

УДК 519.85

Д.А.Терентьев (асп., каф. ЭЯФ), Е.Е.Журкин, к.ф.-м.н., доц.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ РАСПЫЛЕНИИ ЗОЛОТА ПУЧКОМ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ И КЛАСТЕРОВ С ЭНЕРГИЕЙ 500 КЭВ/АТОМ

В настоящее время, методы машинного моделирования активно используются для более детального изучения свойств кристаллической решетки металлов и сплавов а так же их поведения под воздействием ионизирующих излучений. При рассмотрении тяжелых бомбардирующих частиц (в частности, молекул или кластеров), возникают такие ситуации, где существенно проявляются нелинейные эффекты (так называемые тепловые и столкновительные пики) и, следовательно, использовать стандартные приемы линейной теории распыления в этом случае не имеет смысла, поскольку все они основаны на модели линейных каскадов соударений. Метод МД, который не использует приближения бинарных соударений (характерные для методов Монте-Карло), является более адекватным для моделирования распыления при нелинейных режимах. Цель работы, заключается в рассмотрении процессов неаддитивного распыления, возникающего при бомбардировке золотой мишени кластерами, состоящими из 1, 2, 4, 6 и 13 атомов золота. Под неаддитивным распылением понимаем процесс, при котором количество распыленных частиц, приходящееся на один атом снаряда (кластера), превышает число частиц, распыленных при бомбардировке атомарными ионами, при одинаковых условиях облучения. При этом энергия в кластере, приходящаяся на один атом, будет постоянна и равна 500 эВ/атом. В качестве мишени выбран золотой кристалл с ориентацией поверхности (111), рассматриваемый при температуре 0 и 300 градусов Кельвина.

Для моделирования плотных каскадов и сопутствующих процессов распыления использовалась компьютерная программа, базирующаяся на методе классической молекулярной динамики, в рамках которого были использованы периодические граничные условия в двух поперечных направлениях (относительно нормали к свободной поверхности), переменный временной шаг и дампинг на границах бокса. Моделирование производилось в рамках микроканонического (NVE) – ансамбля при $T=0K$ и в рамках канонического ансамбля (NVT) при $T=300K$ [2]. Взаимодействие атомов описывалось с помощью многочастичного потенциала, полученного в работе [3] в рамках параметризации квантово-механической модели сильной связи.

С целью решения поставленной задачи, было произведено сравнение характеристик вторичной эмиссии при бомбардировке кластерами Au_N ($N>1$) с такими же характеристиками, связанными с ионной бомбардировкой атомами Au_1 , при одной и той же энергии на атом ($E/N = 500$ эВ/ат). При этом рассматривались как характеристики распыления (значения коэффициентов распыления, энергетические спектры, спектр времени эмиссии и угловой спектр распыленных атомов), так и характеристики эволюции каскадов соударений в мишени (пробеги первичных ионов, эволюция кинетической энергии, среднее число движущихся атомов мишени, средняя кинетическая энергия приходящаяся на атом в каскаде). Для рассмотрения эволюции микроструктуры поверхности визуализированы финальные конфигурации модельных боксов и оценены размеры кратеров, возникших под действием бомбардировки кластерами.

Изученные особенности распыления при кластерной бомбардировке позволяют сформулировать некоторые общие критерии (признаки) распыления в режиме плотных каскадов: неаддитивное (с ростом числа атомов в бомбардирующем кластере) возрастание коэффициента распыления (изображено на рис. 1), уменьшение средней энергии распыленных атомов (ниже 10 эВ), «поздняя эмиссия» (при временах более 1000 фс) и

отсутствие преимущественных направлений распыления. Необходимо добавить, что большинство из отмеченных эффектов наблюдалось в экспериментах.

Выводы: использованная компьютерная методика позволяет корректно моделировать процессы каскадных соударений атомов в кристаллических мишенях под действием ионной или кластерной бомбардировки, в том числе и в случае возникновения эффектов тепловых и столкновительных пиков.

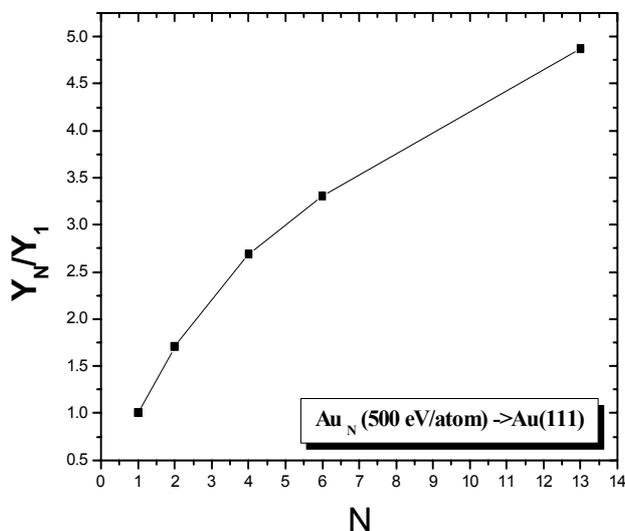


Рис. 1. Отношение значений коэффициентов распыления на один упавший атом при бомбардировке мишени Au(111) кластерами Au_N и ионами Au_1

ЛИТЕРАТУРА:

1. В.Экштайн «Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела». Москва: – Мир, 1995.
2. М.Р.Аллен, Д.Д.Тилдесли «Computer simulation of Liquids» Clarendon press: Oxford, 1987.
3. М.Ню, З-У.Пан. Cascade statistic in binary collisions approximation and in full molecular dynamics // Nucl. Inst. and Meth. In Phys. Res. B 102, (1995). P. 93-102.