

УДК 539.534.9

Угловые распределения атомов молибдена, распылённых с помощью пучка газовых кластерных ионов аргона

А. В. Назаров, В. С. Черныш, Ю. А. Ермаков, А. А. Шемухин

Изучение угловых распределений частиц, распылённых с поверхности твёрдых тел пучком газовых кластерных ионов, имеет большое значение как для прикладных задач, так и для фундаментального понимания механизмов взаимодействия ускоренных кластеров с веществом. В работе представлены результаты моделирования угловых распределений молибдена, распылённого кластерами аргона, при различной энергии методом молекулярной динамики.

PACS: 34.35.+a

Ключевые слова: кластерные ионы, распыление, угловое распределение.

Введение

Взаимодействие ускоренных атомных и молекулярных пучков с поверхностью изучается уже на протяжении более столетия. Этот интерес обусловлен огромной ролью, которую процессы, сопровождающие взаимодействие ионов с веществом, играют в современной науке и технологии. Ионная имплантация и распыление частиц под действием ионного облучения стали неотъемлемой частью микроэлектронной промышленности. Большие успехи достигнуты в области применения ионных пучков для диагностики состава и структуры материалов и т.д.

Развитие новой области в ионно-пучковых технологиях, а именно, пучков кластерных ионов, началось около четверти века назад. Кластер представляет собой ансамбль, содержащий от нескольких единиц до десятков тысяч атомов и молекул. Промышленное применение пучков кластерных ионов активно не рассматривалось до тех пор, пока в начале 2000-х годов не было представлено

первое соответствующее коммерческое оборудование. В данный момент уже проводится достаточно большое количество исследований как в области взаимодействия ускоренных кластеров с веществом, так и в области усовершенствования оборудования для данной технологии.

Изучение угловых распределений атомов, распылённых газовыми кластерными ионами, имеет большое значение как для понимания фундаментальных механизмов взаимодействия кластера с поверхностью твёрдого тела, так и для ряда практических приложений, таких как, например, сглаживание поверхностей. Угловые распределения атомов, распылённых пучком газовых кластерных ионов при нормальном падении, для большинства мишеней (таких как Cu, Ag, Si и т.п.) носят так называемый «латеральный» характер [1, 2]. Однако в недавних работах было экспериментально показано, что для ряда материалов, например, для W и Mo, угловые распределения имеют максимум в направлении нормали к поверхности [3].

В данной работе изучается зависимость угловых распределений молибдена, распылённого кластерами аргона, от энергии кластеров с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики.

Моделирование

Кластер, как уже сказано, представляет собой ансамбль, содержащий от нескольких единиц до десятков тысяч атомов и молекул. В газовых

Назаров Антон Викторович, младший научный сотрудник.
Черныш Владимир Савельевич, зав. лабораторий.
Ермаков Юрий Анварович, старший научный сотрудник.
Шемухин Андрей Александрович, старший научный сотрудник.
МГУ им. М. В. Ломоносова.
Научно-исследовательский институт ядерной физики
им. Д. В. Скобельцына (НИИЯФ МГУ).
Россия, 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, 1, строение 2.
Тел. +7 (495) 393-37-70. E-mail: av.nazarov@physics.msu.ru

Статья поступила в редакцию 1 декабря 2016 г.

© Назаров А. В., Черныш В. С., Ермаков Ю. А., Шемухин А. А., 2016

кластерах атомы связаны между собой силами Ван-дер-Ваальса. Для, например, аргона энергия связи составляет порядка 80 мэВ на атом. При попадании такого ускоренного кластерного иона, имеющего энергию в несколько десятков кэВ и состоящего из нескольких тысяч атомов, в поверхность образца в нем будут происходить процессы, существенно отличающиеся от взаимодействия иона-мономера с твёрдым телом. При ударе кластер распадается, и его энергия случайным образом распределяется между всеми атомами, составляющими этот кластер. Энергия каждого атома при этом в среднем составляет порядка 10 эВ. Отдельные атомы с такой энергией не могут проникать глубоко внутрь мишени, т.е. вся энергия выделяется в нескольких атомных слоях вблизи поверхности. Было показано [4], что кластер локально создаёт давление порядка 10^{10} Па и температуру порядка 10^5 К на время в несколько пикосекунд в небольшой области соударения с мишенью.

В данной работе проводилось моделирование взаимодействия кластеров с твердотельной мишенью методом молекулярной динамики. Этот метод заключается в численном интегрировании классических уравнений движения каждого из атомов системы в потенциале всех остальных атомов системы. Этот метод требует довольно больших вычислительных мощностей, и такие расчёты могут занимать значительное время. Однако для процессов, в которых одновременно большое количество атомов кластера взаимодействует с большим количеством атомов мишени, этот метод подходит гораздо лучше, чем более простой метод бинарных столкновений, широко используемый для моделирования взаимодействия единичных ускоренных атомов с твёрдыми телами, на основе которого работает такая популярная программа, как TRIM [5].

Проведено моделирование взаимодействия кластеров Ag_{200} и Ag_{400} с энергией 10 и 20 кэВ с монокристаллом Мо при комнатной температуре. Направление движения налетающего кластера совпадает с нормалью к поверхности мишени, которая представляет собой плоскость (100) кристалла Мо. Моделирование производилось с помощью пакета PARCAS [6—8]. Для взаимодействия между атомами Ag использовался потенциал Леннарда-Джонса, для Мо — потенциал модели погруженного атома (EAM) [9, 10], для взаимодействия атомов Ag с атомами Мо — потенциал, рассчитанный с помощью теории функционала плотности (DFT) [11]. Размер области моделирования составлял $48 \times 48 \times 48$ элементарных ячеек

Мо, по осям x и y использовались периодические граничные условия.

Для получения статистически достоверных результатов для каждого размера кластеров и энергии было проведено от 500 до 700 расчётов. Каждое из соударений кластера с поверхностью смоделировано в течение 30 пс, этого времени достаточно для того, чтобы прошли все процессы переосаждения атомов на поверхности. Каждый новый расчёт производился с идеальной кристаллической решёткой мишени, т.е. эволюция поверхности в процессе бомбардировки пучков кластерных ионов не учитывалась.

Для того, чтобы корректно сравнивать результаты моделирования с экспериментальными данными, необходимо учитывать особенности методики измерения угловых распределений расплывённых атомов. Чаще всего в таких экспериментах используется коллекторный метод, схема которого приведена на рисунке (рис. 1) [1, 3]. Перед образцом располагается полуцилиндрический алюминиевый коллектор с небольшим отверстием, через которое пролетает пучок ускоренных газовых кластерных ионов. Атомы мишени, расплывённые этим пучком, осаждаются на коллектор, после чего толщина осаждённого слоя в различных точках коллектора измеряется методом спектрометрии резерфордовского обратного рассеяния [12, 13].

Работа по моделированию выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М. В. Ломоносова [14].

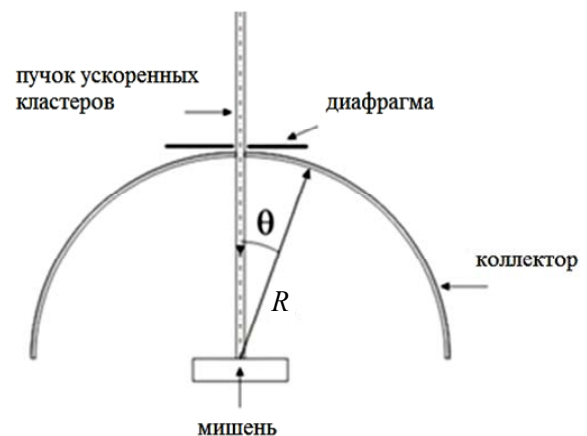


Рис. 1. Схема эксперимента по измерению угловых распределений расплывённых атомов коллекторным методом.

Результаты и обсуждение

На рис. 2 представлены полученные угловые распределения для кластеров Ag_{200} с энергией 10 и 20 кэВ. Угол отсчитывается от нормали к поверх-

ности мишени. Для построения угловых распределений определялось направление скорости расплывшихся частиц. Расчёты показали, что большое количество частиц вылетает с поверхности мишени в виде димеров, тримеров и больших кластеров, которые при движении могут вращаться вокруг своего центра масс. Для таких частиц бралась в расчёт скорость центра масс соответствующего кластера.

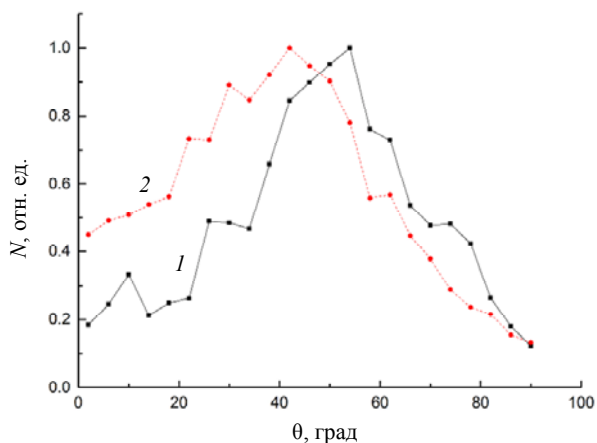


Рис. 2. Угловые распределения количества N атомов Mo , расплывшихся пучком кластеров Ar_{200} с энергией 10 кэВ (кривая 1) и 20 кэВ (кривая 2).

Из рис. 2 видно, что при увеличении энергии кластера распределение смещается в сторону нормали к поверхности мишени, а также уширяется. Аналогичные результаты были получены для кластеров Ar_{400} с энергией 10 и 20 кэВ. Такое поведение угловых распределений расплывшихся атомов связано с большей передачей импульса в латеральном направлении атомам мишени в случае меньшей энергии налетающего кластера. Отметим, что механизм формирования и смещения максимума угловых распределений при различных размерах налетающего кластера подробно обсуждается в работе [11].

Для процессов взаимодействия ускоренных кластеров с поверхностью важна такая величина, как энергия, приходящаяся на один атом кластера. На рис. 3 представлены угловые распределения с энергией 10 и 20 кэВ и размером 200 и 400 атомов соответственно. Средняя энергия, приходящаяся на один атом, в этом случае составляет 50 эВ. Из рисунка видно, что угловые распределения при одинаковой энергии на один атом практически совпадают при больших углах, однако распределение для случая большей энергии и большего размера кластера имеет более высокий выход расплывшихся частиц при малых углах.

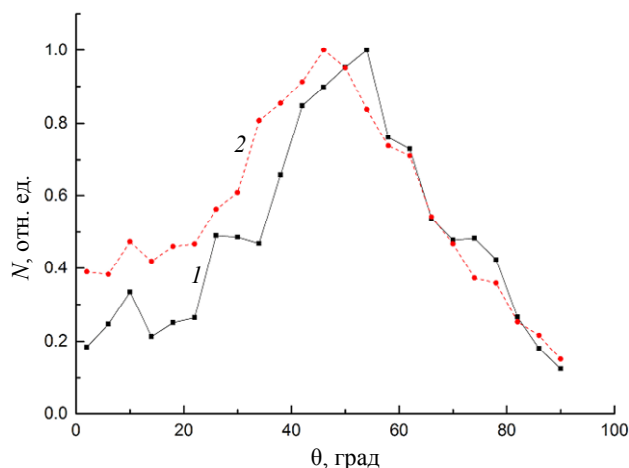


Рис. 3. Угловые распределения количества N атомов Mo , расплывшихся пучком кластеров Ar_{200} с энергией 10 кэВ и Ar_{400} с энергией 20 кэВ.

Заключение

Результаты работы, посвященной моделированию угловых распределений атомов молибдена, расплывшихся кластерами аргона, позволяют сделать следующие основные выводы.

Положение максимума и ширина угловых распределений атомов, расплывшихся пучком газовых кластерных ионов, сильно зависит от полной энергии налетающего кластера. Для кластеров одного размера с увеличением энергии распределение смещается к нормали к поверхности мишени и уширяется.

Для кластеров с одинаковой энергией на атом выход расплывшихся частиц под большими углами практически одинаков, однако для кластеров большего размера и, соответственно, большей суммарной энергией наблюдается больший выход расплывшихся частиц под малыми углами.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение № 14.607.21.0072, проект RFMEFI60714X0072.

ЛИТЕРАТУРА

1. Toyoda N., Kitani H., Hagiwara N., Aoki T., Matsuo J., Yamada I. // Mater. Chem. Phys. 1998. Vol. 54. P. 262.
2. Insepov Z., Yamada I. // Nucl. Instrum. Meth. B. 1995. Vol. 99. P. 248.
3. Chernysh V. S., Ieshkin A. E., Ermakov Yu. A. // Appl. Surf. Sci. 2015. Vol. 326. P. 285.
4. Greer J. A., Fenner D. B., Hautala J., Allen L. P., Di-Filippo V., Toyoda N., Yamada I., Matsuo J., Minami E., Katsumata H. // Surface and Coatings Technology. 2000. Vol. 133–134. P. 273.

5. Ziegler J. F., Biersack J. P., Ziegler M. D. *The Stopping and Range of Ions in Matter* — Lulu Press Co., Morrisville, 2015.
6. Nordlund K., Ghaly M., Averbach R. S., Caturla M., Diaz de la Rubia T., Tarus J. // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 57. No. 13. P. 7556.
7. Ghaly M., Nordlund K., Averbach R. S. // *Phil. Mag. A*. 1999. Vol. 79. No. 4. P. 795.
8. Nordlund K. // *Comput. Mater. Sci.*, 1995. Vol. 3. P. 448.
9. Salonen E., Järvi T., Nordlund K., Keinonen J. // *J. Phys. Cond. Matt*. 2003. Vol. 15. P. 5845.
10. Nordlund K., Runeberg N., Sundholm D. // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, 1997. Vol. 132. P. 45.
11. Maciazek D., Kanski M., Gaza L., Garrison B. J., Postawa Z. // *J. Vac. Sci. Technol.*, B. 2016. Vol. 34. P. 03H114.
12. Shemukhin A. A., Nazarov A. V., Balakshin Yu. V., Chernysh V. S. // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*. 2015. Vol. 354. P. 274.
13. Шемухин А. А., Черных П. Н., Черныш В. С., Балакшин Ю. В., Назаров А. В. // *Прикладная физика*. 2013. № 5. С. 59.
14. Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin V., Opanasenko V. "Lomonosov": Supercomputing at Moscow State University. In *Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale* (Chapman & Hall/CRC Computational Science), pp. 283–307. — Boca Raton, USA, CRC Press, 2013.

The energy dependence of the angular distributions of Mo atoms, sputtered by the Ar gas cluster ion beam

A. V. Nazarov, V. S. Chernysh, Yu. A. Ermakov, and A. A. Shemukhin

M. V. Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics (SINP MSU)
1(2) Leninskie gory, Moscow, 119991, Russia
E-mail: av.nazarov@physics.msu.ru

Received December 1, 2016

The study of the angular distributions of the atoms, sputtered by the gas cluster ion beams, are important both for the practical applications and for the fundamental understanding of the cluster-solid interactions. The results of the molecular dynamics simulations of the Mo angular distributions, sputtered by the Ar clusters, are presented in the paper.

PACS: 34.35.+a

Keywords: gas cluster ion beam, cluster ions, sputtering, angular distribution.

REFERENCES

1. N. Toyoda, H. Kitani, N. Hagiwara, T. Aoki, J. Matsuo, and I. Yamada, *Mater. Chem. Phys.*, **54**, 262 (1998).
2. Z. Insepov and I. Yamada, *Nucl. Instrum. Meth. B*, **99**, 248 (1995).
3. V. S. Chernysh, A. E. Ieshkin, and Yu. A. Ermakov, *Appl. Surf. Sci.* **326**, 285 (2015).
4. J. A. Greer, D. B. Fenner, J. Hautala, L. P. Allen, V. DiFilippo, N. Toyoda, I. Yamada, J. Matsuo, E. Minami, and H. Katsumata, *Surface and Coatings Technology* **133–134**, 273 (2000).
5. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and M. D. Ziegler, *The Stopping and Range of Ions in Matter* (Lulu Press Co., Morrisville, 2015).
6. K. Nordlund, M. Ghaly, R. S. Averbach, M. Caturla, T. Diaz de la Rubia, and J. Tarus, *Phys. Rev. B*, **57**, 7556 (1998).
7. M. Ghaly, K. Nordlund, and R. S. Averbach. *Phil. Mag. A*, **79**, 795 (1999).
8. K. Nordlund *Comput. Mater. Sci.*, **3**, 448 (1995).
9. E. Salonen, T. Järvi, K. Nordlund, and J. Keinonen, *J. Phys. Cond. Matt.*, **15**, 5845 (2003).
10. K. Nordlund, N. Runeberg, and D. Sundholm, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **132**, 45 (1997).
11. D. Maciazek, M. Kanski, L. Gaza, B. J. Garrison, and Z. Postawa // *J. Vac. Sci. Technol.*, B **34**, 03H114 (2016).
12. A. A. Shemukhin, A. V. Nazarov, Yu. V. Balakshin, and V. S. Chernysh, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **354**, 274 (2015).
13. A. A. Shemukhin, P. N. Chernykh, V. S. Chernysh, Y. V. Balakshin, and A. V. Nazarov, *Prikl. Fiz.*, No. 5, 59 (2013).
14. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, and V. Opanasenko, "Lomonosov": Supercomputing at Moscow State University. In *Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale* (Chapman & Hall/CRC Computational Science, Boca Raton, USA, CRC Press, 2013), pp. 283–307.