

УДК 622:53

К.А. Толпин, М.Ю. Толпина, В.Е. Юрасова

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ ПРИ ИОННОМ ОБЛУЧЕНИИ
ТВЕРДОГО ТЕЛА**

Изложено применение молекулярно-динамического метода для исследования процессов, важных как для понимания физики взаимодействия атомных частиц с поверхностью, так и для развития перспективных методов анализа химического состава твердых тел, в частности, горных пород, при ионной бомбардировке.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, распыление твердого тела, метод молекулярной динамики.

**K.A. Tolpin, V.Yu. Tolpina,
V.E. Yurasova
MOLECULAR-DYNAMICS
SIMULATION OF PROCESSES UNDER
ION IRRADIATION OF SOLID BODY**

In this review, we describe the basics of computer simulation using the molecular dynamics method (MD). We look into how this method can be used to study the processes that are important both for understanding the physics of the interaction of atomic particles with a surface, and for developing effective methods of chemical analysis of the composition of solids, mountain rocks in particular, under ion bombardment.

Key words: computer modeling, pulverization of the solid body, molecular dynamics technique.

Ионное облучение является современным и перспективным методом исследования химического состава различных твердых тел, и в частности, горных пород. Ранее для определения состава горных пород (особенно, тонкозернистых и аморфных, о минеральном составе которых нельзя было судить по визуальному наблюдению их шлифа) использовались простые химические анализы. Позже химические анализы служили для установления родства

между породами разного состава. С их помощью доказали, например, что граниты одной и той же местности, как будто бы сходные по внешнему виду, отличаются друг от друга связанными с ними рудами. Например, с одними гранитами встречается олово, с другими – золото. Изучение особенностей химического состава этих гранитов показало, что они различаются также по содержанию окислов щелочей, глинозема и других компонентов. Однако при обычном химическом анализе горной породы определяется содержание лишь небольшого числа химических элементов. В связи с этим, в последнее время для исследования химического состава горных пород применяются новые методы, использующие электронное и ионное облучение. Сюда относится, прежде всего, метод ВИМС – вторично-ионной масс-спектрометрии. Он особенно перспективен для определения примесей, наличие которых позволяет судить о механизмах и времени образования горных пород. В этом методе определяется эмиссия частиц из анализируемой мишени, возникающая в результате ионной бомбардировки и

распыления поверхности. Для развития метода ВИМС и увеличения его разрешающей способности необходимо детальное экспериментальное, теоретическое и модельное исследование процесса распыления.

Далее рассмотрим далее ряд новых данных по исследованию с помощью МД моделирования [1] процессов при ионном облучении поверхности твердого тела, которые были доложены на последней международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью» (Ion-Surface Interactions) 24-28 августа 2007 г. в Звенигороде.

1. Эрозия и модификация поверхности при ионной бомбардировке*¹

Процесс разрушения (эрозии) и модификации поверхности при ионной бомбардировке был недавно подробно исследован с помощью МД моделирования в работе [2]. Были изучены случаи распыления Si, Al, Cu, Ni, W и Nb под воздействием пучков газовых кластеров и высоко-заряженных ионов Xe^{+q} . Получены зависимости коэффициентов распыления Si и W от потенциальной энергии ионов Xe^{+q} . Анализ которых показал, что существует два характерных энергетических интервала: первый, где коэффициент распыления имеет линейную зависимость от потенциальной энергии (выше 0.1 keV для Si) и второй, где эта энергия постоянна (ниже пороговой величины). Эти пороговые энергии для двух областей почти одинаковы для CsI, SiO_2 , Si. Однако порог гораздо больше для GaAs. Одна из причин такого поведения может заключаться в очень низкой плотности носителей ($n_i = 2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$) в GaAs при комнатной температуре. Анализ (базирующиеся на локальных атомных

напряжениях и на векторе скольжения) показали, что пучки из газовых кластеров и высоко-заряженных ионов интенсивно формируют петли дислокаций и дефекты, расположенные вблизи поверхности и стабильные в течение всего периода МД моделирования, который был равен 75 пс. Рассчитанный максимум для «обрезающего» напряженного состояния W мишени был значительно больше величины связи атомов в решетке и модулей упругости. Полученные протяженные дефекты могут служить основой для создания бугорков, наблюдаемых на поверхности при облучении высоко заряженными и высоко энергетическими ионами. Так, при расчете модификации поверхности Nb, наблюдалось два типа поверхностных образований с разными размерами: первый был узким и высоким холмом диаметром несколько нм, второй – невысоким и широким, с площадью несколько нм^2 . Такую модификацию поверхности при облучении высоко заряженными и высоко энергетическими ионами необходимо учитывать в ряде приложений.

2. Взаимодействие фуллеренов с полимерами: от фундаментальных проблем к анализу поверхности*²

По классическому МД методу моделировалось взаимодействие 5 кэВ-ного фуллерена с аморфным икозаном ($\text{C}_{20}\text{H}_{42}$) и полиэтиленовым олигомером (до $\text{C}_{1000}\text{H}_{2002}$) [3]. Была использована крупнозернистая модель, где определенные атомы (CH_2 , CH_3) были сгруппированы так, чтобы сформировались ансамбли атомов или частиц. Этот подход необходим для обработки ансамблей из большого количества атомов и описания взаимодействия кэВ-ного фуллерена с

^{*1} Z.Insepov, Argonne, USA

^{*2} A.Delcorte, Louvain-la-Neuve, Belgium

полимером в пределах разумного компьютерного времени.

Показано, что взаимодействие фуллеренов с аморфным икозаном и полиэтиленовым олигомером вызывает многочисленные реакции фрагментации, формирование кратера и эмиссию в газовую фазу намного большего количества атомов, молекулярных фрагментов и/или объединенных молекул, по сравнению со случаем атомной бомбардировки. Для обоих образцов, в пределах первых 200 фс после проникновения фуллера на поверхность, высокая плотность энергии в объеме взаимодействия приводит к коллективному движению частиц наружу, качественно подобному тому, что происходит при бомбардировке ионами C_{60} серебра и кристалла бензина. Процесс эмиссии начинается между 500 фс и 1 пс с возникновения относительно быстрых атомов и фрагментов из возбужденного объема. Впоследствии, этот нано-объем расширяется и распространяется в вакуум, создавая выброс движущихся из него фрагментов, неповрежденных молекул и больших молекулярных кластеров. Характерной особенностью взаимодействия кэВ-ного кластера с поверхностью является формирование на поверхности кратера глубиной в несколько миллимикрон, из которого материал частично распыляется, а частично оседает на окружающую поверхность. Для кратера в 5-6 нм глубиной, образующегося при 5 кэВ-ой бомбардировке икозана, фрагменты и неповрежденные молекулы распыляются, главным образом, из поверхностного слоя 3-4 нм толщиной. Показано, что фрагменты, такие как CH_2 , формируются в основном в верхней части сферической области размером 3 нм, в то время как неповрежденные молекулы десорбируются из остальной

половины полусферического объема кратера. Это различие непосредственно отражает хронологию механизма передачи энергии, сначала – через разрыв связей и создание атома отдачи в вышеупомянутой сферической области (десятки эВ на атом) и позже – через совместное движение в формирующемся кратере (эВ на атом).

3. Энергетические и размерные эффекты в распылении поверхности нанокластеров металлов при бомбардировке медленными ионами^{*3}

В работе [4] молекулярно-динамическим методом изучались распределения энергии рассеянных и распыленных частиц, которые использовались для объяснения механизма рассеяния иона и для характеристики случайных столкновений в кластерах. Анализ был выполнен для кластеров, состоящих из 13, 27, 39, 75 и 195 атомов меди, на грани (0 0 0 1) графита, состоящей из двух слоев, которые включали 1584, 1920, 2288, 3000 и 5880 атомов С, соответственно. Бомбардировка проводилась ионами Ar и Xe с энергиями воздействия 100, 200 и 400 eV.

Вначале рассмотрим результаты для обратно рассеянных ионов Ar. Расчеты энергетических зависимостей рассеянных ионов Ar, как функции угла рассеяния для простого парного столкновения с атомом меди показали, что при энергии 100 эВ для рассеяния на углы, большие, чем 150° , процесс рассеяния определяется парными столкновениями ионов Ar с атомами меди на поверхности кластера независимо от размера кластера. При энергии в 400 эВ обратно-рассеянные ионы Ar для углов рассея-

^{*3} G.Kornich, G.Betz: Zaporozhye, Ukraine; Wien, Austria

ния больших, чем 130 градусов, обладают намного более низкой средней энергией, чем можно было бы ожидать при простом парном процессе рассеивания (22.0 - 35.0 эВ) с поверхности кластеров. Это указывает на то, что ионы с энергией 400 эВ, в основном, проникают глубоко в кластер перед тем, как стать обратно рассеянными, и, таким образом, теряют намного больше энергии, передаваемой бомбардирующим ионом. Анализ данных показывает, что для больших углов рассеяния, средняя энергия, так же как и вероятность рассеяния, не зависят от размеров кластера, как для бомбардировки ионами Ar так и Xe. Для малых углов рассеяния в области максимальной вероятности рассеяния наблюдается увеличение, и вероятности рассеяния, и средней энергии рассеянных ионов. Это указывает на то, что для больших кластеров многократные процессы рассеяния являются более заметными.

Коэффициент распыления для ионов Xe немного больше, чем для ионов Ar при всех энергиях. Показано, что зависимость коэффициента распыления от размеров кластера одинакова для случаев бомбардировки ионами Ar и Xe. Минимум распыления для кластеров из 39 атомов Cu и сильное увеличение коэффициента распыления для кластера из 75 атомов Cu наблюдается для всех энергий облучения и для обоих типов ионов. Объясняется это тем, что из-за возможности распыления с боковых сторон кластера не требуется полный разворот импульса иона в мишени, чтобы вызвать выход атомов. Действительно, если проанализировать, в каком направлении распыляется большинство атомов меди из кластера, то максимум интенсивности распыления будет в направлении параллельном

поверхности мишени для всех энергий и размеров кластеров. Этот эффект уменьшается с увеличением размера кластера, однако геометрическая форма кластера также играет при этом важную роль, в результате, эти два фактора накладываются друг на друга. Общее уменьшение коэффициента распыления с увеличением размера кластера наблюдается при энергии бомбардировки в 100 эВ, как для ионов Ar, так и для Xe. Наконец, различие между значениями коэффициентов распыления для кластеров и для плоской поверхности (для нормального падения ионов) минимально при энергии падения 100 эВ и растет с увеличением энергии падения ионов Ar и Xe. Геометрия мишени отвечает также за минимум, который наблюдается для кластеров из 39 атомов для всех значений энергий.

Заключение

Процессы, возникающие при ионном облучении твердого тела, интенсивно изучаются в настоящее время, особенно, в связи с рядом важных прикладных задач в микроэлектронике, управляемом термоядерном синтезе, космической технике, горно-добывающей промышленности. В настоящем обзоре приводятся и обсуждаются новые данные по исследованию методом МД моделирования ряда процессов важных, как для понимания физики взаимодействия атомных частиц с поверхностью, так и для развития прогрессивных методов анализа состава твердых тел при ионной бомбардировке. Сюда относятся моделирование процессов при облучении мишеней тяжелыми частицами, например, фуллеренами C₆₀, исследование механизмов распыления наночастиц, численный расчет рассеяния ионов.

Благодарим РФФИ (гранты 05-02-17227 и 05-02-17870) и INTAS (03-53-5607) за поддержку настоящей работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Harrison D.E., Jr.* // CRC Crit. Rev. Solid State Sci. 1988 V.14. P.1.
2. *Insepov Z.* Surface erosion and modification by energetic ions. // Труды 18-й Межд. конф. Взаимодействие ионов с поверхностью, ВИП-2007, Звенигород. Т. 1. С. 55.
3. *Delcorte A., Garrison B. J.* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2007. V. 255.P. 223.
4. *Kornich G.V., Betz G.* Energy and size effects in sputtering of surface metal nanoclusters under low energy ion bombardment". Труды 18-й Межд. Конф. Взаимодействие ионов с поверхностью, Звенигород. 2007. Т.1. С. 38. **ИИЭ**

Коротко об авторах

Толпин К.А., Толпина М.Ю. – Московский государственный горный университет, Moscow state mining university, Russia, ktolpin@mail.ru
Юрасова В.Е. – физический факультет МГУ, dean@phys.msu.ru



РУКОПИСИ,

ДЕПониРОВАННЫЕ В ИЗДАТЕЛЬСТВЕ МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ГОРНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Гриб Н.Н. Применение геофизических методов для изучения углепородного массива в южно-якутском каменноугольном бассейне (712/09-09 от 22.06.09) 16 с.

На примере угольных месторождений Южно-Якутского бассейна рассматриваются технологии изучения углепородного массива с помощью геофизических методов. Рассматриваемые технологии позволяют изучать в естественном залегании: зольности угольных пластов, показатели качества углей, литологический состав углевмещающих пород, физико-механические свойства массива горных пород и по полученным данным прогнозировать устойчивости боковых пород в горных выработках.

Prof. Grib N.N. The usage of geophysical methods for studying the coal rock massif in South Yakutian coalfield.

Review of research technologies of coal rock massif with the help of geophysical methods, by the example of South Yakutian coalfields. Technologies being considered permit to research in natural bedding: bed's ash content, index of coal quality, lithological content of coal beds, physical-mechanical properties of rock massif and, according to the received data, forecast stability of wall rock in mine workings.