різними значеннями коефіцієнтів поверхневого натягу. Нами буде проаналізовано динаміку, типи та умови утворення стаціонарних структур на поверхні, особливості впливу дисипації поверхні на характер утворюваних структур та вивчено еволюцію дефектів поверхні.

Робота складається з шести розділів. У розділі 2 описано модель системи для дослідження зміни морфології поверхні з урахуванням процесів релаксації. У розділі 3 проведено лінійний аналіз на стійкість та отримано фазові діаграми, які визначають області реалізації пласкої та структурованої поверхні, а також, умови утворення стаціонарних структур. Числове моделювання та діаграми параметрів системи для різних типів структур представлено у розділі 4. Аналіз еволюції структурних дефектів проведено у розділі 5. Шостий розділ присвячено висновкам.

## 2. Модель

Розглянемо  $d$ -вимірний субстрат, кожна точка якого у момент часу  $t$  задається полем висоти  $h(\mathbf{r}, t)$ , де  $\mathbf{r}$  – задає координати точки на поверхні. Припустимо, що відбувається розпорошення даної поверхні важкими іонами інертних газів. При цьому виникає серія зіткнень, і деякі атоми вибиваються зі своїх положень та покидають границі матеріалу. Внаслідок цього морфологія поверхні змінюється, що може приводити до формування структур. Далі будемо вважати, що поверхня розташована у площині  $x - y$ , і потік іонів знаходиться у площині  $x - z$ , з кутом падіння іонів  $\theta \in [0, \pi/2]$ , виміряним від нормалі нееродованої поверхні. Тоді, як було показано у роботі [26], енергія отримана поверхнею всередині об'єму матеріалу при її бомбардуванні в деякій точці з координатами  $r(x, y)$  задовольняє гаусовий розподіл:

$$E(\mathbf{r}) = (\epsilon/(2\pi)^{3/2}\sigma\mu^2) \exp(-z^2/2\sigma^2 - (x^2+y^2)/2\mu^2), \quad (1)$$

де  $\epsilon$  – кінетична енергія налітаючого іона,  $\sigma$  і  $\mu$  – ширини розподілу паралельно та перпендикулярно потоку розпорошення, відповідно.

Оскільки вираз (1) визначає енергію одного налітаючого іона, а, насправді, поверхня бомбардується однорідним потоком  $J$  іонів, які можуть одночасно досягати поверхні, то швидкість ерозії поверхні залежить від загальної енергії налітаючого потоку і визначається виразом  $v = p \int_{\mathcal{R}} d\mathbf{r} \times \Phi(\mathbf{r})E(\mathbf{r})$ , з сумою по розподілах всіх енергій для всіх іонів. У останньому виразі  $\Phi(x, y, h)$  задає поправки для локальних нахилів поверхні для однорідного потоку  $J$  і має вигляд  $\Phi(x, y, h) = J \cos(\arctan[\sqrt{(\nabla_x h)^2 + (\nabla_y h)^2}])$ , а  $p$  – залежний від властивостей матеріалу мішені коефіцієнт пропорційності [26, 27]. Таким чином, динамічне рівняння для поля висоти  $h(x, y, t)$  має вигляд:  $\partial_t h \simeq -v(\theta)\sqrt{1 + (\nabla h)^2}$ , де  $0 < \theta < \pi/2$ . У лінійному наближенні отримаємо

$$\partial_t h = -v_0 + \gamma \nabla_x h + \nu_x \nabla_{xx}^2 h + \nu_y \nabla_{yy}^2 h, \quad (2)$$

де величина  $v_0$  задає сталу швидкості ерозії поверхні,  $\gamma = \gamma(\theta)$  – визначає залежну від нахилу потоку бомбардування ерозію;  $\nu_{x,y} = \nu_{x,y}(\theta)$  – ефективний коефіцієнт поверхневого натягу, індукований процесами ерозії вздовж кожного напрямку.

Анізотропія отриманої системи визначена різними значеннями коефіцієнтів розвинення  $\nu_x, \nu_y$  вздовж напрямків  $x$  та  $y$  відповідно.

Рівняння (2) має бути узагальнено введенням у розгляд потоку поверхні, що задається виразом  $j_s = K\nabla(\nabla^2 h)$ ,  $K > 0$  – залежна від температури константа поверхневої дифузії. Врахування перших нелінійних членів у розвиненні швидкості  $v$  за градієнтом висоти дозволяє отримати динамічне рівняння для поля висоти  $h' = h + v_0 t$  [3, 4] у вигляді:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \frac{\partial h}{\partial x} + \nu_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \nu_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\lambda_x}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \frac{\lambda_y}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 - K\nabla^4 h + \xi(x, y, t), \quad (3)$$

де, для зручності, штрих опущено та введено аддитивний шум  $\xi$ . Вважатимемо, що ланжевенівське джерело шуму у рівнянні (3) має гаусівські властивості:

$$\begin{aligned} \langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle &= 0, \\ \langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle &= 2\Sigma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (4)$$

де  $\Sigma$  визначає інтенсивність флуктуацій висоти поверхні. Коефіцієнти з рівняння (3) мають вигляд, як було показано у роботі [5]:

$$\gamma = F_0 \frac{s}{f^2} (a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2 (a_\sigma^2 - 1) - a_\sigma^4 s^2), \quad (5)$$

$$\nu_x = F_0 \frac{a_\sigma^2}{2f^3} (2a_\sigma^4 s^4 - a_\sigma^4 a_\mu^2 s^2 c^2 + a_\sigma^2 a_\mu^2 s^2 c^2 - a_\mu^4 c^4), \quad (6)$$

$$\nu_y = -F_0 \frac{c^2 a_\sigma^2}{2f}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \lambda_x &= F_0 \frac{c}{2f^4} \left( a_\sigma^8 a_\mu^2 s^4 (3 + 2c^2) + 4a_\sigma^6 a_\mu^4 c^4 s^2 - a_\sigma^4 a_\mu^6 c^4 (1 + 2s^2) - f^2 (2a_\sigma^4 s^2 - a_\sigma^2 a_\mu^2 (1 + 2s^2)) - a_\sigma^8 a_\mu^4 s^2 c^2 - f^4 \right), \quad (8) \\ \lambda_y &= -F_0 \frac{c}{2f^2} (a_\sigma^4 s^2 + a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2 - a_\sigma^4 a_\mu^2 c^2 - f^2). \quad (9) \end{aligned}$$

У виразах (5)–(9) величина  $F_0$  визначена як:  $F_0 \equiv \frac{J \varepsilon \rho a}{\sigma \mu \sqrt{2\pi} f} \exp\left(-\frac{a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2}{2f}\right)$ . Решта величин є такими:  $a_\sigma \equiv \frac{a}{\sigma}$ ,  $a_\mu \equiv \frac{a}{\mu}$ ,  $s = \sin(\theta)$ ,  $c = \cos(\theta)$ ,  $f = a_\sigma^2 s^2 + a_\mu^2 c^2$ .

596

Рівняння Курамото–Сівашинського у вигляді (3) не передбачає розв'язків, що характеризують пласку поверхню, та утворення стаціонарних структур. У звичайному випадку висота поверхні і розташування структур постійно змінюються у хаотичному режимі, хоча розмір та кількість структур залишаються сталими [28]. Однак, стаціонарності можна досягти, якщо ввести у рівняння лінійний доданок  $-\alpha h$ , який буде задавати процеси релаксації висоти опроміньованої поверхні за рахунок перерозподілу вибитих атомів на поверхні [29]. Таким чином, стаціонарне анізотропне рівняння Курамото–Сівашинського матиме вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} &= -\alpha h + \gamma \frac{\partial h}{\partial x} + \nu_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \nu_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \\ &+ \frac{\lambda_x}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \frac{\lambda_y}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 - K\nabla^4 h + \xi(x, y, t). \quad (10) \end{aligned}$$

Всі параметри системи визначаються матеріалом мішені та умовами опромінення, а саме, глибиною проникнення іонів  $a$ , кутом падіння потоку розпорощення  $\theta$ , потоком  $J$  та кінетичною енергією іонів  $\varepsilon$ .

### 3. Лінійний аналіз на стійкість

Проведемо лінійний аналіз на стійкість і визначимо області параметрів, у яких формується пласка поверхня та відбувається структуроутворення. Для цього проведемо усереднення рівняння (10) за шумом та отримаємо рівняння для першого статистичного моменту у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle h \rangle &= -\alpha \langle h \rangle + \gamma \frac{\partial}{\partial x} \langle h \rangle + \nu_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle h \rangle + \nu_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \langle h \rangle + \\ &+ \frac{\lambda_x}{2} \left\langle \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right\rangle + \frac{\lambda_y}{2} \left\langle \left( \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 \right\rangle - K\nabla^4 \langle h \rangle, \quad (11) \end{aligned}$$

де враховано властивості шуму (4).

Далі будемо розглядати стійкість лінеаризованої системи, тому знехтуємо всіма нелінійними доданками. В результаті, отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle h \rangle &= -\alpha \langle h \rangle + \gamma \frac{\partial}{\partial x} \langle h \rangle + \nu_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle h \rangle + \\ &+ \nu_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \langle h \rangle - K\nabla^4 \langle h \rangle. \quad (12) \end{aligned}$$

Як відомо, лінеаризоване рівняння у детерміністичному випадку або за наявності адитивного білого шуму припускає розв'язок у вигляді  $\langle h(x, y, t) \rangle = A \exp[i(k_x x + k_y y - \omega t) + rt]$ . Підставляючи його у рівняння (12), знайдемо вирази для визначення частоти  $\omega$  та параметра стійкості  $r$ :

$$\begin{aligned} \omega &= -\gamma(\theta)k_x, \\ r &= -\alpha - \nu_x k_x^2 - \nu_y k_y^2 - K(k_x^2 + k_y^2)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

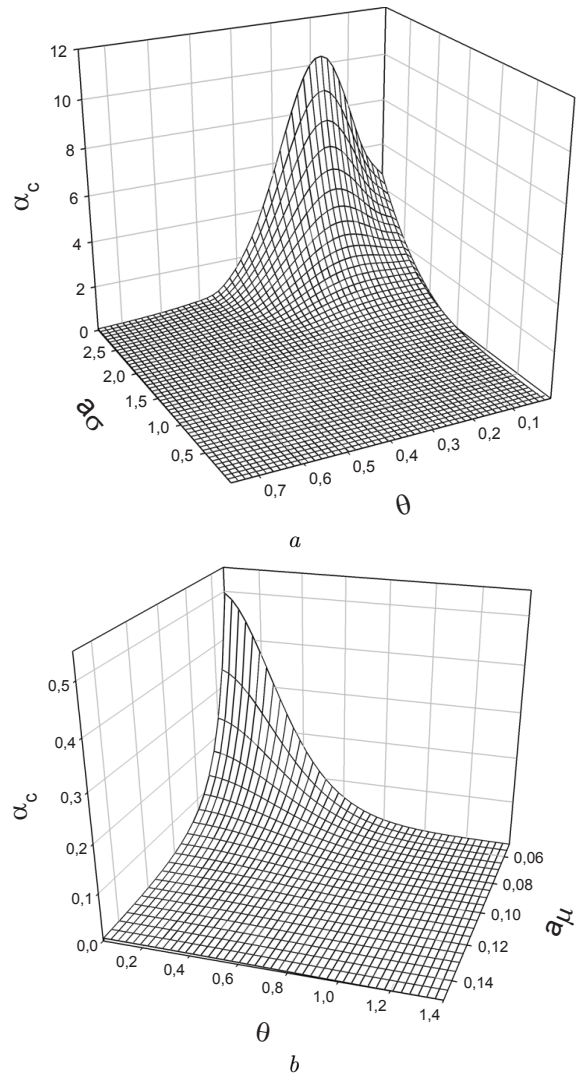
Як було показано у роботі [29], для параметра стабілізації  $\alpha$  існує певне критичне значення  $\alpha_c$ , за якого у системі, що розглядається, можливим стає формування стаціонарних структур. Так що, при  $\alpha > \alpha_c$  поверхня стає плоскою, а у протилежному випадку просторові структури стають нестійкими. Аналіз відповідних залежностей  $\alpha(k_x, k_y, k_z)$  показує, що кількість нестійких мод істотно зменшується при наближенні  $\alpha$  до критичного значення  $\alpha_c$ . Очевидно, що реалізація плоскої поверхні фактично відповідає процесам травлення. У загальному випадку величина  $\alpha_c$  залежить від енергії налітаючих іонів, кута і температури опромінюваної поверхні.

Відповідні залежності  $\alpha_c$  від основних параметрів системи наведено на рис. 1. Області параметрів, для яких можливе утворення просторово-модульованих структур, розташовані нижче зображених поверхонь. В областях вище поверхонь отримаємо плоску однорідну поверхню. З рис. 1, *a* видно, що при фіксованому значенні відношення глибини проникнення до поперечної ширини розкиду, при зміні кута розпорощення, критичне значення  $\alpha_c$  поводить не монотонним чином, досягаючи свого максимуму. Із монотонно спадаючої залежності  $\alpha_c(\theta, a_\mu)$ , зображеної на рис. 1, *b*, випливає, що при зростанні кута падіння та величини  $a_\mu$  при фіксованій ширині розкиду  $\sigma$ , стаціонарні структури реалізуються при малих значеннях  $\alpha_c$ .

#### 4. Числове моделювання

Розглянемо поведінку анізотропної нелінійної моделі (10) з  $\lambda_x \neq 0$  і  $\lambda_y \neq 0$ , поклавши  $\gamma = 0$ .

Як відомо, зміна знака параметрів системи  $\nu_x$ ,  $\nu_y$ ,  $\lambda_x$  приводить до зміни характеру утворюваних поверхневих структур. Параметр  $\nu_y < 0$  завжди, як видно з виразу (9), решта параметрів можуть змінювати свій знак. Відповідні фазові діаграми



**Рис. 1.** Фазові діаграми для лінійного аналізу на стійкість при:  $a - a_\mu = 1,0$  та  $b - a_\sigma = 0,1$ . Решта параметрів є такими:  $F_0 = 1$ ,  $K = 2$

наведені на рис. 2. Розглянемо діаграму, зображену на рис. 2, *a*, побудовану при  $a_\mu = 0,25$ . Як бачимо, площина значень  $a_\sigma$  і  $\theta$  поділяється на 7 областей, в яких реалізуються різні за морфологією структури. Суцільна крива визначає зміну знака  $\nu_x$ , штрихова крива відповідає зміні знака  $\lambda_x$  і пунктирна отримана за умови  $\lambda_y = 0$ . Штрихпунктирна крива, що відділяє області внизу діаграми, визначена за умови одночасної зміни знака для  $\lambda_x$  та  $\lambda_y$ . Відповідно до діаграми, зображеної на рис. 2, *b* при  $a_\sigma = 1,0$  можна бачити зміну обла-

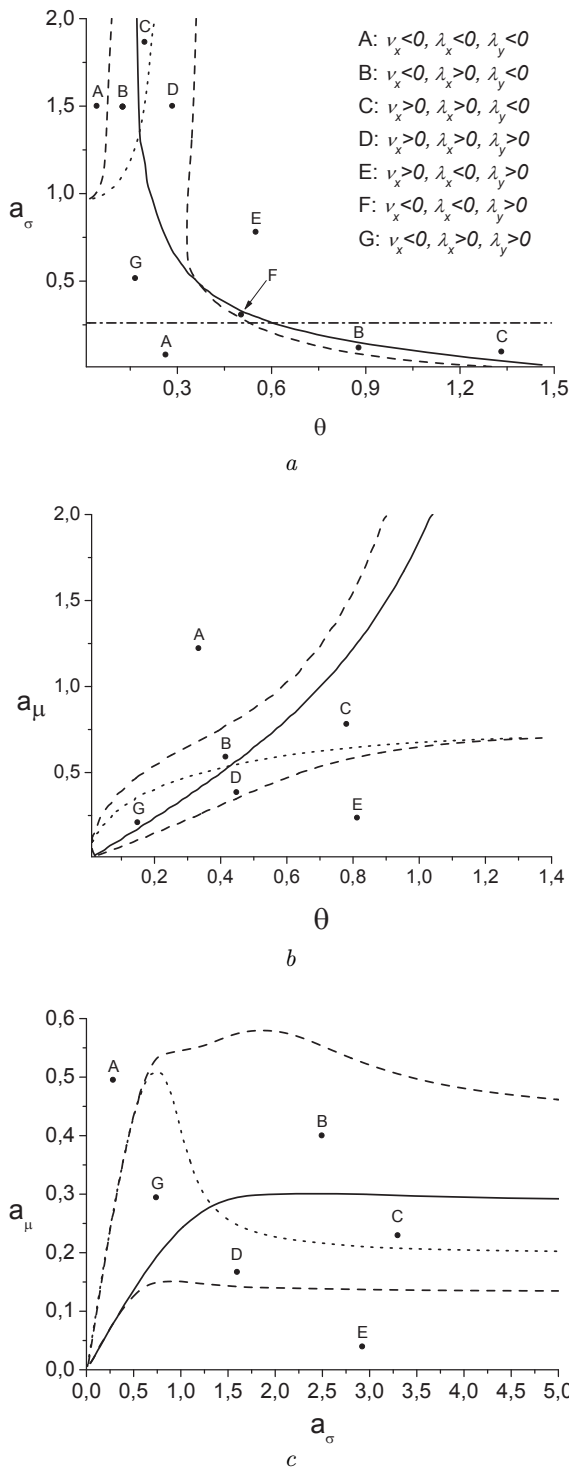


Рис. 2. Фазові діаграми для нелінійної анізотропної системи при:  $a - a_\mu = 0,25$ ,  $b - a_\sigma = 1,0$ ,  $c - \theta = 0,2$ . Решта параметрів:  $F_0 = 1$ ,  $K = 2$  і  $\Sigma = 1$

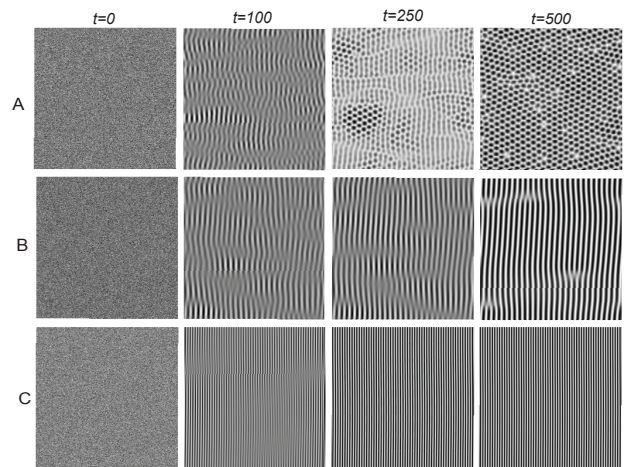


Рис. 3. Картина еволюції анізотропної нелінійної системи в околі критичного значення параметра стабілізації  $a_\sigma$  в областях  $A, B, C$  розміру  $N \times N = 256 \times 256$

стей існування різного типу структур. Залежності знерозмірених довжин при фіксованому куті розпилення, які визначають зміну відповідних типів структур і зміну їх областей існування, можна бачити на рис. 2, *с*. Варто зазначити, що за умови  $a_\sigma \leq a_\mu$  реалізуються лише перші три області  $A, B, C$  [21, 25].

Далі проведемо аналіз динаміки поверхні в отриманих областях фазових діаграм з рис. 2. Скориставшись числовим моделюванням, розв'яжемо рівняння (10) на дискретній ґратці розміру  $N \times N$ , де  $N = 256$ , з періодичними граничними умовами; крок по ґратці  $\ell = 1$  та крок інтегрування за часом  $\Delta t = 0,005$ .

#### 4.1. Поведінка системи в областях $A, B, C$

Проведемо аналіз поведінки системи в областях  $A, B, C$ , для яких  $a_\sigma \leq a_\mu$ . Еволюція поверхні при значенні параметра  $\alpha$ , наближеного до критичної точки, наведена на рис. 3. Темні області на рисунку відповідають меншим значенням поля висоти, тоді як світлі – більшим. Як бачимо, в області параметрів  $A$  ( $\nu_x < 0, \lambda_x < 0, \lambda_y < 0$ ) на поверхні з часом формуються стаціонарні структури (типу дір, обмежених стінками) з гексагональною симетрією, незначною мірою порушеною присутністю точкових дефектів. Для області параметрів  $B$  ( $\nu_x < 0, \lambda_x > 0, \lambda_y < 0$ ) характерним є утворення

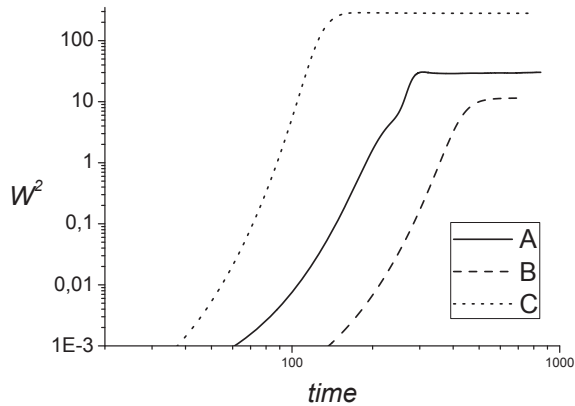


Рис. 4. Динаміка ширини інтерфейсу для областей A, B, C

лінійної поверхневої структури з наявністю дефектів. В області C ( $\nu_x > 0, \lambda_x > 0, \lambda_y < 0$ ) отримаємо аналогічні лінійні поверхневі структури, але з меншим періодом і відсутністю дефектів. При цьому, отримана ширина інтерфейсу, зображена на рис. 4, найшвидше зростає для області C, а найповільніше для області параметрів B.

Розглянемо більш детально вплив параметра  $\alpha$ , що визначає перерозподіл вибитих атомів, на поведінку анізотропної нелінійної системи. Для цього проведемо порівняння еволюції поверхні при  $\alpha = 0$  і  $\alpha \neq 0$ . Аналіз утворюваних поверхневих структур для цих областей за відсутності параметра стабілізації  $\alpha$  вже раніше було проведено у роботах [3–5, 21]. У першій колонці на рис. 5 показано відомий розв'язок рівняння (10) при  $\alpha = 0$ . Отримані структури є нестійкими, при цьому висота поверхні постійно змінюється. Однак, врахування процесів релаксації поверхні, дозволяє в околі критичної точки  $\alpha_c$  досягти стаціонарності (друга колонка на рис. 5).

#### 4.2. Поведінка системи в областях D, E, F, G

Перейдемо до розгляду поведінки нелінійної анізотропної системи в областях D, E, F, G при  $\alpha \neq 0$ . Як видно з рис. 6, в усіх досліджуваних областях в околі критичної точки  $\alpha_c$  на поверхні утворюються лінійні структури. Різниця полягає у періоді утворюваних поверхневих структур та наявності поверхневих дефектів. В області D ( $\nu_x > 0, \lambda_x > 0, \lambda_y > 0$ ) формуються структури з найменшим періодом та присутністю лінійних дефектів,

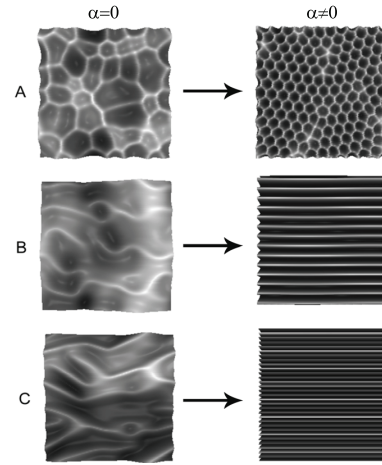


Рис. 5. Порівняння еволюції системи при  $\alpha = 0$  і в околі критичної точки  $\alpha_c$  в областях параметрів A, B, C

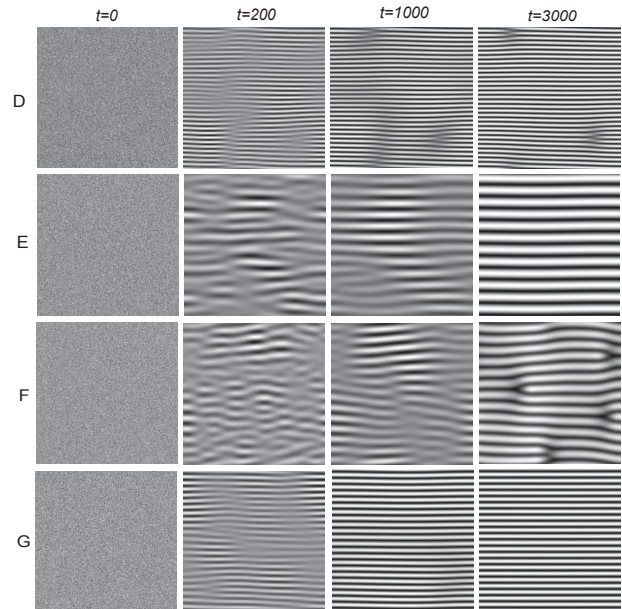


Рис. 6. Картина еволюції анізотропної нелінійної системи в околі критичного значення параметра стабілізації  $\alpha_c$  в областях D, E, F, G розміру  $N \times N = 256 \times 256$

які зберігаються з часом. Аналогічна структура з дефектами, але з більшим періодом структур утворюється в області F ( $\nu_x < 0, \lambda_x < 0, \lambda_y > 0$ ). Для областей E ( $\nu_x > 0, \lambda_x < 0, \lambda_y > 0$ ) і G ( $\nu_x < 0, \lambda_x > 0, \lambda_y > 0$ ) характерна повна відсутність будь-яких лінійних дефектів на лінійно структурованій стаціонарній поверхні, однак в області E період структур є більшим.



### 5. Дослідження дефектів на поверхні

Проведемо аналіз еволюції кількості дефектів. Для цього розглянемо густину дефектів  $N_{\text{def}}/N^2$ , де  $N_{\text{def}}$  – загальна кількість поверхневих дефектів у кожен момент часу,  $N$  – розмір дискретної ґратки (у данному випадку  $N = 256$ ).

У випадку формування гексагональної симетрії на поверхні (область  $A$ ), для визначення кількості поверхневих дефектів використаємо алгоритм, розвинутий для дослідження двовимірних систем, отриманих методом молекулярної динаміки [30]. При цьому структури можна представити у вигляді атомів, а локальний кристалічний порядок задамо орієнтацією шестикутників, вершини яких задають положення структур. Як показано у роботі [30] кут орієнтації  $j$ -го атома  $\phi_j \in [0, \pi/3]$  можна

визначити як:

$$\Psi_j = \sum_{k \in nn(j)} \exp[6i\theta_{jk}] = |\Psi_j| \exp^{6i\phi_j}.$$

Два атоми будуть сусідами за умови  $|r_j - r_k| < 1,25v$ , де  $v$  – положення першого піка двочастинкової кореляційної функції,  $\theta_j$  – кут між вектором  $r_j - r_k$  та віссю  $x$ . Для визначення кількості дефектів, по аналогії з пошуком атомів, що мають дефекти пакування, обчислюються ступіні безладу для кожного атома за формулою:

$$D_j = 2 \sum_{k \in nn(j)} [1 - \cos 6(\phi_j - \phi_k)].$$

Для дослідження лінійних дефектів скористаємося підходом, розвиненим для пошуку дислокацій і дисклинацій у нематиках [31]. Для цього потрібно визначити такі мірники упорядкування, як поле директора  $\hat{n}(\mathbf{r}) = \frac{\nabla h(\mathbf{r})}{|\nabla h(\mathbf{r})|}$  та відповідний нематичний параметр порядку  $Q_{\alpha\beta} = Q_0[\hat{n}_\alpha \hat{n}_\beta - \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}]$ . Відомо, що для двовимірних систем, роль параметра порядку виконує величина  $\cos(2\theta)$ , де  $\hat{n} = (\cos(\theta), \sin(\theta))$ . Тобто існує певний векторний параметр порядку  $\hat{\mathbf{V}}$ , визначений виразами  $\hat{V}_x = \hat{n}_x^2 - \hat{n}_y^2$ ,  $\hat{V}_y = 2\hat{n}_x \hat{n}_y$ . Відомо, що всі дефекти формуються з  $\pm \frac{1}{2}$  дисклинацій у полі директора  $\hat{n}$ , яке переходить у збурення заряду  $\pm 1$  для поля  $\hat{\mathbf{V}}$ . Далі визначимо ядра збурень за формулою  $A = \sum_{\alpha,\beta} (\nabla_\alpha B_\beta)^2$ . Вираз для  $A$  можна записати у іншому вигляді:

$$A = \sum_{\alpha,\beta} (\nabla_\alpha n_\beta)^2 = (\nabla_\alpha \varphi)^2,$$

де  $\varphi(\mathbf{r}, t) = 2\theta(\mathbf{r}, t)$ ,  $\theta(\mathbf{r}) = \arctan(\frac{\hat{n}_y(\mathbf{r})}{\hat{n}_x(\mathbf{r})})$ . Нематичний параметр порядку  $Q_{\alpha\beta}$  повністю визначається кутом  $\varphi(\mathbf{r}) = 2\theta(\mathbf{r})$ . Отже, знаючи похідну  $\nabla\varphi(\mathbf{r})$ , можна визначити величину  $A(\mathbf{r}) = |\nabla\varphi(\mathbf{r})|^2$ . В області дефекту, значення  $\hat{\mathbf{V}}$  зазнає різкої зміни. Таким чином, в області поза дефектами маємо  $A(\mathbf{r}) \approx 0$ . Величина  $A(\mathbf{r})$  стрімко зростає в місці розташування дефекту. Отже, якщо в точці  $\mathbf{r}$  значення  $A(\mathbf{r})$  стає достатньо великим, то в даній точці знаходиться дефект.

Описаний алгоритм допомагає визначити області, де поле директора суттєво змінюється, і вивести відповідні точки. Однак, потрібно ще згрупувати ці точки у структури. Елементи однієї структури знаходяться дуже близько один від одного,

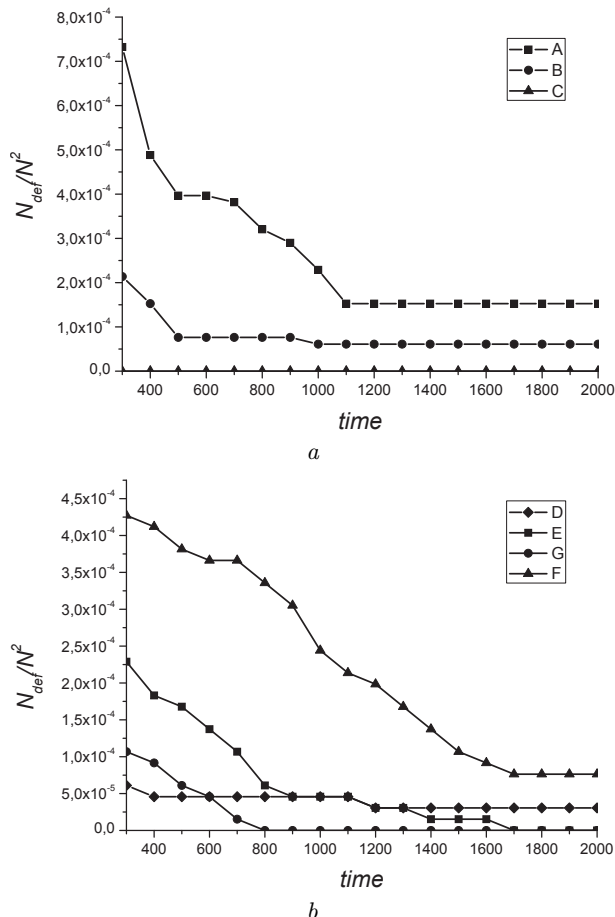


Рис. 7. Еволюція густини дефектів на поверхні при іонному розпорощенні для областей: а – A, B, C та б – D, E, F, G

але не обов'язково у сусідніх комірках. Тому доцільно ввести фільтр  $a_0$ , що задає відстань між точками. І, якщо відстань між точками менша, ніж  $a_0$ , то далі вважаємо, що вони належать одній структурі; для розрізнення таких точкових кластерів використано метод Хошена і Копельмана [32].

Отримані часові залежності концентрації дефектів у різних областях  $A, B, C, D, E, F, G$  зображено на рис. 7. Як бачимо, в областях  $A, B, D, F$  концентрація дефектів зменшується з часом, однак залишається ненульова кількість дефектів, тоді як в областях  $E$  і  $G$  при досягненні поверхнею стаціонарного режиму концентрація дефектів спадає до нуля. При цьому, в області  $C$  концентрація дефектів не зменшується з часом, а завжди рівна нулю. Варто зазначити, що для лінійних структур вдається визначити тільки один характерний тип дефектів – дислокації, тоді як дисклинації та границі зерен при іонному розпорощенні не спостерігаються.

## 6. Висновки

Проведено дослідження поведінки поверхні при іонному розпорощенні в умовах формування стійких поверхневих структур з використанням нелінійного анізотропного рівняння Курамото–Сівашинського. Для досягнення стаціонарного режиму поведінки поверхні при опроміненні, взято до уваги процеси релаксації, що виникають у зв'язку з перерозподілом вибитих атомів. Виконано лінійний аналіз на стійкість для такої системи та отримано відповідні фазові діаграми. Вони поділяють області значень основних керуючих параметрів на ті, в яких реалізується пласка поверхня та області існування поверхневих структур. Для нелінійної моделі отримано фазові діаграми, що визначають зміну морфології структур на поверхні, та визначено, що для нелінійної анізотропної системи існує максимум сім різних областей параметрів. На основі отриманої інформації, шляхом числового моделювання, розв'язано рівняння Курамото–Сівашинського на квадратній дискретній ґратці з періодичними умовами, та визначено тип стаціонарних структур для всіх областей фазової діаграми. Встановлено, що на поверхні можуть формуватися два типи стійких структур: гексагональні та лінійні структури. Лінійні поверхневі утворення відрізняються за розміром та густиною дефектів.

Використовуючи два типи алгоритмів для кожного типу структур, проведено аналіз динаміки дефектів на поверхні. Визначено, що концентрація дефектів з часом зменшується, та за певних умов спадає до нуля. Виявлено, що в системі можливе існування областей параметрів системи, в яких формується структура без дефектів.

Результати роботи можуть бути корисними для дослідження процесів структуроутворення при іонному розпорощенні матеріалів, та виготовлення приладів, що використовують структури заданої геометрії.

1. M. Navez, C. Sella, and D. Chaperot, *Ionic Bombardment: Theory and Applications* (Gordon and Breach, New York, 1964).
2. L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1998).
3. R.M. Bradley and J.M. E. Harper, *J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 2390 (1988).
4. R. Cuerno and A.-L. Barabasi, *Phys. Rev. Lett* **74**, 4746 (1995).
5. M. Makeev and A.-L. Barabasi, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2800 (1997).
6. J.T. Drotar, Y.-P. Zhao, T.-M. Lu, and G.-C. Wang, *Phys. Rev. E* **59**, 177 (1999).
7. T. Aste and U. Valbusa, *Physica A* **332**, 548 (2004).
8. B. Kahng and J. Kim, *Curr. Appl. Phys.* **4**, 115 (2004).
9. R. Kree, T. Yasserli, and A. K. Hartmann, *Nucl. Instrum. Methods B* **267**, 1407 (2009).
10. V.O. Kharchenko and D.O. Kharchenko, *Condens. Matter Phys.* **14**, 23602, (2011).
11. S. Rusponi, C. Boragno, and U. Valbusa, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2795 (1997).
12. S. Rusponi, G. Costantini, C. Boragno, and U. Valbusa, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2735 (1998).
13. E. Chason, T.M. Mayer, B.K. Kellerman, D.T. McIlroy, and A.J. Howard, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3040 (1994).
14. J. Erlebacher, M.J. Aziz, and E. Chason, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2330 (1999).
15. W.-Q. Li, L.J. Qi, and X. Yang, *Appl. Surf. Sci.* **252**, 7794 (2006).
16. J. Lian, Q.M. Wei, L.M. Wang, L.M. Wang, and L.A. Boatner, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 093112 (2006).
17. S. Facsko, T. Dekorsy, and C. Koerdt, *Science* **285**, 1551 (1999).
18. M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).
19. D.E. Wolf and J. Villian, *Europhys. Lett.* **13**, 389 (1990).
20. Y. Kuramoto and T. Tsuzuki, *Prog. Theor. Phys.* **55**, 356 (1976).
21. D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, I.O. Lysenko, and S.V. Kokhan, *Phys. Rev. E* **82**, 061108 (2010).
22. V.O. Kharchenko, *Funct. Mater.* **18**, 156 (2011).
23. C. Misbah and A. Valance, *Phys. Rev. B* **49**, 166 (1994).



24. M. Paniconi and K.R. Elder, *Phys. Rev. E* **56**, 2713 (1997).
25. I.O. Lysenko, D.O. Kharchenko, S.V. Kokhan, and A.V. Dvornichenko, *Metallofiz. Noveish. Tekhnol.* **35**, 763 (2013).
26. P. Sigmund, *Phys. Rev.* **184**, 383 (1969).
27. M. Makeev, R. Cuerno, and A.-L. Barabasi, *NIMB* **197**, 185 (2002).
28. V. O. Kharchenko, *Funct. Mater.* **18**, 156 (2011).
29. I. Bena, C. Misbah, and A. Valance, *Phys. Rev. B* **47**, 12 (1993).
30. T. Yamanaka and A. Onuki, *Phys. Rev. E* **77**, 042501 (2008).
31. Hai Qian and G.F. Mazenko, *Phys. Rev. E* **73**, 036117 (2006).
32. H. Gould and J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods, Part 2*, (Addison-Wesley, Reading, MA, 1988).

Одержано 24.09.15

*I.O. Lysenko*

ANALYSIS OF THE FORMATION  
OF STATIONARY PATTERNS AT THE ION  
SPUTTERING WITHIN THE ANISOTROPIC  
KURAMOTO-SIVASHINSKY MODEL

S u m m a r y

The processes of change of a surface morphology and formation of a stationary pattern at the ion sputtering are considered. A linear stability analysis was carried out, and the range of parameters, at which the patterning is possible, is determined. Assuming the existence of a stabilization parameter that involves the redistribution of knocked-out atoms, all evolution scenarios for the surface are obtained numerically. The dynamics of defects is numerically analyzed for every structure type, and the corresponding time dependences are plotted.