

محاكاة تأثير التشعيع الأيوني على الأغشية الرقيقة لمادة  $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$  متعدد الوظائف الحديدية

\* علي عمر المصراطي<sup>1</sup> وتبرة علي معتوق<sup>2</sup>  
1- قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة مصراته  
2- قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة مصراته  
[almisratali7@gmail.com](mailto:almisratali7@gmail.com)

Electronic publishing data: 28/2/2024

**المخلص:** يُظهر كرومات فيريت البزموت ( $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$ ) (BFCO) خواصاً كهربية حديدية ومغناطيسية معتمداً على بنيته البلورية. في حين يمكن استخدام زرع الأيونات لإنشاء بنية بلورية دقيقة، إلا أن ذلك يتطلب بارامترات محددة. من أجل ذلك، نستخدم في هذا العمل برنامج المحاكاة (Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM) للتنبؤ بالتأثيرات الناجمة عن زرع أيونات Ar و Co بطاقات (5, 9, 20) KeV في هدف BFCO. باستخدام برنامج SRIM تم حساب عمق الاختراق، الفجوات المتولدة، الإزاحة لكل ذرة وكذلك تم دراسة عملية التريز لتقييم استخدام BFCO في عمليات الترسيب. ومع ذلك، نظراً لأن SRIM مُصمم للمواد غير المتبلورة، فلا يمكن تحديد التأثيرات على التركيب البلوري بشكل مباشر، مع إمكانية عدم التبلور، تم تحسين البارامترات المستخدمة في الحسابات لتقليل التشتت وإمكانية حدوث ضرر واسع النطاق.

**الكلمات المفتاحية:** محاكاة SRIM، زرع الأيونات، المواد متعددة الوظائف الحديدية، كرومات فيريت البزموت،  $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$ .

## المقدمة

نتائج المحاكاة أن خيار التوزيع F-C يتنبأ بعدد فجوات أعلى من Q-C. تم أيضاً حساب الإزاحة لكل ذرة بناءً على نموذج NRT باستخدام خيار Q-C بينت النتائج أن زرع أيونات Kr في العينة 3 أعطى منحني توزيع dpa أوسع مع قيمة قصوى تبلغ 6.78، بينما أدت عمليات زرع As و Ar في العينة 1 و 2، إلى قيم dpa قصوى تبلغ 2.54 و 8.65 على التوالي، وهذه القيم تُقابل أقصى طاقة لكل أيون [23]. ومن بين المواد متعددة الوظائف الحديدية تم دراسة  $\text{SrTiO}_3$  (STO) على نطاق واسع، وهو من أكاسيد البيروفسكايت المفردة بسبب تطبيقاتها في مجال الإلكترونيات، وقدرتها على استيعاب العديد من العيوب [24-27]. باستخدام محاكاة SRIM (F-C) تم تشعيع STO بأيونات الأرجون (Ar) بطاقة (200 KeV)، النيون (Ne) بطاقة (100 KeV)، والأكسجين (O) بطاقة (600 KeV) بهدف التحكم في إجمالي الطاقة المترسبة، وأظهرت النتائج أن كثافة الإزاحة الذرية (dpa) تزداد بزيادة طاقة الأيون. تم أيضاً حساب أقصى عمق اختراق لكل أيون بقيم 85 nm لأيونات Ar، 90 nm لأيونات Ne و 220 nm لأيونات O [28].

كما تم استخدام STO كمادة لترسيب الأغشية الرقيقة للعديد من أكاسيد البيروفسكايت [29-30]، مثل  $\text{LaSrMnO}_3$  (LSMO)، حيث رُسبت أغشية LSMO بسُمك 50 nm على مادة  $\text{STO}(001)$  عملياً باستخدام تقنية الترسيب بالتريز، وأجراء التشعيع الأيوني باستخدام أيونات الهيليوم He بطاقات (3.5, 50) KeV لتوليد تركيزات مختلفة من العيوب. نظرياً تم استخدام العيوب وتوزيعها بشكل أفضل، وُجد أن كثافة الإزاحة الذرية (dpa) تزداد بزيادة طاقة الزرع [31]. في هذا البحث، نستخدم برنامج SRIM لمحاكاة زرع أيونات الأرجون (Ar) والكوبالت (Co) في مادة أغشية البيروفسكايت المزوج BFCO، وهي من بين مواد البيروفسكايت التي تم ترسيبها على مادة STO في العديد من الدراسات [32,33].

باستخدام خيارات Q-C و F-C تم محاكاة هدف BFCO بسُمك 980 Å عند طاقات (5, 9, 20) KeV من ذرة الاصطدام الأولية Primary knock-on atom (PKA)، لدراسة التأثيرات الناجمة عن التشعيع، وحساب عدد الفجوات المتولدة، والإزاحة لكل ذرة بناءً على نموذج (NRT). بالإضافة إلى دراسة عملية التريز لتقدير استخدام هدف BFCO في عمليات الترسيب.

## النموذج المستخدم

الطريقة الأكثر استخداماً لتقدير عيوب المواد هي نموذج الإزاحة لكل ذرة (dpa) الذي طوره Norgett-Robinson-Torrens (NRT)، ويعطي نموذج NRT عدد الإزاحات المستقرة  $v_{NRT}$  الناتجة عن ارتداد PKA مع  $T_{dam}$  على النحو التالي [13,15]:

$$v_{NRT}(T_{dam}) = \begin{cases} 0 & \text{for } T_{dam} \leq E_d \\ 1 & \text{for } E_d < T_{dam} \leq L \\ \frac{T_{dam}}{L} & \text{for } T_{dam} > L \end{cases} \quad (1)$$

المواد متعددة الوظائف الحديدية (Multiferroic materials) هي مواد يمكن أن تمتلك أكثر من بارامتر نظام حديدي في نفس الوقت (المغناطيسية الحديدية والكهربية الحديدية والمرونة الحديدية). تعتبر ذات أهمية للعديد من التطبيقات التكنولوجية مثل ذاكرة الوصول العشوائي الكهرومغناطيسية، الإلكترونيات التي تعتمد على اللف الذاتي وكذلك الأجهزة الإلكترونية البصرية [1-3]. من هذه المواد التي تتمتع بإمكانية إظهار سلوك المواد متعددة الوظائف الحديدية مركب البيروفسكايت المزوج BFCO، كما أظهرت الأغشية الرقيقة من BFCO خواصاً كهربية حديدية ومغناطيسية جيدة في درجة حرارة الغرفة [4,5].

يوفر التشعيع الأيوني معلومات حول سلوك المواد ويمكن أن يكون أداة مفيدة لتعديل أو تغيير خصائصها الفيزيائية [6-8]. يتناول المرجع [9] التغيرات في خصائص المواد تحت الإشعاع. تم تطوير طرق للمحاكاة الحاسوبية للتنبؤ بالتأثيرات الناجمة عن التشعيع ومختلف الظواهر التي تحدث عند تفاعل الأيونات مع ذرات المادة المستهدفة [10]. تستند هذه الطرق إلى تقريب التصادمات الثنائية Binary collision approximation (BCA)، والتي يتم فيها التعامل مع حركة الأيونات المزروعة في العينة باعتبارها سلسلة من التصادمات بين الأيونات وذرات الهدف [11-13].

بعد الضرر الإشعاعي الأولي، المعروف على نطاق واسع باسم اضطراب الإزاحة الذرية، أمراً أساسياً لدراسة تأثير الإشعاع على المواد [14]. تم اقتراح عدد الإزاحة لكل ذرة (displacement per atom (dpa) المحسوبة وفقاً لنموذج Norgett-Robinson-Torrens (NRT) لتوحيد تأثير مصادر التشعيع المختلفة، بما في ذلك البروتونات والنيوترونات والفوتونات والإلكترونات والبوزيترونات والأيونات [15,16].

من بين البرامج التي تحاكي زرع الأيونات في المادة غير المتبلورة استناداً على تقريب التصادمات الثنائية (BCA)، برنامج SRIM المُعد بطريقة المونت كارلو، وهذا البرنامج يُظهر لنا أهم الظواهر الفيزيائية التي تحاكي التفاعلات بين الأيونات الواردة وذرات المادة المستهدفة وذلك بإعطاء توزيعها كدالة في عمق الغرس [17-20].

يستخدم SRIM خياران لمحاكاة التوزيع: الأول توزيع الأيونات والحساب السريع Ion distribution and Quick calculation (Q-C) باستخدام نموذج Kinchin-Pease (K-P) والثاني: الحساب التفصيلي الكامل لسلسلة الاصطدامات المتتالية Detailed calculation with full damage cascades (F-C) [21].

تم دراسة تأثير التشعيع الأيوني للعديد من المواد من خلال استخدام برنامج SRIM. من بين هذه المواد أغشية أكسيد الزنك (ZnO) [22]، حيث تم حساب عدد الفجوات المتولدة باستخدام خيار التوزيع Q-C و F-C والناتجة عن زرع أيونات الزرنيخ (As) بطاقات (200, 400) KeV وأيونات الأرجون (Ar) والكربيتون (Kr) بطاقات (30, 200) KeV في 3 عينات من أغشية ZnO بتركيز مختلفة. أظهرت

قيمة طاقة الإزاحة لمادة الهدف 30 eV والتي تم حسابها عن طريق المعادلة التجريبية  $E_d^{eff} = \left[ \sum_i \frac{S_i}{E_d^i} \right]^{-1}$  حيث  $E_d^i$  و  $S_i$  هما الكسر المتكافئ وطاقة الإزاحة لأنواع الذرية، على التوالي [40]. يقوم SRIM بإخراج النتائج في 4 ملفات [34] كما هو مبين بالجدول (2):

جدول (2) ملفات اخراج SRIM.

SRIM output files	Contents	Unites
IONIZ.txt	Ion and Recoil IONIZATION	(eV /Angstrom)- Ion
E2recoil.txt	Energy transferred to RECOILS	(eV /Angstrom) – Ion
VACANCY.txt	Vacancies created	Vacancies / (Angstrom-Ion)
PHONON.txt	Ion and Recoil PHONONS	Phonons / (Angstrom-Ion)

## النتائج والمناقشة

### 1. الفجوات المتولدة

تنتشأ الفجوات إذا كانت الطاقة المنقولة لذرات الهدف من قبل الأيونات الواردة أكبر من طاقة العتبة للإزاحة، يتم إخراج ذرة الهدف بعيداً عن موضعها، وإذا كانت الطاقة المنقولة إلى هذه الذرة كبيرة بما فيه الكفاية، فإن ذرة الهدف يمكن بدورها أن تزيح ذرات أخرى للهدف من مواضعها وتسمى بالذرات المرتردة [10]. هناك طريقتان لحساب الفجوات المتولدة [21]:

Vacancy.txt: يتم الحصول على الفجوات المتولدة من ملف VACANCY.txt من مجموع يعتمد على العمق لجميع أحداث التصادم [جمع  $v_T$  و  $v_i$  من ملف vacancy.txt]. Damage energy: في هذه الطريقة يمكن الحصول على عدد الفجوات المتولدة باستخدام نموذج NRT من المعادلة (2) بعد حساب  $T_{dam}$  من ملفي E2recoil.txt و IONIZ.txt باستخدام العلاقة D1 من المعادلة (3).

- الفجوات المتولدة نتيجة زرع أيونات Ar و Co في هدف BFCO. يتم إجراء محاكاة SRIM باستخدام الخيارين Q-C و F-C الأيونى Co و Ar.

أولاً: الفجوات المحسوبة نتيجة تصادم أيونات الأرجون بطاقات مختلفة (5, 9, 20) KeV مع ذرات الهدف BFCO. يمكن أن نرى من الشكل (1) أن منحني توزيع الفجوات المحسوبة باستخدام طريقة Damage energy (نموذج NRT) وتلك الواردة في ملف الإخراج Vacancy.txt قريبة جداً من بعضها البعض في حالة الخيار Q-C وهذا يعني ان عدد الفجوات المتولدة باستخدام نموذج K-P يتوافق مع نموذج NRT، في حين نلاحظ وجود فرق كبير مع منحني توزيع الفجوات الذي تنبأ به خيار F-C كلما زادت طاقة PKA، حيث F-C يتنبأ بعدد فجوات أكثر كما هو موضح في الشكل (2)، وهذا متفق مع نتائج الدراسات السابقة لأيونات الحديد (Fe) المزروعة في الحديد النقي وأيونات الهيليوم (He) المزروعة في النيكل (Ni) [34]، وأيونات السيليكون (Si) المزروعة في SiC [21]، وكذلك الدراسة السابقة لأغشية أكسيد الزنك (ZnO) المزروعة بواسطة أيونات (As, Kr, Ar) [23]، حيث بينت هذه الدراسات بأن خيار F-C يتنبأ بعدد فجوات أعلى من Q-C. الجدول (3) يوضح عدد الفجوات المتولدة لكل أيون أرجون عند طاقات مختلفة لخيار Q-C و F-C حيث يزداد عدد الفجوات الناشئة بزيادة طاقة الأيون. بينت الدراسة السابقة تأثير البروتون وأيونات الهيليوم (He) في مدى من الطاقات (180-50) KeV على توليد الفجوات في مادة البيروفسكايت  $\text{CspbBr}_3$  من خلال برنامج SRIM باستخدام الخيار F-C، أن عدد الفجوات تزداد بزيادة طاقة الجسيمات، لأن الأيون ذو الطاقة الأعلى يمكنه نقل المزيد من الطاقة إلى الذرة المرتردة [41].

بناءً على هذا النموذج، يتم إعطاء عدد الإزاحات لكل ذرة بالمعادلة:

$$u_{NRT}(T_{dam}) = \frac{0.8T_{dam}}{2E_d} \quad (2)$$

حيث  $E_d$  هي طاقة عتبة الإزاحة،  $L = 2E_d/0.8$  يشير إلى الحد الأدنى من الطاقة الذي عند تجاوزه ستؤدي الطاقة المخزنة عن طريق الذرة الأولية المصطدمة إلى توليد عدة إزاحات عبر تصادم تسلسلي [20].

$T_{dam}$  هي طاقة الضرر وتمثل جزء طاقة PKA الذي يتم فقده بسبب الاصطدامات المرنة مع الذرات المستهدفة. من أجل التبسيط، تم استخدام الرموز الخاصة بطاقة  $T_{dam}$  المختلفة التي استخدمها Stoller et al [35،34]، ووفقاً للمرجع [35]، يمكن حساب طاقة الضرر باستخدام:

$$T_{dam} = E_T^0 - E_T^I \quad (3)$$

$$T_{dam} = E_i^0 - E_i^I - E_T^I - E_i^P \quad (4)$$

$$T_{dam} = E_T^P - E_i^P \quad (5)$$

يشير الحرفان i و T إلى الأيون الساقط وذرات الهدف على التوالي، يشير الحرفان I و P على التوالي إلى الطاقات المفقودة بسبب التأين والفونونات، ويمثل  $E_i^0$  طاقة الأيون الساقط، و  $E_T^0$  هي الطاقة الكلية التي تمتصها ذرات الهدف.

يُشار إلى طاقات الضرر المحسوبة باستخدام الطرق الثلاث المذكورة أعلاه بواسطة D1 و D2 و D3 على التوالي [21]. D1 هو التعريف المباشر لطاقة الضرر، ويمكن اشتقاق D2 من D1 حيث:

$$E_i^0 = E_T^0 + E_i^I + E_i^P \quad (6)$$

$$E_T^0 = E_i^0 - E_i^I - E_i^P \quad (7)$$

الشكل الحالي لـ D3 ليس مفهومًا تمامًا نظرًا للتصحيح المتعلق بـ  $E_T^P$  والذي يمثل طاقة الارتداد المفقودة للفونون ولكن يبدو أنه يتضمن  $E_i^P$  وفقاً لـ Stoller et al [34]:

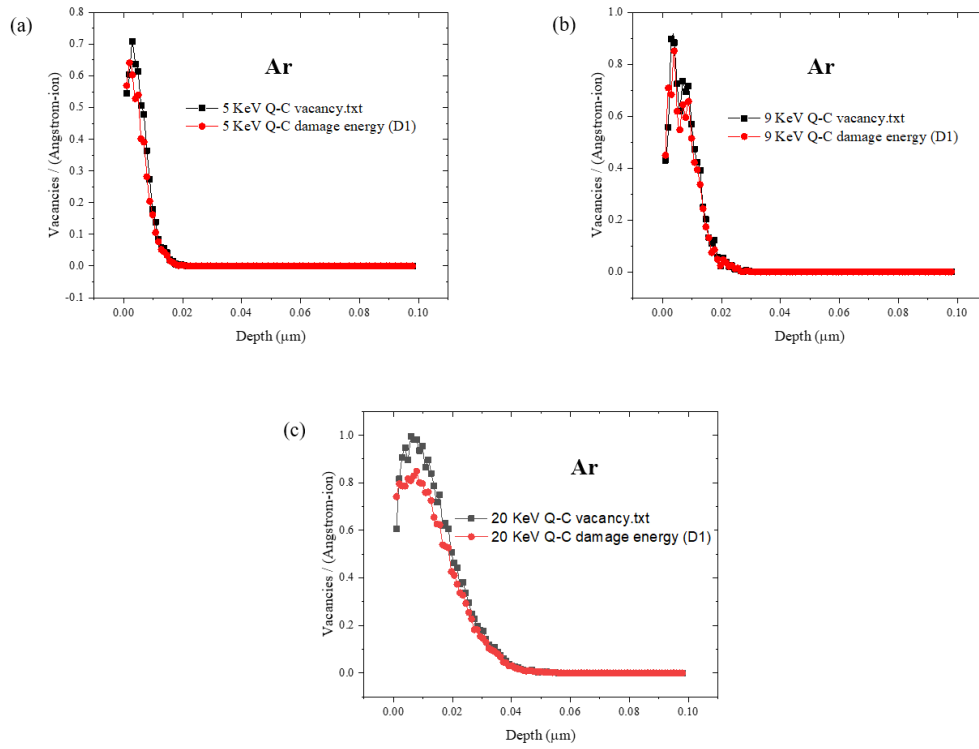
$$T_{dam} = E_i^0 - E_i^I - E_T^I = E_i^P + E_T^P \quad (8)$$

### بارامترات الإدخال المتضمنة في المحاكاة

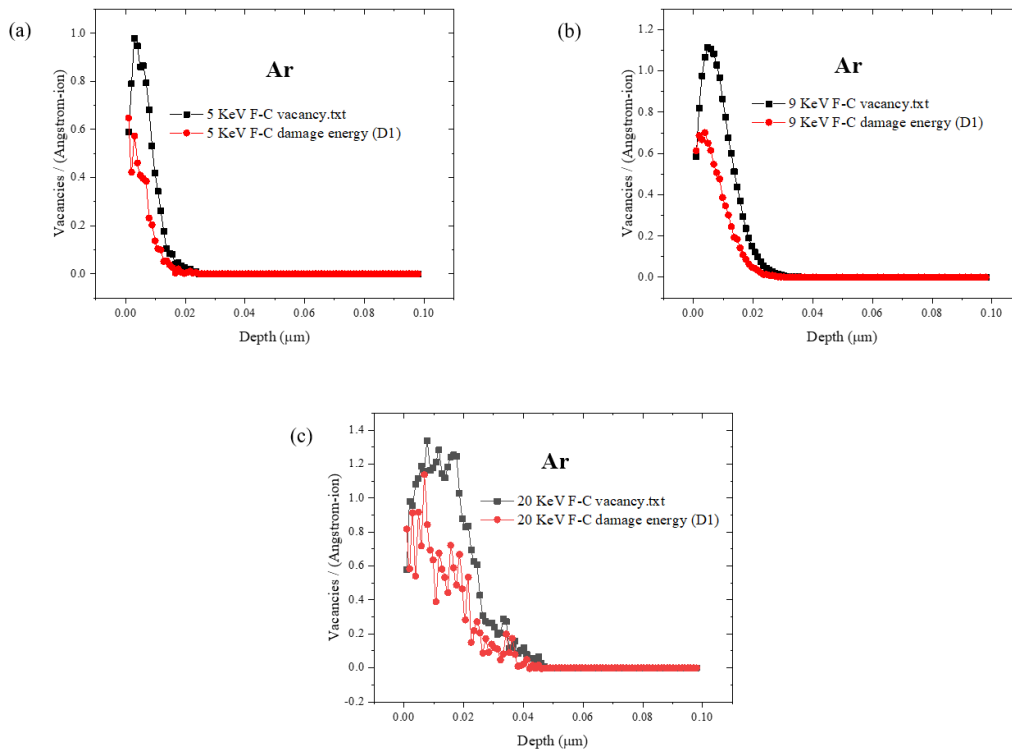
تتطلب محاكاة SRIM إدخال بارامترات الأيونات وبارامترات مادة الهدف كما موضح بالجدول (1):

جدول (1) بارامترات مدخلات SRIM.

Ion Data				
Ions	Argon (Ar), Cobalt (Co)			
Incident Energy	5, 9, 20 K eV			
Angle of incidence	0°			
Total number of ions	5000			
Target Data				
Target material	BFCO			
Target thickness	980 Å [36]			
Density of target	6.57295 g/cm <sup>3</sup>			
	Bi	Fe	Cr	O
Displacement Energy (eV)	13[37]	40[38]	40[38]	45[39]
Lattice Binding Energy (eV)	0	0	0	0
Surface Binding Energy (eV)	2.17	4.34	4.12	2



الشكل (1) عدد الفجوات الناتجة كدالة في العمق لأيون الأرجون الساقط بطاقات مختلفة [ (a) 5 KeV, (b) 9 KeV, (c) 20 KeV ] على مادة الهدف في حالة Q-C.



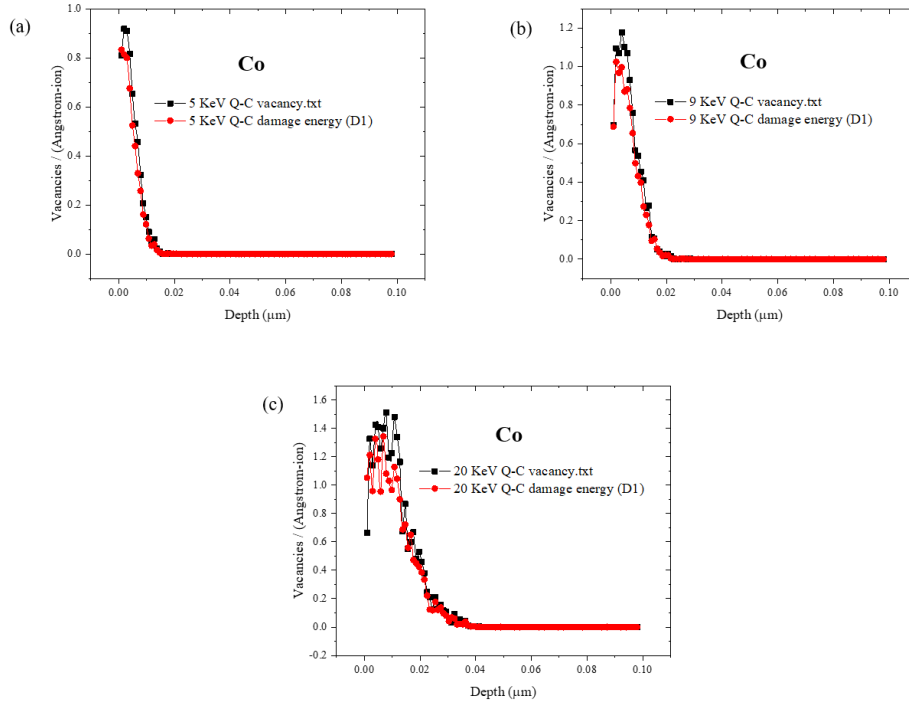
الشكل (2) عدد الفجوات الناتجة كدالة في العمق لأيون الأرجون الساقط بطاقات مختلفة [ (a) 5 KeV, (b) 9 KeV, (c) 20 KeV ] على مادة الهدف في حالة F-C.

جدول (3) عدد الفجوات المُتولدة في مادة الهدف لكل أيون ارجون ساقط بطاقات مختلفة

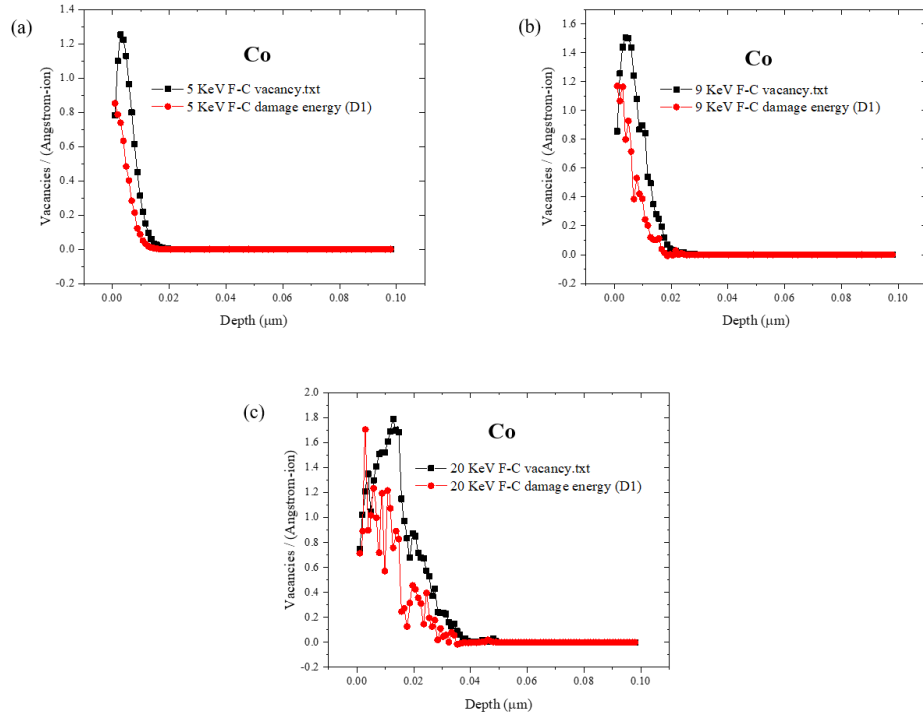
PKA energy (KeV)	Number of vacancies per Ion	
	Quick Q-C	Full cascades F-C
5	52/Ion	90/Ion
9	73/Ion	125/Ion
20	201/Ion	264/Ion

به خيار F-C كلما زادت طاقة PKA، حيث F-C يتنبأ بعدد فجوات أكثر كما هو موضح في الشكل (4)، والنتائج المتحصل عليها في اتفاق مع الدراسات السابقة [21،23،34].  
الجدول (4) يوضح عدد الفجوات المُتولدة لكل أيون كوبالت عند طاقات مختلفة لخباري Q-C و F-C حيث يزداد عدد الفجوات الناشئة بزيادة طاقة الأيون، لأن الأيون ذو الطاقة الأعلى يمكنه نقل المزيد من الطاقة إلى الذرة المُرتدة.

ثانياً: الفجوات الناشئة نتيجة تصادم ايونات Co بطاقات مختلفة (5، 9، 20) KeV مع ذرات الهدف BFCO. يمكن أن نلاحظ من الشكل (3) أن منحنى توزيع الفجوات المحسوبة باستخدام طريقة Damage energy (نموذج NRT) وتلك الواردة في ملف الإخراج Vacancy.txt قريبة جداً من بعضها البعض في حالة الخيار Q-C وهذا يعني أن عدد الفجوات المُتولدة باستخدام نموذج K-P يتوافق مع نموذج NRT، في حين نلاحظ وجود فرق كبير مع منحنى توزيع الفجوات الذي تنبأ



الشكل (3) عدد الفجوات الناتجة كدالة في العمق لأيون الكوبالت الساقط بطاقات مختلفة [(a) 5 KeV, (b) 9 KeV, (c) 20 KeV] على مادة الهدف في حالة Q-C.



الشكل (4) عدد الفجوات الناتجة كدالة في العمق لأيون الكوبالت الساقط بطاقات مختلفة [5 KeV, (b) 9 KeV, (c) 20 KeV] على مادة الهدف في حالة F-C.

جدول (4) عدد الفجوات المُتولدة في مادة الهدف لكل أيون كوبالت ساقط بطاقات مختلفة

PKA energy (KeV)	Number of vacancies per Ion	
	Quick Q-C	Full cascades F-C
5	59/Ion	80/Ion
9	106/Ion	137/Ion
20	229/Ion	290/Ion

وَأغشية LSMO المزروعة باستخدام أيونات He [28] Ne, O)، حيث بينت نتائج المحاكاة أن قيم dpa تزداد مع زيادة طاقة أيونات الزرع.

جدول (5) قيم الازاحة لكل ذرة وأقصى عمق الناتجة عن زرع أيونات الأرجون بطاقات مختلفة

PKA energy (KeV)	SRIM Options	NRT-dpa	Depth (μm)
5	Q-C	0.7129	0.00196
	F-C	0.5306	0.00392
9	Q-C	0.8608	0.00294
	F-C	0.6150	0.00588
20	Q-C	0.8888	0.00784
	F-C	0.7544	0.0156

## 2. الإزاحة لكل ذرة (dpa)

غالبًا ما يتم قياس التأثير الناتج عن التشعيع في المواد بواسطة بارامتر يسمى الإزاحة لكل ذرة (dpa) والذي يعني متوسط عدد المرات التي يتم فيها إزاحة الذرة من موضعها خلال فترة التشعيع، ويعطي مقياسًا للطاقة المترسبة في المادة بواسطة الجسيمات المتفاعلة والتي يمكن من خلالها مقارنة التأثيرات الناتجة عن أنواع مختلفة من الإشعاعات [42].

- الإزاحة لكل ذرة في هدف BFCO الناتجة عن زرع أيوني Ar وCo.

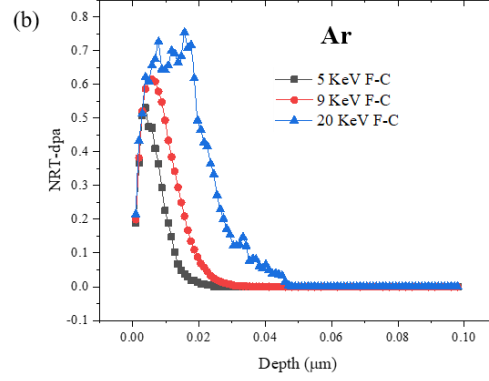
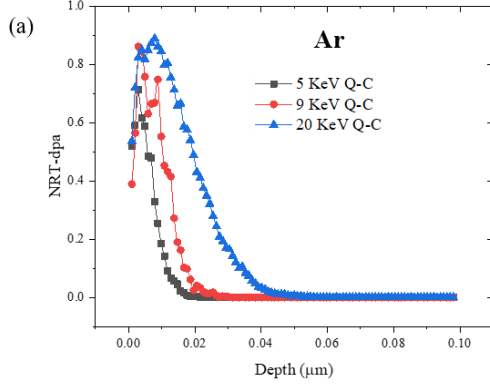
تم حساب الإزاحة لكل ذرة dpa باستخدام نموذج NRT من المعادلة (2) بحساب  $T_{dam}$  من ملفات Phonon.txt لكل من المحاكاة الكاملة F-C والسريعة Q-C كمجموع الطاقة المفقودة للفونونات بواسطة الأيون الساقط والذرات المُرتدة المستهدفة عند كل عمق من المعادلة (8).

من الشكلين (5) و(6) نلاحظ أن dpa تزداد بزيادة طاقة PKA، وكذلك يزداد عمق الهدف لكل من أيونات Ar وCo. هناك اختلاف طفيف في تقدير الإزاحة لكل ذرة الناتجة من المحاكاة الكاملة F-C مقارنة بمحاكاة Q-C، وقيم الإزاحة لكل ذرة (NRT-dpa) وأقصى عمق اختراق لأيونات Ar وCo موضحة في الجدولين (5) و(6). النتائج المتحصل عليها في اتفاق مع نتائج الدراسات السابقة لأغشية البيروفسكايت STO المزروعة باستخدام أيونات (Ar،

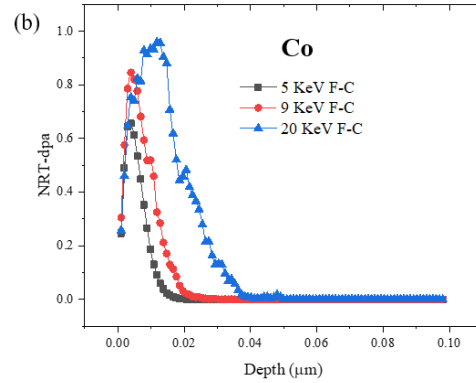
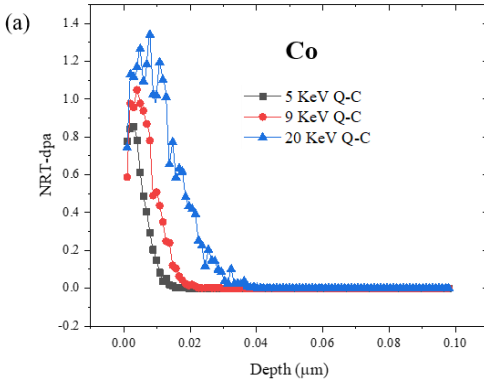
9	Q-C	1.0478	0.00392
	F-C	0.8455	0.00392
20	Q-C	1.3396	0.00784
	F-C	0.9564	0.01274

جدول (6) قيم الازاحة لكل ذرة وأقصى عمق الناتجة عن زرع أيونات الكوبالت بطاقات مختلفة

PKA energy (KeV)	SRIM Options	NRT-dpa	Depth ( $\mu\text{m}$ )
5	Q-C	0.8521	0.00294
	F-C	0.6558	0.00392



الشكل (5) ازاحة كل ذرة كدالة في العمق الناتجة عن زرع أيون الأرجون بطاقات مختلفة لخيارات [(a) Q-C, (b) F-C].



الشكل (6) ازاحة كل ذرة كدالة في العمق الناتجة عن زرع أيون الكوبالت بطاقات مختلفة لخيارات [(a) Q-C, (b) F-C].

طاقة السطح بقيمة  $4.7 \text{ eV}$  [46]. وبينت هذه الدراسات أهمية حساب طاقة السطح لمواد الهدف لتحسين كفاءتها في عمليات الترسيب. هنا تم دراسة محصلة عملية التريز لأيونات Ar و Co الساقطة على هدف BFCO بزوايا صفر وطاقات (5, 9, 20) KeV لحساب طاقة السطح لمادة الهدف.

- محصلة عملية التريز لتقدير استخدام هدف BFCO في عمليات الترسيب

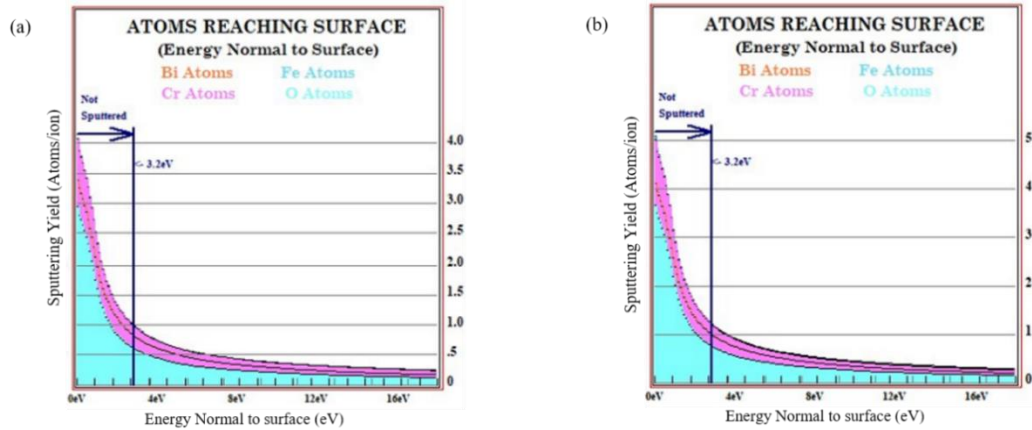
يوضح الشكل (7) المخطط التكاملي integral sputtering graph ويُمثل عدد الذرات التي تصل إلى السطح بطاقة أعلى من عتبة معينة، وبما أنه تم قياس الإحداثيات بالذرات/الأيون فإن كل أيون سينتج عدد من الذرات المرتدة التي قد تصل إلى السطح. وقُدرت طاقة السطح لهدف BFCO بـ  $3.2 \text{ eV}$  (كما هو موضح بالخط العمودي في المخطط)، والذرة على الجانب الأيسر من الخط غير متناثرة لأن الطاقة كانت أقل من  $3.2 \text{ eV}$ . بمعنى أنه سيتم تناثر عدد من ذرات الهدف الذي يتم ضربه بطاقة أعلى من  $3.2 \text{ eV}$  ويرتبط ذلك بجدول ناتج عملية التريز في برنامج SRIM-TRIM. يُوضح المخطط التفاضلي differential sputtering graph كما هو مبين في الشكل (8) توزيع طاقات الذرة التي تصل إلى السطح وبالتالي، لتحسين كفاءة الترسيب

### 3. عملية التريز Sputtering Process

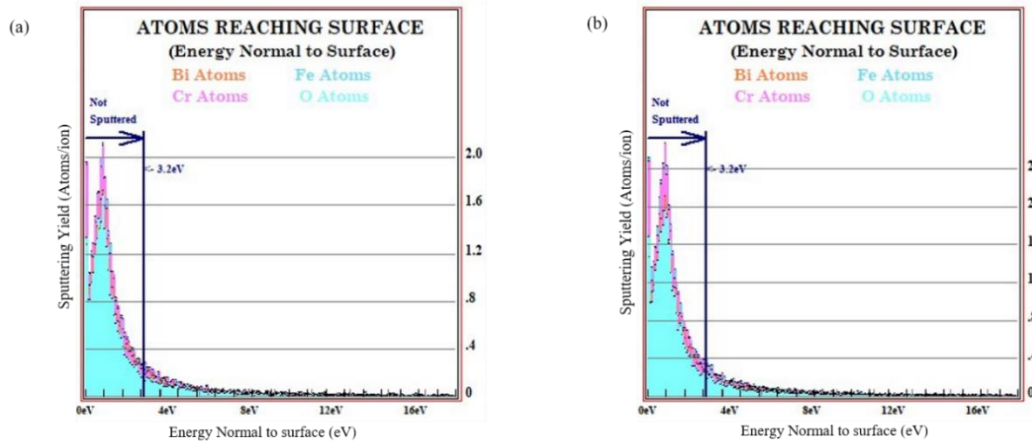
تُعد عملية التريز من تقنيات الترسيب الأكثر استخداماً لتصنيع الأغشية الرقيقة والتي تتطلب تقديراً جيداً لمحصلة عملية التريز. تحدث عملية التريز عندما يصطدم أيون نشط بسطح مادة الهدف وينتشر عبرها. وفي هذه العملية تحدث سلسلة من الاصطدامات بين الأيونات وذرات مادة الهدف، وبعض هذه السلاسل تنتج نحو السطح وإذا كانت طاقة الذرة المرتدة الأخيرة التي تنتج نحو السطح أكبر من طاقة ربط السطح، فسيتم انتزاع الذرة من المادة. تؤدي الطبيعة العشوائية للاصطدامات إلى انبعاث عدد من الذرات في اتجاهات مختلفة. ويعتمد توزيع هذه الذرات على طاقة وكتلة وزاوية الأيون المصطدم وكذلك على خصائص المادة المستهدفة. تُعد محصلة عملية التريز والتوزيعات المكانية للذرات المتناثرة أمراً مهماً للعديد من تقنيات الترسيب [44,43].

تم استخدام برنامج SRIM لدراسة عملية التريز في دراسات سابقة لأيونات الفضة (Ag) الساقطة على مادة CdSe بطاقة  $120 \text{ MeV}$  وحساب طاقة السطح لمادة الهدف بقيمة  $1.7 \text{ eV}$  [45]، وكذلك لأيونات (Ar) الساقطة بزوايا صفر وطاقات مختلفة على مادة NiTi وحساب

لهدف BFCO يجب زيادة مستوى الطاقة لذرات الأيونات الأولية إلى 3.2 eV لكل ذرة.



الشكل (7) المخطط التكاملي لعملية التريز الناتج من اصطدام أيونات [(a) Ar, (b) Co] بهدف BFCO.



الشكل (8) المخطط التفاضلي لعملية التريز الناتج من اصطدام أيونات [(a) Ar, (b) Co] بهدف BFCO.

- إن إزاحة كل ذرة (dpa) تزداد بزيادة طاقة PKA، وكذلك يزداد عمق الهدف لكل من أيونات Ar و Co. كما أن هناك اختلاف طفيف في تقدير الإزاحة لكل ذرة الناتجة من المحاكاة الكاملة F-C مقارنة بمحاكاة Q-C.

- نتائج هذه الدراسة في حساب عدد الفجوات المُتولدة باستخدام خيار التوزيع Q-C و F-C، وتقدير قيم dpa مُقابل طاقة أيونات الزرع كانت متوافقة مع النتائج السابقة المنشورة.

- من خلال دراسة عملية التريز قُدرت طاقة السطح لهدف BFCO بـ **3.2 eV**، وبالتالي لتحسين كفاءة الترسيب لهدف BFCO، يجب زيادة مستوى الطاقة لذرات الأيونات الأولية إلى 3.2 eV لكل ذرة. نتائج هذه الدراسة تضع القيم التقديرية لمادة BFCO ليتم التحقق من صحتها تجريبياً. بينما يوفر SRIM تقديرات الضرر على البنية البلورية وأي تأثيرات مغناطيسية غير مباشرة تتطلب مزيداً من التحقيق.

- [2] Catalan, G., & Scott, J. F. (2009). Physics and applications of bismuth ferrite. *Advanced materials*, 21(24), 2463-2485.
- [3] Ma, J., Hu, J., Li, Z., & Nan, C. W. (2011). Recent progress in multiferroic magnetoelectric composites: from bulk to thin films. *Advanced materials*, 23(9), 1062-1087.

## الخلاصة

في هذا البحث تم دراسة التأثيرات الناجمة عن تفاعل أيونات Ar و Co مع ذرات مادة الهدف BFCO باستخدام برنامج SRIM عند طاقات مختلفة وباستخدام خيار التوزيع Q-C و F-C، والمتمثلة في الفجوات المُتولدة، والإزاحة لكل ذرة بناءً على نموذج (NRT) بالإضافة إلى دراسة عملية التريز لتقدير استخدام هدف BFCO في عمليات الترسيب، وأظهرت نتائج المحاكاة:

- إن عدد الفجوات المُتولدة نتيجة لزرع أيوني Ar و Co في هدف BFCO باستخدام المحاكاة السريعة Q-C يتوافق مع نموذج NRT، نلاحظ أيضاً وجود فرق كبير مع منحنى توزيع الفجوات الذي تنتج به المحاكاة الكاملة F-C كلما زادت طاقة PKA، حيث F-C ينتج بعدد فجوات أعلى من Q-C، ولتقدير صحيح لعدد الفجوات يُفضل الخيار F-C.

## المراجع

- [1] Qiao, L., Zhang, S., Xiao, H. Y., Singh, D. J., Zhang, K. H. L., Liu, Z. J., ... & Li, S. (2018). Orbital controlled band gap engineering of tetragonal BiFeO<sub>3</sub> for optoelectronic applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 6(5), 1239-1247.

- [15] Norgett, M. J., Robinson, M. T., & Torrens, I. M. (1975). A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nuclear engineering and design*, 33(1), 50-54.
- [16] Iwamoto, Y., Niita, K., Sawai, T., Ronningen, R. M., & Baumann, T. (2013). Displacement damage calculations in PHITS for copper irradiated with charged particles and neutrons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 303, 120-124.
- [17] Ziegler, J. F., Ziegler, M. D., & Biersack, J. P. (2010). SRIM—The stopping and range of ions in matter (2010). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 268(11-12), 1818-1823.
- [18] Biersack, J. P., & Haggmark, L. G. (1980). A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets. *Nuclear instruments and methods*, 174(1-2), 257-269.
- [19] Ziegler, J. F., & Biersack, J. P. (1985). The stopping and range of ions in matter. In *Treatise on Heavy-Ion Science: Volume 6: Astrophysics, Chemistry, and Condensed Matter* (pp. 93-129). Boston, MA: Springer US.
- [20] Ziegler, J. F. (2004). SRIM-2003. *Nuclear instruments and methods in physics research section B: Beam interactions with materials and atoms*, 219, 1027-1036.
- [21] Agarwal, S., Lin, Y., Li, C., Stoller, R. E., & Zinkle, S. J. (2021). On the use of SRIM for calculating vacancy production: Quick calculation and full-cascade options. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 503, 11-29.
- [22] Nazri, N. S. M., Mamat, M. H., Parimon, N., Malek, M. F., Yaakob, M. K., Suriani, A. B., ... & Rusop, M. (2022). Ionization Characteristic of Different Gases Inside Zinc Oxide Target During Sputtering Process Simulated Using SRIM Software. In *Enabling Industry 4.0 through Advances in Manufacturing and Materials: Selected Articles from iM3F 2021, Malaysia* (pp. 385-394). Singapore: Springer Nature Singapore.
- [23] Yuan, M., Zhang, X., Saeedi, A. M., Cheng, W., Guo, C., Liao, B., ... & Gehring, G. A. (2019). Study of the radiation damage caused by ion implantation in ZnO and its relation to magnetism. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 455, 7-12.
- [24] Bouzeshouane, K., Woodall, P., Marcilhac, B., Khodan, A. N., Crété, D., Jacquet, E., ... & Contour, J. P. (2002). Enhanced dielectric
- [4] Song, Z. W., & Liu, B. G. (2013). Electronic structure and magnetic and optical properties of double perovskite  $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$  from first-principles investigation. *Chinese Physics B*, 22(4), 047506.
- [5] Nechache, R., Harnagea, C., Pignolet, A., Normandin, F., Veres, T., Carignan, L. P., & Ménard, D. (2006). Growth, structure, and properties of epitaxial thin films of first-principles predicted multiferroic  $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$ . *Applied physics letters*, 89(10).
- [6] Kumar, R., Samanta, S. B., Arora, S. K., Gupta, A., Kanjilal, D., Pinto, R., & Narlikar, A. V. (1998). Study of columnar amorphization and structural symmetry changes produced by swift heavy ion irradiation in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$  thin films using STM. *Solid state communications*, 106(12), 805-810.
- [7] Kumar, R., Arora, S. K., Kanjilal, D., Mehta, G. K., Bathe, R., Date, S. K., ... & Patil, S. I. (1999). Swift heavy ion irradiation effects on transport properties of epitaxial thin films of  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ . *Radiation effects and defects in solids*, 147(3), 187-197.
- [8] Shukla, D. K., Kumar, R., Mollah, S., Choudhary, R. J., Thakur, P., Sharma, S. K., ... & Knobel, M. (2010). Swift heavy ion irradiation induced magnetism in magnetically frustrated  $\text{BiMn}_2\text{O}_5$  thin films. *Physical Review B*, 82(17), 174432.
- [9] Was, G. S., & Was, G. S. (2017). The displacement of atoms. *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys*, 77-130.
- [10] R. Hellborg, H.J. Whitlow, Y. Zhang. (2009). "Ion beams in nanosciences and technology", Springer Heidelberg Dordrecht London New York, 103-105.
- [11] Robinson, M. T. (1994). The binary collision approximation: Background and introduction. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 130(1), 3-20.
- [12] Hobler, G., & Selberherr, S. (1989). Monte Carlo simulation of ion implantation into two-and three-dimensional structures. *IEEE transactions on computer-aided design of integrated circuits and systems*, 8(5), 450-459.
- [13] Robinson, M. T., & Torrens, I. M. (1974). Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation. *Physical Review B*, 9(12), 5008.
- [14] Nordlund, K., Sand, A. E., Granberg, F., Zinkle, S. J., Stoller, R., Averback, R. S., ... & Simeone, D. (2015). Primary radiation damage in materials. Report prepared by the OECD/NEA Working Party on Multiscale Modelling of Fuels and Structural Materials for Nuclear Systems, Expert Group on Primary Radiation Damage Nuclear Science NEA/NSC/DOC, 9.



- radiation damage exposure" [Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 310 (2013) 75-80]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 459, 196-197.
- [36] Rastei, M. V., Gellé, F., Schmerber, G., Quattropiani, A., Fix, T., Dinia, A., ... & Colis, S. (2019). Thickness dependence and strain effects in ferroelectric Bi<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub> thin films. *ACS Applied Energy Materials*, 2(12), 8550-8559.
- [37] Bois, P., & Beuneu, F. (1987). Displacement threshold energy in pure Bi and dilute BiTe alloy. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 17(12), 2365.
- [38] Konobeyev, A. Y., Fischer, U., Korovin, Y. A., & Simakov, S. P. (2017). Evaluation of effective threshold displacement energies and other data required for the calculation of advanced atomic displacement cross-sections. *Nuclear Energy and Technology*, 3(3), 169-175.
- [39] Smith, K. L., Colella, M., Cooper, R., & Vance, E. R. (2003). Measured displacement energies of oxygen ions in titanates and zirconates. *Journal of nuclear materials*, 321(1), 19-28.
- [40] Ghoniem, N. M., & Chou, S. P. (1988). Binary collision Monte Carlo simulations of cascades in polyatomic ceramics. *Journal of Nuclear Materials*, 155, 1263-1267.
- [41] Mei, H. Y., Wu, H. T., Yao, R. X., Zhao, L. Y., Zheng, X. Y., Liu, F., ... & Sun, S. X. (2022). Effect of low energy proton and He particle irradiation on CsPbBr<sub>3</sub> material. *Digest Journal of Nanomaterials & Biostructures (DJNB)*, 17(1).
- [42] Kinchin, G. H., & Pease, R. S. (1955). The displacement of atoms in solids by radiation. *Reports on progress in physics*, 18(1), 1.
- [43] Behrisch, R. (1981). Sputtering by particle bombardment I. Physical sputtering of single-element solids, Vol. 47.
- [44] Behrisch, R., & Wittmaack, K. (Eds.). (1991). *Sputtering by particle bombardment III: characteristics of sputtered particles, technical applications* (p. 8). Berlin, New York: Springer-Verlag.
- [45] Nath, D., & Das, R. (2021). Surface and displacement damage engineering on CdSe nanocrystalline thin film by swift heavy Ag ions: A theoretical investigation by SRIM/TRIM package. *Vacuum*, 190, 110293.
- [46] Behera, A., Saxena, K., Prakash, C., Pramanik, A., Haider, J., Basak, A., & Shankar, S. (2023). MODELING AND SIMULATION OF MAGNETRON-SPUTTERED NiTi THIN FILM DEPOSITION BY SRIM/TRIM. *Surface Review and Letters*, 2340005.
- properties of SrTiO<sub>3</sub> epitaxial thin film for tunable microwave devices. *Applied physics letters*, 80(1), 109-111.
- [25] Szot, K., Speier, W., Bihlmayer, G., & Waser, R. (2006). Switching the electrical resistance of individual dislocations in single-crystalline SrTiO<sub>3</sub>. *Nature materials*, 5(4), 312-320.
- [26] Janousch, M., Meijer, G. I., Staub, U., Delley, B., Karg, S. F., & Andreasson, B. P. (2007). Role of oxygen vacancies in Cr-doped SrTiO<sub>3</sub> for resistance-change memory. *Advanced materials*, 19(17), 2232-2235.
- [27] Gentils, A., Copie, O., Herranz, G., Fortuna, F., Bibes, M., Bouzouane, K., ... & Barthélémy, A. (2010). Point defect distribution in high-mobility conductive SrTiO<sub>3</sub> crystals. *Physical Review B*, 81(14), 144109.
- [28] Velişa, G., Wendler, E., Xue, H., Zhang, Y., & Weber, W. J. (2018). Revealing ionization-induced dynamic recovery in ion-irradiated SrTiO<sub>3</sub>. *Acta Materialia*, 149, 256-264.
- [29] Zhao, H., Kimura, H., Cheng, Z., Wang, X., Ozawa, K., & Nishida, T. (2010). Magnetic characterization of Bi<sub>2</sub>FeMnO<sub>6</sub> film grown on (100) SrTiO<sub>3</sub> substrate. *physica status solidi (RRL)—Rapid Research Letters*, 4(11), 314-316.
- [30] Yang, Y., Schlepütz, C. M., Adamo, C., Schlom, D. G., & Clarke, R. (2013). Untilting BiFeO<sub>3</sub>: The influence of substrate boundary conditions in ultra-thin BiFeO<sub>3</sub> on SrTiO<sub>3</sub>. *APL Materials*, 1(5).
- [31] Cao, L., Herklotz, A., Rata, D., Yin, C., Petravic, O., Kentsch, U., ... & Zhou, S. (2021). Metal-insulator transition via ion irradiation in epitaxial La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3-δ</sub> thin films. *physica status solidi (RRL)—Rapid Research Letters*, 15(11), 2100278.
- [32] Nechache, R., Harnagea, C., Carignan, L. P., Ménard, D., & Pignolet, A. (2007). Epitaxial Bi<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub> multiferroic thin films. *Philosophical magazine letters*, 87(3-4), 231-240.
- [33] Nechache, R., Harnagea, C., Carignan, L. P., Menard, D., & Pignolet, A. (2008). Structure and properties of epitaxial thin films of Bi<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub>: a multiferroic material postulated by ab-initio computation. *Integrated Ferroelectrics*, 101(1), 152-163.
- [34] Stoller, R. E., Toloczko, M. B., Was, G. S., Certain, A. G., Dwaraknath, S., & Garner, F. A. (2013). On the use of SRIM for computing radiation damage exposure. *Nuclear instruments and methods in physics research section B: beam interactions with materials and atoms*, 310, 75-80.
- [35] Stoller, R. E., Toloczko, M. B., Was, G. S., Certain, A. G., Dwaraknath, S., & Garner, F. A. (2019). Erratum to " On the use of SRIM for computing

*Simulation of the effect of ion irradiation on the thin films of multiferroic material  
Bi<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub>*

\*Ali. O. Almesrati<sup>1</sup> and Tebra.A.Mataug<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Faculty of science, Misurata University

<sup>2</sup>Department of Physics, Faculty of science, Misurata University

\*Corresponding Author: [almisratiali7@gmail.com](mailto:almisratiali7@gmail.com)

**Abstract**

Bismuth ferrite chromate (Bi<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub>) exhibits coupled ferroelectric and magnetic ordering dependent on its crystalline structure. Ion implantation allows for precise structural engineering but requires defined parameters. This work utilizes Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM) simulations to predict damage from implanting Ar and Co ions with incident energies 5.0, 9.0 and 20 KeV. using SRIM was calculated ion penetration depth, vacancies generated, displacement per atom and the sputtering process was studied to evaluate the use of BFCO in deposition processes. However, as SRIM inherently models amorphous materials, direct structural and ordering impacts cannot be determined. Parameters were optimized in SRIM to minimize excessive damage formation and sputtering, with localized amorphization possible.

**Keywords:** SRIM simulation, ion implantation, multiferroic material, bismuth ferrite chromate, Bi<sub>2</sub>FeCrO<sub>6</sub>.