

РАСЧЕТ МАССОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ КЛАСТЕРОВ, РАСПЫЛЕННЫХ С ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ ПУЧКОМ ГАЗОВЫХ КЛАСТЕРНЫХ ИОНОВ

А.В. Назаров^{1), 2)}, Д.С. Киреев²⁾, А.Н. Ратцев²⁾, В.С. Черныш²⁾

¹⁾Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скobelцына,

Ленинские горы 1/2, Москва 119991, Россия

²⁾Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,

Ленинские горы 1/2, Москва 119991, Россия

av.nazarov@physics.msu.ru

Газовые кластеры представляют собой структуры, состоящие из некоторого числа атомов инертного газа (от единиц до десятков тысяч), связанных между собой Ван-дер-Ваальсовским взаимодействием. Механизмы взаимодействия ускоренных кластеров с твердым телом значительно отличаются от случая атомарных ионов, и на данный момент, остаются исследованы в недостаточной мере. В данной работе проведено исследование массовых распределений материала, распыленного с поверхности меди пучком кластерных ионов аргона размером в диапазоне от 50 до 1000 атомов и с энергией 10 и 20 кэВ. Расчет производился на основе компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Показан степенной характер массовых распределений. Проводится сравнение полученных распределений со случаем распыления атомарными ионами. Изучены зависимости параметров распределения от энергии и размера налетающего кластерного иона, показана корреляция показателя степенной функции, описывающей распределение, с полным коэффициентом распыления.

Ключевые слова: газовые кластерные ионы; распыление; молекулярная динамика.

CALCULATION OF THE MASS DISTRIBUTIONS OF CLUSTERS SPUTTERED FROM COPPER BY GAS CLUSTER ION BEAM

Anton Nazarov¹⁾, Dmitrii Kireev²⁾, Alexander Rattsev²⁾, Vladimir Chernysh²⁾

¹⁾Lomonosov Moscow State University,

D.V. Skobeltsyn Scientific Research Institute of Nuclear Physics,

1/2 Leninskie Gory, 119991 Moscow, Russia

²⁾Lomonosov Moscow State University,

1/2 Leninskie Gory, 119991 Moscow, Russia

av.nazarov@physics.msu.ru

Gas clusters are structures comprising from several to tens of thousands inert gas atoms bound by Van der Waals forces. The gas cluster ion beam (GCIB) irradiation has found several practical applications for surface modification and analysis. The mechanisms of GCIB interaction with solid surface differ significantly from the case of atomic ions. The studies these mechanisms play an important role for advancement in these applications. The material can be sputtered from the surface not only in the form of individual atoms, but also as dimers, trimers and larger clusters. Current report is devoted to the study on the mass distributions of the copper clusters sputtered from the copper surface by argon GCIB. The calculations have been carried out using molecular dynamics simulations of cluster impact on copper surface. The cluster size varied from 50 to 1000 atoms per cluster and the energy varied from 10 to 20 keV. It has been found that the mass distributions of sputtered material can be described by the power law. Such distribution shape is similar to the case of sputtering by atomic ions. The dependences of the distribution parameters on the energy and size of the incident gas cluster ion are studied, and the correlation of the exponent of the power function describing with the total sputtering coefficient is shown.

Keywords: gas cluster ions; sputtering; molecular dynamics.

Введение

Дифференциальные характеристики распыления, такие как угловые энергетические и массовые распределения распыленного материала, играют важную роль для понимания механизмов взаимодействия ускоренных частиц с материалом мишени.

Поток частиц, эмитированных с поверхности при облучении пучком атомарных ионов, (например, Ar^+), преимущественно состоит из нейтральных атомов и кластеров, причем выход кластеров значительно меньше, чем одиночных атомов. Зависимость выхода от размера кластера подчиняется степенному закону (1):

$$Y(n) \propto n^{(-\delta)} \quad (1)$$

Основными моделями, описывающими эмиссию многоатомных кластеров в процессе распыления атомарными ионами, являются модель ударных волн (2) и модель термодинамического равновесия (3).

Целью данной работы является изучение массовых распределений меди при распылении пучком газовых кластерных ионов аргона. Расчет распределений производится на основе компьютерного моделирования взаимодействия кластера с поверхностью меди методом молекулярной динамики.

Методы

Компьютерное моделирование взаимодействия ускоренных кластеров аргона с поверхностью меди проводилось методом молекулярной динамики с помощью программного пакета PARCAS (4). Кластеры аргона с энергией 10 и 20 кэВ и размерами в диапазоне от 50, 500 и 1000 атомов направлялись на мишень вдоль нормали к поверхности (111) монокристалла меди. Температура мишени составляла 300 К. Процедура подготовки ячейки моделирования подробно описана в работах (11 – 13).

Взаимодействие между атомами аргона описывалось потенциалом Леннарда –

Джонса; между атомами мишени – потенциалом модели погруженного атома (EAM); между атомами кластера и мишени – универсальным отталкивающим потенциалом ZBL.

Для каждого размера и энергии кластера была проведена серия расчетов от 50 до 200 соударений кластера с поверхностью, в каждом из которых начально положение кластера по осям X и Y варьировалось случайным образом в пределах постоянной кристаллической решетки мишени. Моделируемое время варьировалось от 5 до 20 пс в зависимости от размера и энергии кластера. После моделирования проводился анализ распыленных фрагментов материала мишени.

Результаты и их обсуждение

В результате расчетов показано, что массовые распределения материала, распыленного пучком газовых кластерных ионов (рис. 1), подобно случаю распыления атомарными ионами могут быть хорошо описаны степенной функцией (1).

При этом при анализе распределений обнаружено, что показатель степени монотонно возрастает с полным коэффициентом распыления Y_{tot} . Это значит, что большие значения δ , т. е. низкие относительные вклады больших фрагментов, связаны с низкими значениями Y_{tot} и наоборот. Коэффициент распыления материала газовыми кластерными ионами зависит как от полной энергии кластера, так и от его приведенной энергии E/n , определяемой как энергия, приходящаяся на один атом кластера. В случае высоких значений E/n кластер на начальном этапе взаимодействия с поверхностью распадается на отдельные атомы. Энергия атомов кластера достаточно для того, чтобы они могли независимо друг от друга двигаться в мишени, создавая каскады атомных столкновений. В результате перекрытия этих каскадов формируется неравновесная область теплового пика, в процессе диссипации энергии из которого, и происходит эмиссия распыленного вещества. Данный режим характер-

ризуется практически полной передачей энергии кластера атомам мишени и высокими значениями коэффициента распыления, что соответствует меньшему по модулю показателю степени распределения и характеризуется эмиссией больших кластеров.

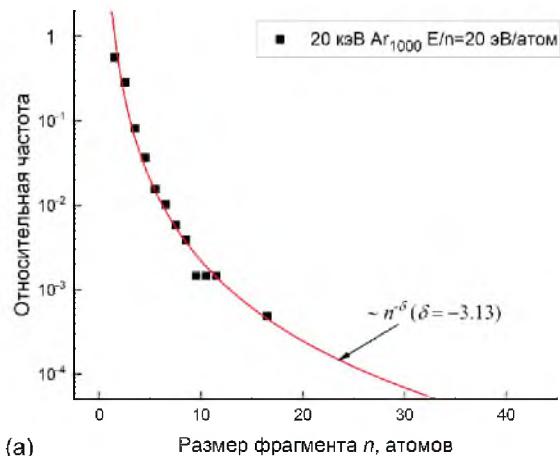


Рис. 1. Распределение по размерам фрагментов, распыленных с поверхности меди кластерными ионами Ar_{1000} с энергией 20 кэВ

В случае малых E/n атомы кластера не могут независимо двигаться в мишени. В этом случае происходит компрессия кластера в приповерхностной области. Передача энергии и импульса атомам мишени в этом случае определяется не каскадами столкновений, индивидуально созданными атомами кластера в мишени, а коллективным воздействием атомов кластера, в результате которого создается давление в приповерхностной области взаимодействия. В этом случае доля энергии кластера, переданная атомам мишени значительно снижается, коэффициент распыления падает с уменьшением значения E/n . Такой режим характеризуется большим по модулю показателем степени для массового распределения, низким значением среднего размера эмитированных кластеров.

Заключение

В работе были рассчитаны массовые распределения материала, распыленного с поверхности меди кластерными ионами аргона. Распределения хорошо описываются степенной функцией, аналогично распылению атомарными ионами. Значение показателя степени зависит как от энергии, так и от размера кластера, при этом показатель степени возрастает с ростом полного коэффициента распыления для заданных параметров, также аналогично случаю атомарных ионов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №24-79-00125.

Библиографические ссылки

1. Wucher A, Wahl M. The formation of clusters during ion induced sputtering of metals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 1996; 115.
2. Bitensky I.S., Parilis E.S. Shock wave mechanism for cluster emission and organic molecule desorption under heavy ion bombardment. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1987.
3. Urbassek H.M. Sputtered Cluster Mass Distributions, Thermodynamic Equilibrium and Critical Phenomena. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1988; 31: 541-550.
4. Nordlund K. Molecular dynamics simulation of ion ranges in the 1–100 keV energy range. *Computational Materials Science*. 1995; 3(4): 448-456.
5. Шилов М. С., Назаров А. В., Черныш В. С., Шемухин А. А. Расчет поверхностной энергии связи атомов в никель-палладиевых сплавах с помощью метода молекулярной динамики. *Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия*. 2025; (1): 2510302
6. Chernysh V.S., Ieshkin A.E., Kireev D.S., Nazarov A.V., Zavilgelsky A.D. Interaction of gas cluster ions with solids: Experiment and computer simulations. *SurfCoat Technol.* 2020; 388: 125608.
7. Иешкин А.Е., Завильгельский А.Д., Беляев М.Е., Назаров А.В. Температурные зависимости коэффициента распыления при облучении газовыми кластерными ионами. Численное моделирование. *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон.* 2022; (4): 30-34.