

# Физика плазмы и плазменные технологии

УДК 53.072; 53:004; 539.186.2

## Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия ионов с нанокластерами с парным межатомным взаимодействием

*Н. А. Панькин, Н. А. Смоланов*

*В рамках метода молекулярной динамики проведено компьютерное моделирование процесса взаимодействия ионов титана с нанокластерами  $Ti_{13}$ . Получены энергетические и угловые распределения конденсированных, прошедших и отразившихся от кластера ионов в зависимости от первоначальной энергии бомбардирующих частиц.*

PACS: 02.70.Ns, 07.05.-t, 36.40.-c

*Ключевые слова:* кластер, ионная бомбардировка, молекулярная динамика, моделирование.

### Введение

При нанесении покрытий из низкотемпературной плазмы помимо прочих частиц (атомов, ионов, микро-, макрочастиц и т. д.) присутствуют и нанокластеры, состоящие из элементов материала катода, подложки, реакционного и остаточных газов [1—3]. Основными механизмами образования кластеров в плазме являются [2, 3]:

ионная бомбардировка поверхности твердого тела (катода, подложки, стенок вакуумной камеры, макрочастиц и т. д.);

объединение атомов после их выхода с поверхности мишени (данный механизм объясняет лишь появление димеров);

дефрагментация более крупных частиц в результате их "кулоновского" распада (взрыва) или взаимодействия с другими образованиями.

При своем движении в ионно-плазменном потоке нанокластеры испытывают упругие и неупругие соударения с различными высокоэнергетическими частицами, присутствующими в низкотемпературной плазме. В результате этих взаимодействий возможно протекание следующих физических процессов: дефрагментация кластера с образованием более мелких кластеров и отдельных атомов; рост кластеров; испускание фотонов; иони-

зация и перевод бомбардирующей частицы в возбужденное состояние. При этом образованные после столкновения частицы могут изменять степень ионизации, а также переходить в возбужденное состояние и наоборот. Изменение величины и направления скоростей движения частиц, составляющих низкотемпературную плазму, приводит к изменениям пространственных и временных характеристик плазмы.

Исследование вышеуказанных процессов представляет интерес как с прикладной, так и с фундаментальной точек зрения. Прикладные аспекты связаны с широким использованием ионно-плазменных технологий для создания поверхностей твердых тел с уникальными физико-механическими свойствами [4]. Фундаментальный характер связан с выяснением механизмов взаимодействия ионов с наноразмерными объектами и сопряженными с этим особенностями формирования покрытий. В частности, на данный момент нельзя обстоятельно объяснить обнаруженное авторами появление конденсата (в виде продуктов распыленного катода) в области отрицательных расстояний катод—подложка при реализации метода конденсации с ионной бомбардировкой [5, 6]. Данное расстояние отсчитывается от плоскости катода по направлению к подложке (направление движения ионов). Конденсацию вещества в прикатодной области нельзя в полной мере объяснить наличием в ионно-плазменном потоке ионов титана различной зарядности и сложной геометрией результирующего магнитного поля, создаваемого фокусирующей и стабилизирующей катушками установки, реализующей метод конденсации с ионной бомбардировкой.

---

**Панькин Николай Александрович**, старший преподаватель.  
**Смоланов Николай Александрович**, доцент.  
Мордовский университет им. Н. П. Огарева.  
Россия, 430005, г. Саранск. ул. Большевикская, 68.  
Тел. 8 (342) 29-05-97.

E-mail: panjkinna@yandex.ru, smolanovna@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2010 г.

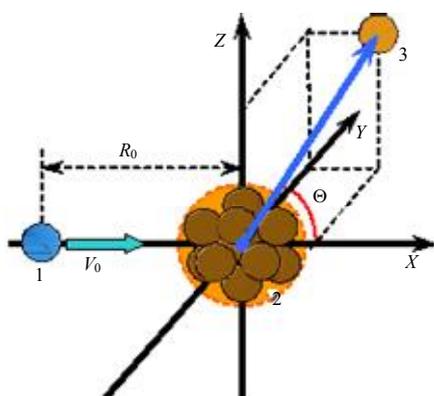
Цель настоящей работы — теоретическое исследование начальных стадий процесса взаимодействия ионов титана с нанокластерами  $Ti_{13}$  в рамках метода молекулярной динамики [7]. Под ионами будем понимать высокоэнергетические частицы, взаимодействующие с атомами кластера. Рассматривается случай центрального удара ионов с кластером (т. е. прицельное расстояние равно нулю). Анализировались энергетические спектры и угловые распределения ионов в зависимости от их первоначальной энергии. Расчет проводился для нулевой температуры кластера и различных начальных энергиях иона (в диапазоне 100—1000 эВ).

### Модель

Исходная конфигурация кластеров выбиралась в виде случайного распределения атомов титана в пространстве. Далее проводилась структурная релаксация, т. е. минимизация суммарной потенциальной энергии взаимодействия в нанокластере методом Метрополиса при заданной температуре (в нашем случае она была равна 0 К) [8].

Взаимодействие между атомами нанокластера, а также иона с кластером описывалось с помощью парного потенциала Морзе [9], параметры которого  $\alpha$ ,  $r_0$  и  $D$  для титана равны  $1,05291 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $3,230 \text{ \AA}$  и  $0,49888 \text{ эВ}$ , соответственно [10]. Для поиска решения системы уравнений движения ионов и атомов кластера (дифференциальные уравнения первого порядка) применяли алгоритм Верлета в "скоростной форме" [11]. Использовали переменный шаг по времени. Его значения изменялись в интервале от 0,3 до 2,5 фс. Термостатирование моделируемой системы не применялось. Неупругие потери энергии иона при его взаимодействии с кластером не учитывали.

Схема модельного эксперимента представлена на рис. 1. Угол  $\Theta$  отсчитывался от положительного направления оси  $x$ , совпадающего с направлением движения иона до его взаимодействия с кластером.

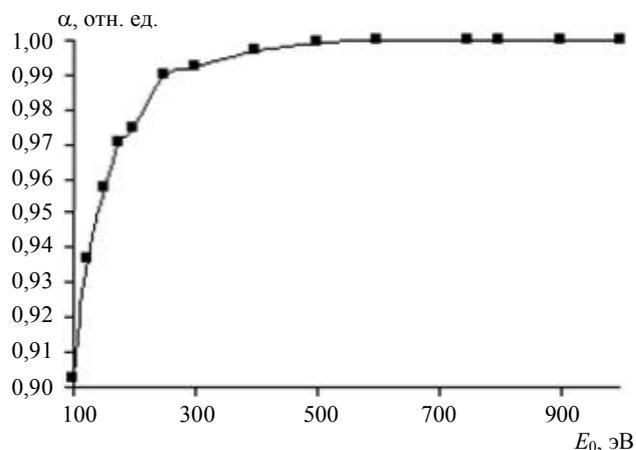


**Рис. 1. Схема модельного эксперимента:**  
1 — ион; 2 — кластер; 3 — рассеянные ионы или расплывшиеся атомы кластера;  $V_0$  — скорость иона;  
 $R_0$  — исходное расстояние ион—кластер

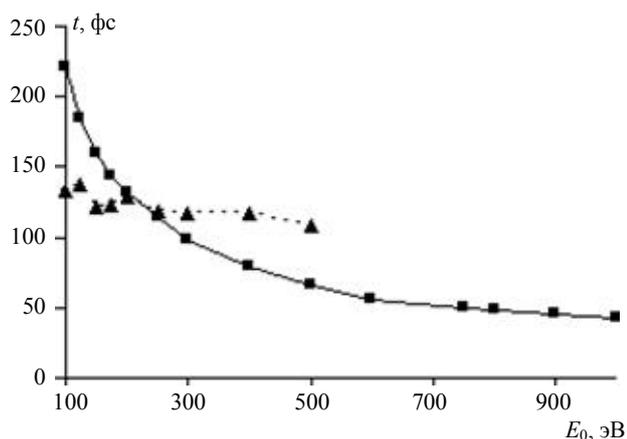
При моделировании рассчитывали коэффициент прохождения, время взаимодействия, энергетическое и угловое распределения отраженных/прошедших и конденсированных частиц. Вышеуказанные параметры усреднялись после рассмотрения 10 000 актов взаимодействия ион—кластер при различных исходных конфигурациях нанокластеров титана. При каждом взаимодействии исходный нанокластер поворачивался вокруг координатных осей на углы, выбираемые случайным образом. Ион присоединялся к кластеру, если его кинетическая энергия была меньше потенциальной энергии связи (отрицательной) с атомами кластера, а также если он не покинул окружение атомов кластера в течение 10 000 временных шагов молекулярно-динамического моделирования. Ион считался отраженным от кластера или прошедшим сквозь него, если расстояние до ближайшего атома кластера будет превосходить  $10 \text{ \AA}$  и скорость направлена от центра масс кластера.

### Результаты и их обсуждение

На рис. 2 и 3 представлены зависимости коэффициента прохождения ионов  $\alpha$  и времени их взаимодействия с кластером от энергии бомбардирующих частиц  $E_0$ . Видно, что повышение энергии ионов приводит к увеличению суммарного вклада отразившихся и прошедших через нанокластер частиц (см. рис. 2) и уменьшению времени их взаимодействия с атомами кластера (см. рис. 3). При этом наблюдается монотонное возрастание относительной энергии отразившихся ионов от  $0,41 E/E_0$  при  $E_0 = 100 \text{ эВ}$  до  $0,98 E/E_0$  при  $E_0 = 1 \text{ кэВ}$  ( $E_0$  — первоначальная энергия ионов,  $E$  — конечная энергия ионов).

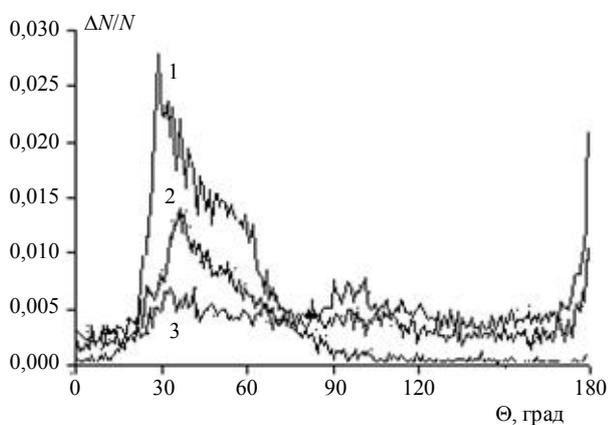


**Рис. 2. Зависимость коэффициента прохождения  $\alpha$  ионов через кластер от их начальной энергии  $E_0$**



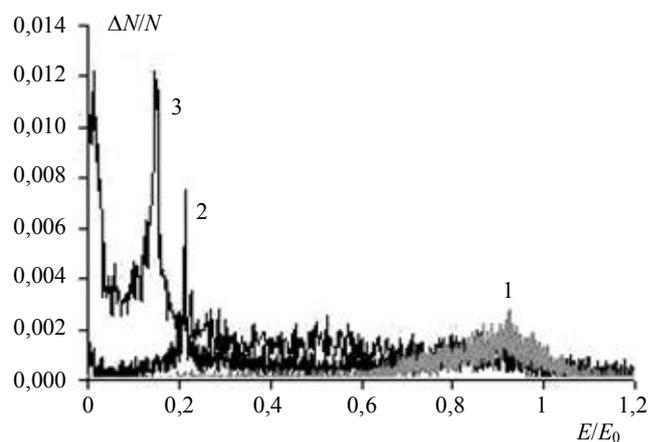
**Рис. 3. Зависимость времени  $t$  взаимодействия ионов с кластером от их начальной энергии  $E_0$ :**  
 ■ — прошедшие (в том числе отраженные) ионы;  
 ▲ — конденсированные ионы

Такое поведение энергии рассеянных ионов обусловлено меньшим количеством упругих соударений с атомами кластера и снижением времени взаимодействия. При повышении энергии бомбардирующих частиц более 500 эВ не отмечается появление конденсированных на кластере ионов. Максимальная передача энергии от иона осуществляется ближайшим к нему и центральному атомам кластера. Это справедливо как в случае прохождения (отражения) иона, так и при его конденсации. При увеличении кинетической энергии бомбардирующих частиц в случае их присоединения к кластеру начинают затрагиваться и более удаленные атомы кластера (относительно исходного положения иона). Для пролетающих сквозь кластер и отраженных от него ионов кинетическая энергия атомов кластера (кроме центрального) существенно уменьшается. Кроме того, по мере повышения энергии бомбардирующих частиц от 100 до 1000 эВ наблюдается уменьшение доли обратнорассеянных ионов ( $\Theta > 90^\circ$ ) от 40 до 5 %, соответственно (рис. 4).



**Рис. 4. Относительное распределение ионов  $\Delta N/N$  по углам вылета  $\Theta$  после их взаимодействия с кластером:**  
 1 —  $E_0 = 500$  эВ; 2 —  $E_0 = 250$  эВ; 3 —  $E_0 = 100$  эВ

На рис. 5 представлено распределение числа ионов по энергиям после их взаимодействия с кластером. В энергетическом спектре частиц условно можно выделить три зоны: 1) от 0 до 0,10  $E/E_0$ ; 2) от 0,10 до 0,25  $E/E_0$ ; 3) от 0,25  $E/E_0$  и выше. Они соответствуют различным вкладам в результирующее распределение по энергиям частиц, конденсированных на кластере, отразившихся и прошедших сквозь нанокластер ионов.



**Рис. 5. Относительное распределение ионов  $\Delta N/N$  по энергиям  $E/E_0$  после их взаимодействия с кластером.**  
 (Номера кривых соответствуют рис. 4)

Первая зона представлена суммой всех вышеуказанных частиц, распределение которых по направлению (углам  $\Theta$ ) движения близко к равномерному. Доля ионов (при 100 эВ), соответствующих рассматриваемой области, составляет порядка 20 % от всех рассматриваемых в модельном эксперименте ионов.

Вторая и третья зоны обусловлены лишь отраженными от поверхности кластера ионами либо прошедшими сквозь него. Для второй области (доля порядка 30 % при 100 эВ) характерно наличие ярко выраженного максимума в энергетическом распределении рассеянных ионов. Его положение составляет около 0,15  $E/E_0$ . Появление этого максимума обусловлено отражением ионов от кластера на углы свыше  $160^\circ$  (отражение назад), причем в основном за счет взаимодействия иона с центральным атомом кластера. Третья энергетическая область (доля порядка 50 % при 100 эВ) обуславливает появление ионов с максимумами в угловом распределении при  $\Theta$ , равными  $40^\circ$  и  $100^\circ$ .

По мере повышения энергии бомбардирующих кластер частиц в третьей зоне отмечается появление второго энергетического максимума. При энергии падающего иона равной 175 эВ его положение составляет около 0,54  $E/E_0$  и постепенно увеличивается до 0,99 ( $E_0 = 1$  кэВ). Ионы, соответствующие данному энергетическому максимуму после взаимодействия с кластером, имеют направ-

ление скорости, составляющее угол порядка  $40^\circ$  с первоначальным направлением движения иона. Первый энергетический максимум постепенно смещается от значений  $E/E_0 = 0,15$  ( $E_0 = 100$  эВ) до  $E/E_0 = 0,23$  ( $E_0 = 500$  эВ). При этом уменьшается доля ионов, обладающих данной энергией (от 26 до 8 % при 500 эВ). При энергии бомбардирующих ионов свыше 500 эВ он не выделяется. По мере увеличения энергии также отмечается снижение вклада первой и второй зон в результирующий энергетический спектр ионов.

### Выводы

По результатам компьютерного моделирования процесса взаимодействия ионов Ti с нанокластерами титана можно сделать следующие выводы.

1. Повышение энергии бомбардирующих кластер частиц сопровождается увеличением коэффициента прохождения (отражения) ионов с одновременным уменьшением времени взаимодействия. Наблюдается возрастание доли и относительной энергии отразившихся ионов.

2. В распределении ионов по энергиям выделяются три зоны: 1) от 0 до  $0,10 E/E_0$ ; 2) от  $0,10$  до  $0,25 E/E_0$ ; 3) от  $0,25 E/E_0$  и выше. Они соответствуют различным вкладам в результирующие распределения по энергиям и направлениям движения ионов, конденсированных на кластере, отразившихся и прошедших сквозь него атомных частиц. Рост энергии ионов приводит к уменьшению вклада

да первой и второй областей в результирующий энергетический спектр.

3. Во второй и третьей энергетических зонах выделяются максимумы распределения ионов по энергиям, которые соответствуют различным углам распространения ионов после их взаимодействия с кластером. Наибольшие значения высоты первого максимума (вторая зона) постепенно уменьшаются с ростом энергии ионов и при  $E > 500$  эВ его появление не отмечается. Второй максимум (третья зона) ведет себя наоборот.

### Литература

1. Смирнов Б. М. // УФН. 2003. Т. 173. № 6. С. 609.
2. Handbook of metal physics. Metallic nanoparticles. — Amsterdam: Elsevier, 2009.
3. Капитанов П. В., Смирнов Б. М., Хиндлер Р. // УФН. 2007. Т. 177. № 5. С. 473.
4. Кудинов В. В., Иванов В. М. Нанесение плазмой тугоплавких покрытий. — М.: Машиностроение, 1981.
5. Панькин Н. А., Смоланов Н. А. // Прикладная физика. 2009. № 3. С. 99.
6. Панькин Н. А., Смоланов Н. А. // Поверхность. 2009. № 6. С. 102.
7. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. — New York: Oxford University Press, 1987.
8. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. — М.: Наука, 1990.
9. Girifalco L. A., Weizer V. G. // Phys. Rev. 1959. V. 114. No. 3. P. 687.
10. Баранов М. А., Дубов Е. А., Дятлова И. В., Черных Е. В. // ФТТ. 2004. Т. 46. Вып. 2. С. 212.
11. Verlet L // Phys. Rev. 1967. V. 159. No. 1. P. 98.

## Molecular-dynamic simulation of ion bombardment with nanoclusters with pair interatomic interaction

N. A. Pan'kin, N. A. Smolanov

N. P. Ogarev Mordovian State University, 68 Bolshevistskaya str., Saransk, 430005, Russia

E-mail: panjkinna@yandex.ru

*A computer simulation on the base of the molecular dynamics has been made for interacting the titan ions with nanoclusters  $Ti_{13}$ . Energy and angular distributions of the ions are gained as functions of the bombarding particles energy.*

PACS: 02.70.Ns, 07.05.-t, 36.40.-c

*Keywords:* cluster, ionic bombardment, molecular dynamics, simulation.

Bibliography — 11 references.

Received November 20, 2010