

На правах рукописи



ЖУРКИН Евгений Евгеньевич

**Первичные структурные нарушения, распыление и десорбция при
облучении поверхности монокристаллов и нанокластеров
низкоэнергетическими атомарными частицами
и многоатомными кластерами**

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2012

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» (ФГБОУ ВПО «СПбГПУ») на кафедре “Экспериментальная ядерная физика”

Официальные оппоненты:

Титов Андрей Иванович

доктор физико-математических наук,
профессор, ФГБОУ ВПО «СПбГПУ»,
профессор кафедры “Физическая электроника”

Зиновьев Александр Николаевич

доктор физико-математических наук, с.н.с.,
ФГБУ науки “Физико-технический институт
им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук”
(ФТИ им. А.Ф. Иоффе), и.о. заведующего
лабораторией атомных столкновений в твёрдых
телах

Черныш Владимир Савельевич

доктор физико-математических наук,
профессор, ФГБОУ ВПО “Московский
государственный университет имени
М.В.Ломоносова”, в.н.с. физического
факультета МГУ им. М.В.Ломоносова

Ведущая организация:

ФГБУ “Петербургский институт ядерной
физики им. Б.П. Константинова”, НИЦ
“Курчатовский институт”

Защита состоится «17» апреля 2013 года в 16 часов 00 мин. на заседании диссертационного совета Д212.229.29 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул. 29, главный учебный корпус, ауд. 118.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан « » _____ 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.229.29
кандидат физико-математических наук
доцент



Ермакова Наталья Юрьевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертационная работа посвящена исследованию физических процессов, обуславливающих эрозию (распыление) поверхности металлов и полупроводников и первичные структурные нарушения при бомбардировке одноатомными ионами и многоатомными кластерами, содержащими от 1 до 60 атомов, с начальной энергией в диапазоне $\sim(0.1-1)$ кэВ/атом (что соответствует режиму имплантации-распыления с преобладанием ядерных потерь энергии за счет упругих атом-атомных соударений), а также процессы распыления и десорбции металлических нанокластеров при аналогичных режимах облучения одно- и многоатомными частицами. Для изучения данных процессов был применен метод классической молекулярной динамики с использованием современных многочастичных моделей межатомного взаимодействия. Исследованы характерные особенности и закономерности процессов развития каскада атомных соударений, распыления поверхности, образования первичных дефектов и формирования микроструктуры приповерхностной области (в частности, образование микрократера), а также выявлены особенности процессов распыления и механизмы десорбции металлических нанокластеров (изолированных либо предварительно осаждённых на подложку) зависимости от типа подложки и условий облучения. При этом особое внимание уделено выявлению физических механизмов, обуславливающих существенные различия характера вышеперечисленных процессов, вызванных внедрением одноатомного иона и многоатомного кластера.

Актуальность темы диссертации.

В настоящее время использование пучков ускоренных многоатомных кластеров для анализа и модификации поверхности рассматривается как новый и многообещающий подход, существенно превосходящий по своим технологическим возможностям традиционные методы, основанные на использовании пучков одноатомных ионов [1-2]. Одной из главных причин, ограничиваю-

щей использование для этих целей пучков сфокусированных ионов с достаточно большой энергией, является радиационное повреждение облучаемых материалов. Наиболее очевидный путь уменьшения поверхностных повреждений – это использование ионов низких энергий (менее 1 кэВ), однако при этом существенно ухудшаются модифицирующие свойства пучка и, кроме того, резко падает качество его фокусировки. Использование кластерных пучков имеет ряд очевидных преимуществ. С одной стороны, энергия кластера возрастает кратно числу атомов в нем при той же скорости, что позволяет избежать больших оптических aberrаций в фокусирующих системах. С другой стороны, коэффициент распыления в пересчете на один налетающий атом также будет возрастать при той же скорости частиц, что позволит повысить эффективность травления [2]. Однако при этом будет так же расти и эффективность вносимых пучком радиационных повреждений [3]. Физическая модель эрозии поверхности под воздействием кластерной бомбардировки пока не разработана до уровня, позволяющего делать надежные количественные оценки подобных эффектов, что отчасти сдерживает практическое использование кластерных пучков и, с другой стороны, стимулирует фундаментальные исследования в данной области. Проводимые экспериментальные исследования охватывают лишь отдельные явления и не носят систематического характера. Так, в ряде экспериментов выявлены эффекты неаддитивного (нелинейного) возрастания коэффициента распыления при кластерной бомбардировке (в пересчете на один налетающий атом) [4]. Бомбардировка тяжелыми ионами и кластерами может также способствовать формированию специфической топографии поверхности. В случае линейного режима распыления (характерного для ионной бомбардировки) основная топографическая особенность приповерхностной области мишени - это образование ад-атомов (атомов на поверхностном слое мишени), тогда как нелинейный режим обычно сопровождается формированием кратера в приповерхностной области мишени, что было установлено экспериментально [5-6]. Подобные эффекты, проявляющиеся при внедрении нанокластера, обусловлены

аномально высокой локальной плотностью поглощенной в мишени энергии, что приводит к возникновению каскада атомных соударений с высокой плотностью энергии (так называемого “столкновительного пика”), который постепенно трансформируется в “тепловой пик”, представляющий собой долгоживущую (вплоть до нескольких десятков пикосекунд) локально расплавленную область вещества. Подобные величины локально поглощенной объемной плотности энергии практически недостижимы при внедрении в вещество одноатомных ионов, за исключением ряда случаев торможения сверхтяжелых ядер и осколков деления при энергии, соответствующей максимуму их ядерной тормозной способности. Теория, позволяющая адекватно описывать подобные явления, в настоящее время отсутствует. Эффекты “пиков” не могут быть также описаны и в рамках приближения парных соударений, широко используемого для моделирования распыления и дефектообразования при ионной бомбардировке, поэтому наиболее адекватным подходом к их моделированию является метод классической молекулярной динамики (МД). Данный метод был использован в ряде работ для исследования распыления и модификации структуры поверхности в нелинейном режиме при кластерной бомбардировке [7]. Однако систематические исследования данных явлений не проводились. Следует особо отметить, что на сегодняшний день крайне ограничены данные о характере структурных нарушений под воздействием кластерной бомбардировки. Хотя процесс радиационного повреждения при ионной бомбардировке различных материалов (в линейном режиме) хорошо изучен как в теории, так и с помощью компьютерного моделирования [8-9], процессы дефектообразования в режиме каскадов высокой плотности энергии практически не изучались.

В настоящее время в связи с развитием технологий получения наноматериалов, возрос интерес к изучению процессов распыления и десорбции при облучении наноструктурных материалов, что фактически привело к появлению нового направления в теории распыления, связанного с исследованиями вторичной эмиссии при облучении нанокластеров и наноструктур пучками

одноатомных и многоатомных ионов [10]. Исследования процессов десорбции нанокластеров при облучении наноструктурных материалов пучками ионов и многоатомных кластеров представляют как фундаментальный, так и прикладной интерес, обусловленный развитием методов вторично-ионной масс-спектрометрии для изучения нанодисперсных и биологических материалов, а также перспективами использования пучков кластерных ионов для повышения эффективности распыления и десорбции [11–15].

В настоящее время явления распыления и десорбции наноструктурных материалов остаются малоизученными. Впервые распыление непрерывной нанокластерной плёнки исследовалось в работе [16], где было установлено существенное увеличение скорости распыления по сравнению с поликристаллическим материалом. Десорбция “целых” нанокластеров впервые была обнаружена экспериментально при облучении нанодисперсных мишеней осколками деления тяжелых ядер [17], когда энергия частиц составляла величину свыше 10 МэВ, т.е. неупругие процессы торможения играли доминирующую роль, при этом выход десорбированных нанокластеров (в пересчете на один налетающий ион) достигал величин $\sim(10\div 500)\%$. Вторичная эмиссия нанокластеров была обнаружена и при более низких энергиях налетающих ионов, когда преобладают процессы упругого торможения, однако при этом выходы эмиссии оказывались существенно ниже [18-19]. В литературе обсуждается целый ряд возможных физических механизмов, приводящих к десорбции нанокластеров как за счёт прямого, так и непрямого удара налетающей частицы-снаряда, однако действительный механизм, проявляющийся в том или ином эксперименте, сильно зависит от конкретных условий облучения, структуры и размеров нанокластеров и других факторов. В настоящее время невозможно сформулировать универсальные закономерности явлений радиационно-стимулированной десорбции, и поэтому для интерпретации каждого эксперимента фактически необходимо проведение индивидуального исследования.

Таким образом, исходя из анализа опубликованных работ, можно сделать

вывод о необходимости дальнейших исследований для лучшего понимания физики процессов взаимодействия атомарного нанокластера с поверхностью кристаллов и наноструктурами, а также для количественного описания наблюдаемых при этом физических явлений (в частности, таких как распыление, изменение микроструктуры поверхности, радиационные повреждения, десорбция наночастиц и др.).

Цели и задачи диссертационной работы

Целью данной диссертационной работы является исследование методом компьютерного моделирования характерных особенностей процессов распыления, первичного дефектообразования и микроструктуры приповерхностной области металлов (Al, Cu, Ni) и полупроводников (c-SiC, Si), подвергаемых облучению многоатомными кластерами и одноатомными ионами, содержащими от 1 до 60 атомов, с начальной энергией в диапазоне $\sim 0.1\text{--}10$ кэВ на один налетающий атом. При этом особо акцентировалась задача анализа нелинейных эффектов, или эффектов синергизма (т.е. качественных и количественных различий характера процессов, вызванных внедрением кластера и одноатомного иона при идентичных начальных условиях в пересчете на один налетающий атом), а также выявление физических механизмов, лежащих в основе данных эффектов. Так же одной из задач является исследование особенностей распыления и механизмов десорбции нанокластеров золота при ионной и кластерной бомбардировке в режиме доминирования упругих потерь энергии (при начальных энергиях $\sim 0.1\text{--}40$ кэВ/атом) как за счёт прямого, так и непрямого удара налетающей частицы-снаряда.

Для достижения основных целей диссертационной работы необходимо также решить ряд сопутствующих задач:

- выбрать адекватные модели элементарных процессов, определяющих взаимодействие ускоренных частиц с веществом и эффекты связи в веществе, а именно (в контексте используемого метода) выбрать потенциалы межатомного взаимодействия для всех рассматриваемых систем, с учетом реалистич-

ности как короткодействующей, так и далекодействующей составляющей такого потенциала;

- оптимизировать математическую модель и компьютерную программу, реализующую метод классической молекулярной динамики применительно к задачам внедрения кластеров в монокристалл и нанокластер;
- разработать и оптимизировать методику анализа результатов численного моделирования.

Научная новизна результатов диссертационной работы заключается в том, что в ней впервые:

- ✓ проведено систематическое изучение характерных особенностей вторичной эмиссии, а также микроструктуры приповерхностной области металлов и полупроводников при бомбардировке кластерами различного размера в диапазоне энергий до ~ 1 кэВ/атом, как в зависимости от числа атомов в налетающем кластере при фиксированной энергии на атом, так и в зависимости от энергии.
- ✓ показано существование порога между линейным и нелинейным режимами распыления, который зависит от полной энергии кластера.
- ✓ изучены процессы первичного радиационного повреждения металлов и полупроводников, подвергаемых бомбардировке нанокластерами.
- ✓ проведена сравнительная оценка относительных эффективностей радиационного повреждения и распыления при различных режимах облучения.
- ✓ показана возможность десорбции нанокластера при прямом ударе и предложен её физический механизм.
- ✓ установлено влияние подложки на механизмы радиационно-стимулированной десорбции осажденного нанокластера при прямом и непрямом ударе атомарного/кластерного иона

Основные результаты, полученные в процессе исследований и описанные в диссертационной работе, являлись новыми на момент их публикации.

Научно-практическая ценность результатов работы

В результате выполнения данной работы была разработана методика, позволяющая проводить атомистическое моделирование процессов внедрения ускоренного кластера в твердое тело, а также исследовать сопутствующие процессы: вторичную эмиссию, изменение микроструктуры поверхности и образование кратеров, первичное дефектообразование в мишени, десорбцию наночастиц. С точки зрения фундаментальных исследований ценность работы заключается в том, что с помощью разработанных методик возможно изучать на атомарном уровне физические механизмы, обуславливающие нелинейные эффекты при кластерном распылении, каскады высокой плотности энергии, пост-каскадные тепловые пики и соответствующие им механизмы радиационного повреждения мишени и десорбции наночастиц. С точки зрения прикладной науки ценность полученных результатов и разработанных методик моделирования заключается в возможности получать количественные оценки характеристик десорбции, распыления и радиационного повреждения мишени при бомбардировке нанокластерами. Таким образом, научные результаты и выводы диссертационной работы могут быть рекомендованы для использования в аналитических методах анализа поверхности для оптимизации режимов облучения, а также при разработке новых прецизионных методов анализа и нанообработки поверхности с использованием кластерных пучков.

Положения, выносимые на защиту:

- Методика численного моделирования методом классической молекулярной динамики процессов внедрения ускоренных нанокластеров (с начальной энергией до нескольких кэВ/атом) в монокристаллическую мишень и нанокластеры, а также сопутствующих процессов распыления и модификации поверхности, первичного радиационного повреждения облучаемого кристалла, распыления и десорбции осажденных нанокластеров;

- Результаты исследования пространственных, энергетических и временных характеристик нелинейных каскадов атомных соударений и пост-каскадных эффектов, возникающих вследствие внедрения ускоренного кластера в мишень;
- Результаты исследования нелинейных и неаддитивных эффектов при распылении металлов и полупроводников под воздействием кластерной бомбардировки при различных режимах облучения (в зависимости от энергии и размера налетающего кластера);
- Результаты исследований особенностей микроструктуры приповерхностной области мишени, формируемой при внедрении нанокластера, а также характера первичных структурных повреждений мишени;
- Результаты исследований распыления изолированных нанокластеров золота;
- Результаты исследования механизмов десорбции нанокластера золота, осажденного на различные подложки.

Апробация работы.

Основные положения диссертационной работы были представлены в виде устных и стендовых докладов следующих научных конференциях: 19th International Conference on Atomic Collisions in Solids - ICACS-19 (Париж, Франция, 2001); Sixth International Conference on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids - COSIRES-2002 (Дрезден, Германия, 2002); "Неразрушающие методы контроля и компьютерное моделирование в науке и технике" (New Approaches to High-Tech: Nondestructive testing and Computer Simulations in Science and Engineering) – NDTCS (Санкт-Петербург, 2002, 2003, 2004, 2005 г.г.); XXXIII – XLI Международные конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами - ФВЗЧК (Москва, МГУ им. Ломоносова, 2003–2011 г.г.); International Meeting on Development in Materials, Processes and Applications of Nanotechnology – MPA 2007 (Белфаст, Великобритания, 2007).

Материалы работы докладывались и обсуждались на научно-технических семинарах в СПбГПУ, НПО “Радиевый институт им. В.Г.Хлопина”, Свободном университете Брюсселя (Бельгия).

Публикации.

По материалам, изложенным в диссертационной работе, автором опубликовано 40 работ [А1–А40], включая 16 статей в отечественных и зарубежных журналах, 6 статей в сборниках докладов конференций, 18 тезисов докладов на конференциях. 16 статей опубликовано в журналах из списка ВАК ведущих российских и зарубежных рецензируемых изданий [А1–А16].

Личный вклад автора

Все представленные в диссертационной работе результаты были получены автором лично, либо под его непосредственным руководством в период с 2000 по 2012 г. Все проведенные исследования, состоящие в (1) постановке целей и задач, выборе методов исследования; (2) в разработке и реализации методики численного моделирования; (3) проведении статистического анализа, обработки и обобщения полученных данных, были выполнены автором лично при участии аспиранта А.С.Колесникова, а также студентов кафедры “Экспериментальная ядерная физика” СПбГПУ.

Объем и структура диссертации.

Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, списка цитированной литературы (185 наименований) и списка авторских публикаций (40 наименований). Объем диссертации составляет 193 страницы, включая 64 рисунка и 30 таблиц.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обосновывается актуальность работы, формулируются ее цели, научная новизна и практическая значимость, а также положения, выносимые на защиту, приводится информация о личном вкладе и публикациях автора диссертации, кратко излагается ее содержание.

В главе 1 представлены физические основы и методика численного моделирования воздействия пучков заряженных частиц и кластеров на приповерхностную область твердотельных мишеней [А1–А6], которая основана на методе классической молекулярной динамики (МД). Представлено описание выбранных моделей потенциалов межатомного взаимодействия для металлических и полупроводниковых мишеней, а также особенностей используемого алгоритма метода МД. При расчетах использовался многочастичный потенциал межатомного взаимодействия, базирующийся на приближении второго момента модели сильной связи [20–21] для металлов и потенциал Терсова [22–23] для полупроводников. Короткодействующая часть данных потенциалов была скорректирована в рамках ZBL модели [24] для адекватного учета близких соударений высокоэнергетичных атомов. Используемый метод МД базируется на стандартном алгоритме, в основе которого лежит решение системы уравнений движения Ньютона для каждого атома модельного кристалла методом численного интегрирования с определенным шагом по времени. В данной работе использовался метод Верле с переменным временным шагом [25]. При проведении расчетов были использованы модельные кристаллы, содержащие от 30000 до 500000 атомов (в зависимости от размера налетающего кластера и его энергии) с поперечными периодическими граничными условиями. Демпфирующие силы на всех границах (исключая поверхность) обеспечивали отвод избытка энергии и гашение ударной волны, возникающей вследствие удара кластера о поверхность. Для каждого рассматриваемого случая моделировалось от 20 до 1000 индивидуальных историй, каждая из которых отслеживалась в течение 20–30 пикосекунд от момента удара налетающей частицы о поверхность. Для того чтобы исключить эффект

каналирования, было выбрано наклонное направление удара (под углом 7° относительно нормали к поверхности мишени).

В главе 2 представлены результаты исследования процессов легирования приповерхностной области мишени при бомбардировке низкоэнергетическими кластерами, а также особенностей процессов, происходящих на каскадной и пост-каскадной стадиях для различных размеров налетающих кластеров и ионов (от 1 до 60) при фиксированной энергии на один атом частицы-снаряда. Рассматривались как металлические мишени (Cu, Ni, Al), так и полупроводниковые (SiC, Si). Проведено сравнение характеристик каскада атомных соударений и посткаскадного теплового пика в металлах и полупроводниках, инициированных бомбардировкой одноатомными ионами и многоатомными кластерами при одинаковой начальной энергии на один атом снаряда в диапазоне 0.1...5 кэВ/атом. Также изучены характерные особенности распределений пробегов внедренных атомов. Показано, что начальная стадия каскада соударений слабо зависит от размера налетающего кластера. Однако поздняя стадия каскада и характер посткаскадной стадии охлаждения существенно зависят от размера налетающего кластера [A3–A6]. С увеличением числа атомов налетающего снаряда наблюдается переход от режима линейных каскадов к режиму столкновительного пика, увеличение времени жизни каскада, а также, возникновение долгоживущего теплового пика на посткаскадной стадии (для металлов). Одновременно с возникновением режима нелинейных каскадов с ростом размера налетающего кластера N наблюдается некоторое увеличение величины среднего проективного пробега внедренных атомов, однако эта тенденция ослабляется с ростом энергии, приходящейся на один атом налетающего кластера [A7]. При этом при всех рассмотренных энергиях с ростом N возрастает страгглинг пробегов, что приводит к размытию распределения имплантированных частиц [A7]. В результате проведенного исследования, в частности, был выявлен ряд закономерностей, характерных для низкоэнергетической имплантации ионов Si_1 , C_1 и кластеров Si_5 ,

Si_{60} , C_5 , C_{60} (при начальной энергии 200 и 1000 эВ/атом) в карбид кремния [A13–A14]:

- пространственное распределение пробегов внедрённых атомов в карбид кремния слабо зависит от размера внедрённого кластера;
- интенсивность нелинейных эффектов на каскадной и пос-каскадной стадиях при внедрении многоатомных кластеров оказывается заметно меньше, чем для металлических мишеней (при сходном режиме облучения).

В каждой из глав 3–7 вначале приведен краткий литературный обзор, в котором обобщаются накопленные к настоящему времени знания по теме соответствующей главы и формулируются актуальные проблемы, нерешенные на момент проведения исследований в рамках диссертационной работы.

Глава 3 посвящена изучению процессов вторичной эмиссии при облучении поверхности твердых тел пучками частиц (включая многоатомные кластеры) при фиксированной энергии на один атом налетающего снаряда. Получены абсолютные и относительные (т.е. в пересчёте на один внедрённый атом кластера-снаряда) значения коэффициентов распыления, а также энергетическая, временная и угловая зависимость коэффициента распыления.

С целью верификации разработанной методики проведены тестовые расчёты распыления одноатомными ионами с начальными энергиями в диапазоне 0.1–15 кэВ. Так, в качестве примера на рис.1 приведена энергетическая зависимость коэффициентов самораспыления $Cu(111)$ и $Ni(111)$. Видно, что расчеты хорошо согласуются с экспериментом [26–27]. Кроме того, в рамках МД моделирования были получены дифференциальные спектры распыленных частиц (по энергии и по углам вылета из мишени). Энергетическое распределение полностью согласуются с известным распределением Зигмунда-Томпсона, которое имеет многочисленные экспериментальные подтверждения [28]. Угловой спектр в среднем подчиняется зависимости $Cos^n \theta$, где $n > 1$, но имеет характерный максимум, связанный с высокой вероятностью вторичной эмиссии вдоль плотноупакованного направления $\{110\}$, что соответствует экспериментальным наблюдениям [29]. При этом (в отличие от мо-

делей, базирующихся на приближении парных столкновений) согласие результатов МД моделирования с экспериментом достигнуто без введения в модель каких-либо дополнительных эмпирических параметров, описывающих поверхностную связь атомов. Таким образом, выбранный многочастичный потенциал межатомного взаимодействия автоматически позволяет корректно учесть поверхностные силы связи.

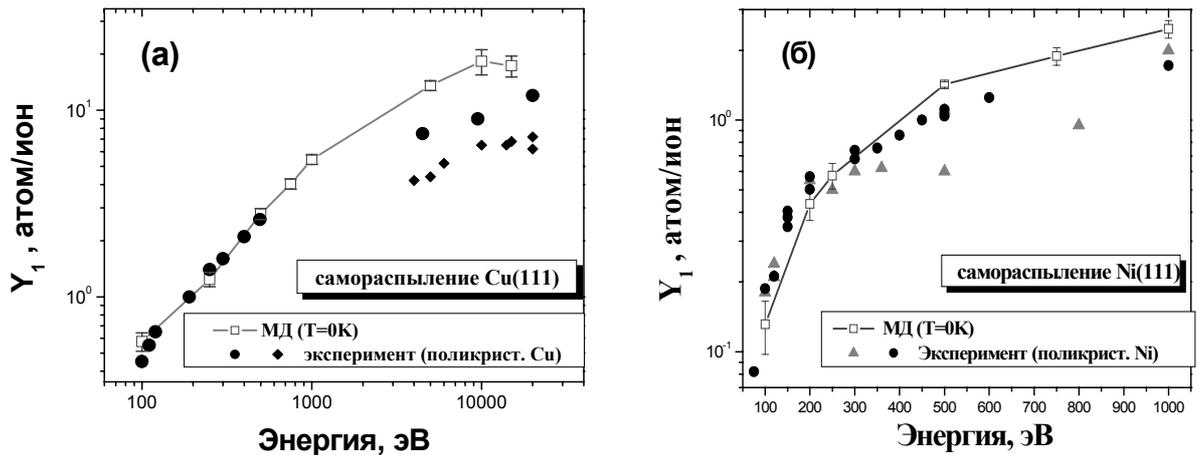


Рисунок 1 – Энергетические зависимости коэффициентов самораспыления Y_1 при бомбардировке Ni(111) (а) и Cu(111) (б) одноатомными ионами: сравнение результатов моделирования с помощью МД [A5] с имеющимися экспериментальными данными [26–27]. Соответствующие обозначения указаны на рисунке.

Выявлен целый ряд тенденций, характерных для распыления грани (111) Al, Cu и Ni [A4, A5, A16] и полупроводников на примере (111)SiC и Si [A15, A16] при бомбардировке N-атомными кластерами и одноатомными ионами с фиксированной энергией на один атом налетающего снаряда, выявлены характерные отличия в нелинейных эффектах, возникающих в металлических и полупроводниковых мишенях. Получены интегральные и дифференциальные характеристики распыления, проведено их сравнение с соответствующими характеристиками распыления одноатомными ионами при одинаковой энергии на один атом налетающего снаряда. Поскольку в рассматриваемой ситуации распыление одноатомными ионами является линейным, то отношение Y_N/Y_1 (где Y_N - коэффициент распыления, приходящийся на один

атом налетающего кластера) можно рассматривать как характеристику степени “линейности” распыления при кластерной бомбардировке. Величина отношения Y_N/Y_1 для Cu и Ni при их бомбардировке кластерами Cu_N и Ni_N , соответственно, приведена на Рис.2 в зависимости от числа атомов (N) в налетающем кластере. Видно, что как для Ni, так и для Cu при $N \geq 10$ наблюдается неаддитивное увеличение коэффициента распыления, приходящегося на один атом кластера ($Y_N/Y_1 > 1$), тогда как при меньших размерах кластера имеет место линейный режим, при котором распыление практически аддитивно (т.е. $Y_N/Y_1 \cong 1$). Также установлено, что отмеченный эффект нелинейности сопровождается характерными изменениями вида энергетического и временного спектров распыленных частиц. При этом возрастает доля низкоэнергетических распыленных частиц (с энергиями ниже 1 эВ), а так же возникает так называемая “поздняя эмиссия” (т.е. вторичная эмиссия наблюдается в течение более чем 1 пс после удара). В случае полупроводниковой мишени SiC существенная нелинейность распыления (при рассмотренных режимах облучения, т.е. в диапазоне энергий 0.2-1 кэВ/атом) наблюдалась при облучении фуллеренами C_{60} ($N=60$).

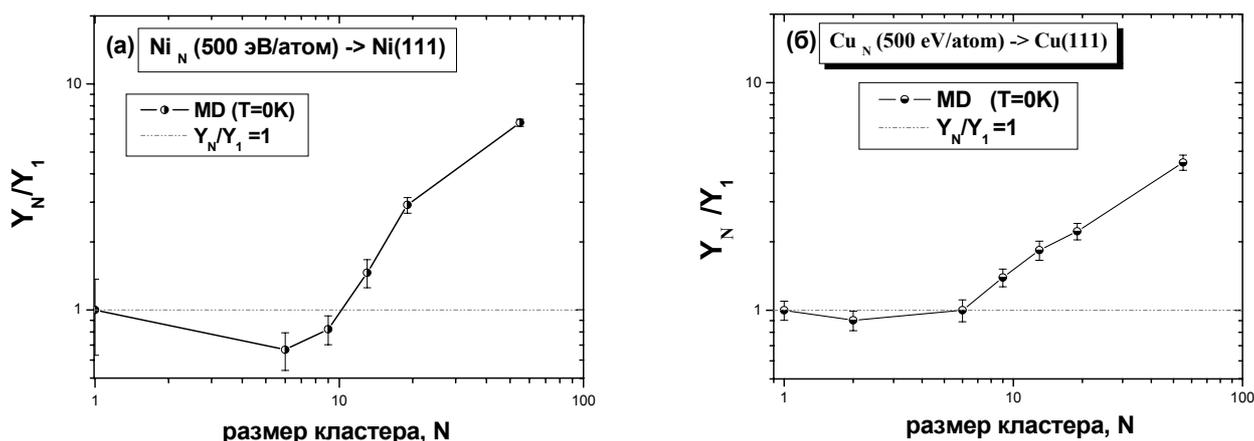


Рисунок 2 – Величина отношения Y_N/Y_1 в зависимости от числа атомов (N) в налетающем кластере при распылении а) Ni (111) кластерами Ni_N и б) Cu (111) кластерами Cu_N с начальной энергией 500 эВ/атом.[A4, A5].

В **Главе 4** представлены результаты систематического исследования микро-рельефа поверхности металлических [A4, A6] и полупроводниковых [A13–

Al6] материалов, формирующегося после внедрения многоатомных кластеров, имеющих различные размеры (от 1 до 60 атомов). Найдены ряд общих тенденций и особенностей формирования топографии поверхности в Al, Cu и Ni при бомбардировке N-атомными кластерами Al_N , Cu_N , Ni_N и Au_N при $N=1\dots55$, а также при бомбардировке Si и SiC кластерами Si_N , C_N ($N=1-60$) в энергетическом диапазоне $E/N=100\dots1000$ эВ/атом. Показано, что при внедрении многоатомных кластеров, в приповерхностной области Si и SiC происходит образование аморфной зоны, тогда как в металлических мишенях вещество полностью рекристаллизуется. Изучение процессов эрозии поверхности Cu(111) и Ni(111) показало, что бомбардировка одноатомными ионами приводит к образованию адатомов на поверхности облучаемой мишени. При внедрении N-атомного кластера ($N>6$) характер топографии поверхности за-

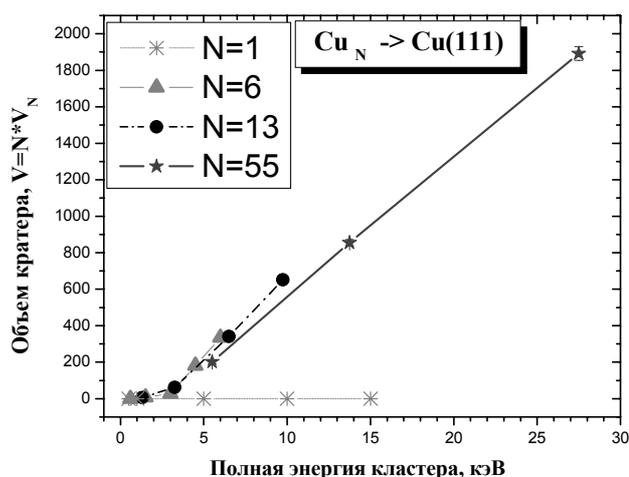


Рисунок 3 – Объем кратера (выраженный в количестве вакантных узлов решетки) образующегося в Cu(111) при внедрении кластеров Cu_N при $N=1-55$ в зависимости от суммарной кинетической энергии налетающего кластера [А6].

женно описана универсальной кривой (для заданного элементного состава снаряда и мишени). Образование кратера коррелирует с образованием теплового пика в облучаемой мишени.

Предметом **Главы 5** является изучение особенностей первичного радиационного повреждения поверхности металлов [А5, А6] и полупроводников

зависит от его суммарной кинетической энергии (E_{tot}): при этом происходит либо формирование адатомов и мелкозалегающего кратера, если $E_{tot} < 5$ кэВ, либо образование отчетливо выраженного глубокого кратера, если $E_{tot} \geq (4-5)$ кэВ. В последнем случае, как видно из рис.3, объем кратера V линейно растет с ростом E_{tot} , при этом зависимость V от E_{tot} для налетающих кластеров различных размеров может быть прибли-

[A13–A16] и их корреляции с динамикой каскада соударений при бомбардировке частицами (одноатомными ионами и многоатомными кластерами). Представлены результаты изучения особенностей и физических механизмов первичного радиационного повреждения при кластерной бомбардировке поверхности г.ц.к. металлов (Ni, Cu и Al) и полупроводников с алмазной решёткой (Si; c-SiC). Рассмотрены случаи низкоэнергетической бомбардировки поверхности (111) вышеперечисленных материалов одноатомными ионами и кластерами C_N , Si_N ($N=1, 5, 12$ и 60), а также Al_N , Ni_N и Au_N ($N=1-55$), имеющими фиксированную энергию на один атом бомбардирующей частицы, в диапазоне 0.1-1 кэВ/атом. В частности, показано, что с увеличением размера налетающего кластера при фиксированной энергии на атом, рост относительной эффективности распыления в пересчете на один налетающий атом существенно опережает соответствующее значение относительной эффективности радиационного повреждения мишени. (см. рис.4)

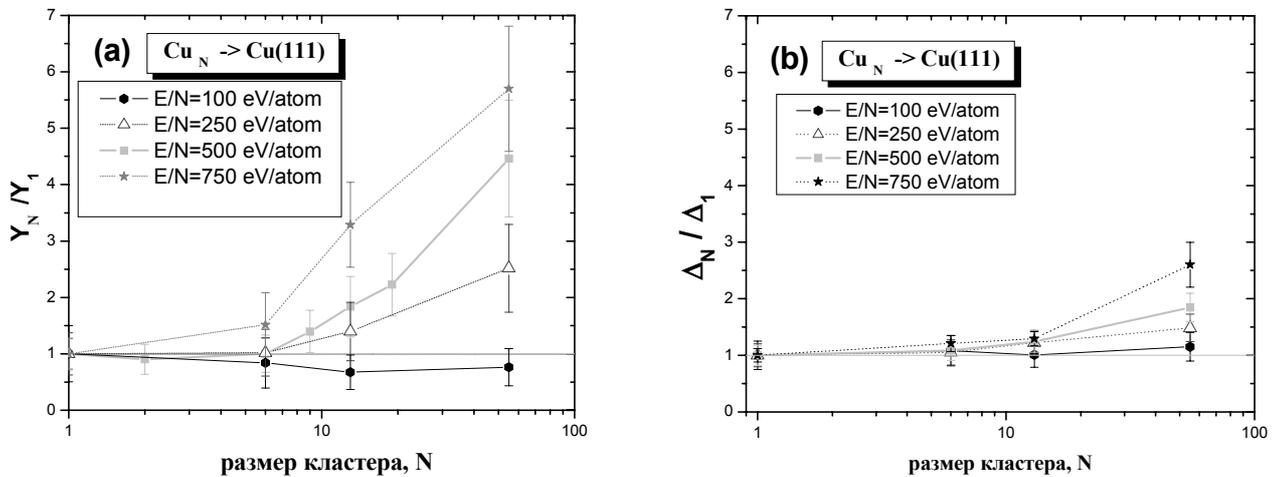


Рисунок 4 – (а) Отношение коэффициентов распыления (в пересчете на один атом налетающего кластера) при бомбардировке Cu(111) N -атомным кластером (Y_N) и одноатомным ионом (Y_1), и (б) отношение количества атомов мишени, имеющих координационное число $Z \neq 12$ (в пересчете на один атом налетающего кластера) после бомбардировки N -атомным кластером (Δ_N) и одноатомным ионом (Δ_1) в зависимости от N в диапазоне энергий $E/N=100..750$ эВ/атом.[A6].

Глава 6 посвящена изучению особенностей распыления сферических нанокластеров Au_N диаметром (2–18)нм при прямом ударе ионами Au_1 (с энергией 38 кэВ) [A9, A10] и многоатомными кластерами Au_{400} (с фиксированной на-

чальной энергией 180 эВ/атом) [A8, A11]. Установлено, что величина полного коэффициента распыления нанокластера превышает соответствующую величину для плоской поверхности мишени главным образом за счёт большого выхода кластеризованной составляющей спектра вторичной эмиссии, обусловленной в основном выходом больших фрагментов (практически совпадающих по размеру с исходным кластером). В случае бомбардировки одноатомными частицами, поглощенная энергия и выход распыления слабо зависят от прицельного параметра удара. При кластерной бомбардировке поглощенная энергия и атомарный выход распыления уменьшаются с ростом прицельного параметра удара; наибольший выход больших фрагментов (содержащих более половины атомов исходного нанокластера) наблюдается при периферических ударах. Впервые продемонстрировано, что при прямом ударе облучаемый нанокластер (как единое целое) может с некоторой вероятностью получить суммарный импульс, направленный от поверхности подложки (в результате “эффекта отдачи”, вызванного вторичной эмиссией атомов преимущественно по направлению к “подложке”), и при этом в конечном итоге нанокластер может быть эжектирован (десорбирован). В качестве примера, на рис.5 показана визуализация одного такого события – эжекции большого фрагмента нанокластера за счёт “эффекта отдачи”. При фиксированных условиях облучения вероятность “десорбции” падает с ростом размера кластера-мишени и становится практически нулевой, когда размер нанокластера превышает некоторое пороговое значение, зависящее от условий облучения.

Основным результатом проведенного исследования является тот факт, что обнаруженные явления фрагментации кластера и “эффект отдачи” при прямом ионном ударе могут являться одними из возможных механизмов (экспериментально наблюдаемой) десорбции нанокластеров при бомбардировке нанодисперсных мишеней ионами и кластерами золота с энергиями порядка нескольких десятков кэВ (т.е. при достаточно типичных условиях облучения, когда упругие потери энергии являются доминирующими).

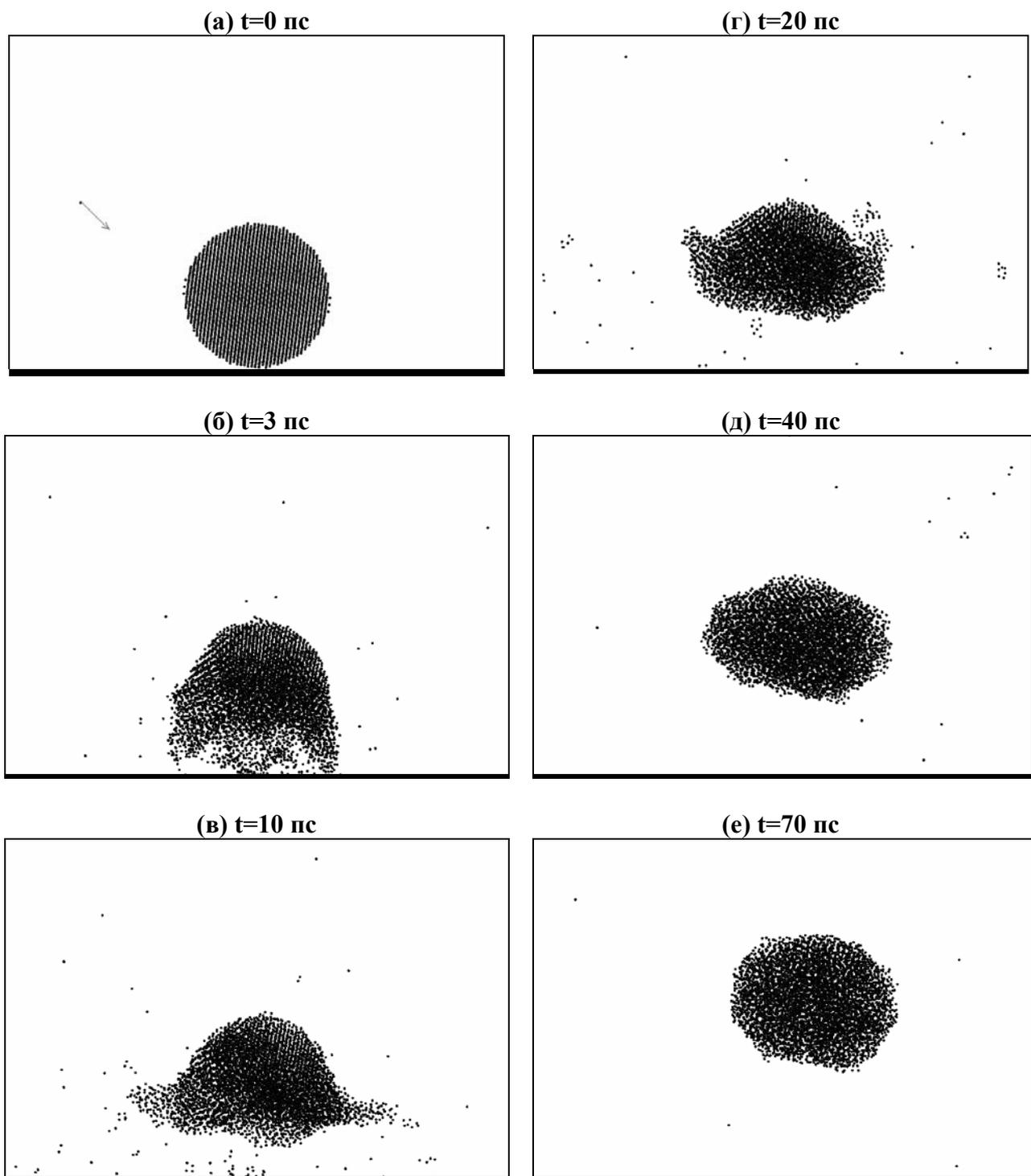


Рисунок 5 – Визуализация временной эволюции кластера Au_{6051} после наклонного удара иона Au_1 с энергией 38 кэВ, иллюстрирующая десорбцию в результате “эффекта отдачи”. Соответствующие времена приводятся непосредственно над каждым рисунком: (а) - $t=0$ пс (стрелка указывает начальное направление вектора скорости иона); (б) - $t=3$ пс, (в) - $t=10$ пс, (г) - $t=20$ пс, (д) - $t=40$ пс, (е) - $t=70$ пс. Нижняя линия рамки на каждом изображении соответствует положению условной поверхности подложки. [A9]

В главе 7 приведены результаты исследования десорбции сферического нанокластера Au_{6051} (диаметром 6 нм), предварительно осаждённого на подложку Al(111) либо Au(111), как за счёт “прямого”, так и за счёт “непрямого” удара бомбардирующей частицы (в последнем случае частица-снаряд внедряется в подложку вблизи осаждённого кластера, не задевая его непосредственно) [A8, A12]. В качестве частиц-снарядов рассмотрены одноатомные ионы Au_1 и кластеры Au_{400} с суммарной энергией 38 и 72 кэВ, соответственно. Выбранные размеры нанокластера и режимы облучения фактически воспроизводят условия прецизионных экспериментов [A8, A10], в которых наблюдалась десорбция “целых” нанокластеров. Исследованы возможные механизмы десорбции в зависимости от режима облучения, а так же влияние массы атомов подложки на эффективность наблюдаемой эжекции нанокластеров. Показано, что при рассматриваемых условиях облучения “непрямой” удар налетающей частицы не приводит к десорбции осаждённого нанокластера с “лёгкой” подложки Al (масса атомов которой существенно меньше массы атомов осаждённого нанокластера), однако такой удар может десорбировать нанокластер с “тяжелой” подложки Au. При этом эффективность десорбции при ударе кластерным многоатомным ионом существенно выше, чем при ударе одноатомным ионом.

При рассмотренных условиях облучения можно выделить два основных механизма десорбции осаждённых на подложку нанокластеров:

- для “тяжелой” подложки Au доминирующим механизмом является “эффект абляции” (связанный с передачей импульса от потока распыляемого вещества подложки осаждённому на неё нанокластеру);
- для “лёгкой подложки” десорбция возможна лишь за счёт “эффекта отдачи” при “прямом” ударе бомбардирующей частицы.

В заключении сформулированы **основные результаты исследований**, представленных в диссертационной работе:

1. Разработана методика для численного моделирования на атомарном уровне процессов эрозии поверхности металлов и полупроводников, а также наноматериалов при внедрения ускоренных кластеров.
2. Исследованы закономерности вторичной эмиссии при бомбардировке металлов и полупроводников нанокластерами (Ni_N , Cu_N , Al_N , Au_N , $N=1\dots 55$; Si_N , C_N , $N=1\dots 60$) в энергетическом диапазоне от 0.1 до ~ 1 кэВ/атом. Найдены характерные зависимости коэффициентов распыления, как от энергии, так и от размера налетающего кластера.
3. Получены характеристики каскадов высокой плотности энергии и пост-каскадных тепловых пиков, а также распределения пробегов при внедрении кластеров различных энергий.
4. Проведено исследование характерных особенностей микрорельефа приповерхностной области мишени при кластерной бомбардировке.
5. Впервые получены систематические характеристики первичных структурных повреждений мишени при кластерной бомбардировке металлов и полупроводников.
6. Впервые изучена возможность десорбции нанокластеров, осажденных на подложку, при прямом и непрямом ионном и кластерном ударе (в режиме доминирования упругого торможения для частицы-снаряда) и исследованы её механизмы.

На основании полученных результатов можно кратко сформулировать **основные выводы** по проведённой работе:

- Характер временной эволюции линейных и нелинейных каскадов существенно различается на временах, превышающих пик каскада;
- Нелинейные (неаддитивные) эффекты при распылении кластерными ионами имеют пороговый характер, т.е. проявляются при превышении кластером-снарядом некоторого критического размера;
- Характер первичных структурных нарушений при кластерном облучении металлов и полупроводников существенно различается – в случае

полупроводников наблюдается аморфизация за счёт одиночного удара, тогда как в металлах возникают скопления точечных дефектов;

- Относительная эффективность эрозии поверхности при бомбардировке кластерами превышает эффективность первичного повреждения с увеличением размера кластера-снаряда.
- Одним из физических механизмов эжекции/десорбции осажденных нанокластеров при бомбардировке кэВ-ными частицами (в режиме доминирования упругого торможения) является эффект отдачи;
- Масса атомов подложки может существенно влиять на доминирующий механизм десорбции при кластерной бомбардировке.

Список цитируемой литературы:

1. Yamada, I. Nano-processing with gas cluster ion beams [Text] / I. Yamada, J. Matsuo, Z. Insepov [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. – 2000. – Vol. 164-165. – P. 944-959.
2. Dobeli, M. Sputtering and defect production by focused gold cluster ion beam irradiation of silicon [Text] / M. Dobeli, P.W.Nebiker, R.Miible, [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. –1997. – Vol. 132. – P. 571-577.
3. Canut, M. Damage creation in silicon single crystals irradiated with 200 keV/atom Au_n⁺ clusters. [Text] / B. Canut, M. Fallavier, O. Marty and S. M. M. Ramos// Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. –2000. – Vol. **164-165** . – P.396-400.
4. Andersen, H. Giant Metal Sputtering Yields Induced by 20–5000 keV/atom Gold Clusters [Text] / H. Andersen, A Brunelle., S. Della-Negra, J. Depauw, D. Jacquet, Y. LeBeyec// Phys. Rev. Lett. – 1988. – Vol.80. – P.5433-5436.
5. Merkle, K.L. Direct Observation of Spike Effects in Heavy-Ion Sputtering [Text] / K.L. Merkle and W.Jäger // Phil. Mag. – 1981. – Vol. 44. – P.741-762.
6. Insepov, Z., Allen, L.P., Santeufemio, C., Jones, K.S., Yamada, I. Computer modeling and electron microscopy of silicon surfaces irradiated by cluster ion

- impacts [Text] / Z.Insepov, L.P.Allen, C.Santeufemio, K.S. Jones, I.Yamada. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. – 2003. - Vol. **202**. - P. 261-268
7. Colla, T.J. Sputtering of Au (111) induced by 16-keV Au cluster bombardment: Spikes, craters, late emission, and fluctuations [Text] / T. J. Colla, R. Aderjan, R. Kissel, and H. M. Urbassek.// Phys. Rev.B. . –2000. –Vol.62. – P.8487-8493.
 8. Кирсанов, Процессы радиационного дефектообразования в металлах. / В.В. Кирсанов В.В., Суворов А.В., Трушин Ю.В. - М.: Энергоатомиздат, 1985. - 272 с.
 9. Экштайн, В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. / В.Экштайн. – М.: Мир, 1995. - 320 с.
 - 10.Urbassek, H. News on sputter theory: Molecular targets, nanoparticle desorption, rough surfaces [Text] / H.M. Urbassek, C. Anders, Y. Rosandi // Nucl. Instrum. and Meth. In Phys. Res. B. – 2011. – Vol. 269. – I. 9. – P.947-954
 - 11.Behrisch, R. Sputtering by Particle Bombardment: Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies (Topics in Applied Physics) [Text] / R. Behrisch, W. Eckstein. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2007 – 508 p.
 - 12.Popok, V.N. Beams of atomic clusters: effects on impact with solids [Text] / V.N. Popok, E.E.B. Campbell // Rev. Adv. Mater. Sci. – 2006. – Vol. 11. – P. 19-45.
 - 13.Marcus, A. Metal Nanoparticle Deposition for TOF-SIMS Signal Enhancement of Polymers [Text] / A. Marcus, N. Winograd // Anal. Chem. – 2006. – Vol. 78. – P. 141-148
 - 14.Szymczak, W. TOF-SIMS characterization of spark-generated nanoparticles made from pairs of Ir–Ir and Ir–C electrodes [Text] / W. Szymczaka, N. Menzel, W.G. Kreyling, K. Wittmaack // Int. J. Mass Spectrom. – 2006. – Vol. 254. – P. 70-84
 - 15.Kirchner, U. Single particle MS, SNMS, SIMS, XPS, and FTIR spectroscopic analysis of soot particles during the AIDA campaign [Text] / U Kirchner, R.

- Vogt, C. Natzeck, J. Goschnick // *J. Aerosol Sci.* – 2003. – Vol. 34. – P. 1323-1346.
16. Andersen, H.H. Degradation of discontinuous gold films under MeV heavy ion bombardment. [Text] / H. H. Andersen, H. Knudsen, P. M. Petersen // *J. Appl. Phys.* – 1978. – Vol. 49. – P. 5638-5648
 17. Baranov, I. Measurement of cluster masses up to 10^7 amu arising as a result of inelastic sputtering of thin layers by ions. [Text] / I.A. Baranov, A.C. Novikov, V.V. Obnorskii, S.O. Tsepelevich // *Nucl. Instrum Methods Phys. Res. B.* – 1992. – Vol. 65. – P. 177-180
 18. Rehn, L.E. Origin of Atomic Clusters during Ion Sputtering [Text] / / L. E. Rehn, R. C. Birtcher, S. E. Donnelly, P. M. Baldo, L. Funk // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 87. – P. 207601-207604
 19. Staudt, C. Generation of large indium clusters by sputtering. [Text] / C. Staudt, A. Wucher // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 66. – P. 075419-075431
 20. Gao, F. Point-defect and threshold displacement energies in Ni_3Al [Text] / F.Gao, D. Bacon, G.Ackland. // *Phil. Mag. A.* –1993. – Vol. 67.. –P.275-288.
 21. Hou, M. Cascade statistics in the binary collision approximation and in full molecular dynamics [Text] / M.Hou, Z.-Y.Pan. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* –1995. – Vol. 102. – P.93-102.
 22. Tersoff, J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems [Text] / J. Tersoff // *Phys. Rev. B.* –1989. –Vol. 39. – P. 5566-5568.
 23. Tersoff, J. Erratum: Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems [Text] / J. Tersoff // *Phys. Rev. B.* – 1990. – Vol. 41 . – P. 3248.
 24. Ziegler, J.F. The Stopping and Range of Ions in Solids / J.F.Ziegler, J.P.Biersack, U.Littmark // *The Stopping and Range of Ions in Matter.*–1985.– Vol. 1. – New York : Pergamon, 1985. – 321 p.
 25. Allen, M.P. Computer simulation of liquids / M.P.Allen, D.J. Tildesley. – Oxford: Clarendon Press, 1987. – 387 p.

26. Andersen, H.H. Sputtering Yield Measurements / H.H.Andersen, H.L.Bay. //in Sputtering by Particle Bombardment; ed. by R. Behrisch. – 1981. – Pt.I. – Berlin: Springer-Verlag, 1981. – P.145-218
27. Eckstein, W. Sputtering data / W.Eckstein, C.Garcia-Rosles, J.Roth, W.Ottenberger // Rep. IPP 9/82. – 1993. – Garching, Munchen, Max-Planck-Institute-Fur-Plasmaphysik, 1993.
28. Thompson., M.W. The Velocity Distribution of Sputtered Atoms [Text] / M.W.Thompson // Nucl. Instrum. And Meth. In Phys. Res. B. – 1987. – Vol. **18**. – P. 411-429.
29. G.Betz, G.K. Werner, Sputtering of multicomponent materials // R.Behrish. Sputtering by Particle Bombardment II. - Springer-Verlag, Berlin, Top.Appl.Phys. . –1983. – Vol. **52**. – P. 11-90

Список публикаций автора по теме диссертации:

- [A1] **E.E.Zhurkin** and M.Hou. Structural and thermodynamic properties of elemental and bimetallic nanoclusters: an atomic scale study // J.Phys.: Condens. Matter .– 2000. –Vol. 12. – P.6735–6754.
- [A2] V.S.Kharlamov, **E.E.Zhurkin**, M.Hou. Atomic Scale Molelling of Nanosize Ni₃Al cluster beam deposition on Al, Ni and Ni₃Al(111) surfaces //Nuclear Instruments and Methods in Phys. Res. B.–2002. –Vol. B193 (1-4). –P. 538-543.
- [A3] **E.E. Zhurkin**, A.S.Kolesnikov. Molecular Dynamics Study of Al and Ni₃Al sputtering by Al clusters bombardment // Nuclear Instruments and Methods in Phys. Res. B. – 2002. – Vol. B193 (1-4). – P.822-829.
- [A4] **E.E.Zhurkin**, A.S. Kolesnikov. Atomic scale modeling of Al and Ni(111) surface erosion under cluster impact //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B. – 2003. – Vol. B202 . – P. 269-277.
- [A5] **Е.Е.Журкин**, А.С.Колесников, В.Ф.Космач. Моделирование распыления поверхности Cu(111) и Ni(111) под воздействием пучков ускоренных

ионов и кластеров // Поверхность. Рентген. Синхротрон. и нейтр. исслед. . – 2004. – №4. – С. 23-27.

[A6] **Е.Е.Журкин**, А.С.Колесников, В.Ф.Космач. Компьютерное моделирование процессов эрозии поверхности металлов при бомбардировке N-атомными кластерами (N=1- 55)// Поверхность. Рентген. Синхротрон. и нейтр. исслед. . – 2005. – №3. – С.51-56.

[A7] **Е.Е.Журкин**, В.Ф.Космач, А.С.Колесников. Пробеги имплантируемых атомов при бомбардировке Cu(111) многоатомными кластерами. //Поверхность. Рентген. Синхротрон. и нейтр. исслед. . – 2007. – № 4. – С.5-10.

[A8] I. Baranov, S. Della-Negra, V. Domaratsky, A. Chemezov, A. Novikov, V. Obnorsky, M. Pautrat, Chr. Anders, H.M. Urbassek, K. Wien, S Yarmiychuk, **E. Zhurkin**. Desorption of nanoclusters from gold nanodispersed layers by 72 keV Au₄₀₀ ions: Experiment and molecular dynamics simulation.//Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. –2008. – B266. – P.1993–2001.

[A9] **Е.Е.Журкин**. Исследование распыления нанокластеров золота при бомбардировке ионами Au с энергией 38 кэВ методом классической молекулярной динамики. //Поверхность. Рентген. Синхротрон. и нейтр. исслед. . – 2008 . –№ 3 . –С.27-33.

[A10] I.A.Baranov, S.Della-Negra, V.P.Domaratsky, A.V.Chemezov, S.N.Kirillov, A.C. Novikov, V.V.Obnorsky, M.Pautrat, H.M.Urbassek, K.Wien, S.V.Yarmiychuk, **Е.Е.Zhurkin**. Ejection of Nanoclusters from Gold Nanoislet Layers by 38 keV Au Ions in the Elastic Stopping Mode.// Journal of Nanoscience and Nanotechnology. –2009 . – Vol. 9 . – N 7. – P. 4085-4093(9)

[A11] **Е.Е.Журкин**. Моделирование распыления и десорбции нанокластеров золота при бомбардировке нанокластерами Au₄₀₀ с энергией 180 эв/атом методом классической молекулярной динамики.// Поверхность. Рентген. Синхротрон. и нейтр. исслед. . – 2009. – N 3. – С. 24–31

[A12] **Е.Е.Журкин**. Моделирование десорбции нанокластеров золота, осаждённых на поверхность (111) Al и Au, при бомбардировке ионами Au₁ и кла-

стерами Au₄₀₀ методом классической молекулярной динамики. // Поверхность. Рентген. Синхротрон. и нейтр. исслед. . – 2010. – N 3. – С. 48–56.

[A13] А.В.Бакаев, **Е.Е.Журкин**. Моделирование первичных радиационных дефектов в карбиде кремния при бомбардировке ионами и кластерами углерода. // Научно-технические ведомости СПбГПУ. –2010. –Т.2 .– С.17-23.

[A14] А.В. Бакаев, **Е.Е. Журкин**. Моделирование легирования и первичного радиационного повреждения поверхности (111) SiC при бомбардировке атомарными и кластерными ионами Si_N (N = 1, 5, 60) методом классической молекулярной динамики // Поверхность. рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2011, № 3, с. 49–55.

[A15] П.Ю.Григорьев, **Е.Е.Журкин**. Моделирование распыления поверхности карбида кремния при бомбардировке ионами и кластерами. // Научно-технические ведомости СПбГПУ. –2011. –Т.2 .– С.67-74.

[A16] П.Ю.Григорьев, **Е.Е.Журкин**. Моделирование распыления поверхности (111) Si и Al при бомбардировке многоатомными кластерами методом классической молекулярной динамики // Поверхность. Рентген. Синхротрон. и нейтр. исслед. . – 2012. – N 3. – С. 42–49.

[A17] A.S.Kolesnikov, **Е.Е. Zhurkin**. Ranges and range fluctuations of Cu_N nano-clusters implanted in Cu(111): a molecular dynamics study. // Proc. SPIE Vol. 6253 Ninth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations; Alexander I. Melker; Ed. . – 2006. – P.625306.1-8.

[A18] A.S. Kolesnikov, **Е.Е. Zhurkin**. Molecular dynamics study of surface erosion and defect generation in copper under cluster bombardment: influence of projectile mass and energy. // Proc. SPIE Vol. 5831 Eighth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering; Alexander I. Melker; Ed. . – 2005. – P.33-43.

[A19] **Е.Е. Zhurkin**, A.S. Kolesnikov. Atomic scale study of Cu and Ni(111) surface erosion under cluster bombardment. // Proc. SPIE Vol. 5400 Seventh International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering; Alexander I. Melker; Ed. . – 2004. – P. 69-77

[A20] **E.E. Zhurkin**, A.S. Kolesnikov. Molecular dynamics study of nonlinear sputtering.// Proc. SPIE Vol. 5400 Seventh International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering; Alexander I. Melker; Ed. . – 2004 . –P. 78-84

[A21] **E.E. Zhurkin**, A.S. Kolesnikov. Sputtering of Ni and Ni₃Al(111) surfaces under cluster bombardment: a Molecular Dynamics study. International Workshop on New Approaches to High-Tech Materials: Nondestructive Testing and Computer Simulations in Materials Science and Engineering, Ed. by A.I. Melker, Proceedings of SPIE 5127 . – 2003. –P.107-115.

[A22] D.A. Terentiev, **E.E. Zhurkin**. Atomic scale calculation of surface binding energies of pure metals and their alloys. International Workshop on New Approaches to High-Tech Materials: Nondestructive Testing and Computer Simulations in Materials Science and Engineering, Ed. by A.I.Melker, Proceedings of SPIE 5127 . – 2003. – P.116-123.

[A23] П.Ю.Григорьев, **Е.Е.Журкин**. Моделирование распыления поверхности (111) Si и Al при бомбардировке многоатомными кластерами методом классической молекулярной динамики. // Тез.докл. XLI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва 31 мая - 02 июня) . – Москва. – 2011. – С.99

[A24] **Е.Е.Журкин**. Моделирование десорбции нанокластеров золота, осаждённых на поверхность (111) Al и Au, при бомбардировке ионами Au₁ и кластерами Au₄₀₀ методом классической молекулярной динамики. Тезисы докладов XXXIX международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 26-28 мая 2009 г.) Под ред. Проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Университетская книга, 2009, 183 С. – С.91

[A25] **Е.Е.Журкин**. Моделирование распыления и десорбции нанокластеров золота при бомбардировке нанокластерами Au₄₀₀ с энергией 180 эв/атом методом классической молекулярной динамики. // Тезисы докладов XXXVIII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц

с кристаллами (Москва, 27-29 мая 2008 г.) Под ред. Проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Изд-во МГУ. –2008. – 203 С. – С.97

[A26] I.A.Baranov, S. Della-Negra, V.P. Domaratsky, A.V.Chemesov, S. N.Kirillov, A.C.Novikov, V.V.Obnorsky, M. Pautrat, H. M. Urbassek, K. Wien, S.V. Yarmiychuk, **Е.Е.Zhurkin**. Ejection of nanoclusters from gold nanoisland layers by 38 keV Au ions in the elastic stopping mode.// Proc. of the International Meeting on Developments in Materials, Processes and Applications of Nanotechnology – “MPA 2007” . – University of Ulster. – Belfast. – UK. – 13-14 January 2007. – P.2042.

[A27] **Е.Е.Журкин**. Исследование распыления нанокластеров золота при бомбардировке ионами Au с энергией 38 кэВ методом классической молекулярной динамики. // Тезисы докладов XXXVII международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 29-31 мая 2007 г.) Под ред. Проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Изд-во МГУ. –2007. – 177С. – С.88

[A28] A.S.Kolesnikov, **Е.Е. Zhurkin**. Ranges and range fluctuations of Cu_N nanoclusters implanted in Cu(111): a molecular dynamics study // Proc. SPIE Vol. 6253 Ninth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations; Alexander I. Melker; Ed. . – 2006 . – P.625306.1-8.

[A29] **Е.Е.Журкин**, В.Ф.Космач, А.С.Колесников. Пробеги имплантируемых атомов при бомбардировке Cu(111) многоатомными кластерами //Тезисы докладов XXXVI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 30 мая-01 июня 2006 г.) Под ред. Проф. А.Ф. Тулинова. – М.: Изд-во МГУ. –2006. – 172 С. – С.92

[A30] A.S.Kolesnikov, **Е.Е. Zhurkin**. Ranges and range fluctuations of Cu_N nanoclusters implanted in Cu(111): a molecular dynamics study. // Proceedings of SPAS: Ninth International Workshop on New Approaches to High-Tech Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering NDTCS-2005, Preprints and Program, 6-12 June 2004 St.Petersburg, Russia. – Vol.9. – P.27-31

- [A31] A.S. Kolesnikov, **E.E. Zhurkin**. Molecular dynamics study of surface erosion and defect generation in copper under cluster bombardment: influence of projectile mass and energy. – Proceedings of SPAS: Eighth International Workshop on New Approaches to High-Tech Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering NDTCS-2004 Preprints and Program, 7-13 June 2004. – St.Petersburg, Russia . –Vol.8 - B1
- [A32] **Е.Е.Журкин**, А.С.Колесников, В.Ф.Космач. Компьютерное моделирование процессов эрозии поверхности металлов при бомбардировке N – атомными кластерами (N=1-55). //Тезисы докладов XXXIV Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 31 мая – 2 июня 2004 г.) - Изд.-во УНЦ ДО МГУ им. Ломоносова, 2004г. – С. 79
- [A33] **E.E.Zhurkin**, A.S.Kolesnikov. Molecular dynamics study of non-linear sputtering. //Proceedings of SPAS -"New Approaches to High-Tech: Nondestructive testing and Computer Simulations in Science and Engineering - NDTCS-2003", Preprints and Program. – St.Petersburg, Russia: 9-15 June 2003. –Vol.7-C6.
- [A34] **E.E.Zhurkin**, A.S.Kolesnikov. Atomic scale study of Cu and Ni(111) surface erosion under cluster bombardment.// Proceedings of SPAS -"New Approaches to High-Tech: Nondestructive testing and Computer Simulations in Science and Engineering - NDTCS-2003", Preprints and Program, St.Petersburg, Russia: 9-15 June 2003. – Vol.7 . –C2
- [A35] **Е.Е.Журкин**, А.С.Колесников, В.Ф.Космач. Моделирование распыления поверхности Cu(111) и Ni(111) под воздействием пучков ускоренных ионов и кластеров //Тезисы докладов XXXIII Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, 26-28 мая 2003 г.) - Изд.-во УНЦ ДО МГУ им. Ломоносова. – 2003. – С. 65
- [A36] D.A.Terentiev, **E.E. Zhurkin**. Atomic scale calculation of surface binding energies of pure metals and their alloys. Proceedings of SPAS -"New Approaches to High-Tech: Nondestructive testing and Computer Simulations in Science and

Engineering - NDTCS-2002", Preprints and Program, St.Petersburg, Russia: 10-16 June 2002. – Vol.6 - C27

[A37] **E.E.Zhurkin** , A.S. Kolesnikov. Sputtering of Ni and Ni₃Al(111) surfaces under cluster bombardment: a Molecular Dynamics study", Proceedings of SPAS - "New Approaches to High-Tech: Nondestructive testing and Computer Simulations in Science and Engineering - NDTCS-2002 // Preprints and Program, St.Petersburg, Russia: 10-16 June 2002. – Vol.6 . – C31

[A38] **E.E.Zhurkin**, A.S.Kolesnikov. Atomic scale modeling of Al and Ni(111) surface erosion under cluster impact // in: "Sixth International Conference on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids, COSIRES 2002", Dresden, Germany: June 23 - 27, 2002. – Final Program and Abstracts. –O26

[A39] **E.E. Zhurkin**, A.S.Kolesnikov. Molecular Dynamics Study of Al and Ni₃Al sputtering by Al clusters bombardment // 19th International Conference on Atomic Collisions in Solids, Paris: 29 July- 3 August 2001. – Programme & Abstracts. – B128.

[A40] П.Ю.Григорьев, **Е.Е.Журкин**. Первичные структурные повреждения кристаллов Al и Si при бомбардировке многоатомными кластерами. // XL Неделя науки СПбГПУ: материалы международной научно-практической конференции. Ч.V. –СПб.: Изд.-во Политехнического университета, 2011. – 202 с. . – С.168–170.