УДК 53.072.001.57, 539.12

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БОМБАРДИРОВКИ КЛАСТЕРОВ МЕТАЛЛОВ ОДНОИМЁННЫМИ ИОНАМИ С ЭНЕРГИЕЙ 10—1000 ЭВ

Н.А. Панькин, Н.А. Смоланов (ГОУ ВПО «МГУ им. Н.П. Огарева», Саранск, Россия)

Моделировалось разрушение кластеров пылевых частиц металлов в плазме при их облучении одноимёнными ионами. В качестве модели были взяты кластеры Ti_{13} , а энергия бомбардирующих ионов Ti^+ изменялась в интервале от 10 до 1000 эВ. Моделирование выполнено методом молекулярной динамики с многочастичным межатомным взаимодействием (tight-binding-потенциал). Рассматривалось взаимодействие иона и кластера при центральном столкновении. Получены функции распределения ионов по энергиям и направлению вылета. Результаты работы представляют интерес и для других случаев пылевой и кластерной плазмы.

Ключевые слова: кластер, ион, функция распределения по углам, энергетический спектр, метод молекулярной динамики, многочастичный потенциал.

MOLECULAR-DYNAMIC SIMULATION OF METAL CLUSTERS BOMBARDMENT BY IONS OF THE SAME METALS WITH ENERGY OF 10—1000 EV. N.A. PAN'KIN, N.A. SMOLANOV. Destruction of clusters of metal dust particles in plasma under their irradiation by the same ions was simulated. Ti_{13} clusters were used as model. The energy of the bombarding Ti^+ ions varied from 10 to 1000 eV. The method of molecular dynamics with multiparticle interatomic interaction (with tight-binding potential) was applied. The ion-cluster interaction was considered for central collision. The ion energy distribution and ion escape direction functions have been established. The results of the study can be of interest also at consideration of other events connected with dusty and cluster plasma.

Key words: cluster, ion, distribution function on angles, energy distribution, method of the molecular dynamics, N-body potential.

ВВЕДЕНИЕ

Кластеры являются наноструктурированными объектами и представляют собой объединение различных частиц (атомов, молекул или ионов), которое обладает свойствами, отличными от аналогичных свойств составляющих их элементов [1, 2]. Для них характерно резкое изменение физических и химических свойств при изменении размера (размерный эффект). Они обладают более низкими значениями температуры и теплоты плавления, теплоёмкости и т.д. по сравнению с массивными твёрдыми телами. В ряде случаев кластеры металлов могут подменять собой другие химические элементы [3]. Все перечисленные особенности кластеров обусловлены прежде всего дискретностью энергетических уровней [1].

Для инженерных проблем реактора токамака проблема пыли является одной из наиболее острых [4] и среди вопросов, требующих разрешения, важной является проблема разрушения пылевых частиц и кластеров в плазме. Среди механизмов, вызывающих разрушение, наряду с испарением необходимо учитывать и разрушение ионной бомбардировкой и, в первую очередь, тяжёлыми ионами примесей.

Известны физико-химические методы получения кластеров, основанные на испарении твёрдых тел с последующей конденсацией [2, 4]. Содержание в потоке частиц, а также размеры, структура и скорость кластеров определяются параметрами получения. В ряде методов кластеры являются «побочным» продуктом. Это прежде всего касается ионно-плазменной модификации твёрдых тел, где основными рабочими объектами являются эмитируемые с поверхности катода ионы и атомы. При движении кластеры испытывают упругие и неупругие столкновения с другими частицами, а также с поверхностью твёрдого тела [5, 6]. В результате этого изменяются размер, структура нанокластеров, а также пространственно-временные характеристики потока частиц, что, в конечном счёте, определяет характер процессов конденсации потока на модифицируемой поверхности твёрдого тела. Время указанных взаимодействий составляет величину порядка 10^{-13} — 10^{-15} с [7], и существующие экспериментальные методы исследования не позволяют их изучать. Фиксируется конечный результат — плёнка, кластер, капли на поверхности и т.д. Поэтому описываемые процессы рассматриваются преимущественно с использованием теоретических методов.

Целью настоящей работы является исследование бомбардировки кластера Ti_{13} ионами титана с энергией от 10 до 1000 эВ (случай центрального ион-кластерного столкновения). Методом молекулярной динамики определено распределение ионов и атомов кластера по углам вылета (Θ) и энергии (E) после ион-кластерного взаимодействия. Кластеры Ti_{13} относятся к «магическим» [1]. Выбор титана связан с его широким применением в различных методах модификации поверхности [8].

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Взаимодействие между атомами кластера, а также иона с атомами кластера описывалось много-частичным потенциалом в приближении второго момента модели сильной связи (tight-binding-потенциал) [9]. В этом случае энергию взаимодействия V для i -го атома можно представить следующим образом:

$$V = \sum_{j \neq i} A \exp \left[-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right] - \left\{ \sum_{j \neq i} \xi^2 \exp \left[-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right] \right\}^{1/2},$$

где ξ — эффективный интеграл перекрытия электронных оболочек, r_{ij} — расстояние между атомами i и j ; r_0 — радиус первой координационной сферы; параметр q — зависимость интеграла перекрытия от расстояния. Значения параметров A , p , q и ξ вычислены [9] из экспериментальных данных для энергии когезии, параметров кристаллической решетки, упругих постоянных и модуля всестороннего сжатия. При малых расстояниях сближения частиц (менее 0,5 Å) применяли потенциал Циглера—Бирзака—Литтмарка [10]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi \left(\frac{r}{a} \right); \quad \Phi \left(\frac{r}{a} \right) = \sum_{i=1}^4 c_i \exp \left(-d_i \frac{r}{a} \right),$$

где Φ — функция экранирования; a — длина экранирования; Z_1 , Z_2 — зарядовое число для иона и атома подложки; e — заряд электрона; r — расстояние между центрами взаимодействующих частиц; c_i , d_i — параметры потенциала взаимодействия. При значениях межатомных расстояний от 0,5 до 1,0 Å указанные потенциалы сшивали друг с другом полиномом 5-й степени. Обрезание области действия потенциалов не проводилось.

Для поиска решения уравнений движения частиц системы ион—кластер использовали схему Верлета в «скоростной форме» [11] с переменным шагом по времени. Термостатирование моделируемой системы не проводилось. Неупругие потери при ион-атомных и атом-атомных столкновениях, а также тепловое движение атомов кластера не учитывали. Угол Θ отсчитывался от положительного направления оси, совпадающей с первоначальным направлением движения иона до его взаимодействия с кластером.

Статистический материал набирался по 10 000 различных положений атомов кластера относительно бомбардирующего их иона. Это достигалось следующим образом: исходный кластер в начале каждого акта взаимодействия с ионом поворачивался вокруг осей декартовой системы координат на углы, выбранные случайным образом. Рассматриваемое время моделирования составляло 10 000 молекулярно-динамических шагов для различных первоначальных энергий ионов. За это время перемещение самых быстрых частиц не превосходило 250 Å.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Рис. 1. Конфигурация атомов кластера до взаимодействия с ионом

Структурная релаксация, проводимая в рамках алгоритма Метрополиса метода Монте-Карло [11], для различных исходных положений атомов формировала икосаэдрическую структуру. Для неё характерно наличие осей симметрии пятого порядка, не наблюдаемых у макроскопических тел.

Исходная конфигурация атомов кластера представлена на рис. 1. На рис. 2. показаны зависимости

энергий системы ион—кластер от времени взаимодействия (энергии бомбардирующих частиц $E_0 = 100$ эВ). В начальный момент времени ион передаёт свою энергию атомам кластера, где в последующем развивается «каскад» многочастичных атомных столкновений. В результате происходит разрушение первичной структуры кластера с распадом на более мелкие частицы (в дальнейшем — агломераты). Основу потока частиц при этом составляют одиночные атомы (от 54 до 73% от общего количества), димеры (от 3 до 6%), и агломераты, состоящие из 3—12 атомов (от 17 до 38%) (рис. 3). При уменьшении энергии падающего иона до 10 эВ отмечается сохранение исходного числа атомов в кластере (0,8%), а также рост наноструктуры до Ti_{14} (менее 0,1%).

Рис. 2. Зависимости кинетической энергии иона (1) и атомов кластера (3), потенциальной энергии иона (2) и атомов кластера (4) от времени взаимодействия

Рис. 3. Доля выхода агломератов с различным числом атомов: ■ — 1000 эВ; □ — 100 эВ; ■ — 10 эВ

При взаимодействии ионов, имеющих начальную энергию E_0 в интервале от 50 до 1000 эВ, максимальная энергия сообщается одиночным атомам, которым передается от 5 до 25% исходной кинетической энергии ионов (рис. 4). Атомы, входящие в крупные объединения, имеют среднюю энергию менее 1 эВ. В случае бомбардировки кластера ионами с $E_0 = 10$ эВ распределение средней энергии агломератов равномерное: одиночные атомы обладают энергией 0,5 эВ (5% E_0), для агломератов с другим числом атомов — от 0,2 до 0,3 эВ.

Распределение $F(\Theta)$ ионов и атомов кластера по углам вылета (угол сбора 5°) после ионной бомбардировки кластера представлено на рис. 5. Интегральное угловое распределение (по всем атомам и ионам) незначительно отличается от распределения атомов кластера, что обусловлено небольшим числом ионов в общем потоке частиц. К примеру, для

Рис. 4. Распределение средней кинетической энергии атомов агломератов: ■ — 1000 эВ; □ — 100 эВ; ■ — 10 эВ

Рис. 5. Угловое распределение атомов кластера (а) и ионов (б) после ион-кластерного взаимодействия: $E_0 = 10$ (1); 100 (2); 1000 эВ (3)

распределения $F(\Theta)$ при начальной энергии иона $E_0 = 100$ эВ число атомов кластера, рассеянных в некоторый интервал углов, больше числа ионов из этого же углового интервала в 14 раз. Особо отметим, что вид $F(\Theta)$ для атомов кластера незначительно изменяется при увеличении энергии бомбардирующих частиц. При больших энергиях (более 500 эВ) наблюдается рост доли атомов кластера с направлением вектора скорости, составляющего небольшой угол ($\Theta < 10^\circ$) с первоначальным направлением движения ионов. При этом распределение по углам вылета для ионов сильно видоизменяется. По мере увеличения начальной энергии растёт доля ионов, испытавших обратное рассеяние.

На рис. 6 показано распределение бомбардирующих ионов и атомов кластера по энергиям $F(E)$ после ион-кластерного взаимодействия для различных начальных скоростей, соответствующих 10, 100 и 1000 эВ. Для E_0 более 500 эВ в энергетическом спектре можно выделить три зоны: I. — от 0 — до 0,1 E/E_0 ; II — от 0,1 до 0,9 E/E_0 ; III — от 0,9 до 1,0 E/E_0 (E — конечная энергия ионов).

Рис. 6. Участок распределения по энергиям атомов кластера (а) и ионов (б) после ион-кластерного взаимодействия: $E_0 = 10$ (1); 100 (2); 1000 эВ (3)

Рис. 7. Распределение ионов по углам вылета, соответствующее различным энергетическим зонам. Начальная энергия ионов 1000 эВ: 1 — результирующее распределение; 2 — зона I; 3 — зона II; 4 — зона III

Этим областям соответствуют различные угловые распределения бомбардирующих частиц после их взаимодействия с исходным кластером (рис. 7). Зависимость $F(\Theta)$ для атомов кластера имеет примерно одинаковый вид для всех рассматриваемых областей. Вторая и третья зоны соответствуют вкладу ионов, отраженных или прошедших сквозь кластер. Для первой области характерно наличие ионов, присоединённых к кластеру, т.е. они участвуют в образовании некоторых агломератов. Для энергий бомбардирующих частиц меньше 500 эВ подобного разделения энергетического спектра на области провести не удалось.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При ионной бомбардировке кластеров титана происходит разрушение исходной структуры кластера с образованием более мелких частиц (агломератов). Их основу (от 61 до 82%) составляют одиночные атомы и димеры. Доля агломератов, имеющих от 3 до 12 атомов, составляет от 17 до 38%. При энергии бомбардирующих частиц менее 50 эВ только в 80 случаях из 10 000 взаимодействий отмечается сохранение исходного числа атомов в кластере (0,8%) и в 10 случаях — рост размера наноструктуры (0,1%). Максимальной энергией обладают одиночные атомы, которым передаётся от 5 до 25% исходной кинетической энергии ионов.

Основной вклад в угловое распределение взаимодействующих частиц вносят атомы кластера. При возрастании энергии бомбардирующих частиц вид распределения по углам меняется незначительно для атомов кластера и сильно изменяется для ионов. Увеличение начальной энергии приводит к увеличению доли ионов, испытавших обратное рассеяние.

Для энергий бомбардирующих ионов свыше 500 эВ в энергетическом спектре условно выделяются три зоны: I — от 0 до 0,1 E/E_0 ; II — от 0,1 до 0,9 E/E_0 ; III — от 0,9 до 1,0 E/E_0 (E_0 , E — начальная и конечная энергия ионов соответственно). Этим областям соответствуют различные угловые распределения бомбардирующих частиц после их взаимодействия с исходным кластером. Для энергий бомбардирующих частиц меньше 500 эВ подобного разделения провести не удалось.

Выражаем благодарность Юрию Владимировичу Мартыненко за ценные замечания и рекомендации при подготовке статьи.

REFERENCES

1. **Smirnov B.M.** — UFN (APhS), 1993, vol. 163, № 10, pp. 29—56 (in Russian).
2. **Gusev A.I.** Nanomaterials, nanostructures, nanotechnologies. — M.: Nauka (Science)—Fizmatlit (PhysMathLit), 2007. 416 p. (in Russian).
3. **Reveles J.U., Khanna S.N., Roach P.J., Castleman A.W.** — PNAS, 2006, vol. 103, № 49, pp. 18405—18410.
4. **Jensen P.** — Rev. Mod. Phys., 1999, vol. 71, № 5, pp. 1695—1735.
5. **Kalweit M., Drikakis D.** — Phys. Rev. B, 2006, vol. 74, p. 235415.
6. **Makarov G.N.** — UFN (APhS), 2006, vol. 176, № 2, pp. 121—174 (in Russian).
7. **Sputtering** under the influence of particles bombardment. Issue III. Characteristics of sputtered particles, application in technique. Edited by R. Berish, K. Vitmak. — M.: Mir (World), 1998. 551 p. (in Russian).
8. **Pan'kin N.A., Smolanov N.A.** — Poverkhnost' (Surface), 2009, № 6, pp. 102—105 (in Russian).
9. **Cleri F., Rosato V.** — Phys. Rev. B., 1993, vol. 48, № 1, pp. 22—33.
10. **O'Connor D.J., Biersack J.P.** — Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., 1986, vol. B15, № 1—4, pp. 14—19.
11. **Kheerman D.V.** Methods of computer experiment in theoretical physics. — M.: Nauka (Science), 1990. 176 p. (in Russian).

AUTHORS

Pan'kin N.A. N.P. Ogarev Mordovia State University, Bol'shevistskaya ul. 68 (8342), 430005 Republic of Mordovia, Saransk, 290597, Russia; panjkinna@yandex.ru.

Smolanov N.A. N.P. Ogarev Mordovia State University, Bol'shevistskaya ul. 68 (8342), 430005 Republic of Mordovia, Saransk, 290597, Russia; smolanovna@yandex.ru.

Received 21 March 2011
Problems of Atomic Science and Technology
Ser. Thermonuclear Fusion, 2011, issue 3, pp. 97—101