

PACS numbers: 05.40.Ca, 64.60.al, 68.35.Ct, 68.55.J-, 79.20.Rf, 81.16.Rf, 82.40.Np

Формування нанорозмірних структур на поверхні матеріалів при йонному розпорощенні

В. О. Харченко¹, Д. О. Харченко¹, І. О. Лисенко¹, В. В. Яновський²,
А. В. Дворниченко³

¹*Інститут прикладної фізики НАН України,
вул. Петропавлівська, 58,
40000 Суми, Україна*

²*Інститут монокристалів НАН України,
просп. Науки, 60,
61001 Харків, Україна*

³*Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2,
40007 Суми, Україна*

Досліджено процеси утворення поверхневих структур нанорозмірного масштабу у процесі йонного розпорощення. В рамках дослідження анізотропного моделю при врахуванні флюктуацій потоку йонів, що налітають, одержано діаграми, що ілюструють можливі типи рівновісних і хвильових поверхневих структур, які реалізуються в досліджуваній системі. Показано, що кількість таких структур на пізніх часах еволюції системи є постійною величиною. Встановлено залежності показників росту поверхні та її шерсткості. Досліджено динаміку процесів структуроутворення на поверхні за умови флюктуацій кута розпорощення. Показано, що статистичні властивості такого мультиплікативного шуму впливають на динаміку структуроутворення, характер і морфологію поверхневих структур. В рамках узагальненого моделю з урахуванням процесів релаксації опромінюваної поверхні було одержано фазову діаграму, що розділяє область основних параметрів системи на домени, які відповідають умовам реалізації стаціонарних структур на поверхні розпорощуваного матеріалу та гладкої поверхні. Досліджено динаміку структурних дефектів. Розвинутий підхід застосовано для моделювання процесу розпорощення кремнію йонами Аргону. Встановлено залежності глибини проникнення йонів і коефіцієнта виходу від кута розпорощення та енергії йонів. Показано, що на малих кутах розпорощення реалізуються рівновісні (ізотропні) структури, тоді як при великих значеннях кута розпорощення формуються хвильові структури. Встановлено залежності довжини хвилі структур кремнію від енергії йонів і показано, що лінійний розмір ізотропних структур зменшується зі збільшенням енергії налітних йонів і набуває

значень порядку декількох десятків нанометрів.

Processes of nanosize surface-structures' formation during ion-beam sputtering are studied. By considering the anisotropic model taking into account fluctuations of the incident ions' flow, the diagrams illustrating the possible types of the equiaxed and wave surface structures, which are implemented in the system, are obtained. As shown, the number of such structures at late stages of the system evolution remains constant. Temporal dependences of the surface growth and its roughness exponents are discussed. Dynamics of pattern formation on the surface is studied taking into account fluctuations of the incident angle. As shown, the statistical properties of the multiplicative-noise impact on the dynamics of pattern formation, character and morphology of the surface structures. Within the framework of the generalized model taking into account the relaxation of the irradiated surface, a phase diagram is obtained illustrating domains of main system parameters, where stationary structures on the surface of the sputtered material and smooth surface can be realized. Dynamics of structural defects is discussed in detail. The developed approach is applied to simulate sputtering process of the silicon surface with argon ions. The dependences of the penetration depth of the ions and the sputtering yield on both the incident angle and the energy of the ions are obtained. As shown, at small values of incident angle, the equiaxed (isotropic) structures are realized, whereas at large values of the incident angle, wave structures are formed during a sputtering. The dependences of the wavelength of the silicon structures on the energy of the incoming ions are calculated. As shown, the linear size of isotropic structures decreases with growing energy of the incident ions and takes the value of the order of several tens of nanometres.

Исследованы процессы образования поверхностных структур наноразмерного масштаба при ионном распылении. В рамках исследования анизотропной модели, при учёте флуктуаций потока налетающих ионов получены диаграммы, иллюстрирующие возможные типы равноосных и волновых поверхностных структур, которые реализуются в исследуемой системе. Показано, что количество таких структур на поздних временах эволюции системы является постоянной величиной. Установлены зависимости показателей роста поверхности и её шероховатости. Исследована динамика процессов структурообразования на поверхности с учётом флуктуаций угла распыления. Показано, что статистические свойства такого мультипликативного шума влияют на динамику структурообразования, характер и морфологию поверхностных структур. В рамках обобщённой модели с учётом процессов релаксации облучаемой поверхности была получена фазовая диаграмма, разделяющая область основных параметров системы на домены, которые соответствуют условиям реализации стационарных структур на поверхности распыляемого материала и гладкой поверхности. Исследована динамика структурных дефектов. Развитый подход применён для моделирования процесса распыления кремния ионами аргона. Установлены зависимости глубины проникновения ионов и коэффициента выхода от угла распыления и энергии ионов. Показано, что на малых углах распыления реализу-

ются равноосные (изотропные) структуры, тогда как при больших значениях угла распыления формируются волновые структуры. Установлены зависимости длины волны структур кремния от энергии ионов и показано, что линейный размер изотропных структур уменьшается с увеличением энергии налетающих ионов и принимает значение порядка нескольких десятков нанометров.

Ключові слова: йонне розпорошення, морфологія поверхні, поверхневі наноструктури, стохастичні системи, комп'ютерне моделювання, скейлінгові показники.

Key words: ion-beam sputtering, surface morphology, surface nanostructures, stochastic systems, computer simulation, scaling exponents.

Ключевые слова: ионное распыление, морфология поверхности, поверхностные наноструктуры, стохастические системы, компьютерное моделирование, скейлинговые показатели.

(Отримано 22 вересня 2016 р.)

1. ВСТУП

Останнім часом особливої уваги в області сучасної статистичної фізики, мікро- та наноелектроніки набувають задачі щодо дослідження процесів формування наноструктурованих поверхонь. Такі наноструктуровані поверхні ефективним чином використовуються у сучасній наноелектроніці, а саме, у магнеторезистивних датчиках, пристроях пам'яті, оптичних та комунікаційних пристроях, лазерах на квантових точках і детекторах. Це пов'язано, у першу чергу, з унікальними властивостями та функціональними здібностями нанорозмірних об'єктів. Серед останніх можна виділити гігантський магнетоопір [1], контрольовану оптичну емісію [2], високу ефективність фотоелектричних перетворень [3], наднизьку теплопровідність [4], тощо. У зв'язку з цим вивчення особливостей формування поверхневих структур нанорозмірного масштабу та умов керування морфологією поверхні, типом та розміром поверхневих наноструктур являє собою вельми актуальну тему сучасної фізики.

Протягом останніх десятиліть широко використовується декілька підходів та методів для вирощування наноструктур на поверхні матеріалів. Серед них можна виділити конденсацію (осадження з газової фази), епітаксію та йонне розпорошення. При цьому використання різних підходів та різних умов виготовлення наноструктурованих поверхонь уможливорює вирощувати як видовжені, так і рівновісні (ізотропні) структури. Такі рівновісні та видовжені нанорозмірні структури спостерігалися у процесах

осадження з газової фази в реальних експериментах [5–8] і при числовому моделюванні [9–22] та молекулярно-променевої епітаксії [23–30].

Використання технологій на основі опромінення матеріалів йонними пучками (йонне розпорошення) набуває все більшого інтересу, оскільки воно уможливорює продукувати формування структур нанорозмірів на поверхні цілі [31–38]. Дослідження процесів зміни морфології поверхонь матеріалів, що опромінюються важкими йонами (Kr^+ , Ar^+ , He^+) з енергіями порядку 0,1–100 кеВ в інтервалі температур 250–500 К є вельми актуальною задачею в області статистичної фізики, сучасного матеріалознавства, мікро- та наноелектроніки [39, 40]. За останні роки було встановлено низку механізмів, що контролюють процеси самоорганізації поверхні при йонному розпорошенні [40–47] та виявлено основні керувальні параметри такої самоорганізації, що зводяться до потоку йонного пучка, енергії налітних йонів, кута розпорошення та температури [34–38]. Експериментально та числовим моделюванням було встановлено, що залежно від енергії падіння йонів на поверхні цілі внаслідок розпорошення можуть формуватися або хвильові (стаціонарні хвилі із певною орієнтацією) структури або ізотропні структури, відомі як наноточки, або нанодірки. Формування таких структур було досліджено на металічних поверхнях та напівпровідниках [48–54]. Поверхневі утворення характеризуються варіацією поля висоти в інтервалі 0,1–1 мкм, тоді як характерний розмір структур вимірюється від десятків ангстремів [53] до кількох сотень нанометрів.

Основні теоретичні дослідження зміни морфології поверхні при йонному розпорошенні [55] ґрунтуються на моделюванні Кардара–Парізі–Занґа, Вілліяна, його узагальненні, проведеному Курамото і Сівашинським, та застосуванні до процесів йонного розпорошення Бредлі та Харпером [41], Цуерно [42], Барабаші, Макеевим і Дротаром [43, 44].

У даній роботі в рамках континуального підходу нами узагальнено модель Курамото–Сівашинського для дослідження процесів утворення структур нанорозмірного масштабу на поверхнях матеріалів при моделюванні процесів йонного розпорошення. В рамках використання процедури числового моделювання буде досліджено стохастичний модель з урахуванням адитивного шуму, викликаного флюктуаціями опромінювального потоку. Буде розглянуто лінійні та нелінійні моделі, встановлено діаграми формування різних типів структур при варіюванні основних параметрів системи. Буде проаналізовано масштабні властивості процесу росту структур та морфології поверхні та буде встановлено вплив флюктуацій потоку налітних йонів на динаміку структуроутворення.

В рамках стохастичного узагальнення анізотропного моделю нами буде розглянуто поведінку системи з мультиплікативним шумом, обумовленим флюктуаціями кута розпорошення. Буде проведено аналізу стійкості лінеаризованого моделю, де буде встановлено особливості процесів зміни орієнтації структур при варіюванні інтенсивності таких флюктуацій і радіуса їх просторових кореляцій. При аналізі динаміки утворення поверхневих структур у нелінійному моделю буде встановлено скейлінгові показники, що визначають швидкість утворення поверхневої структури, шерсткість поверхні та фрактальні властивості поверхні. Буде визначено вплив флюктуацій кута розпорошення на морфологію утворюваних поверхневих структур.

Досліджуваний стохастичний модель Курамото–Сівашинського буде узагальнено на випадок формування гладкої поверхні та утворення стаціонарних поверхневих структур за рахунок врахування процесів релаксації опромінюваної поверхні внаслідок перерозподілу вибитих атомів на поверхні цілі. В рамках лінійної аналізу на стійкість буде встановлено діаграму, що визначає області реалізації стаціонарних структур на поверхні розпорошеного матеріалу та гладкої поверхні. Буде встановлено вплив стохастичного джерела на густину розподілу структур за розмірами та вивчено динаміку структурних дефектів при різних значеннях інтенсивності флюктуацій.

Розвинений підхід буде застосовано для дослідження процесів розпорошення поверхні кремнію йонами Аргону. Основні параметри системи, як то глибина проникнення йонів Аргону в кремній, ширини розподілу енергії в кремнійовій цілі та коефіцієнт виходу при варіюванні енергії налітних йонів та кута розпорошення будуть встановлені в рамках використання підходів Монте-Карло. З використанням експериментальних даних для потоку йонів, температури та матеріальних констант нами буде встановлено фазову діаграму (кут падіння налітних йонів, енергія йонів), що ілюструє можливі типи поверхневих структур кремнію при розпорошенні йонами Аргону. Буде встановлено залежність довжини хвилі структур та лінійного розміру поверхневих структур кремнію від енергії налітних йонів.

Дану роботу побудовано наступним чином. У наступному розділі представлено анізотропний континуальний модель зміни висоти поверхні при йонному розпорошенні. Третій розділ присвячено дослідженню динаміки структуроутворення за умов флюктуації потоку налітних йонів. Розділ 4 присвячено дослідженню процесів формування поверхневих структур та зміни морфології поверхні при врахуванні флюктуацій кута розпорошення. В розділі 5 проведено дослідження моделю, узагальненого уведенням стабілізуючого фактора, що приводить до формування стаціо-

нарних структур та гладкої поверхні. У розділі 6 розвинутий формалізм застосовано до дослідження процесів формування структур на поверхні кремнію при розпорощенні йонами Аргону. Основні висновки представлено в останньому розділі.

2. МОДЕЛЬ ЕВОЛЮЦІЇ ВИСОТИ ПОВЕРХНІ ПРИ ЙОННОМУ РОЗПОРОШЕННІ

У рамках загального підходу розглянемо d -вимірний субстрат так, що кожна точка на ньому характеризується радіус-вектором \mathbf{r} . В момент часу t висота поверхні описується полем $z = h(\mathbf{r}, t)$. За умови, що морфологія поверхні змінюється під час йонного розпорощення, скористаємося положеннями моделю Бредлі–Харпера [41]. Розглянемо систему, в якій потік йонів лежить у площині x – z з кутом падіння θ , виміряним від нормалі до нееродованої поверхні. Схематичне представлення процесу розпорощення поверхні йонами подано на рис. 1. Згідно з поданою схемою вважається, що налітний йон з кінетичною енергією ε досягає поверхні в точці P . При цьому він проникає вглиб зразка, і глибина проникнення a залежить від енергії йона ε . Бомбівний йон зупиняється в точці O вглибині зразка, і середня енергія, отримана поверхнею в точці O , задається Гаусовим розподілом [41] $E(\mathbf{r}) = (\varepsilon / (2\pi)^{3/2} \sigma \mu^2) \exp(-z^2 / 2\sigma^2 - (x^2 - y^2) / 2\mu^2)$, що параметризується кінетичною енергією бомбівного йона ε , ширинами роз-

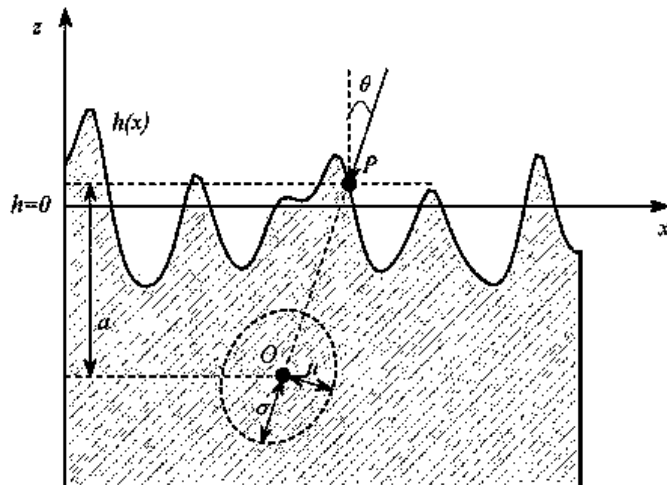


Рис. 1. Схематичне представлення процесу йонного розпорощення поверхні.¹

поділу паралельно та перпендикулярно потоку — σ і μ відповідно. Параметри σ і μ залежать від фізичних властивостей матеріалу цілі, і визначаються енергією падного йонного потоку. Швидкість ерозії поверхні в точці O задається виразом $v = p \int_R d\mathbf{r} \Phi(\mathbf{r}) E(\mathbf{r})$, де сума береться за розподілом енергій по всіх йонах. Тут $\Phi(\mathbf{r})$ — корекція для локального нахилу, залежного від однорідного потоку J [56]; $p = 3 / (4\pi^2) (NU_0 C_0)^{-1}$ — матеріальна константа, яка визначається через поверхневу енергію зв'язку U_0 , атомову густину цілі N та константу C_0 , що є пропорційною до квадрата ефективного радіуса потенціалу міжчастинкової взаємодії [57, 58]. Узагальнене рівняння для локального потоку на поверхні з ненульовою локальною кривизною записується у вигляді [57]: $\Phi(x, y, h) = J \cos \left(\arctan \left[(\nabla_x h)^2 + (\nabla_y h)^2 \right]^{1/2} \right)$, де $\nabla_\alpha = \partial/\partial\alpha$, $\alpha = \{x, y\}$. Отже, динаміка висоти поверхні описується рівнянням $\partial_t h \approx -v(\theta) \left[1 + (\nabla h)^2 \right]^{1/2}$, де $0 < \theta < \pi/2$ [41–43, 59, 60]. Розвиваючи цей вираз у ряд та залишаючи лише лінійні складові, одержуємо

$$\partial_t h = -v_0 + \gamma \nabla_x h + v_x \nabla_{xx}^2 h + v_y \nabla_{yy}^2 h.$$

При цьому анізотропія пов'язується з різними значеннями коефіцієнтів розвинення вздовж напрямків x та y відповідно; $\gamma = \gamma(\theta)$ — стала, що визначає ерозію, залежну від кута падіння потоку бомбівних йонів θ ; $v_\alpha = v_\alpha(\theta)$ — ефективні коефіцієнти поверхневого натягу, індуковані процесами ерозії вздовж напрямків x та y відповідно.

Вважаючи, що поверхневий потік створюється різницею хемічних потенціалів, то права частина рівняння еволюції поля h має включати дифузійну складову $(-\nabla \cdot \mathbf{j}_s)$, де $\mathbf{j}_s = K \nabla (\nabla^2 h)$ — поверхневий потік; $K > 0$ — залежна від температури константа поверхневої дифузії. При термічно активованій поверхневій дифузії маємо визначення $K = D_s \kappa \rho / n^2 T$, де $D_s = D_0 \exp(-E_a/T)$ — коефіцієнт самодифузії (E_a — енергія активації для поверхневої дифузії); κ — поверхнева вільна енергія; ρ — поверхнева густина атомів, що дифундують; n — кількість атомів в одиниці об'єму.

Припускаючи, що зміни поверхні відбуваються плавно, можемо нехтувати просторовими похідними висоти h третього і вище порядків при розвиненні в ряд. Враховуючи нелінійні складові розкладу рівняння динаміки висоти поверхні, одержуємо рівняння для величини $h' = h + v_0 t$ у вигляді [41, 42]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \frac{\partial h}{\partial x} + v_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + v_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\eta_x}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \frac{\eta_y}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 - K \nabla^4 h, \quad (1)$$

де для зручності штрих опускаємо. Невідомі коефіцієнти у рівнянні (1) означено у роботі [42] наступним чином:

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

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

$$v_y = -F_0 \frac{c^2 a_\sigma^2}{2f}, \quad (4)$$

$$\eta_x = F_0 \frac{c^2}{2f^4} \left\{ a_\sigma^8 a_\mu^2 s^4 (3 + 2c^2) + 4a_\sigma^6 a_\mu^4 c^4 s^2 - a_\sigma^4 a_\mu^6 c^4 (1 + 2s^2) - f^2 (2a_\sigma^4 s^2 - a_\sigma^2 a_\mu^2 (1 + 2s^2)) - a_\sigma^8 a_\mu^4 c^2 s^2 - f^4 \right\}, \quad (5)$$

$$\eta_y = F_0 \frac{c^2}{2f^2} \left\{ a_\sigma^4 s^2 + a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2 - a_\sigma^4 a_\mu^2 c^2 - f^2 \right\}. \quad (6)$$

У вищенаведених виразах використано позначення:

$$F_0 \equiv \frac{J \varepsilon p a}{\sigma \mu \sqrt{2\pi f}} \exp \left(\frac{-a_\sigma^2 a_\mu^2 c^2}{2f} \right), \quad (7)$$

$$a_\sigma \equiv a / \sigma, \quad a_\mu \equiv a / \mu, \quad s \equiv \sin(\theta), \quad c \equiv \cos(\theta), \quad f \equiv a_\sigma^2 s^2 + a_\mu^2 c^2. \quad (8)$$

Всі керувальні параметри можна знайти, якщо відомі глибина проникнення йонів a , ширини каскадів μ та σ , кут падіння потоку θ , потік J і кінетична енергія йонів ε . Рівняння (1) відоме як детерміністичне рівняння Курамото–Сівашинського [61].

3. СТОХАСТИЧНИЙ МОДЕЛЬ З ФЛЮКТУАЦІЯМИ ОПРОМІНЮВАЛЬНОГО ПОТОКУ

У даному розділі будуть проведені теоретичні дослідження процесів утворення структур на поверхні матеріялу при йонному розпорошенні в рамках анізотропного моделю Курамото–Сівашинського (1). При проведенні досліджень буде враховано, що пучок налітних йонів характеризується певною скінченною шириною; отже бомбівні йони досягають поверхні у різних місцях. Таку умову можна задовольнити шляхом уведення до розгляду флюктуацій

зміни висоти розпорошеної поверхні. У такому разі рівняння еволюції висоти поверхні узагальнюється уведенням адитивного шуму і набуває вигляду:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma \frac{\partial h}{\partial x} + v_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + v_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\eta_x}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \frac{\eta_y}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 - K \nabla^4 h + \zeta(\mathbf{r}, t). \quad (9)$$

Стохастичне джерело $\zeta(\mathbf{r}, t)$ виберемо у найпростішому випадку у вигляді Гаусового білого шуму з наступними властивостями:

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0; \quad \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2 \sum \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d(t - t'), \quad (10)$$

де \sum — це інтенсивність флюктуацій потоку йонів.

3.1. Аналіза стійкості лінійної системи

Першим кроком при дослідженні еволюції нелінійних просторово-розподілених систем є проведення аналізу на стійкість однорідних станів до однорідних та неоднорідних збурень. Оскільки рівняння (9) не містить реакційної складової (всі доданки визначаються просторовими операторами), то всі неоднорідні збурення будуть згасати з часом. Тому при проведенні подальшої аналізу встановимо стійкість однорідного стаціонарного стану (пласкої поверхні) до неоднорідних збурень. Крім того, оскільки рівняння (9) є стохастичним, то аналіза на стійкість має бути зробленою для статистичних моментів. У цьому підрозділі ми проведено лінійну аналізу на стійкість системи (9), нехтуючи нелінійними складовими. Для цього проведемо усереднення рівняння (9) за шумом, та покладемо $\eta_x = 0$, $\eta_y = 0$. В результаті одержуємо рівняння еволюції середньої висоти поверхні у вигляді

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle h \rangle = \gamma \frac{\partial}{\partial x} \langle h \rangle + v_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle h \rangle + v_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \langle h \rangle - K \nabla^4 \langle h \rangle, \quad (11)$$

де враховані властивості флюктуацій (10). Далі більш зручно переписати лінеаризоване еволюційне рівняння для середньої висоти $\langle h \rangle$ у стандартний спосіб:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle h \rangle = (\hat{v}_{ef} + \hat{K}_{ef}) \langle h \rangle, \quad (12)$$

де використано позначення

$$\hat{v}_{ef} = \gamma \frac{\partial}{\partial x} + v_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + v_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \quad \hat{K}_{ef} = -K \nabla^4. \quad (13)$$

Розв'язок рівняння (12) будемо шукати у наступному вигляді: $\langle h \rangle = A \exp(i[k_x x + k_y y + \omega t] + \aleph t)$. Тоді вирази для частоти ω та параметра стійкості \aleph набувають вигляду:

$$\omega = -\gamma(\theta)k_x, \quad \aleph = -v_x(\theta)k_x^2 - v_y(\theta)k_y^2 - K(k_x^2 + k_y^2)^2. \quad (14)$$

В ході еволюції системи відбувається відбір хвильових чисел, що задають напрямок хвиль. Хвильові числа, обрані в процесі еволюції, задаються виразом $k^2 = |v_{\min}|/2K$, де v_{\min} — мінімальне з v_x та v_y . Проаналізуємо вираз для параметра стійкості \aleph . Оскільки $v_y < 0$ завжди, незалежно від основних параметрів системи (див. вираз (4)), то в напрямку y в системі завжди будуть існувати просторові нестійкості. Отже, даний модель не передбачає реалізації гладкої поверхні у якості стійкого розв'язку. Стійкість системи у напрямку x визначається параметром v_x , який може змінювати знак, залежно від енергії налітних йонів, кута розпорошення, глибини проникнення йонів та ширин відповідних каскадів, згідно з формулою (3). Отже, розв'язок $\langle h \rangle$ буде стійким в x напрямку за умови $v_x > 0$ та не стійким у випадку $v_x < 0$. На рисунку 2 подано діаграму стійкості лінеаризованого моделю. З рисунка видно, що збільшення значень a_μ звужує область стійкості в x -напрямку (див. криві 1 і 2), у той час як збільшення значень a_σ (криві 1' та 2'), навпаки, розширює дану область. На вставках до рисунку наведено типові структури на розрахункових часах 20, 100 та 500 (зверху вниз) в областях стійких та не-

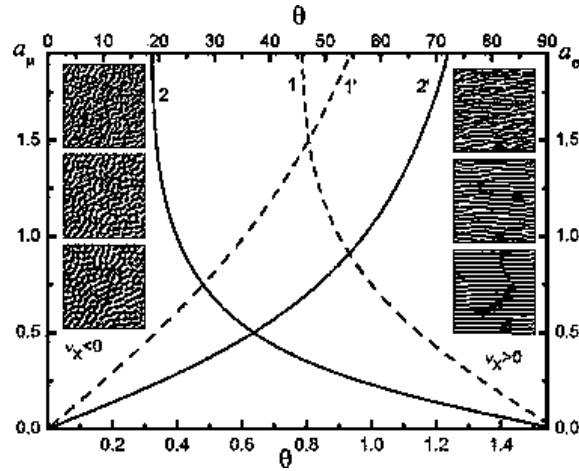


Рис. 2. Діаграма стійкості лінеаризованого моделю (криві 1 та 2 відповідають залежностям $a_\sigma(\theta)$ при $a_\mu = 1,5$ та $a_\mu = 0,5$; криві 1' та 2' відповідають залежностям $a_\mu(\theta)$ при $a_\sigma = 1,5$ та $a_\sigma = 0,5$).²

стійких розв'язків в x -напрямку. Видно, що в області стійких розв'язків в y -напрямку реалізуються добре виражені періодичні структури, орієнтовані у x -напрямку. У випадку $v_x < 0$ формуються рівновісні структури, які не мають виділеного напрямку. При проведенні числового моделювання процесів формування структур на поверхні матеріалу при йонному розпорощенні чисельно розв'язувалося рівняння (9) при $\eta_x = 0$, $\eta_y = 0$ на квадратній ґратниці розміру $L \times L$, $L = 256$ з періодичними крайовими умовами. У якості початкових умов для висоти поверхні використовувався Гаусів розподіл із $\langle h(\mathbf{r}, t = 0) \rangle = 0$, $\langle (\delta h)^2 \rangle = 0,1$; крок інтегрування за часом $\Delta t = 0,005$, крок у просторі $\iota = 1$. Таким чином, із проведеної аналізи на стійкість лінеаризованої системи випливає, що: 1) модель Курамото–Сівашинського не передбачає умов для формування стійкої гладкої поверхні у процесі розпорощення; 2) під час еволюції системи будуть формуватися або рівновісні або лінійні структури в x -напрямку.

3.2. Моделювання процесів формування поверхневих структур

У даному підрозділі розглянемо поведінку нелінійної системи (9), поклавши $\eta_x \neq 0$ та $\eta_y \neq 0$. Спочатку розглянемо спрощений випадок, припускаючи що при бомбардуванні матеріалу йонами ширини розподілу енергії в глибині матеріалу є однаковими, тобто $a_\mu = a_\sigma$. У такому випадку вирази для параметрів v_x , v_y , η_x та η_y значно спрощуються та набувають вигляду

$$\begin{aligned} \eta_x &= \frac{F}{\sigma} c^2 (a_\sigma^2 (3s^2 - c^2) - a_\sigma^4 s^2 c^2), \quad \eta_y = -\frac{F}{\sigma} c^2 (a_\sigma^2 c^2), \\ v_x &= \frac{F}{2} a_\sigma (2s^2 - c^2 - a_\sigma^2 s^2 c^2), \quad v_y = -\frac{F}{2} a_\sigma c^2, \end{aligned} \quad (15)$$

$$s = \sin \theta, \quad c = \cos \theta, \quad a_\sigma = a / \sigma, \quad F \equiv (\varepsilon p J / \sqrt{2\pi}) \exp(-a_\sigma^2 / 2).$$

У такому разі, окрім $v_y < 0$, маємо $\eta_y < 0$, незалежно від умов розпорощення. Відповідну діаграму, що ілюструє залежності $v_x(\theta, a_\sigma) = 0$ та $\eta_x(\theta, a_\sigma) = 0$ подано на рис. 3. З рисунка видно, що площину параметрів (θ, a_σ) розділено на три області: A , B та C , які характеризуються наборами $(v_x < 0, \eta_x < 0)$, $(v_x < 0, \eta_x > 0)$ та $(v_x > 0, \eta_x > 0)$. Таким чином, в системі, коли ширини розподілу енергії є однаковими, варіація кута розпорощення буде приводити до реалізації трьох типів поверхневих структур.

Далі розглянемо загальніший випадок, вважаючи, що ширини розподілу енергії σ та μ в матеріалі є різними. При цьому, варіація параметрів a_σ та a_μ означає варіацію енергії налітних йонів та потоку для певної цілі. Разом з цим, різні матеріали характе-

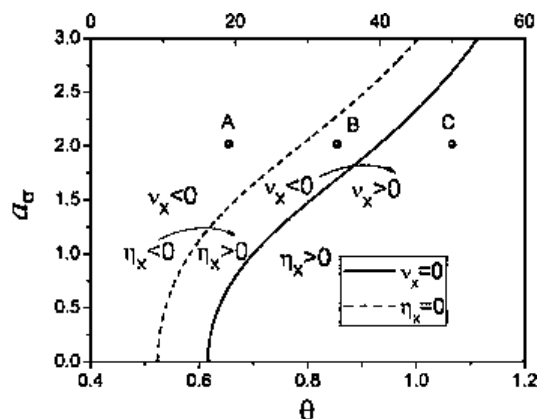


Рис. 3. Діаграма ілюстрації областей формування різних поверхневих структур в нелінійній системі при $a_\mu = a_\sigma$.³

ризуються різними значеннями глибини проникнення для різних йонів. Будемо розглядати модельну систему з метою встановлення зміни морфології поверхні, зміни типу та форми поверхневих структур, що можуть формуватися при варіюванні основних параметрів системи та з'ясування основних скейлінгових властивостей поверхні, як то показників росту поверхні та її шерсткості.

3.2.1. Зміна морфології поверхні

У якості основних параметрів для варіювання оберемо кут налітних йонів θ та параметри a_σ та a_μ . На рисунку 4 показано діаграми, що ілюструють області параметрів системи, коли в процесі еволюції системи реалізуються різні типи структур. На цих діаграмах криві відповідають критичним значенням основних параметрів системи, коли величини v_x , η_x та η_y набувають нульових значень. Спочатку розглянемо діаграму $a_\sigma(\theta)$ при $a_\mu = 0,25$, показану на рисунку 4, а. Тут всю площину (a_σ, θ) поділено на 10 областей, позначених символами А, В, С, D, E, F, G, що характеризуються різним набором знаків параметрів v_x , η_x та η_y ($v_y < 0$ у всіх областях згідно з виразом (4)). На рисунку штрихові лінії відповідають зміні знаку η_x ; пунктирна крива визначає умову $v_x = 0$; η_y дорівнює нулю на штрих-пунктирній кривій; у випадку перетинання суцільної кривої як η_y , так і η_x разом змінюють свої знаки. У випадку $a_\sigma \leq a_\mu$ маємо лише три області, тоді як при $a_\sigma > a_\mu$ реалізується сім областей, що характеризуються різними знаками вказаних трьох параметрів, та відповідають структурам різного типу. На рисунку 4, б показано залежності $a_\mu(\theta)$ при $a_\sigma = 2,0$. Тут лінії позначено у той самий спосіб, що і на поперед-

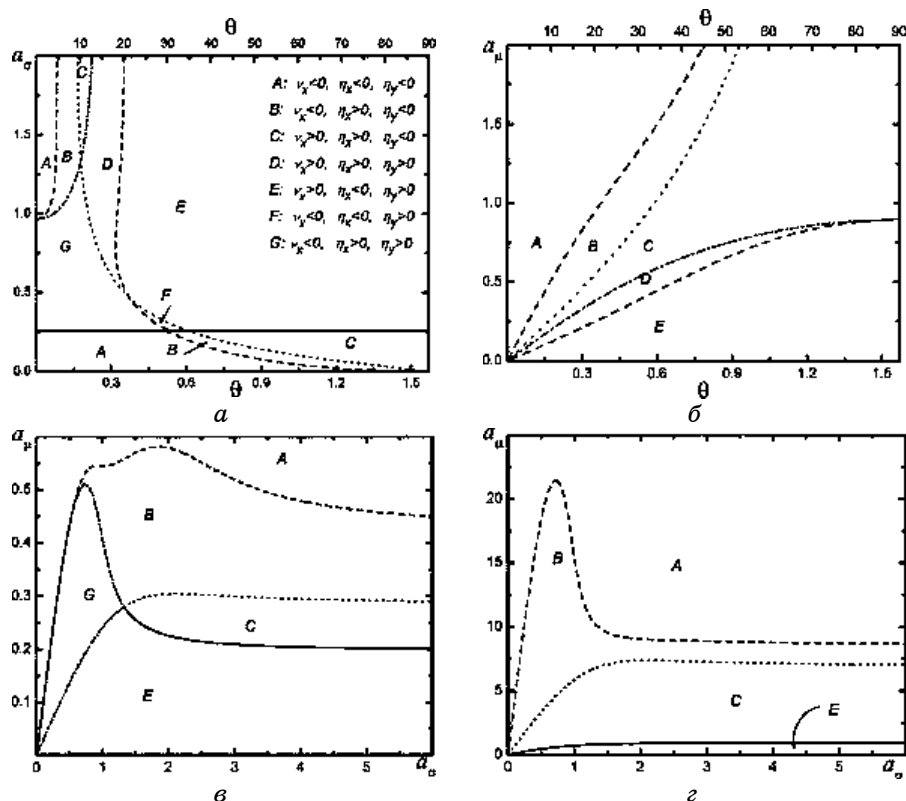
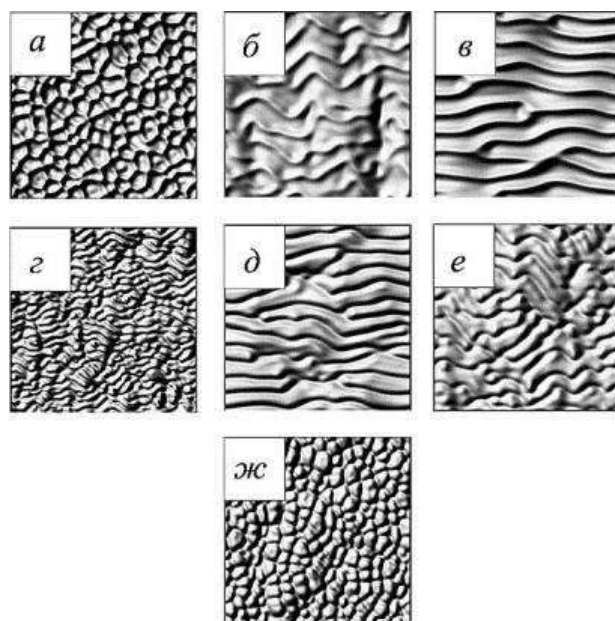


Рис. 4. Діаграми формування різних типів структур при: а) $a_\mu = 0,25$; б) $a_\sigma = 2,0$; в) $\theta = 0,2$, г) $\theta = \pi/2 - 0,2$.⁴

ньому рисунку. Рисунки 4, в, г показують залежності $a_\mu(a_\sigma)$ при малому ($\theta = 0,2$) та великому ($\theta = \pi/2 - 0,2$) куті розпорошення відносно нормалі відповідно. На рисунку 4, в штрих-пунктирна крива відповідає умові $v_x = \eta_x = 0$. Порівнюючи рисунки 4, в, г, видно, що збільшення значення кута розпорошення приводить до зникнення області G та вимагає великих значень a_μ для областей A та B. Типові структури в усіх сімох різних областях подано на рис. 5. Числовий розв'язок рівняння (9) проводився відповідно до представленої вище схеми. Просторові похідні другого та четвертого порядків обчислено методом скінченних різниць; нелінійну складову $(\nabla h)^2$ обчислено за схемою [62, 63]:

$$\begin{aligned}
 (\nabla h)^2(\mathbf{r}) = & \frac{1}{3\ell^2} \sum_{z=1}^d \left([h(\mathbf{r} + \ell \hat{e}_z) - h(\mathbf{r})]^2 + [h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r} - \ell \hat{e}_z)]^2 + \right. \\
 & \left. + [h(\mathbf{r} + \ell \hat{e}_z) - h(\mathbf{r})][h(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r} - \ell \hat{e}_z)] \right), \quad (16)
 \end{aligned}$$

Рис. 5. Типові структури в областях А–Г.⁵

де \hat{e}_z — базисний вектор вздовж напрямку z .

Проаналізуємо зміну морфології поверхневих структур у відповідності до зміни знаків v_x , η_x та η_y . Як показала лінійна аналіза на стійкість, $v_x < 0$ є умовою нестійкості у горизонтальному напрямку та основним критерієм формування рівновісних структур островів/дірок (див. області А, В, F, G). Дослідження детерміністичного анізотропного рівняння Курамото–Сівашинського показали, що у випадку $\eta_x \eta_y < 0$ напрямок хвильових структур може змінюватись згідно з напрямком налітних йонів (дивись структури В, С, Е, F). Додатковим критерієм для формування рівновісних структур (островів/дірок) є $\eta_x \eta_y > 0$. Отже структури типу островів/дірок будуть формуватися при одночасному виконанні двох умов, а саме: $v_x < 0$ та $\eta_x \eta_y > 0$. (див. області А та G та відповідні структури на рисунку 5). Умовами формування хвильових структур у горизонтальному напрямку є $v_x > 0$ та додатково $\eta_x \eta_y < 0$ (див. області С та Е та відповідні структури на рисунку 5). В областях В, D, та F критерії формування як рівновісних так і хвильових структур не виконуються у повній мірі: структури В та F характеризуються негативним значенням v_x (наявність нестійкості як у горизонтальному, так і у вертикальному напрямках), але різні знаки η_x та η_y приводять до повертання смугових структур у напрямку налітних йонів; в області D позитивні значення v_x та добуток $\eta_x \eta_y > 0$ не приводять до добре виражених по-

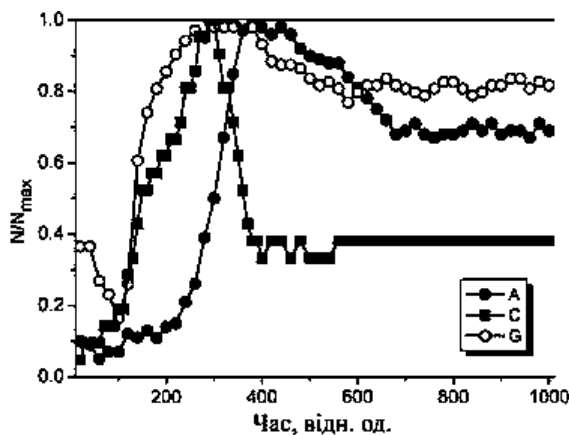


Рис. 6. Залежності перенормованої кількості структур від часу.⁶

верхневих структур.

На підтвердження того, що рівновісні (ізотропні) структури (A та G) та хвильові структури (C) на рис. 5 є стійкими у часі у тому сенсі, що загальна їх кількість є постійною величиною на великих часових інтервалах, ми обчислили залежності кількості структур від часу.

Результати подано на рис. 6. З рисунка видно, що як для процесу формування рівновісних структур (заповнені та порожні кружечки), так і для процесу формування хвильових структур (квадратики) їх кількість $n = N/N_{\max}$ збільшується на малих часових інтервалах, що відповідає процесам формування (утворення) структур. На середніх часових інтервалах їх кількість спадає, що відповідає стадії коалесценції: коли малі структури, розмір яких перевищує певне критичне значення, об'єднуються, утворюючи більші структури; структури з розміром, меншим за критичний, — дисоціюють. На великих часових інтервалах кількість поверхневих структур залишається постійною величиною. Отже, такі структури є стійкими у часі у тому сенсі, що коли стадії формування та коалесценції завершені, то загальна кількість як рівновісних, так і хвильових структур не змінюється з часом.

3.2.2. Статистичні властивості наноструктурованої поверхні

З точки зору статистичної аналізи поверхні важливим є з'ясування масштабних властивостей морфології поверхні. За відомими числовими даними можна провести дослідження статистичних властивостей системи на основі розгляду часової кореляційної функції висоти, визначеної наступним чином:

$$C_h(r, t) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \int_0^L [h(r+r', t) - h(r', t)] dr'.$$

У рамках гіпотези динамічної масштабної інваріантності запишемо кореляційну функцію у вигляді [64, 65]:

$$C_h(r, t) = 2W^2(t) \varphi\left(\frac{r}{\xi(t)}\right), \quad (17)$$

де

$$\varphi(u) \propto \begin{cases} u^{2\alpha}, & \text{при } u \ll 1, \\ \text{const}, & \text{при } u \gg 1. \end{cases} \quad (18)$$

Ранні стадії поведінки системи можна проаналізувати за допомогою апроксимаційної функції $C_h(r, t) \approx 2W^2(t) \left\{1 - \exp\left[-(r/\xi)^{2\alpha}\right]\right\}$ [66], де $W(L, t)$ — середньоквадратична флюктуація висоти поверхні, що залежить від лінійного розміру зразка L та часу t . Згідно гіпотези масштабної інваріантності для часової залежності поведінки середньоквадратичної флюктуації $W(L, t)$ маємо наступні асимптотики: $W(L, t) \propto t^\beta$; $\xi(t) \propto t^{1/z}$. Тут α — показник шерсткості поверхні; β — показник росту; $z = \alpha/\beta$ — динамічний показник. З іншого боку можна покласти [62]

$$C_h(r, t) = r^{2\alpha} \psi\left(\frac{t}{r^z}\right), \quad (19)$$

де

$$\psi(v) \propto \begin{cases} v^{2\beta}, & \text{при } v \ll 1, \\ \text{const}, & \text{при } v \gg 1. \end{cases} \quad (20)$$

Таким чином, часову та просторову залежність кореляційної функції можна представити у степеневому вигляді $C_h(t) \propto t^{2\beta}$ і $C_h(r) \propto r^{2\alpha}$ з показником росту β і показником шерсткості α . В рамках досліджуваного моделю йонного розпорощення для типових поверхонь, показаних на рис. 5, відповідні показники шерсткості можуть бути знайдені за допомогою чисельної аналізи кореляційної функції висоти поверхні, яку можна подати у вигляді

$$C_h(r, t_i) = \left\langle [h(r+r', t_i) - h(r', t_i)]^2 \right\rangle.$$

Тоді для фіксованих моментів часу t_i можна визначити показник шерсткості α_i як нахил кореляційної функції у подвійному логарифмічному масштабі:

ритмічному масштабі. Для встановлення властивостей процесу росту поверхні та визначення показників росту поверхні будемо розглядати часову поведінку величини $W^2(t) = \langle [h(r) - \langle h(r) \rangle]^2 \rangle$ та

визначати показники росту β_i , як кут нахилу $W^2(t)$ у подвійному логаритмічному масштабі у фіксовані проміжки часу t_i . Для проведення статистичного усереднення було проведено 20 незалежними числових експериментів. Відповідні набори показників росту поверхні $\{\beta_i\}$ та показників шерсткості $\{\alpha_i\}$ від часу для типових структур A–G з рис. 5 наведено на рис. 7.

На рисунку 7, а наведено показники росту (верхній графік відповідає результатам, одержаним для детерміністичного моделю, нижній — для стохастичної при $\Sigma = 1,0$). Видно, що показники β_i , які визначають закон росту структур у часі, набувають різних значень в різні моменти часу. Така часова залежність означає те, що на ранніх стадіях еволюції системи, коли реалізуються процеси росту, на логаритмічних залежностях $W^2(t)$ реалізується лінійний закон. На пізніх стадіях (великі часові інтервали), коли процеси огрубіння стають пріоритетними спостерігається набір показників $\{\beta_i\}$. Це означає, що можливим є використання локальної степеневої апроксимації для гладкої функції, коли кожний показник β_i відповідає фіксованому часовому інтервалу: $W^2(\Delta t_i) \propto (\Delta t_i)^{2\beta_i}$. Відповідно до такого припущення функція $\psi(\cdot)$ у рівнянні (20) має вести себе більш складним чином.

Проводячи аналізу залежностей показників росту, видно, що

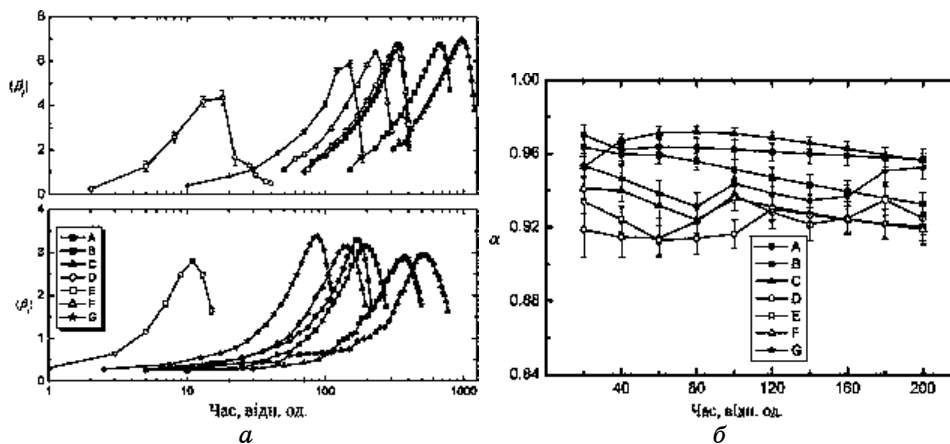


Рис. 7. Скейлінгові показники для кожної з структур з рисунка 5: а) набори показників росту (верхній графік відповідає результатам, одержаним для детерміністичного моделю, нижній — для стохастичної при $\Sigma = 1,0$); б) показник шерсткості.⁷

як для детерміністичного (верхній графік на рисунку 7, а), так і для стохастичного (нижній графік на рисунку 7, а) моделей спочатку β_i зростає та набуває максимального значення; потім β_i спадає. Воно набуває максимального значення набагато пізніше для структур В та С (при $t \approx 600$ та $t \approx 800$ відповідно) ніж для структур А, Е, F, G та D (при $t \in (150-300)$ та $t \approx 20$ для структури D). Порівнюючи результати залежностей $\{\beta_i\}$ для детерміністичного та стохастичного моделей, можна бачити, що у процесі еволюції системи $\{\beta_i\}$ зростають швидше для детерміністичної системи, ніж для стохастичної. Отже, процеси огрубіння в детерміністичній системі настають швидше, ніж для стохастичної. З фізичної точки зору це означає, що адитивний шум, зумовлений флюктуаціями потоку йонів, призводить до уповільнення процесів росту поверхні: вони уповільнені у часі (на малих часових інтервалах з малими значеннями $\beta_i < 1$). Крім того, процеси огрубіння пришвидшуються у детермінованій системі: вони спостерігаються з великими значеннями $1 < \beta_i < 7$. У стохастичній системі процеси росту спостерігаються пізніше, ніж у випадку $\Sigma = 0$, тоді як процеси огрубіння уповільнюються і характеризуються $1 < \beta_i < 3,5$. Таким чином, адитивні флюктуації у анізотропній системі здатні уповільнювати процеси зростання та огрубіння з одного боку, та зменшувати часові інтервали спостереження таких процесів, з іншого. На рисунку 7, б представлено залежності показника шерсткості α_i від часу для різних типів структур. Видно, що показник шерсткості не сильно змінюється з часом для кожної із досліджуваних структур. Відхили від середнього значення знаходяться в межах похибки обчислень.

4. СТОХАСТИЧНИЙ МОДЕЛЬ ІЗ ФЛЮКТУАЦІЯМИ КУТА РОЗПОРОШЕННЯ

У даному розділі узагальнимо модель (1), враховуючи те, що бомбівні йони сягають поверхні випадковим чином, тобто в різних місцях і моментах часу; отже, йон може сягати поверхні під випадковим кутом, величина якого незначно відрізняється від кута падіння потоку. Вважаючи, що потік йонів складається з йонів, розподілених з різним кутом падіння, у даному розділі розглянемо випадок, коли потік флюктує у часі і просторі так, що напрямком йонів створює однорідне і стаціонарне поле. Дослідимо випадок з Гаусовим розподілом профілю потоку, центрованим з певним кутом θ_0 . Тоді у динамічному рівнянні поля h з'являється флюктуаційна складова, що подається мультиплікативним шумом (із залежною від поля висоти інтенсивністю).

При проведенні досліджень далі припустимо, що ширини розподілу енергії в глибині матеріалу є однаковими, тобто $a_\mu = a_\sigma$.

Тоді відповідне детерміністичне рівняння еволюції висоти поверхні (1) визначається коефіцієнтами (15). Для врахування флюктуацій кута розпорошення перепишемо рівняння (1) у вигляді $\partial_t h = f(\theta, \nabla_\alpha h)$, де f — детерміністична сила та використано позначення $\nabla_\alpha = \partial/\partial\alpha$, $\alpha = \{x, y\}$. Уводячи малі відхилення від заданого кута θ_0 , можна розвинути в ряд функцію $f(\theta, \nabla_\alpha h)$ в околі θ_0 . Отже, для правої частини виразу одержимо: $f = f(\theta_0) + (\partial f/\partial\theta)|_{\theta=\theta_0} \delta\theta$. Далі будемо вважати, що $\delta\theta$ — випадкове поле, тобто $\delta\theta = \delta\theta(\mathbf{r}, t)$. Враховуючи фізичну природу процесу розпорошення, будемо вважати, що випадкова компонента $\delta\theta$ має Гаусові властивості, тобто

$$\langle \delta\theta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0; \quad \langle \delta\theta(\mathbf{r}, t) \delta\theta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D \sum C_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}') C_t(t - t'), \quad (21)$$

де D — параметер, залежний від характеристик потоку та зводиться до константи F , що задається виразом (15). Це враховує той факт, що мультиплікативні флюктуації виникають у системі лише за умови наявності потоку йонів, з $F \neq 0$ (аналог флюктуаційно-дисипативної теореми). Σ — інтенсивність шуму, яка задає дисперсію $\delta\theta$; C_r і C_t — просторова і часова кореляційні функції шуму $\delta\theta$. При подальшому розгляді будемо вважати, що $\delta\theta$ — квазибілий шум у часі з $C_t(t - t') \rightarrow \delta(t - t')$ та кольоровий у просторі з корелятором $C_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (2\pi r_c^2)^{-1} \exp[-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 / 2r_c^2]$, де r_c — радіус кореляції флюктуацій. При $\Sigma = 0$ флюктуації напрямків потоку (кута падіння) зникають, і реалізується чисто детерміністичний випадок. Розвиваючи в ряд коефіцієнти при просторових похідних у рівнянні (1), одержимо Лянжевенове рівняння у вигляді

$$\begin{aligned} \partial_t h = & \gamma_0 \nabla_x h + v_{\alpha 0} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 0}}{2} (\nabla_\alpha h)^2 - K \nabla^2 (\nabla^2 h) + \\ & + \left[\gamma_1 \nabla_x h + v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 1}}{2} (\nabla_\alpha h)^2 \right] \delta\theta, \end{aligned} \quad (22)$$

де $\gamma_0 = \gamma(\theta_0)$, $v_{\alpha 0} = v_\alpha(\theta_0)$, $\eta_{\alpha 0} = \eta_\alpha(\theta_0)$, $\gamma_1 = \partial_\theta \gamma|_{\theta=\theta_0}$, $v_{\alpha 1} = \partial_\theta v_\alpha|_{\theta=\theta_0}$, $\eta_{\alpha 1} = \partial_\theta \eta_\alpha|_{\theta=\theta_0}$. Рівняння (22) є узагальненим модельом Курамото–Сівашинського з урахуванням флюктуацій кута розпорошення [34].

4.1. Стійкість поверхневих структур у лінійному наближенні

Лінійну аналізу на стійкість стохастичної системи будемо проводити для статистичних моментів. Для цього усереднимо Лянжевенове рівняння (22) за шумом. У результаті одержуємо рівняння

для першого статистичного моменту у вигляді:

$$\begin{aligned} \partial_t \langle h \rangle = & \gamma_0 \nabla_x \langle h \rangle + v_{\alpha 0} \nabla_{\alpha\alpha}^2 \langle h \rangle + \frac{\eta_{\alpha 0}}{2} \langle (\nabla_\alpha h)^2 \rangle - K \nabla^2 (\nabla^2 \langle h \rangle) + \\ & + \left\langle \left[\gamma_1 \nabla_x h + v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 1}}{2} (\nabla_\alpha h)^2 \right] \delta\theta \right\rangle. \end{aligned} \quad (23)$$

Останній доданок можна обчислити за теоремою Новікова [67]. З формального представлення одержимо:

$$\langle \Xi \delta\theta(x, y; t) \rangle = \int dt' \int dx' \int dy' \langle \delta\theta(x, y; t) \delta\theta(x', y'; t') \rangle \left\langle \frac{\delta\Xi}{\delta(\delta\theta(x' y'; t'))} \right\rangle, \quad (24)$$

де Ξ — функціонал; $\delta/\delta(\delta\theta)$ — варіаційна похідна. Інтегрування проводиться за всіма величинами x' , y' і t' .

$$\text{Для розглядуваного моделю } \Xi = \gamma_1 \nabla_x h + v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 1}}{2} (\nabla_\alpha h)^2.$$

Варіаційну похідну можна обчислити за допомогою виразу

$$\frac{\delta\Xi}{\delta(\delta\theta)} = \frac{\partial\Xi}{\partial h} \left(\frac{\partial h}{\partial\delta\theta} \right)_{\alpha=\alpha'},$$

де другий множник одержимо з формального розв'язку Лянгенового рівняння (22). Отже, шукана функція відгуку набирає вигляду

$$\left(\frac{\partial h}{\partial\delta\theta} \right)_{\alpha=\alpha'} = \gamma_1 \nabla_x h \delta(x - x') + \delta(\alpha - \alpha') \left\{ v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 1}}{2} (\nabla_\alpha h)^2 \right\}. \quad (25)$$

У результаті варіаційну похідну запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Xi}{\delta(\delta\theta)} = & \gamma_1 \nabla_x \left[\gamma_1 \nabla_x h \delta(x - x') + \delta(\alpha - \alpha') \left\{ v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 1}}{2} (\nabla_\alpha h)^2 \right\} \right] \\ & + v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha\alpha}^2 \left[\gamma_1 \nabla_x h \delta(x - x') + \delta(\beta - \beta') \left\{ v_{\beta 1} \nabla_{\beta\beta}^2 h + \frac{\eta_{\beta 1}}{2} (\nabla_\beta h)^2 \right\} \right] + \\ & + \eta_{\alpha 1} (\nabla_\alpha h) \nabla_\alpha \left[\gamma_1 \nabla_x h \delta(x - x') + \delta(\beta - \beta') \left\{ v_{\beta 1} \nabla_{\beta\beta}^2 h + \frac{\eta_{\beta 1}}{2} (\nabla_\beta h)^2 \right\} \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

Перейдемо до розгляду стійкості лінеаризованої системи. З одержаного виразу випливає, що, оскільки коефіцієнт $\eta_{\alpha 1}$ відповідає за нелінійність у системі, для подальшої аналізи ним можна нехтувати. Отже, для варіаційної похідної одержимо вираз:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Xi}{\delta(\delta \theta)} &= \gamma_1^2 \nabla_x \left[\nabla_x h \delta(x - x') \right] + v_{\alpha 1} v_{\beta 1} \nabla_{\alpha \alpha}^2 \left[\nabla_{\beta \beta}^2 h \delta(\alpha - \beta') \right] \\ &+ \gamma_1 v_{\alpha 1} \left\{ \nabla_x \left[\nabla_{\alpha \alpha}^2 h \delta(\alpha - \alpha') \right] + \nabla_{\alpha \alpha}^2 \left[\nabla_x h \delta(x - x') \right] \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Далі представимо просторову кореляційну функцію наступним чином: $C_r(\mathbf{r}) = C_x(x)C_y(y)$ з максимумом при $\alpha = \alpha'$, де $C(0) = C_x(0) = C_y(0)$ і $C''|_{\alpha=\alpha'} = \partial_{xx}^2 C_x|_{x=x'} = \partial_{yy}^2 C_y|_{y=y'}$ з $C''|_{\alpha=\alpha'} < 0$. Інтегруючи частинами за x' , y' і t' , одержимо шуканий вираз для кореляційної функції першого порядку за h :

$$\begin{aligned} &\left\langle \left[\gamma_1 \nabla_x h + v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha \alpha}^2 h + (\eta_{\alpha 1} / 2) (\nabla_{\alpha} h)^2 \right] \delta \theta \right\rangle = \\ &\left\{ v_{\alpha 1}^2 C''|_{\alpha=\alpha'} \nabla_{\alpha \alpha}^2 + \gamma_1^2 C(0) \nabla_{xx}^2 + C(0) (v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha \alpha}^2)^2 \right. \\ &\left. + \gamma_1 v_{1x} \left[C''|_{\alpha=\alpha'} \nabla_x + C(0) \nabla_{xxx}^3 \right] + \gamma_1 v_{\alpha 1} C(0) \nabla_{\alpha \alpha}^2 \nabla_x \right\} \langle h \rangle \end{aligned} \quad (28)$$

Перепишемо лінеаризоване рівняння еволюції для середнього $\langle h \rangle$ у стандартному вигляді:

$$\partial_t \langle h \rangle = \gamma_{ef} \langle h \rangle + v_{ef} \langle h \rangle - K_{ef} \langle h \rangle, \quad (29)$$

де уведено наступні позначення:

$$\begin{aligned} \gamma_{ef} &\equiv \left(\gamma_0 + \gamma_1 \Sigma \left[v_{x1} C''|_{\alpha=\alpha'} + v_{x1} C(0) \nabla_{xx}^2 + v_{\alpha 1} C(0) \nabla_{\alpha \alpha}^2 \right] \right) \nabla_x, \\ v_{ef} &\equiv \left(v_{\alpha 0} + \Sigma C''|_{\alpha=\alpha'} v_{\alpha 1}^2 \right) \nabla_{\alpha \alpha}^2 + \gamma_1^2 \Sigma C(0) \nabla_{xx}^2, \\ K_{ef} &\equiv -K \left(\nabla_{\alpha \alpha}^2 \right)^2 + \Sigma C(0) \left(v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha \alpha}^2 \right)^2. \end{aligned} \quad (30)$$

Легко бачити, що розв'язок рівняння (29) може бути знайдений у вигляді

$$\langle h \rangle = A \exp \left[i(k_x x + k_y y - \omega t) + \aleph t \right].$$

Отже, підставляючи його у рівняння (29) та розділяючи на дійсну та уявну частини, маємо:

$$\begin{aligned} \omega &= -k_x \left(\gamma_0 + \gamma_1 v_{x1} \Sigma C''|_{x=x'} \right) + k_x \gamma_1 v_{x1} \Sigma C(0) (k_x^2 + k_y^2), \\ \aleph &= -k_x^2 \Gamma_x - k_y^2 \Gamma_y - K (k_x^2 + k_y^2)^2 + \Sigma C(0) (v_{x1}^2 k_x^2 + v_{y1}^2 k_y^2)^2, \\ \Gamma_x &\equiv v_{x0} + v_{x1}^2 \Sigma C''|_{x=x'} + \gamma_1^2 \Sigma C(0), \quad \Gamma_y \equiv v_{y0} + v_{y1}^2 \Sigma C''|_{y=y'}. \end{aligned} \quad (31)$$

За умови $\Gamma_{\alpha} < 0$ з'являється певний діапазон низьких частот,

які будуть експоненційно зростати. З аналізу досліджуваного моделю впливає, що при $v_{y0} < 0$ і $C'' < 0$ з $C(0) > 0$ величина Γ_y завжди буде негативною. Тобто вздовж осі y завжди виникає нестабільність. Варіація значень параметрів θ , a_σ та характеристик шуму може змінювати знак величини Γ_x . Таким чином, нестійкість у x -напрямку може виникати при варіації кута розпорощення, глибини проникнення йона в ціль та статистичних характеристик пучка налітних йонів.

Розглянемо зміну стійкості системи з мультиплікативним шумом. На рисунку 8 зображено відповідні фазові діаграми при фіксованій інтенсивності шуму Σ та різних значеннях радіуса кореляції r_c . Для випадку $\Gamma_x = 0$ області стійкості системи при низьких частотах обмежуються пунктирними кривими. Суцільна крива розділяє всю діаграму $a_\sigma(\theta)$, де величина $B \equiv 2K - 4\Sigma C(0)v_{\alpha 1}^4$ обертається на нуль за умови $k_x = k_y$. Цей параметер відповідає за стійкість системи при великих хвильових числах. Штрихові лінії на рис. 8 відповідають параметрам системи, коли виконується умова $k_x = k_y$. В областях позначених хвильовими числами k_x та k_y хвильові структури розташовані, відповідно, у x - або y -напрямку. З лінійної аналізи на стійкість маємо, що орієнтація структур визначається глибиною проникнення a_σ та кутом розпорощення θ при заданих Σ і r_c . Порівнюючи графіки на рис. 8, а, б, легко бачити, що статистичні характеристики шуму $\delta\theta$ змінюють характер поведінки системи: при малому радіусі кореляції флюктуацій ку-

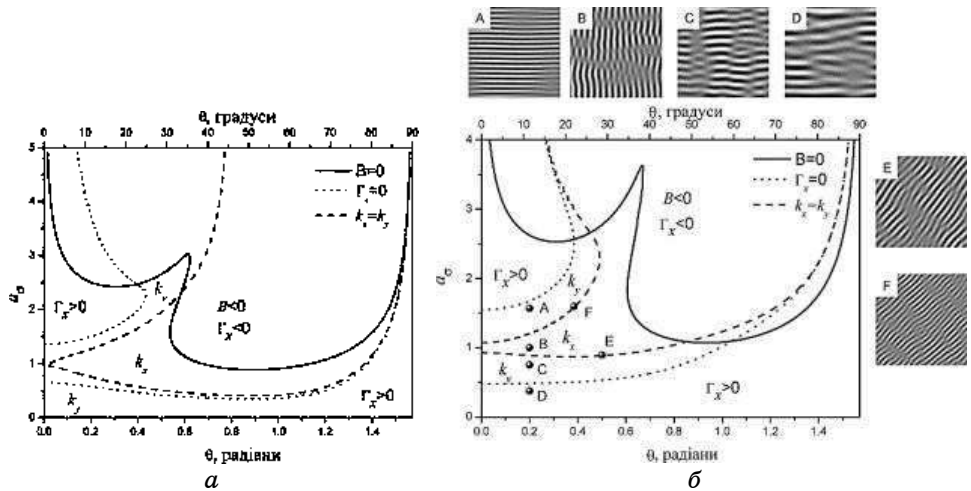


Рис. 8. Фазові діаграми системи з мультиплікативним шумом при $\Sigma = 1,0$ (в областях, позначених k_x та k_y , обрані структури характеризуються відповідним напрямком); графіки (а), (б) відповідають $r_c = 0,65$, $r_c = 1$ відповідно.⁸

та розпорошення область нестійкості системи при заданому $a_\sigma = 1$ більша, ніж при більшому радіусі r_c . Окрім того, зміна величини r_c може привести до зростання параметрів системи, при яких спостерігаються хвильові структури орієнтовані вздовж k_x . Слід зазначити, що при великому r_c у фіксованому інтервалі кутів падіння θ переорієнтування хвильових структур може відбутися зі зміною параметра a_σ . В інтервалі значень кута розпорошення θ , що знаходиться між абсцисою точки E і абсцисою точки F можна спостерігати один із варіантів реверсивності: при малих a_σ (нижче нижньої пунктирної лінії, де $k_x = k_y$) хвильові структури розташовані вздовж k_y ; у проміжній області a_σ (між двома пунктирними лініями) хвильові структури розташовані вздовж k_x ; при великих a_σ хвильові структури знову розташовані вздовж k_y (див. знімки зроблені в точках $A-D$).

Аналогічна картина реалізується при зміні кута розпорошення з заданим a_σ . Для параметрів системи, що відповідають пунктирній кривій (див. точки E, F), хвильові структури характеризуються кутом орієнтації $\pi/4$ з $k_x = k_y$.

Далі розглянемо особливості поведінки довжин хвиль λ_x і λ_y зі зміною кута розпорошення θ та глибини проникнення a_σ (рис. 9, а) і кореляційного радіуса r_c та енергетичного параметра F (рис. 9, б). Обрані довжини хвиль відповідають найменшим значенням хвильових чисел для кожного напрямку. З рисунку видно, що зміна значень параметрів a_σ та θ приводить до змін у напрямку

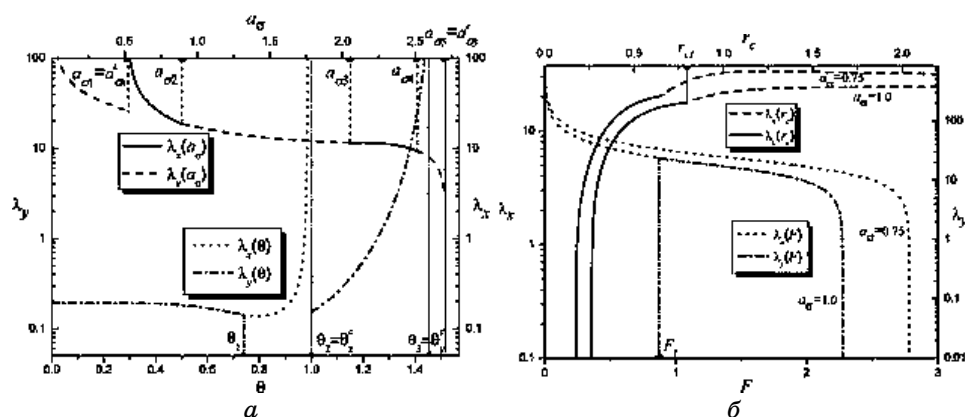


Рис. 9. Довжина хвилі λ_x та λ_y а) від кута падіння θ при $a_\sigma = 0,45$, $r_c = 0,65$ та безрозмірної глибини проникнення a_σ при $\theta = 0,4763$, $r_c = 1,0$ (a_{σ_i} з $i = 1, \dots, 4$ позначають порогові значення, коли виникає зміна напрямку хвильового вектора структур) при $F = 1,0$ ($0 < \theta < \pi/2$ виміряно у радіанах); б) від радіуса кореляції r_c при $F = 1,0$ та енергетичного параметра F з $r_c = 1,0$ при $\theta = 0,4763$. Решта параметрів: $\sigma = 1$, $\Sigma = 1$.⁹

хвильових структур. Порогові значення глибини проникнення та кута падіння відповідають $a_{\sigma i}$ і θ_i , які позначають точку зміни напрямку структур. Відмітимо присутність двох критичних точок $a_{\sigma 1} = a_{\sigma x}^c$ і $a_{\sigma 5} = a_{\sigma y}^c$, в яких відповідні довжини хвиль приймають нескінченно великі значення з $\Gamma_x = 0$. Для кута розпорошення існують два критичних значення, $\theta_2 = \theta_x^c$ і $\theta_3 = \theta_y^c$, які позначають розбіжність довжини хвилі, коли Γ_x набуває нульових значень. З рисунку 9, б видно, що з ростом енергетичного параметра F довжина хвилі структур спадає до нуля. При малому a_σ у точці $F = F_1$ змінюється напрямок структур, тоді як при великих значеннях a_σ таких змін не відбувається. Залежність $\lambda_\alpha(r_c)$ проявляє немонотонну поведінку: при малому r_c довжина хвилі зростає, тоді як при великому r_c спостерігається її спад. Існує критична точка для кореляційного радіуса r_{c1} , в якій змінюється напрямок хвильових структур.

Таким чином, кореляційні характеристики на ранніх стадіях істотно впливають на процеси утворення хвильових структур (випадок лінеаризованого моделю).

4.2. Динаміка процесів самоорганізації поверхні при йонному розпорошенні

У попередньому підрозділі розглянуто лінеаризований модель, що уможливило пояснити втрату стійкості стану, який відповідає пласкій поверхні. Було показано, що основну роль тут відіграє ефективний коефіцієнт поверхневого натягу. Вплив шуму приводить до його перенормування та зсуву відповідних критичних значень, при переході через які втрачається стійкість вздовж x -напрямку.

У даному підрозділі розглядається вплив нелінійних складових $\eta_\alpha \neq 0$ у рівнянні еволюції поля висоти. Подальше дослідження базується на процедурі моделювання, яка зводиться до розв'язку нелінійного стохастичного диференційного рівняння (22). Для розв'язування Лянжевенового рівняння з мультиплікативним шумом, записаного у Стратоновичевому численні, було використано Мільштайнову схему [68]. Джерело білого шуму моделювалося за алгоритмом Бокса–Мюллера, де одержані випадкові числа розподілені за Гаусом [69]. Моделювання проводилося за схемою, представленою у попередньому розділі.

4.2.1. Еволюція функції розподілу висоти поверхні

Однією з важливих характеристик при дослідженні процесів самоорганізації стохастичних систем є густина ймовірності реалі-

зації значень випадкового поля.

Для вивчення особливостей розподілу поля висоти h використаємо асиметрію m_3 та ексцес m_4 , означені у стандартний спосіб:

$$\begin{aligned} m_3 &= \frac{\langle (h(\mathbf{r}) - \langle h(\mathbf{r}) \rangle)^3 \rangle}{W^3}, \\ m_4 &= \frac{\langle (h(\mathbf{r}) - \langle h(\mathbf{r}) \rangle)^4 \rangle}{W^4}, \\ W^2 &= \langle (h(\mathbf{r}) - \langle h(\mathbf{r}) \rangle)^2 \rangle, \end{aligned} \quad (32)$$

де $\langle h(\mathbf{r}) \rangle$ — середнє значення поля висоти, $\langle h(\mathbf{r}) \rangle \equiv V^{-1} \sum_{\mathbf{r}} h(\mathbf{r}, t)$, де $V = L^d$ — об'єм системи (L — лінійний розмір системи).

Асиметрія m_3 це міра симетрії профілю базового рівня поверхні. Її знак характеризує положення точок пропорційно над ($m_3 > 0$) або під ($m_3 < 0$) середнім рівнем поверхні. Ексцес m_4 описує хаотичність поверхні в порівнянні з випадковою (Гаусовою) поверхнею, де для Гаусового розподілу маємо $m_4 = 3.0$. Ексцес також характеризує негладкість функції розподілу висот. Якщо більшість особливостей поверхні зосереджено поблизу середнього рівня поверхні, то ексцес буде меншим, ніж для випадку розташування особливостей далі від середнього рівня.

На рисунку 10, *a* показано часові зрізи поверхні, одержані при: $a_\sigma = 1,2$, $\theta = 0,4$, $F = 1,0$, $\sigma = 1,0$, $K = 2,0$, $\Sigma = 1,0$, $r_c = 1,0$ у моменти часу $t = 20, 40, 60$ і 100 . З рисунка видно, що на ранніх стадіях розпорошення формуються видовжені структури, тоді як на великих часах ($t = 100$) утворюються рівновісні структури (нанодірки). Таким чином, нелінійні ефекти та дія шуму критичним чином змінюють морфологію поверхні, порівняно із видовженими структурами у лінійній системі, показаними на рисунку 8, *б*.

На рисунку 10, *б* зображено функції розподілу висоти поверхні для знімків з рис. 10, *a*. Бачимо, що на початкових стадіях еволюції системи ($t = 20$) даний розподіл є наближеним до Гаусового з малою дисперсією. З часом спостерігаємо відхил від центрального в нулі Гаусового розподілу, та при досягненні певного моменту часу функція густини ймовірності стає симетричною і центрованою у нулі.

На рисунку 10, *в* зображено зміну з часом ексцесу m_4 та асиметрії m_3 для вище заданих параметрів системи. Для заданих Гаусових початкових умов маємо: $m_4 \approx 3,0$, $m_3 \approx 0,0$ при $t = 0$. Ексцес з часом зростає поки не досягне свого максимуму. Асиметрія спадає до свого мінімуму, і згодом починає прямувати до нуля. Ці дві величини відображають форму функції розподілу зобра-

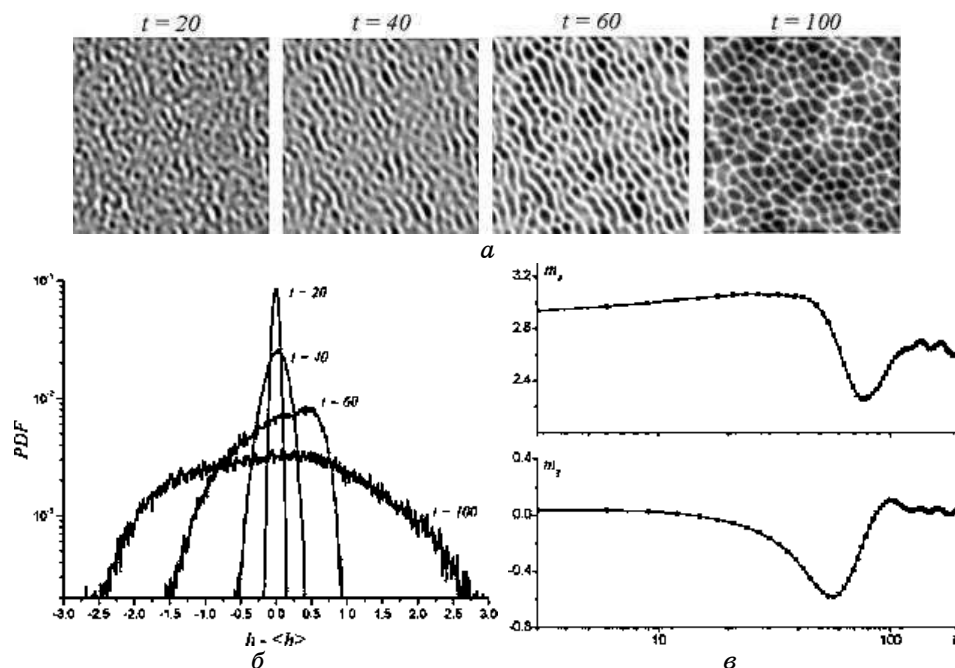


Рис. 10. Типова картина еволюції системи з мультиплікативними флюктуаціями на ранніх стадіях. (а) Часові зрізи розподілу поля h , одержані для різних моментів часу. (б) Функція розподілу висот для різного часу розпорощення. (в) Експес та асиметрія від часу. Відповідні залежності одержано при: $a_\sigma = 1,2$, $\theta = 0,4$, $F = 1,0$, $\sigma = 1,0$, $K = 2,0$, $\Sigma = 1,0$, $r_c = 1,0$.¹⁰

жену на рис. 10, б.

На рисунку 11 наведено фазову діаграму у площині a_σ , θ , що ілюструє області параметрів, коли реалізуються різні типи структур. Як бачимо, чисельно одержані результати добре узгоджуються з аналітично проведеною лінійною аналізою на стійкість. Дійсно, критичні точки на лініях відповідають за зміну знаку величини Γ_x . При високій і низькій глибині проникнення a_σ хвильові структури орієнтовані вздовж k_y напрямку (див. знімок для точки А та С), оскільки $\Gamma_x > 0$. Для проміжних значень a_σ , вплив нелінійної детерміністичної складової $\eta_\alpha (\nabla_\alpha h)^2$ та стохастичний внесок приводять до утворення ізотропні (рівновісних) структур, які характеризуються гексагональною симетрією (див. знімок для точки В). Характерно, що процесом утворення різного типу структур можна керувати, змінюючи не лише величину потоку опромінення та енергію налітних частинок, але й варіюючи ширину розкиду налітних йонів, тобто дисперсію кута розпорощення. Важливим також є той факт, що додатковим керувальним

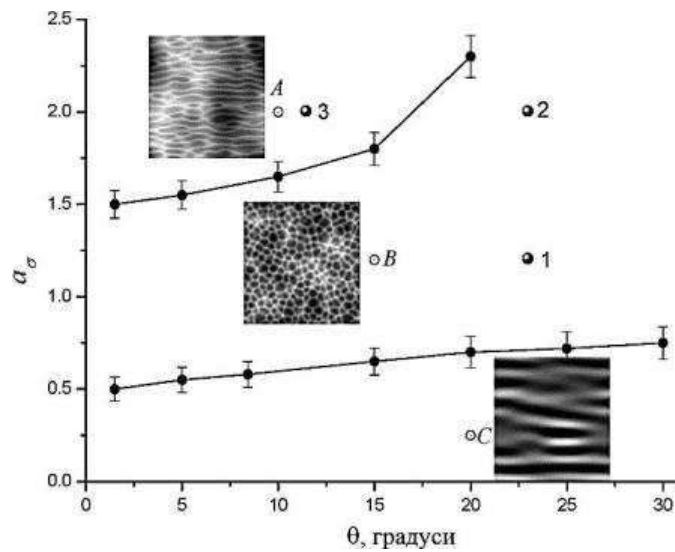


Рис. 11. Фазова діаграма для анізотропного нелінійного моделю при $F = 1$, $\Sigma = 1$, $r_c = 1$. Знімки зроблено для параметрів системи, що відповідають точкам A , B і C відповідно.¹¹

параметром при йонному розпорошенні виступає радіус кореляції зовнішнього шуму.

4.2.2. Масштабні властивості морфології поверхні

У попередньому розділі нами було показано, що для системи з адитивним шумом показники шерсткості та росту поверхні α та β залежать від параметрів системи та набувають різних значень в різні часові інтервали. У розглядуваній системі уведено мультиплікативний шум, що визначається енергетичними характеристиками потоку налітних йонів та задається інтенсивністю шуму Σ й радіусом кореляції флюктуацій r_c . Таким чином, з урахуванням перенормованих основних параметрів системи, відповідальних за стійкість, і нелінійних ефектів масштабні показники α та β будуть функціями вищезазначених характеристик шуму. Додатково до вказаних скейлінгових характеристик будемо досліджувати зміну фрактальної розмірності поверхні D_2 . Для цього розглянемо парну кореляційну функцію, для визначення фрактальних властивостей поверхні:

$$C_p(\mathbf{r}, t) = \langle h(\mathbf{r} + \mathbf{r}', t) h(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (33)$$

За відсутності характерного просторового масштабу дана коре-

ляційна функція має поводитись алгебраїчно, тобто $C_p(\mathbf{r}, t) \propto 1/r^\Delta$, де масштабний показник Δ пов'язаний з фрактальною кореляційною розмірністю D_2 наступним чином: $\Delta = d - D_2$. Із визначення кореляційної фрактальної розмірності D_2 випливає, що при $D_2 = 0$ не відбувається ніяких масштабних змін. Отже, поверхня у заданий момент часу $t \in \Gamma$ Гаусовою поверхнею з відсутністю кореляцій, тобто з рівномірним для всіх хвильових чисел k внеском типу білого шуму; відповідний просторовий корелятор (33) зводиться до Діракової дельта-функції: $C_p(r) \rightarrow \delta(r)$. У випадку $D_2 = 2$ одержуємо типову картину для дифузного розповсюдження на структурованій поверхні. У цьому випадку фрактальна розмірність D_2 еквівалентна топологічній розмірності d . Таким чином, зміна фрактальної розмірності D_2 з часом сигналізує про зміну фрактальності поверхні від некорельованої Гаусової поверхні з $D_2 = 0$ до добре структурованої поверхні з фрактальною розмірністю $D_2 = d = 2$.

Для дослідження скейлінгових характеристик анізотропної системи з мультиплікативними флюктуаціями, як і у попередньому розділі, будемо використовувати апроксимацію кореляційної функції $C_h(r, t)$ степеневими законами для визначення множин показників росту $\{\beta_i\}$ та шерсткості $\{\alpha_i\}$. Проведемо розрахунки масштабних показників у фіксованій точці на фазовій діаграмі (θ, a_σ) для різних значень інтенсивності шуму Σ та кореляційного радіуса r_c . Обраною точкою є точка 1 на фазовій діаграмі на рис. 11, яка характеризується наступними параметрами: $a_\sigma = 1, 2$, $\theta = 0, 4$, $F = 1, 0$, $\sigma = 1, 0$, $K = 2, 0$. Відповідні залежності $\{\alpha_i\}$, $\{\beta_i\}$ і D_2 зображено на рис. 12.

На рисунку 12, а зображено кореляційну функцію $C_h(r, t)$; показник шерсткості $\{\alpha_i\}$ наведено на рис. 12, б; рис. 12, в ілюструє зміну з часом величини $W^2(t)$ та показника росту $\{\beta_i\}$; парну кореляційну функцію $C_p(r)$ представлено на рис. 12, д; пов'язану з нею фрактальну розмірність D_2 у фіксовані моменти часу зображено на рис. 12, з. Як видно з рис. 12, а, процес росту на ранніх стадіях не є стаціонарним і показник шерсткості для малої дисперсії кута розпорошення складає величину порядку 0,95. При даній множині керувальних параметрів (a_σ і θ) і малому Σ кореляційний радіус r_c суттєво не впливає на поведінку системи. Зі збільшенням Σ показник шерсткості набуває менших значень, показники $\{\alpha_i\}$ набувають різних значень для різних часових інтервалів. Для малого r_c і великого Σ значення показника шерсткості зменшуються.

Розглянемо детально поведінку системи на малому часі, коли відбуваються процеси утворення й росту структур. Порівнюючи криві для величини W^2 при різних Σ і r_c та поведінку показника росту β з часом (див. рис. 12, в), можна стверджувати, що зі збі-

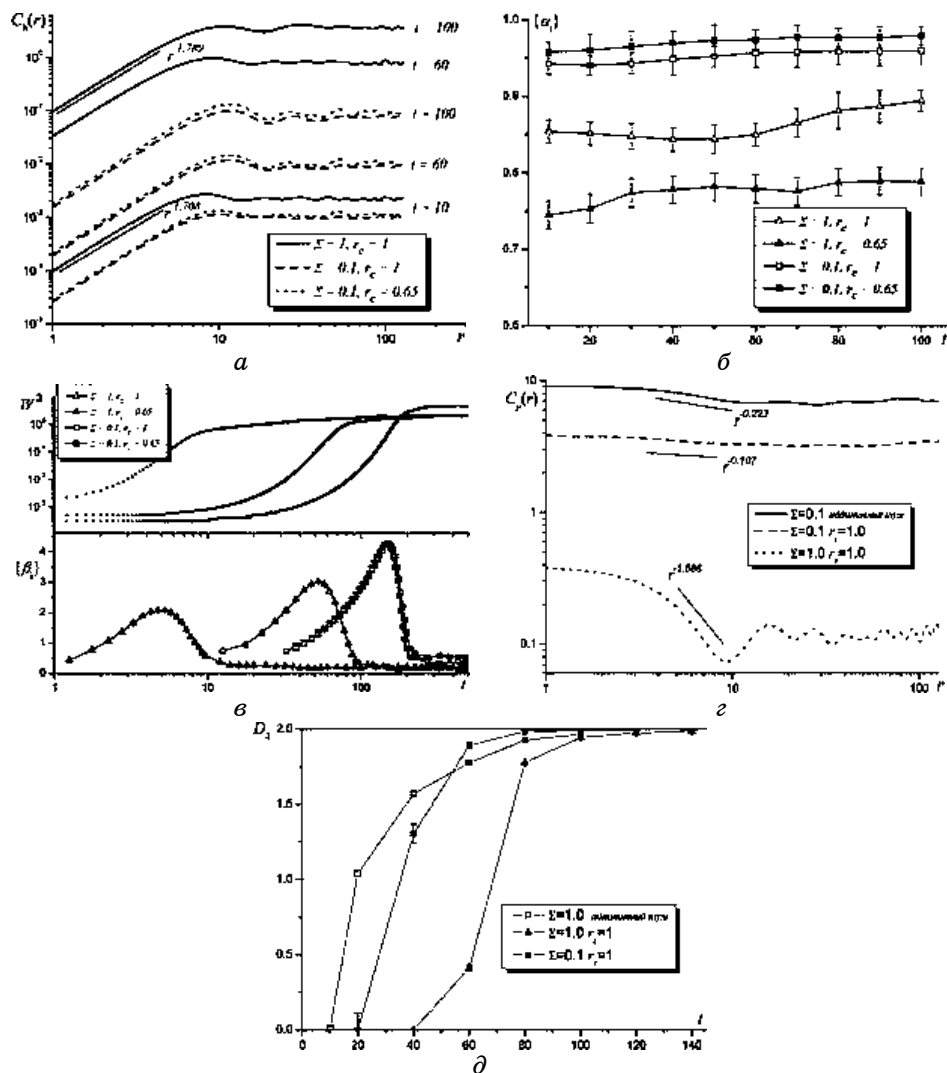


Рис. 12. Кореляційна функція $C_h(r)$ (а); показник шерсткості α (б); величина W^2 та показник росту β (в); кореляційна функція $C_p(r)$ у момент часу $t=60$ (г); фрактальна розмірність D_2 (д). Решта параметрів: $a_\sigma = 1,2$, $\theta = 0,4$, $F = 1$, $\sigma = 1$, $K = 2$.¹²

льшенням інтенсивності шуму Σ положення піку показника β зміщується у напрямку малого часу.

Це означає, що з ростом інтенсивності шуму при обраних керувальних параметрах величина W^2 зростає за менший проміжок часу, ніж для малих Σ . Зсув положення піку при великих Σ також означає, що мультиплікативні флюктуації спонукають до

появи нелінійних ефектів на малих проміжках часу. Це є природнім, оскільки мультиплікативність шуму приводить до нелінійності, і великий шум приводить до значних перетворень у процесах росту.

Із фізичної точки зору великі флюктуації пришвидшують процеси росту (зменшують часовий проміжок з малим $\beta_I < 1$), процеси утворення структур реалізуються при $\beta_i \leq 3$. При малій інтенсивності шуму процеси росту відбуваються пізніше ніж для великих Σ , тоді як процеси утворення структур пришвидшуються: $\beta_i \leq 4$. Таким чином, мультиплікативний шум в анізотропній системі, з одного боку, здатний пришвидшувати процеси росту і утворення структур, а з іншого — приводити до зменшення часових проміжків, на яких ці процеси відбуваються. Кореляційні властивості шуму, що визначаються параметром r_c , при малій інтенсивності, істотно не впливають на процеси росту. Однак, зі збільшенням Σ малий радіус кореляції r_c понижує величину показника росту; процеси росту і структуроутворення відбуваються раніше, ніж при великих r_c . На великих часових проміжках суттєвої різниці у значеннях β_i для різних часових інтервалів немає. У даному випадку при збільшенні інтенсивності шуму значення β_i зменшуються (пор. чорні трикутники та квадратики); зміни кореляційного радіуса не впливають на значення β_i (пор. пусті та чорні трикутники).

Зміну фрактальних властивостей поверхні зображено на рис. 12, *г*, *д*, де проведено порівняння фрактальних особливостей для систем з адитивним та мультиплікативним шумами. Із зображення парної кореляційної функції $C_p(r)$ на рис. 12, *г* легко бачити, що у момент часу $t = 60$ адитивний шум приводить до спадання кореляційної функції $C_p(r)$ з показником $\Delta = 0,227$, тоді як внесок мультиплікативного шуму з такою ж інтенсивністю $\Sigma = 1,0$ при $r_c = 1,0$ збільшує показник Δ до 1,587. Згідно з визначенням кореляційної розмірності D_2 це означає, що під впливом мультиплікативного шуму з великою інтенсивністю на малих часових проміжках фрактальні особливості поверхні є добре вираженими (див. рис. 12, *д*). Із часової залежності фрактальної розмірності D_2 для системи з мультиплікативним шумом випливає, що на ранніх стадіях поверхня характеризується Гаусовими властивостями типу білого шуму у просторі (кореляційна функція має вигляд Діракової дельта-функції). На малих проміжках часу проявляються фрактальні властивості, які характеризуються $0 < D_2 < 2$. Для великого часу утворюються добре виражені структури, фрактальна розмірність яких D_2 співпадає з топологічною $d = 2$. У випадку адитивних флюктуацій часові інтервали утворення чітко виражених структур збільшуються, в порівнянні з системою з мультиплікативним шумом.

Далі, порівняємо часові залежності для показників шерсткості, росту та фрактальної розмірності при різних значеннях параметрів системи a_σ і θ , що зображено на рис. 13, *a*, *б* для точки 2 та точки 3 на фазовій діаграмі на рис. 11. Як бачимо, при $a_\sigma = 2,0$, $\theta = 0,4$ (рис. 13, *a*) поведінка системи така ж як і в попередньому випадку. При великій інтенсивності шуму максимум β_i є меншим і виникає раніше, ніж для малої інтенсивності шуму. Зі зменшенням кореляційного радіуса флюктуацій кута розповсюдження r_c значення показників росту β_i зменшуються. Це є природним, оскільки точки з координатами $a_\sigma = 1,2$, $\theta = 0,4$ та $a_\sigma = 2,0$, $\theta = 0,4$ (точки 1 і 2 на рис. 11) знаходяться в одній області на фазовій діаграмі. Зміна r_c при малих Σ істотно не впливає на динаміку системи і не змінює морфологію поверхні. Порівнюючи криві для залежності фрактальної розмірності D_2 від часу для двох вищезазначених множин параметрів системи, бачимо, що при малих Σ величина D_2 є меншою, ніж у попередньо розглянутому випадку (пор. залежності $D_2(t)$ на рис. 12, *д*, 13 *a*)

На рисунку 13, *б* представлено динаміку системи у іншій області фазової діаграми зображеної на рис. 11 (в околі точки 3). Як бачимо, при малих Σ універсальний закон для процесів росту реалізується раніше, ніж у випадку флюктуацій великої інтенсивності. Більш того, велика інтенсивність шуму затримує динаміку еволюції системи. Зростання β_i і α_i при великих Σ пов'язане зі зміною морфології поверхні (див. відповідні знімки). Таким чи-

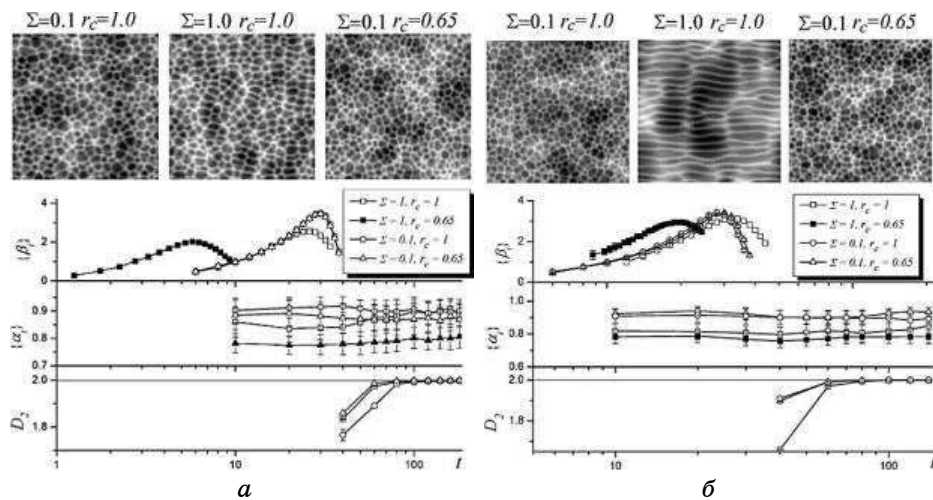


Рис. 13. Показники шерсткості α , росту β та фрактальна розмірність D_2 від часу при (а) $a_\sigma = 2,0$, $\theta = 0,4$ (точка 2 на фазовій діаграмі на рис. 11); (б) $a_\sigma = 2,0$, $\theta = 0,2$ (точка 3 на фазовій діаграмі на рис. 11). Решта параметрів: $F = 1$, $\sigma = 1$, $K = 2$.¹³

ном, фазова діаграма, зображена на рис. 11, може змінюватися при різних Σ . Величина r_c не впливає на значення α_i і β_i при малих Σ і не приводить до зміни морфології поверхні. При великій інтенсивності шуму та малому кореляційному радіусі динаміка системи аналогічна, як і при великих r_c , однак всі процеси перебігають раніше при малому r_c . Великі Σ та малі r_c понижують значення показника шерсткості.

Як показано у роботі [62], шерсткість поверхні, визначена за допомогою $W(L,t)$, пов'язана зі структурним фактором $S(k)$ наступним чином: $W^2(L,t) = V^{-1} \sum_{k \neq 0} S(k,t)$, де $S(k,t) = V^{-1} \langle h_k(t) h_{-k}(t) \rangle$.

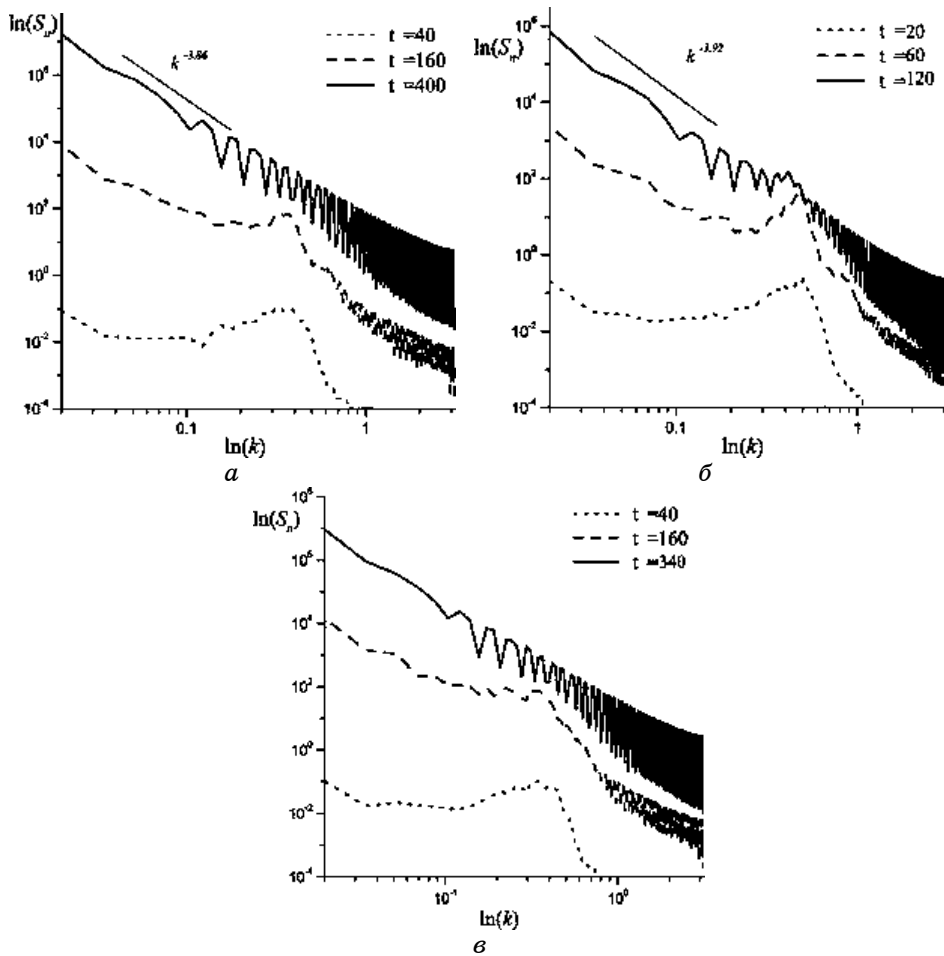


Рис. 14. Еволюція сферично усередненого структурного фактора $S(k,t)$ при: а) $\Sigma = 0,1, r_c = 1,0$; б) $\Sigma = 1,0, r_c = 1,0$; в) $\Sigma = 0,1, r_c = 0,65$. Решта параметрів: $a_\sigma = 1,2, \theta = 0,4, F = 1, \sigma = 1, K = 2$.¹⁴

Структурний фактор $S(k, t)$ має вигляд [62]

$$S(k, t) = k^{-(d+2\alpha)} \Theta(k^z t), \quad (34)$$

де

$$\Theta(k^z t) \propto \begin{cases} k^{2\alpha} t^{2\alpha/\beta} & \text{при } k^z t \ll 1, \\ \text{const} & \text{при } k^z t \gg 1, \end{cases} \quad (35)$$

і розраховується як $S(k, t) \propto k^{-(d+2\alpha)}$ для великого t і $S(k, t) \propto t^{2\beta}$ для малого t .

На рисунку 14 зображено еволюцію сферично усередненого структурного фактора $S(k, t) = N_k^{-1} \sum_{k \leq |\mathbf{k}| \leq k + \Delta k} S(\mathbf{k}, t)$, визначеного на

колі, де N_k — число точок у колі діаметром Δk . Розглянуто випадки для двох варіантів інтенсивності шуму і радіусів його кореляції. Результати представлено на рис. 14, *a*, *б*, *в*. Видно, що на ранніх стадіях еволюції система обирає хвильові структури з певними хвильовими числами (точкові криві), а на пізніх стадіях реалізується алгебраїчна форма структурного фактора. На великих часових інтервалах показник α можна знайти з виразу $S(k) \propto k^{-(d+2\alpha)}$. Як показано на рис. 14, *a*, *б* для вищезазначених параметрів системи $S(k) \propto k^{-3,86}$ для $\Sigma = 0,1$ і $S(k) \propto k^{-3,92}$ для $\Sigma = 1,0$, де $d = 2$. Таким чином, показники шерсткості набувають значень $\alpha \approx 0,93$ і $\alpha \approx 0,96$, що добре узгоджується з одержаними даними для показника шерсткості з аналізу кореляційної функції $C_h(r)$ (див. рис. 12, *б*).

5. ФОРМУВАННЯ СТАЦІОНАРНИХ ПОВЕРХНЕВИХ СТРУКТУР У ПРОЦЕСАХ ЙОННОГО РОЗПОРОШЕННЯ

У попередніх розділах основні дослідження було зосереджено на виявленні характеру утворюваних поверхневих структур та з'ясуванні динамічних властивостей росту поверхні або її ерозії та встановленні закономірностей, що описують зміну шерсткості поверхонь. Як зазначалося вище, рівняння Курамото–Сівашинського (1) не передбачає існування гладкої поверхні як стійкого розв'язку. У попередніх розділах було показано, що кількість поверхневих структур виходить з часом на стаціонарне значення, проте при цьому вони еволюціонують упродовж всього часу розпорошення. При цьому, експериментально було показано, що залежно від умов розпорошення поверхня може ставати гладкою, або структурованою, а відповідні структури будуть стаціонарними (незмінними у часі).

У даному розділі буде досліджено процеси утворення стаціона-

рних поверхневих структур при йонному розпорошенні матеріалів. В рамках узагальнення анізотропного моделю Бредлі–Харпера буде розглянуто поведінку системи, що описується стохастичним рівнянням Курамото–Сівашинського з мультиплікативним шумом (22), обумовленим флюктуаціями кута розпорошення, з урахуванням процесів релаксації опромінюваної поверхні за рахунок перерозподілу вибитих атомів на поверхні цілі. Буде проаналізовано динаміку утворення стаціонарних поверхневих структур в залежності від основних параметрів системи, що зводяться до кута розпорошення та властивостей цілі (глибини проникання йона в цілі). Буде встановлено вплив внутрішнього мультиплікативного шуму на зміну морфології стаціонарних структур та проаналізовано динаміку структурних дефектів.

5.1. Стабілізація поверхневих структур

Для опису стаціонарних у часі поверхневих структур модель Курамото–Сівашинського (1) узагальнюється за рахунок уведення до нього лінійної складової ($-\alpha^*h$), що приводить до стабілізації системи. У такому разі узагальнене рівняння Курамото–Сівашинського з флюктуаціями кута розпорошення набуває наступного вигляду:

$$\begin{aligned} \partial_t h = & -\alpha^* h + v_{\alpha 0} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 0}}{2} (\nabla_{\alpha} h)^2 - K \nabla^2 (\nabla^2 h) + \\ & + \left[\gamma_1 \nabla_x h + v_{\alpha 1} \nabla_{\alpha\alpha}^2 h + \frac{\eta_{\alpha 1}}{2} (\nabla_{\alpha} h)^2 \right] \delta\theta. \end{aligned} \quad (36)$$

Уведені у розгляд процеси затухання приводять до порушення трансляційної інваріантності поверхні. Як показано у роботах [70, 71], у найпростішому ізотропному випадку при $k = k_x = k_y$ для коефіцієнта затухання можна визначити критичне значення $\alpha_c^* = 0,25$, яке позначає границю утворення просторово нестійких мод (біфуркація Тюрінга). Відповідне критичне значення хвильового числа $k_c = 1/\sqrt{2}$; це означає, що при наближенні величини α^* до свого критичного значення знизу кількість нестійких мод істотно зменшується, і залишається тільки одна $k = k_c$, яка відповідає за структуроутворення. Однак при $0 < \alpha^* < \alpha_c^*$ тривіальний розв'язок $h = 0$ є нестійким, і експоненційно зростають моди, що знаходяться в інтервалі $1/2 + \sqrt{1/4 - \alpha^*} \geq k^2 \geq 1/2 - \sqrt{1/4 - \alpha^*}$. Нелінійна складова відповідного рівняння Курамото–Сівашинського, що відповідає за переміщення цих мод, приводить до формування стійких структур [72, 73]. При $\alpha^* > \alpha_c^*$ у фіксованій області основних пара-

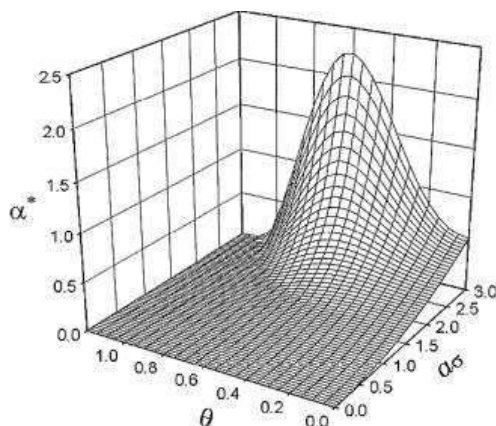


Рис. 15. Фазова діаграма для структуроутворення (під поверхнею реалізуються стаціонарні структури; над поверхнею реалізується гладкий профіль).¹⁵

метрів системи ніяких просторових модуляцій спостерігатися не буде, і в результаті одержуємо лише гладку поверхню, тобто розв'язок $h=0$ є стійким. Даний модель широко використовується для вивчення стаціонарних структур з дефектами [74] і формування структурованих островів [75].

Розглянемо поведінку системи, що описується загасальним детерміністичним рівнянням Курамото–Сівашинського (36) з $\delta\theta=0$. Як і у попередньому розділі, будемо досліджувати випадок $a_\mu = a_\sigma$. Виходячи з результатів лінійної аналізу на стійкість, коефіцієнт затухання для середнього значення поля висоти набуває вигляду $\varkappa = -\alpha^* - v_x(\theta)k_x^2 - v_y(\theta)k_y^2 - K(k_x^2 - k_y^2)^2$. З використанням визначення основних керувальних параметрів системи було одержано фазову діаграму, подану на рис. 15. Тут вище поверхні, яка обмежує критичні значення α^* , θ і a_σ , маємо стійкий однорідний стан, що відповідає реалізації гладкої поверхні без структур. Під поверхнею одержуємо просторово-модульовані стаціонарні структури. Детальне дослідження фазової діаграми стійкості структур за умови $a_\mu \neq a_\sigma$ проведено у роботі [38].

5.2. Зміна морфології стаціонарних поверхневих структур

У даному розділі будемо досліджувати поведінку системи в рамках використання метод числового моделювання. Для цього рівняння (36) розв'язується на квадратній ґратниці за схемою, наведеною вище. На рисунках 16, а, б, в показано динаміку структуроутворення при різних значеннях a_σ , α^* і при фіксованих зна-

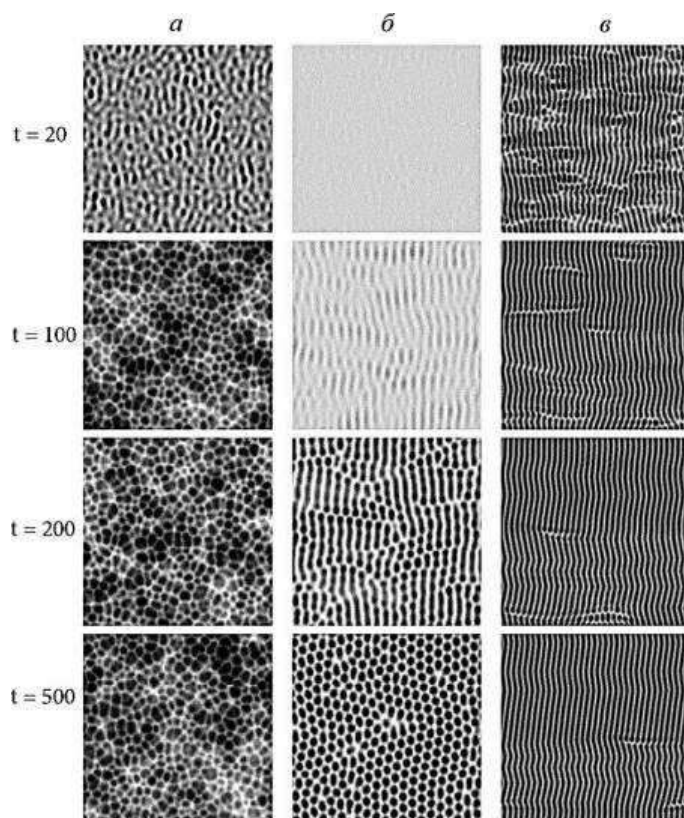


Рис. 16. Типові поверхневі структури при $\theta = 0,5$, $\Sigma = 0$ та (а) $a_\sigma = 2,0$, $\alpha^* = 0,0$; (б) $a_\sigma = 2,0$, $\alpha^* = 0,1$; (в) $a_\sigma = 2,7$, $\alpha^* = 0,5$.¹⁶

ченнях кута розпорошення θ . При $\alpha^* = 0$ (рис. 16, а) реалізується фіксована кількість островів (нанодірки), які хаотично виникають у зв'язку з первинними і вторинними нестійкостями. Це типова картина, що реалізується при розв'язку рівняння Курамото–Сівашинського (22). При $\alpha^* \neq 0$ (рис. 16, б, в) в області параметрів під поверхнею на фазовій діаграмі на рис. 15, під час еволюції системи виникають стаціонарні структури. Залежно від значень параметрів системи (кут розпорошення та глибина проникнення йонів), можуть утворюватися структури з гексагональною симетрією з дефектами або хвильові структури з лінійними дефектами типу дислокацій.

Для ілюстрації того, що зростання α^* приводить до переходу системи з хаотичного режиму до регулярного стаціонарного, розглянемо поведінку одноточкової часової кореляційної функції, визначеної таким чином: $C(\tau) = \langle \delta h(r, 0) \delta h(r, \tau) \rangle$, де $\delta h(r, t) = h(r, t) - h_{tr}(t)$; $h_{tr}(t)$ задає постійність ерозії поверхні. Як відомо, одним з критері-

ів хаотичної траєкторії є швидке спадання часової кореляційної функції $C(\tau)$ до нуля. Це означає, що система дуже швидко втрачає пам'ять.

З рисунку 17 видно, що при $\alpha^* = 0$ одноточкова кореляційна функція швидко спадає до нуля, що означає хаотичну поведінку висоти у фіксованій точці поверхні, тоді як при $\alpha^* \neq 0$ часова кореляційна функція набуває певного сталого значення, що свідчить про наявність добре впорядкованого (постійного) сигналу $h(r,t)$.

Іншим критерієм для констатування стаціонарності поверхневих структур виступає величина W^2 , залежність якої від часу при різних α^* подано на рис. 18. Тут при $\alpha^* = 0$ (суцільна крива) ве-

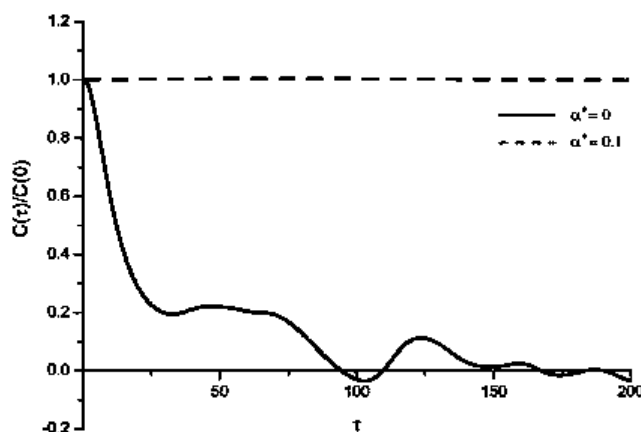


Рис. 17. Одноточкова часова кореляційна функція для поверхні при $\theta = 0,5$, та $a_\sigma = 2,0$.¹⁷

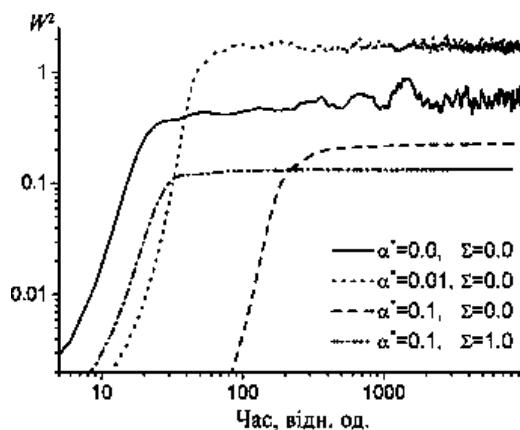


Рис. 18. Часові залежності $W^2(t)$ при $\theta = 0,5$, $a_\sigma = 2$ та різних значеннях параметра затухання α^* .¹⁸

личина $W^2(t)$ постійно зростає з часом. На пізніх стадіях еволюції процес росту поверхні характеризується показником росту $\beta \approx 0,1$. Врахування затухання в системі ($\alpha^* \neq 0$) приводить до уповільнення процесів росту на ранніх стадіях еволюції системи (пор. криві при $\alpha^* = 0$ та $\alpha^* = 0,001$). При цьому на пізніх стадіях еволюції величина $W^2(t)$ набуває стаціонарного значення W_{st}^2 з $\beta = 0$. Збільшення α^* приводить до зменшення стаціонарного значення W_{st}^2 (див. пунктирну та штрихову криві на рис. 18 при $\alpha^* = 0,01$ та $\alpha^* = 0,1$).

Розглянемо вплив мультиплікативного шуму на динаміку структуроутворення у загасальному рівнянні Курамото–Сівашинського, враховуючи флюктуації кута опромінення θ з інтенсивністю флюктуацій Σ . Порівнюючи динаміку величини W^2 у детерміністичному випадку та за наявності мультиплікативного шуму (див. штрихову та штрих-пунктирну криві на рис. 18), легко бачити, що шум пришвидшує процеси формування структур. З часом затухання пригнічує зростання W^2 і, таким чином, W^2 приймає менші стаціонарні значення W_{st}^2 на пізніх стадіях еволюції.

На рисунку 19 представлена еволюція структур при $\Sigma = 0,3$ та різних значеннях параметрів системи. Видно, що з часом на поверхні формуються структури зі структурними дефектами. У випадку гексагональних структур (рис. 19, а) такі дефекти можна ефективно пов'язати з міжвузловими атомами та вакансіями; у випадку хвильових структур (рис. 19, б) формуються лінійні дефекти (дислокації, дисклінації). Видно, що під час еволюції системи кількість дефектів зменшується.

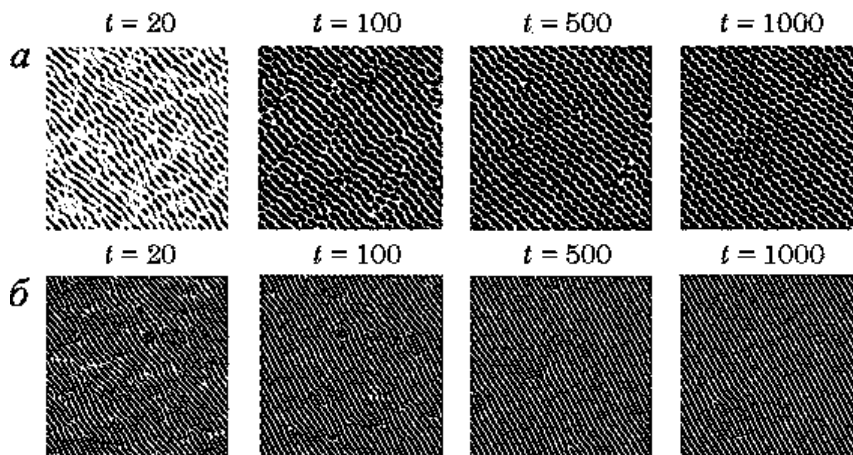


Рис. 19. Еволюція структур при $\theta = 0,5$, $\Sigma = 0,3$ та (а) $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0,1$; (б) $a_\sigma = 2,7$, $\alpha^* = 0,5$.¹⁹

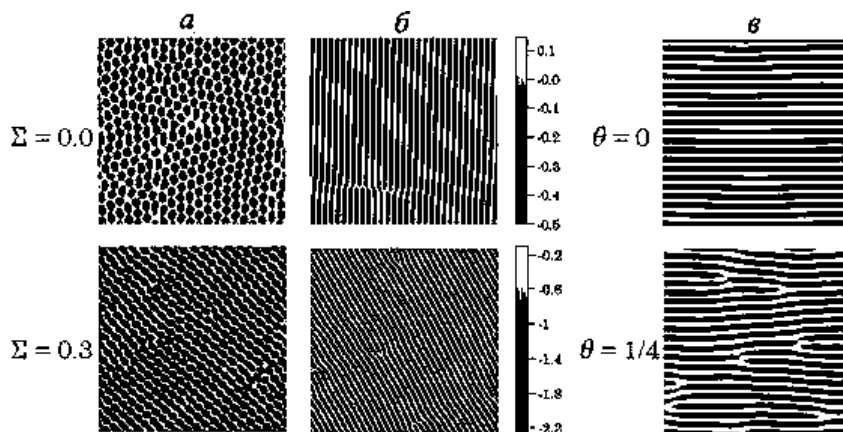


Рис. 20. Типові поверхневі структури при (а) $a_{\sigma} = 2$, $\alpha^* = 0,1$, $\theta = 0,5$; (б) $a_{\sigma} = 2,7$, $\alpha^* = 0,5$, $\theta = 0,5$; (в) $a_{\sigma} = 2$, $\alpha^* = 0,1$, $\Sigma = 0,3$.²⁰

На рисунку 20 наведено ілюстрації поверхневих структур при різних значеннях кута розпорошення θ , параметра a_{σ} , параметра затухання α^* та інтенсивності флюктуацій кута розпорошення Σ у стаціонарному випадку при $t = 500$.

Розглянемо спочатку вплив інтенсивності шуму на характер зміни поверхневих структур. На рисунку 20, а при $\theta = 0,5$, $a_{\sigma} = 2,0$ та $\alpha^* = 0,1$, коли у детерміністичному випадку реалізуються структури із гексагональною симетрією, вплив шуму приводить до подрібнення структур. Для значень параметрів $\theta = 0,5$, $a_{\sigma} = 2,7$ та $\alpha^* = 0,5$, коли реалізуються вертикальні хвильові структури (рис. 20, б), врахування шуму приводить до повороту структур. При цьому величина інтенсивності шуму $\Sigma \neq 0$ не впливає на значення кута повороту. На рисунку 20, в наведено типові поверхневі структури при $a_{\sigma} = 2,0$, $\alpha^* = 0,1$, фіксованому значенні інтенсивності шуму $\Sigma = 0,3$ і різних значеннях кута розпорошення. З рисунка видно, що зміна кута розпорошення приводить до зміни типу структур. При цьому збільшення θ від 0 до 0,25 приводить до реалізації хвильових структур з лінійними дефектами. Тут структури орієнтовані горизонтально і шум не впливає на їх орієнтацію.

5.3. Дослідження структурних дефектів

Спочатку проаналізуємо еволюцію густини розподілу структур за розміром (у нашому випадку за площею). Для цього поверхня перерізлася на середній висоті і за алгоритмом перколяційного кластера встановлювалося загальна кількість структур та їхній

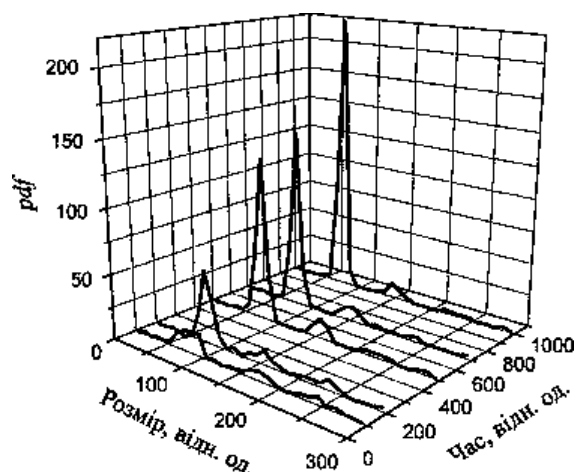


Рис. 21. Еволюція густини ймовірності розподілу структур за розміром при $a_{\sigma} = 2$, $\alpha^* = 0,1$, $\theta = 0,5$ та $\Sigma = 0,3$.²¹

розмір. Результати наведено на рис. 21 на різних часах еволюції системи при $\theta = 0,5$, $a_{\sigma} = 2,0$, $\alpha^* = 0,1$ та $\Sigma = 0,3$. Тут основний пік вказує на найбільш ймовірний розмір (площу) структур. Додаткові піки відповідають наявності структур іншого, відмінного від найбільш ймовірного, розміру, або про наявність структурних дефектів. Видно, що з часом основний пік густини ймовірності збільшується, а кількість додаткових піків та їх величина зменшується. Це є свідченням того, що з часом поверхня стає більш структурованою, а кількість дефектів зменшується. Результати щодо залежності форми густини ймовірності від інтенсивності флюктуацій кута розпорощення на пізніх стадіях еволюції ($t = 2000$) подано на рис. 22. З рисунка випливає, що добре структурована поверхня при відсутності флюктуацій кута розпорощення стає більш дефектною при збільшенні інтенсивності шуму: зменшення та розмиття основного піку густини ймовірності та поява й збільшення величини другорядних піків свідчать про наявність дефектів.

Далі, проаналізуємо еволюцію кількості дефектів. Для випадку формування гексагональної симетрії утворюваних поверхневих структур дефекти пакування будемо визначати за алгоритмом, розвинутим для дослідження двовимірних систем, що моделювалися методами молекулярної динаміки [76]. Основні кроки цього методу є такими. Локальний кристалічний порядок можна описати орієнтацією шестикутників, точки яких відповідають положенню структур, а структури ефективно представляються у вигляді атомів. Тоді кут орієнтації j -того атома $\varphi_j \in [0, \pi/3]$ визначається зі співвідношення

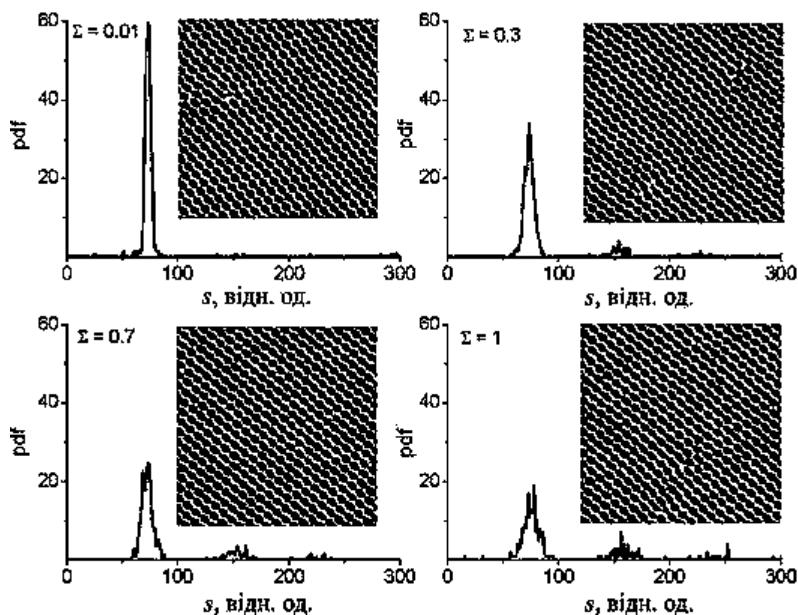


Рис. 22. Залежності форми густини ймовірності від інтенсивності флюктуацій кута розпорошення Σ на пізніх стадіях еволюції ($t = 2000$) при $a_\sigma = 2$, $\sigma^* = 0,1$, $\theta = 0,5$.²²

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

Два атоми будуть межувати, якщо $|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k| < 1,25v$, де v — положення першого піку двочастинкової кореляційної функції; ϕ_i — кут між відповідним вектором $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k$ та віссю x . Ступінь безладу j -го атома визначається за формулою

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

За поданою схемою обчислюється кількість дефектів як «атомів», що мають дефекти пакування (утворення з вакансіями, міжвузлові атоми, ядра дислокацій). Результати залежності відносної кількості дефектів N_{def}/N_s , де N_{def} — кількість структурних дефектів, N_s — загальна кількість структур, від часу представлено на рис. 23 при $\theta = 0,5$, $a_\sigma = 2,0$, $\alpha^* = 0,1$ та різних значеннях інтенсивності шуму Σ . З рисунку видно, що у детерміністичному випадку ($\Sigma = 0$) та у випадку невеликих значень флюктуацій кута розпорошення ($\Sigma = 0,3$) на стадіях формування поверхневих структур кількість дефектів є меншою, ніж у випадку помірних та великих значень інтенсивності шуму ($\Sigma = 0,6$ та $\Sigma = 0,9$). Швид-

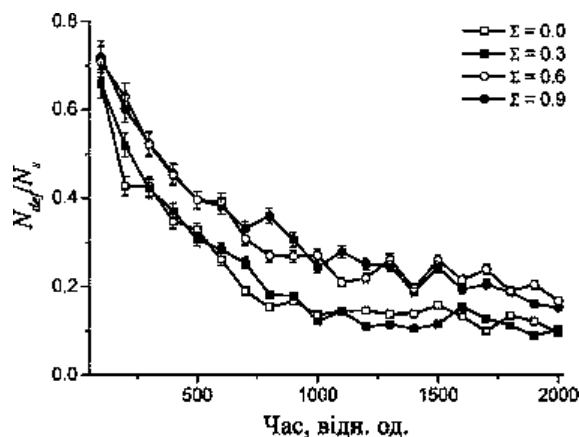


Рис. 23. Еволюція відносної кількості дефектів при $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0,1$, $\theta = 0,5$ та різних значеннях інтенсивності шуму Σ .²³

кількість анігіляції дефектів є більшою для детерміністичного випадку та у разі шуму малої інтенсивності, тоді як збільшення інтенсивності шуму уповільнює даний процес. На пізніх стадіях еволюції квазістаціонарне значення кількості дефектів набуває менших значень для випадку $\Sigma = 0$ та $\Sigma = 0,3$. Отже, за умов формування гексагональних структур кількість дефектів зменшується з часом, але не зникає, навіть при нескінченно малій дисперсії кута розпорошення (детерміністичний випадок).

У випадку, коли реалізуються хвильові структури наведений підхід визначення дефектів не може бути використаний. Дефектами, які можуть бути досліджені у такому випадку, є дислокації, дисклінації та межі зерен. Далі сконцентруємося на дослідженні лінійних дефектів як таких. При дослідженні дислокацій скористаємося підходом, розвинутим для дослідження дефектів у нематиках [77], де однією з мір упорядкування є спрямовувальне поле (директор) $\nabla x(r)/|\nabla x(r)|$ та відповідний нематичний параметр порядку $Q_{\alpha\beta} = Q_0 [n_\alpha n_\beta - 1/2\delta_{\alpha\beta}]$. Зокрема, для двовимірних систем роль параметра порядку виконує величина $\cos(2\phi)$, де $n = [\cos(\phi), \sin(\phi)]$. Тобто існує певний векторний параметр порядку Ω , заданий виразами $\Omega_x = n_x^2 - n_y^2$, $\Omega_y = 2n_x n_y$. Далі будемо вважати, що всі дефекти формуються з $\pm 1/2$ -дисклінацій у спрямовувальному полі n , яке переходить у «вихори» заряду ± 1 для поля Ω . Для ідентифікації дефектів визначимо ядра вихорів за формулою $A = \sum_{\alpha,\beta} (\nabla_\alpha \Omega_\beta)^2$. В області дефекту значення Ω зазнає різкої зміни. Отже, точка розташування дефекту визначається за умови, що A більше певного значення. Також можемо записати A

у вигляді $A = (\nabla_\alpha \varphi)^2$, де $\varphi(r, t) = 2\phi(r, t)$, $\phi(r, t) = \arctan[n_y(r) / n_x(r)]$. Нематичний параметер порядку $Q_{\alpha\beta}$ повністю визначається кутом $\varphi(r) = 2\phi(r)$. Отже, знаючи похідну $\nabla\varphi(r)$, обчислення індикаторної величини $A(r) = |\nabla\varphi(r)|^2$ уможливило визначити такі дефекти як дислокації, дисклінації та межі зерен. Методу засновано на тому, що в області дефекту (дислокації, дисклінації або межі зерна) поле $\varphi(r)$ швидко змінюється, тоді як поза цими областями воно змінюється гладко. Отже, в точках з більшою інтенсивністю зміни $\varphi(r)$ знаходяться дефекти або частина межі зерна. Тоді в області поза дефектами $A(r) \approx 0$. Проте, в місці знаходження дефекту ця величина стрімко зростає. Описаний алгоритм допомагає визначити області, де поле директора суттєво змінюється, і вивести відповідні точки. Далі необхідно згрупувати ці точки у структури. Елементи однієї структури знаходяться дуже близько один від одного, але не обов'язково у сусідніх комірках. У такому разі доцільно ввести фільтр a_0 , і, якщо відстань між точками менша ніж a_0 , то далі вони належать одній структурі; для розрізнення таких точкових кластерів використано методу Хошена і Копельмана [78]. Таким чином, у будь-який момент часу є можливість визначити стан системи і наявність в ній зерен та дефектів. Із наведеної процедури визначення дефектів можна одержати стаціонарну залежність кількості дефектів від параметрів системи.

На рисунку 24 наведено еволюцію кількості лінійних дефектів для різних інтенсивностей флюктуацій кута розпорошення при $\theta = 0,5$, $a_\sigma = 2,7$ та $\alpha^* = 0,5$. З рисунка видно, що врахування розкиду кута розпорошення призводить до збільшення кількості

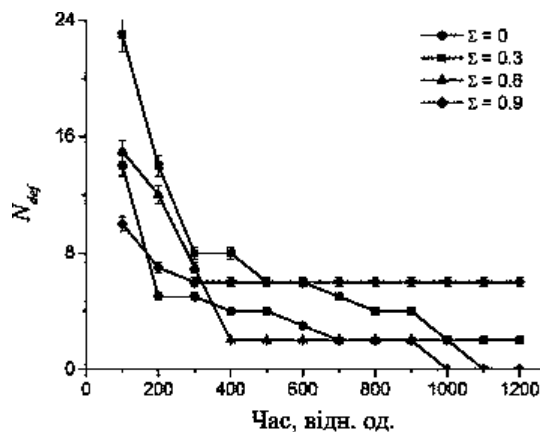


Рис. 24. Еволюція кількості лінійних дефектів при $a_\sigma = 2,7$, $\alpha^* = 0,5$, $\theta = 0,5$ та різних значеннях інтенсивності шуму Σ .²⁴

дефектів на ранніх стадіях еволюції; на великих часах кількість дефектів залишається ненульовою у порівнянні з детерміністичним випадком (пор. криві з кружками та квадратами). При помірних значеннях інтенсивності шуму швидкість анігіляції дефектів зростає і, як наслідок, структури стають бездефектними на пізніх стадіях еволюції (див. криву з трикутниками). При великих значеннях інтенсивності шуму дефекти, сформовані на ранніх стадіях еволюції, анігілюють, проте стаціонарне значення їх кількості збільшується. Отже, помірні значення інтенсивності флюктуацій кута розпорошення приводять до швидшого структурування поверхні.

6. МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІНИ МОРФОЛОГІЇ ПОВЕРХНІ КРЕМНІЮ ПРИ РОЗПОРОШЕННІ ЙОНАМИ АРГОНУ

У задачі про зміну морфології поверхні при розпорошенні конкретного матеріалу такі величини як глибина проникнення та ширина розподілу енергії йонів у поздовжньому та поперечному напрямках до пучка налітних йонів можуть бути розраховані методами молекулярної динаміки або Монте-Карло. Ця процедура реалізована у пакеті прикладних програм TRIM [79]. Основні параметри в експерименті зводяться до енергії йонного пучка, потоку йонів та кута розпорошення. У числовому моделюванні ціль кремнію опромінювалася йонами Аргону. Густина потоку приймалася рівною $J = 20,7$ йон/нм²·сек, температура $T = 550$ К, значення енергії варіювалися в інтервалі від 100 еВ до 10 кеВ. Для чистого кремнію параметер ґратниці має значення $a_{\text{Si}} = 0,5437$ нм. Для визначення матеріальної сталої $p = 3/(4\pi^2)(NU_0C_0)^{-1}$ енергію зв'язування будемо вважати величиною порядку вільної енергії $U_0 = 7,7$ еВ/нм², та приймемо $C_0 = 0,29$ нм, $N = 25$ атом/нм². При дослідженні процесів структуроутворення на поверхні кремнію при розпорошенні йонами Аргону будемо варіювати кут розпорошення в інтервалі $[40^\circ, 70^\circ]$. Коефіцієнт розпорошення $Y_0 = Y_0(\theta, \epsilon)$, глибину проникнення йонів Аргону в ціль кремнію a та ширину розподілу енергії σ й μ будемо обчислювати методами Монте-Карло з використанням коду SRIM [79].

6.1. Глибина проникнення йонів та коефіцієнт виходу

Результати розрахунків параметрів $a_\sigma \equiv a/\sigma$ та $a_\mu \equiv a/\mu$ в залежності від енергії налітних йонів подано на рис. 25. З рисунка видно, що поздовжня та поперечна ширини розподілу енергії σ і μ , та параметри a_σ і a_μ відповідають наступним співвідношенням: $\sigma < \mu$ і $a_\sigma < a_\mu$. Отже, ширина розподілу енергії у напрямку, пер-

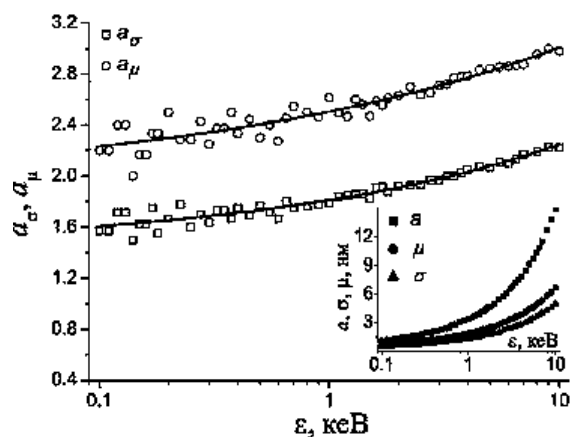


Рис. 25. Результати розрахунків методами Монте-Карло з використанням коду SRIM глибини проникнення йонів Ar^+ у кремнійову ціль та ширин відповідних каскадів $a_\sigma \equiv a/\sigma$ та $a_\mu \equiv a/\mu$.²⁵

пендикулярному до потоку йонів, є більшою, ніж у напрямку потоку (в глибину). Крім того, з одержаних даних випливає, що як відносна величина a_σ , так і a_μ в досліджуваному інтервалі енергій налітних йонів набувають значень, більших за 1. Цей факт є природнім, оскільки глибина проникнення йона вглиб матеріалу a має перевищувати ширини розподілу енергії σ та μ .

Раніше Бредлі та Харпером [41] було запропоновано лінійну залежність глибини проникнення йона від його енергії ε у вигляді: $a \approx \varepsilon^{2m}/nC_m$, де C_m — константа, залежна від потенціалу міжатомної взаємодії [58], $m \approx 1/2$ для енергій від 1 до 100 кеВ. Використовуючи зв'язок між глибиною проникнення a та довжиною хвилі структур λ у вигляді $\lambda \propto a^{-1/2}$, така лінійна залежність глибини проникнення йона від його енергії передбачає залежність довжини хвилі від енергії йонів у вигляді $\lambda(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-1/2}$. З аналізу залежностей глибини проникнення a та ширин σ і μ від енергії видно, що вони відхиляються від лінійного закону запропонованого Бредлі та Харпером [41]. Для досліджуваної кремнійової ціль одержано степеневу апроксимацію даних залежностей у вигляді: $\phi(\varepsilon) = A + B\varepsilon^C$, де $\phi = \{a, \sigma, \mu\}$, сталі A , B та C — параметри апроксимації. Очевидно, що можна очікувати залежність довжини хвилі від енергії йонів у вигляді $\lambda(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-\delta}$ з показником $\delta \neq 1/2$. У подальшому континуальному підході ми обчислимо цю залежність.

Далі використаємо методу Монте-Карло, реалізовану у коді TRIM, для обчислення залежності коефіцієнта виходу Y_0 від енергії ε та кута розпорошення θ для кремнійової ціль при розпорошенні йонами Аргону Ar^+ . Результати моделювання залежності

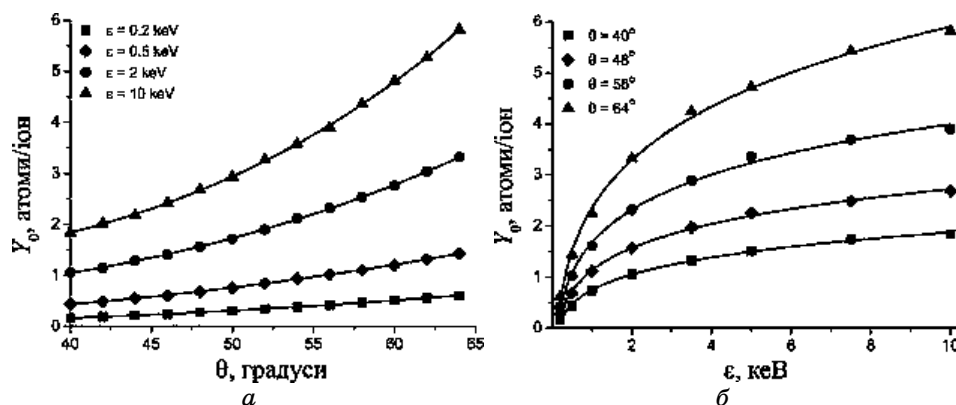


Рис. 26. Коефіцієнт виходу Y_0 при а) фіксованих значеннях енергії налітних йонів; б) фіксованому значенні кута розпорошення.²⁶

ти $Y_0(\theta)$ при фіксованих значеннях енергії налітних йонів ε та залежності $Y_0(\varepsilon)$ при фіксованих значеннях кута розпорошення θ подано на рис. 26, а та б відповідно. З результатів моделювання видно, що відповідні залежності задовольняють степеневій апроксимації $Y_0(\psi) = A' + B'\varepsilon^C$, де $\psi = \{\varepsilon, \theta\}$, стали A' , B' та C' — параметри апроксимації. Таким чином, використання метод Монте-Карло та пакету програм SRIM і TRIM уможлиблює однозначно встановити основні параметри (v_x , v_y , η_x , η_y) континуального моделю (36) для подальшого моделювання процесів розпорошення кремнійової цілі йонами Аргону.

6.2. Фазова діаграма та типові структури кремнію

Моделювання процесів розпорошення кремнію йонами Аргону будемо проводити в рамках використання моделю Курамото–Сівашинського зі стабілізуючим членом (36). Оскільки глибина проникнення йонів у ціль, ширини розподілів збурень та залежності коефіцієнта виходу одержано для фіксованих значень кута розпорошення для системи $\text{Ar}^+ \rightarrow \text{Si}$, то при моделюванні в рамках континуального підходу будемо вважати, що флюктуації кута розпорошення є нескінченно малі і в подальшому, без втрати загальності, ними можна нехтувати.

Для встановлення типу структур, що реалізуються на поверхні кремнію при розпорошенні йонами Аргону, обчислимо діаграму $\varepsilon(\theta)$ при заданих параметрах розпорошення. Для цього проаналізуємо зміну знаку коефіцієнтів поверхневого натягу v_x та ерозії η_x , оскільки $v_y < 0$ та $\eta_y < 0$ для встановлених інтервалів зміни енергії налітних йонів та кута розпорошення. Відповідну діагра-

му зображено на рис. 27. Аналіза значень коефіцієнтів v_x та η_x уможливило розділити площину (θ, ϵ) на п'ять домен, позначених цифрами від 1 до 5. (Типові приклади структур на поверхні кремнію при розпорошенні йонами Аргону наведено на рис. 28 в усіх п'яти областях діаграми 27.) При цьому штрих-пунктирна крива визначає умову $v_x = 0$. Суцільна крива розділяє області, що характеризуються $\eta_x < 0$ зліва та $\eta_x > 0$ справа. Штрихова крива визначається умовою $v_x = v_y$: зліва від неї маємо $v_x < v_y$, справа виконується умова $v_x > v_y$. Таким чином, при розпорошенні кремнію йонами Аргону при варіюванні кута розпорошення можна очікувати формуванні трьох основних типів структур.

— При малих кутах розпорошення, зліва від суцільної кривої, виконуються умови $v_x < 0$ та $\eta_x \eta_y > 0$, і, отже, на поверхні кремнію будуть формуватися ізотропні структури (нанодірки). При цьому такі структури будуть дещо видовжені у вертикальному напрямку при виконанні умови $v_x < v_y$ (область 1) та у горизонтальному напрямку при $v_x > v_y$ (область 2).

— При великих кутах розпорошення, справа від штрих-

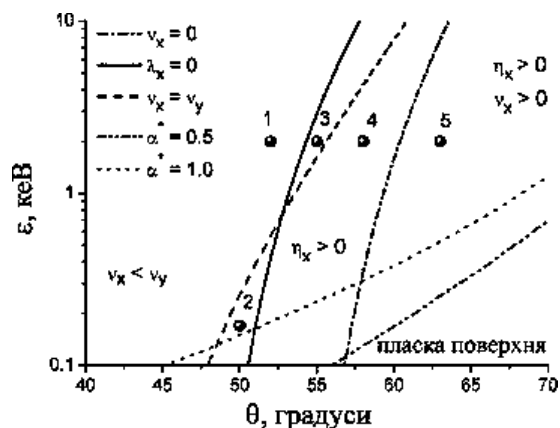


Рис. 27. Діаграма формування різних типів структур на поверхні кремнію при розпорошенні йонами Аргону.²⁷

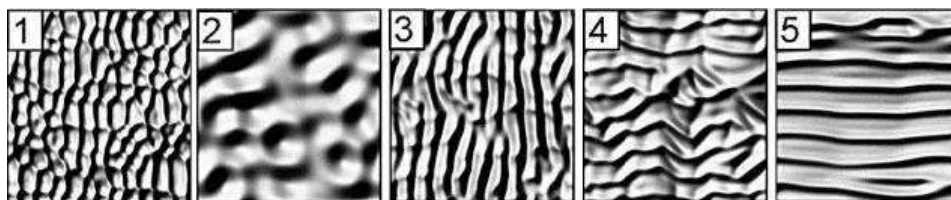


Рис. 28. Типові приклади структур на поверхні кремнію при розпорошенні йонами Аргону в різних областях діаграми рис. 27.²⁸

пунктирної кривої, реалізуються умови для формування хвильових структур у горизонтальному напрямку завдяки $v_x > 0$ та $\eta_x \eta_y < 0$ (область 5).

— При помірних кутах розпорошення умови формування як ізотропних, так і хвильових структур не виконуються у повній мірі: $v_x < 0$, $\eta_x \eta_y < 0$. Тут, залежності від співвідношення між v_x та v_y , структури будуть видовжені у вертикальному (область 3) або горизонтальному (область 4) напрямках.

На діаграмі 27 штрих-пунктир-пунктирна та пунктирна криві ілюструють вплив стабілізуючого фактора α^* . Врахування цього чинника приводить до обмеження області формування структур знизу: нижче цих кривих буде реалізовуватися процес формування гладкої поверхні при розпорошенні. При цьому збільшення значення коефіцієнта α^* розширює цю область. Одержана діаграма структуроутворення та морфологія поверхневих структур добре узгоджуються із результатами експериментальних досліджень зміни морфології поверхні Si(001), що розпорошувалася йонами Ar^+ [80].

6.3. Залежність довжини хвилі та розміру структур кремнію від енергії йонів

У даному підрозділі встановимо залежність довжини хвилі утворених структур від енергії падних йонів і кута розпорошення. Як було показано раніше, співвідношення між v_x та v_y визначає орієнтацію структур. Довжина хвилі поверхневих структур у відповідному напрямку визначається як $\lambda_{x,y} = 2\pi \sqrt{2K / |v_{\min x,y}|}$, де $v_{\min x,y}$ відповідає мінімальному з v_x та v_y . Відповідно до фазової діаграми на рис. 27 варіація енергії йонів при фіксованому куті розпорошення приводить до зміни орієнтації структур: при малих ε маємо структури, орієнтовані вздовж y -напрямку, тоді як при великих ε структури орієнтовані в горизонтальному напрямку. Розраховані залежності довжини хвилі подано на рис. 29. З рисунка видно, що довжина хвилі зменшується з ростом енергії йонів за степеневим законом та змінюється в інтервалі від 100 нм до 1 мкм. Цей результат добре узгоджується з відомими експериментальними даними для кремнію, розпорошуваного йонами Аргону [81]. Принципово важливо, що оскільки глибина проникнення залежить від енергії йонів нелінійним чином (див. вставку на рис. 25), то можна очікувати відхилу від асимптотики Бредлі-Харпера $\lambda(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-1/2}$. З рисунку 29 також видно, що при малих та великих кутах розпорошення (пунктирна та штрихова лінії) маємо лінійну залежність в подвійних логаритмічних осях. Отже,

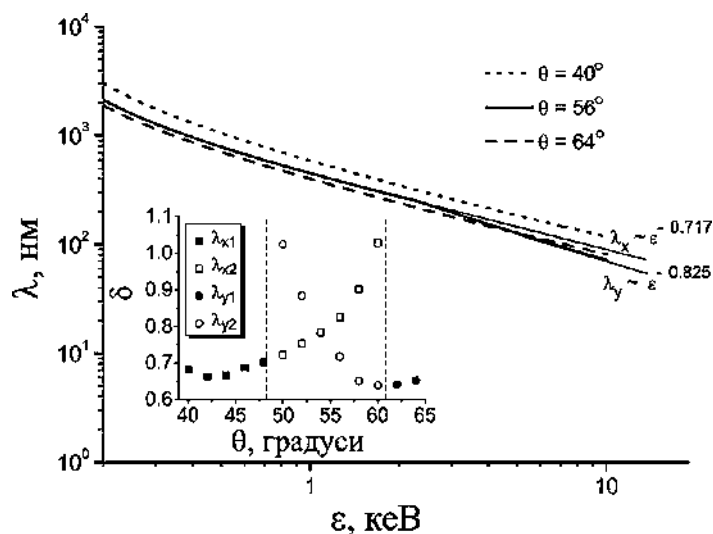


Рис. 29. Залежність довжини хвилі структур кремнію від енергії налітних йонів (залежність скейлінгівового показника δ від кута розпорощення показано на вставці).²⁹

для залежності довжини хвилі маємо $\lambda(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-\delta}$, де скейлінгівий показник δ визначено як нахил залежності $\lambda(\varepsilon)$ у подвійних логаритмічних осях. При проміжних значеннях кута θ , що відповідає штриховій лінії на рис. 27, залежність $\lambda(\varepsilon)$ має злом, який означає зміну орієнтації структур. Таким чином, при малих енергіях йонів структури орієнтовані вздовж y -напрямку, а при великих — вздовж x -напрямку. Отже, маємо два нахили: перед зломом (малі енергії) відповідні структури характеризуються довжиною хвилі λ_x , після злomu при великих енергіях — довжиною λ_y (див. суцільну лінію та асимптотику на рис. 29). Залежність показника δ , що визначає залежність $\lambda(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-\delta}$, від кута розпорощення приведено на вставці до рис. 29. Можна бачити, що для досліджуваного інтервалу енергій скейлінгівий показник δ набуває значень $\delta > 1/2$. Більш того, при малих та великих θ показник δ не змінюється суттєво у той час, як в інтервалі для θ , коли $\lambda(\varepsilon)$ має злом, показник δ змінюється в інтервалі від 0,65 до 1,05. Слід зазначити, що наведені залежності довжини хвилі структур кремнію від енергії бомбівних йонів Аргону одержано за умови, що потік J та температура T є сталими величинами.

Наприкінці визначимо лінійний розмір поверхневих структур кремнію, що реалізуються у процесі йонного розпорощення. Для цього розглянемо випадок малих кутів розпорощення θ для дос-

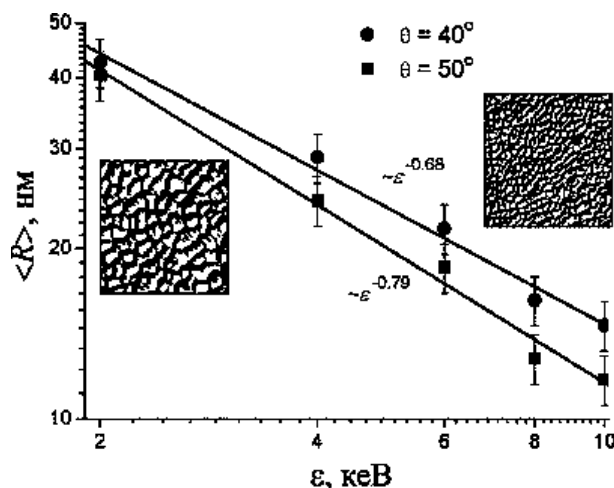


Рис. 30. Залежності середнього лінійного розміру рівно вісних (анізотропних) структур кремнію від енергії налітних йонів Аргону.³⁰

лідження рівновісних структур (нанодірок). Для визначення лінійного розміру використовувалася наступна процедура. На великих часових інтервалах (порядку 80 хвилин) визначалися площі всіх структур. Далі, використовуючи наближення сферичності структур, визначався радіус (лінійний) розмір структур. Для кількісної оцінки розміру структур використовувалося значення дифузійної довжини для кремнію $L_D \sim 10^{-7}$ м. Результати розрахунків залежності середнього лінійного розміру структур (радіуса) від енергії налітних йонів при фіксованих значеннях кута розпорошення подано на рис. 30. З рисунка видно, що середній лінійний розмір структур кремнію спадає з ростом енергії налітних йонів. Крім того, він степеневим чином залежить від енергії налітних йонів Силіцію. При цьому, збільшення кута розпорошення також приводить до зменшення лінійного розміру структур кремнію. З проведених розрахунків лінійного розміру структур кремнію при розпорошенні йонами Аргону випливає, що поверхневі структури кремнію характеризуються нанометровим діапазоном.

7. ВИСНОВКИ

У даній роботі досліджено процеси утворення поверхневих структур нанорозмірного масштабу у процесі йонного розпорошення. Розглянуто окремо вплив флюктуацій потоку йонів та флюктуацій кута розпорошення на характер структуроутворення, та морфологію поверхневих структур. Дослідження проводилися в рам-

ках континуального підходу з використанням метод числового моделювання.

При дослідженні анізотропного моделю змін поверхні при йонному розпорошенні нами враховано флюктуації потоку налітних йонів. В рамках лінійної аналізи було одержано критичні значення кута розпорошення при фіксованих значеннях глибини проникнення йонів в ціль, які визначають стійкі хвильові структури. Досліджуючи нелінійну анізотропну систему, були одержані діаграми, що ілюструють можливі типи поверхневих структур, що реалізуються в досліджуваній системі, при варіюванні кута розпорошення, глибини проникнення йонів в ціль та ширин розподілу енергії вглибині цілі. Було показано, що в залежності від значень параметрів системи можуть формуватися як рівновісні (ізотропні) структури типу наноточок та наноотворів (дірок), так і видовжені (хвильові) структури. Показано, що кількість таких структур на пізніх часах еволюції системи є постійної величиною. Встановлено залежності показників росту поверхні та її шерсткості при варіюванні основних параметрів системи. Показано, що уведені флюктуації потоку йонів затримують процеси росту та укрупнення та зменшують інтервал часу, коли ці процеси реалізуються.

Досліджуючи динаміку процесів структуроутворення на поверхні за умови флюктуацій кута розпорошення, було показано, що розкид кута розпорошення приводить до зміни критичних значень керувальних параметрів системи, таких як глибина проникнення та середній кут падіння. Показано, що як кореляційні властивості такого мультиплікативного шуму, так і дисперсія кута розпорошення, в околі середнього значення, можуть приводити до зміни орієнтації поверхневих структур. Була розрахована фазова діаграма, яка ілюструє області утворення різних типів поверхневих структур. Встановлено, що скейлінговою динамікою процесів структуроутворення можна керувати за допомогою кута розпорошення, параметрів цілі, а також інтенсивності флюктуацій та радіусом їх просторової кореляцій.

Проведено дослідження процесів формування стійких поверхневих структур при йонному розпорошенні матеріалів в рамках узагальненого моделю Курамото–Сівашинського з урахуванням процесів релаксації опромінюваної поверхні, що зумовлені процесами перерозподілу вибитих атомів на поверхні цілі. Встановлено фазову діаграму, що розділяє простір основних параметрів системи (кут падіння налітного йона та глибина проникнення йона в ціль) на області, що відповідають умовам реалізації стаціонарних структур на поверхні розпорошеного матеріалу та гладкої поверхні. Досліджено вплив стохастичного джерела на характер зміни густини розподілу структур за розмірами. Вста-

новлено, що врахування флюктуацій кута розпорошення приводить до переорієнтації хвильових структур при помірних кутах розпорошення. Вивчено динаміку структурних дефектів при різних значеннях інтенсивності флюктуацій кута розпорошення.

Розвинений підхід застосовано для моделювання процесу розпорошення кремнію йонами Аргону. В рамках використання методів Монте-Карло було встановлено, що в такій системі усереднена глибина проникнення падного йона та відповідні ширини розподілу енергії в напрямках, паралельному та перпендикулярному до налітного пучка йонів, залежать від енергії йонів степеневим чином. Було встановлено залежності коефіцієнта виходу від кута розпорошення та енергії йонів. Було розраховано фазову діаграму у площині кут розпорошення — енергія йонів, що ілюструє області формування різних типів структур кремнію. Показано, що на малих кутах розпорошення реалізуються рівновісні (ізотропні) структури, тоді як при великих значеннях кута розпорошення формуються хвильові структури. Було встановлено, що довжина хвилі структур кремнію залежить від енергії йонів степеневим чином з показником, залежним від кута розпорошення. Було розраховано залежність лінійного розміру ізотропних структур від енергії налітних йонів при різних значеннях кута розпорошення та показано, що збільшення як енергії йонів Аргону, так і кута їх падіння приводить до зменшення лінійного розміру структур кремнію, який при енергіях йонів від 2 до 10 кеВ приймає значення від 45 до 15 нм.

Одержані в роботі результати добре узгоджуються з відомими експериментальними та теоретичними дослідженнями [51, 80–83] та можуть бути використані для опису процесів формування рівновісних і хвильових структур на поверхнях матеріалів при йонному розпорошенні.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. E. Hirota, H. Sakakima, and K. Inomata, *Giant Magneto-Resistance Devices* (Berlin–Heidelberg–New York–Barcelona–Hong Kong–London–Milan–Paris–Tokyo: Springer: 2002).
2. R. J. Warburton, C. Schaflein, D. Haft et al., *Nature*, **405**: 926 (2000).
3. A. Shah, P. Torres, R. Tscharnner et al., *Science*, **285**: 692 (1999).
4. Li-Dong Zhao, Shih-Han Lo, Yongsheng Zhang et al., *Nature*, **508**: 373 (2014).
5. H. N. G. Wadley, X. Zhou, R. A. Johnson et al., *Progress in Materials Science*, **46**: 329 (2001).
6. K. S. Sree Harsha, *Principles of Physical Vapor Deposition of Thin Films* (Amsterdam–Oxford: Elsevier: 2006).
7. G. Perotto, V. Bello, T. Cesca et al., *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **268**: 3211 (2010).

8. H. Bernas, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **268**: 3171 (2010).
9. A. Mikhailov and G. Ertl, *Chem. Phys. Lett.*, **238**: 104 (1994).
10. M. Hildebrand and A. S. Mikhailov, *J. Phys. Chem.*, **100**: 19089 (1996).
11. D. Batogkh, M. Hildebrand, F. Krischer, and A. Mikhailov, *Phys. Rep.*, **288**: 435 (1997).
12. M. Hildebrand, A. S. Mikhailov, and G. Ertl, *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 2602-1-4 (1998).
13. M. Hildebrand, A. S. Mikhailov, and G. Ertl, *Phys. Rev. E*, **58**: 5483-1-11 (1998).
14. H. Brune, *Surf. Sci. Reports*, **31**: 121 (1998).
15. R. E. Caflisch, W. E. M. F. Gyure, B. Merriman, and C. Ratsch, *Phys. Rev. E*, **59**: 6879 (1999).
16. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, S. V. Kokhan et al., *Physica Scripta*, **86**: 055401 (2012).
17. V. O. Kharchenko and D. O. Kharchenko, *Phys. Rev. E*, **86**: 041143 (2012).
18. S. E. Mangioni and H. S. Wio, *Phys. Rev. E*, **71**: 056203 (2005).
19. S. E. Mangioni, *Physica A*, **389**: 1799 (2010).
20. S. B. Casal, H. S. Wio, and S. Mangioni, *Physica A*, **311**: 443 (2002).
21. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, and A. V. Dvornichenko, *Surf. Sci.*, **630**: 158 (2014).
22. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, S. V. Kokhan, V. V. Yanovskiy, and A. V. Dvornichenko, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **14**, Iss. 1: 47 (2016) (in Ukrainian); В. О. Харченко, Д. О. Харченко, С. В. Кохан, В. В. Яновський, А. В. Дворниченко, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **14**, вип. 1: 47 (2016).
23. J. A. Venables, G. D. T. Spiller, and M. Hanbucken, *Rep. Prog. Phys.*, **47**: 399 (1984).
24. A. Pimpinelli and J. Villian, *Physics of Crystal Growth* (Cambridge: Cambridge University Press: 1998).
25. R. E. Caflisch, *Proc. of the International Congress of Mathematicians* (Madrid, Spain: 2006), p. 1419.
26. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, and I. O. Lysenko, *Physica Scripta*, **83**: 045802 (2011).
27. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, T. I. Zhylenko et al., *Eur. Phys. Jour. B*, **86**: 175 (2013).
28. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, and S. V. Kokhan, *Cond. Mat. Phys.*, **17**: 33004 (2014).
29. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, and A. V. Dvornichenko, *Eur. Phys. Jour. B*, **88**: 3 (2015).
30. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, I. O. Lysenko, S. V. Kokhan, V. V. Yanovsky, and A. V. Dvornichenko, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, **13**, Iss. 4: 577 (2015) (in Ukrainian); В. О. Харченко, Д. О. Харченко, І. О. Лисенко, С. В. Кохан, В. В. Яновський, А. В. Дворниченко, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **13**, вип. 4: 577 (2015).
31. R. M. Bradley and J. M. E. Harper, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **6**, No. 4: 2390 (1988).
32. P. Karmakar, *Nanofabrication by Ion-Beam Sputtering: Fundamentals and Applications* (Eds. T. Som and D. Kanjilal) (Boca Raton: Taylor & Francis Group, LLC: 2013).

33. J. Lian, W. Zhou, Q. M. Wei et al., *Appl. Phys. Lett.*, **88**: 093112 (2006).
34. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, I. O. Lysenko, and S. V. Kokhan, *Phys. Rev. E*, **82**: 061108 (2010).
35. V. O. Kharchenko and D. O. Kharchenko, *Cond. Mat. Phys.*, **14**: 23602 (2011).
36. V. O. Kharchenko, *Functional Materials*, **18**: 156 (2011).
37. I. O. Lysenko, V. O. Kharchenko, S. V. Kokhan, and A. V. Dvornichenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 6: 763 (2013) (in Ukrainian);
І. О. Лисенко, В. О. Харченко, С. В. Кохан, А. В. Дворниченко, *Металлофіз. новейшие технол.*, **35**, № 6: 763 (2013).
38. I. O. Lysenko, *Ukr. J. Phys.*, **61**: 588 (2016).
39. L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs, *Quantum Dots* (Berlin: Springer-Verlag: 1998).
40. M. Navez, C. Sella, and D. Chaperot, *Ionic Bombardment: Theory and Applications* (Ed. J. J. Trillat) (New York: Gordon and Breach: 1964).
41. R. M. Bradley and J. M. E. Harper, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **6**: 2390 (1988).
42. R. Cuerno and A.-L. Barabasi, *Phys. Rev. Lett.*, **74**: No. 23: 4746 (1995).
43. M. Makeev and A.-L. Barabasi, *Appl. Phys. Lett.*, **71**: 2800 (1997).
44. J. T. Drotar, Y.-P. Zhao, T.-M. Lu, and G.-C. Wang, *Phys. Rev. E*, **59**: 177 (1999).
45. T. Aste and U. Valbusa, *Physica A*, **332**: 548 (2004).
46. B. Kahng and J. Kim, *Curr. Appl. Phys.*, **4**: 115 (2004).
47. R. Kree, T. Yasserli, and A. K. Hartmann, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **267**: 1407 (2009).
48. S. Rusponi, C. Boragno, and U. Valbusa, *Phys. Rev. Lett.*, **78**: 2795 (1997).
49. S. Rusponi, G. Costantini, C. Boragno, and U. Valbusa, *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 2735 (1998).
50. E. Chason, T. M. Mayer, B. K. Kellerman et al., *Phys. Rev. Lett.*, **72**: 2040 (1994).
51. J. Erlebacher, M. J. Aziz, E. Chason et al., *Phys. Rev. Lett.*, **82**: 2330 (1999).
52. W.-Q. Li, L. J. Qi, X. Yang et al., *Appl. Surf. Sci.*, **252**: 7794 (2006).
53. S. Facsko, T. Dekorsy, C. Koerdet et al., *Science*, **285**: 1551 (1999).
54. J. Lian, Q. M. Wei, L. M. Wang et al., *Appl. Phys. Lett.*, **88**: 093112 (2006).
55. J. Munoz-Garcia, L. Vazquez, R. Cuerno, J. A. Sanchez-Garcia, M. Castro, and R. Gago, *Series: Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology* (New York: Springer: 2009), vol. 5, p. 323.
56. P. Sigmund, *J. Matter. Sci.*, **8**: 1545 (1973).
57. M. A. Makeev and A.-L. Barabasi, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **222**: 316 (2004).
58. P. Sigmund, *Phys. Rev.*, **184**: 383 (1969).
59. J. W. Cahn and J. E. Taylor, *Acta Metall. Matter.*, **42**: 1045 (1994).
60. M. Kardar, G. Parisi, and Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **56**: 889 (1986).
61. Y. Kuramoto and T. Tsuzuki, *Prog. Theor. Phys.*, **55**: 356 (1977).
62. L. Giada, A. Giacometti, and M. Rossi, *Phys. Rev. E*, **65**: 036134 (2002).
63. C. H. Lam and F. G. Shin, *Phys. Rev. E*, **57**: 6506 (1998).
64. F. Family and T. Vicsek, *J. Phys. A*, **18**: L75 (1985).
65. F. Family, *Physica A*, **168**: 561 (1990).
66. S. K. Sinha, E. B. Sirota, and S. Garott, *Phys. Rev. B*, **38**: 2297 (1988).
67. E. A. Novikov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **47**: 1919 (1964) (in Russian).

68. J. M. Sancho, M. San Miguel, S. L. Katz, and J. D. Gunton, *Phys. Rev. A*, **26**: 1589 (1982).
69. G. E. P. Box and M. E. Muller, *Ann. Math. Statist.*, **29**: 610 (1958).
70. A. Keller and S. Facsko, *Materials*, **3**: 4811 (2010).
71. D. Obeid, J. M. Kosterlitz, and B. Sandstede, *Phys. Rev. E*, **81**: 066205 (2010).
72. C. Misbah and A. Valance, *Phys. Rev. E*, **49**: 166 (1994).
73. P. Brunet, *Phys. Rev. E*, **76**: 017204 (2007).
74. S. Facsko, T. Bobek, A. Stahl et al., *Phys. Rev. B*, **69**: 153412 (2004).
75. S. Vogel and S. J. Linz, *Phys. Rev. B*, **75**: 155417 (2007).
76. T. Yamanaka and A. Onuki, *Phys. Rev. E*, **77**: 042501 (2008).
77. H. Qian and G. F. Mazenko, *Phys. Rev. E*, **73**: 036117 (2006).
78. H. Gould and J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods* (Reading, MA: Addison-Wesley Publishing Company: 1988), part 2.
79. J. P. Biersack and L. G. Hagmark, *Nucl. Instr. Meth.*, **174**: 257 (1980).
80. C. S. Madi, B. Davidovich, H. B. George et al., *Phys. Rev. Lett.*, **101**: 246102 (2008).
81. J. Erlebacher, M. Aziz, E. Chason et al., *J. Vac. Sci. Technol. A*, **18**: 115 (2000).
82. A. Keller, R. Cuerno, S. Facsko, and W. Moller, *Phys. Rev. B*, **79**: 115437 (2009).
83. A. C.-T. Chan and G.-C. Wang, *Surf. Sci.*, **414**: 14 (1998).

¹*Institute of Applied Physics, N.A.S. of Ukraine, 58, Petropavlivska Str., 40000 Sumy, Ukraine*

²*Institute for Single Crystals, N.A.S. of Ukraine, 60, Nauka Avenue, 61178 Kharkiv, Ukraine*

³*Sumy State University 2, Rimsky-Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine*

¹ Fig. 1. Schematic presentation of the ion-beam sputtering process.

² Fig. 2. Stability diagram for the linearized model (curves 1 and 2 correspond to dependences $a_\sigma(0)$ at $a_\mu = 1.5$ and $a_\mu = 0.5$; curves 1' and 2' relate to dependences $a_\mu(0)$ at $a_\sigma = 1.5$ and $a_\sigma = 0.5$).

³ Fig. 3. Phase diagram for the different surface structures in nonlinear system at $a_\mu = a_\sigma$.

⁴ Fig. 4. Diagrams for the different structures' formation at: a) $a_\mu = 0.25$; б) $a_\sigma = 2.0$; в) $\theta = 0.2$, г) $\theta = \pi/2 - 0.2$.

⁵ Fig. 5. Typical structures in domain A-G.

⁶ Fig. 6. Temporal dependences of the renormalized number of structures.

⁷ Fig. 7. Scaling exponents for the each structure from Fig. 5: a) the set of the growth exponent (top panel corresponds to the deterministic model, bottom panel relates to the stochastic model at $\Sigma = 1.0$); б) roughness exponent.

⁸ Fig. 8. Phase diagrams for the system with multiplicative noise at $\Sigma = 1.0$ (in domains marked by k_x and k_y selected structures are characterized by the corresponding direction); plots a) and б) relate to $r_c = 0.65$ and $r_c = 1$.

⁹ Fig. 9. Dependences of wavelengths λ_x and λ_y : a) on sputtering angle θ at $a_\sigma = 0.45$, $r_c = 0.65$ and renormalized penetration depth a_σ at $\theta = 0.4763$, $r_c = 1.0$ (a_{σ_i} \exists $i = 1, \dots, 4$ denote critical values when wave-vector of structures changes the direction) at $F = 1.0$ ($0 < \theta < \pi/2$ scaled in radians); б) on correlation radius r_c at $F = 1.0$ and energy parameter F with $r_c = 1.0$ at $\theta = 0.4763$. Other parameters: $\sigma = 1.0$, $\Sigma = 1.0$.

¹⁰ Fig. 10. Typical evolution of the system with multiplicative fluctuations at early stages.

(a) Snapshots of the height field h , obtained at different time instants. (б) Height distribution function at different time instants. (в) Temporal dependence of skewness and kurtosis. All dependences were obtained at $a_\sigma = 1.2$, $\theta = 0.4$, $F = 1.0$, $\sigma = 1.0$, $K = 2.0$, $\Sigma = 1.0$, $r_c = 1.0$.

¹¹ Fig. 11. Phase diagram for the anisotropic non-linear model at $F = 1$, $\Sigma = 1$, $r_c = 1$. Snapshots correspond to the system parameters in points A, B and C.

¹² Fig. 12. Correlation function $C_h(r)$ (a); roughness exponent α (б); quantity W^2 and growth exponent β (в); correlation function $C_p(r)$ at time instant $t = 60$ (г); fractal dimension D_2 (д). Other parameters: $a_\sigma = 1.2$, $\theta = 0.4$, $F = 1$, $\sigma = 1$, $K = 2$.

¹³ Fig. 13. Roughness exponent α , growth exponent β and fractal dimension D_2 at: (a) $a_\sigma = 2.0$, $\theta = 0.4$ (point 2 in phase diagram in Fig. 11); (б) $a_\sigma = 2.0$, $\theta = 0.2$ (point 3 in phase diagram in Fig. 11). Other parameters: $F = 1$, $\sigma = 1$, $K = 2$.

¹⁴ Fig. 14. Evolution of the spherical averaged structure function $S(k, t)$ at: a) $\Sigma = 0.1$, $r_c = 1.0$; б) $\Sigma = 1.0$, $r_c = 1.0$; в) $\Sigma = 0.1$, $r_c = 0.65$. Other parameters are as follow: $a_\sigma = 1.2$, $\theta = 0.4$, $F = 1$, $\sigma = 1$, $K = 2$.

¹⁵ Fig. 15. Phase diagram for structures' formation (under which the surface stationary structures will be formed; above the surface, the flat surface is realized).

¹⁶ Fig. 16. Typical surface structures at $\theta = 0.5$, $\Sigma = 0$; (a) $a_\sigma = 2.0$, $\alpha^* = 0.0$; (б) $a_\sigma = 2.0$, $\alpha^* = 0.1$; (в) $a_\sigma = 2.7$, $\alpha^* = 0.5$.

¹⁷ Fig. 17. One-point correlation function for the surface at $\theta = 0.5$, and $a_\sigma = 2.0$.

¹⁸ Fig. 18. Time dependences $W^2(t)$ at $\theta = 0.5$, $a_\sigma = 2$ and different values for the damping coefficient α^* .

¹⁹ Fig. 19. Snapshots at $\theta = 0.5$, $\Sigma = 0.3$ and (a) $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0.1$; (б) $a_\sigma = 2.7$, $\alpha^* = 0.5$.

²⁰ Fig. 20. Typical snapshots at (a) $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0.1$, $\theta = 0.5$; (б) $a_\sigma = 2.7$, $\alpha^* = 0.5$, $\theta = 0.5$; (в) $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0.1$, $\Sigma = 0.3$.

²¹ Fig. 21. Evolution of the distribution of the structures over sizes at $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0.1$, $\theta = 0.5$ and $\Sigma = 0.3$.

²² Fig. 22. Distribution of structures over sizes at late stages of the system evolution ($t = 2000$) at different values of the intensity of incidence angle fluctuations Σ and $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0.1$, $\theta = 0.5$.

²³ Fig. 23. Evolution of the reduced number of defects at $a_\sigma = 2$, $\alpha^* = 0.1$, $\theta = 0.5$ and different values of the noise intensity Σ .

²⁴ Fig. 24. Evolution of the number of linear defects at $a_\sigma = 2.7$, $\alpha^* = 0.5$, $\theta = 0.5$ and different values of the noise intensity Σ .

²⁵ Fig. 25. Results of the Monte Carlo simulations of the penetration depth of ions Ar^+ into the silicon target and corresponding widths of cascades $a_\sigma \equiv a/\sigma$ and $a_\mu \equiv a/\mu$ by using SRIM codes.

²⁶ Fig. 26. Yield Y_0 at: a) fixed vales of the incoming ions' energy; б) fixed values of incidence angle.

²⁷ Fig. 27. Diagram for the different structures' formation on a silicon surface sputtered by argon ions.

²⁸ Fig. 28. Typical snapshots of different structures formed on the silicon surface sputtered by argon ions corresponding to different domains of the diagram Fig. 27.

²⁹ Fig. 29. Dependences of the wavelength of silicon structures on the ions' energy (the dependence of the scaling exponent δ on the incidence angle is shown in insertion).

³⁰ Fig. 30. Dependences of the mean linear size of equiaxed (isotropic) silicon structures on incoming ions' energy.