

Молекулярно-динамическое
моделирование распыления
твёрдых поверхностей
частицами аргона


Выполнил: ст. гр. КНТ-822м

Глацких Н.Н.

Руководитель: проф. Корнич Г. В.

Объектом исследования в данной работе выступают процессы бомбардировки поверхностей низкоэнергетическими ионами и последующий за этим процесс распыления поверхности мишени.

Предметом исследования является моделирование процесса бомбардировки поверхностей кристаллов меди и кремния ионами аргона.



Целью работы было построить математическую модель, которая описывает процесс распыления поверхности мишеней меди и кремния в результате бомбардировки ионами аргона.

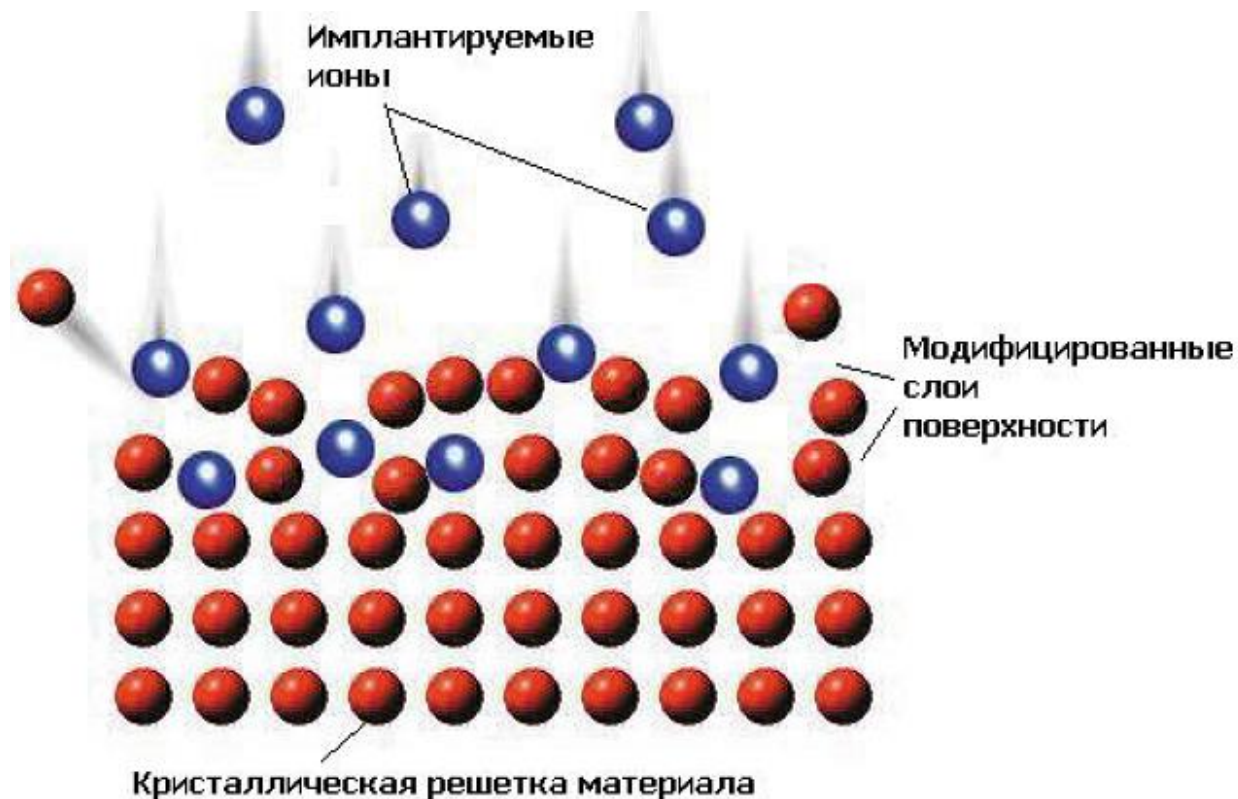
На основе полученной модели было необходимо провести достаточное число экспериментов с целью выявления закономерностей и более детального изучения процесса бомбардировки.



У. Р. Грув
(1811-1896)

Явление распыления при ионной бомбардировке было обнаружено в середине XIX века ученым У. Р. Грувом в процессе наблюдения за катодом в тлеющем заряде. Изначально данное явление считалось нежелательным, поскольку разрушало катод. Однако за последующие 120 лет был найден целый ряд применений данного явления в науке и технике.

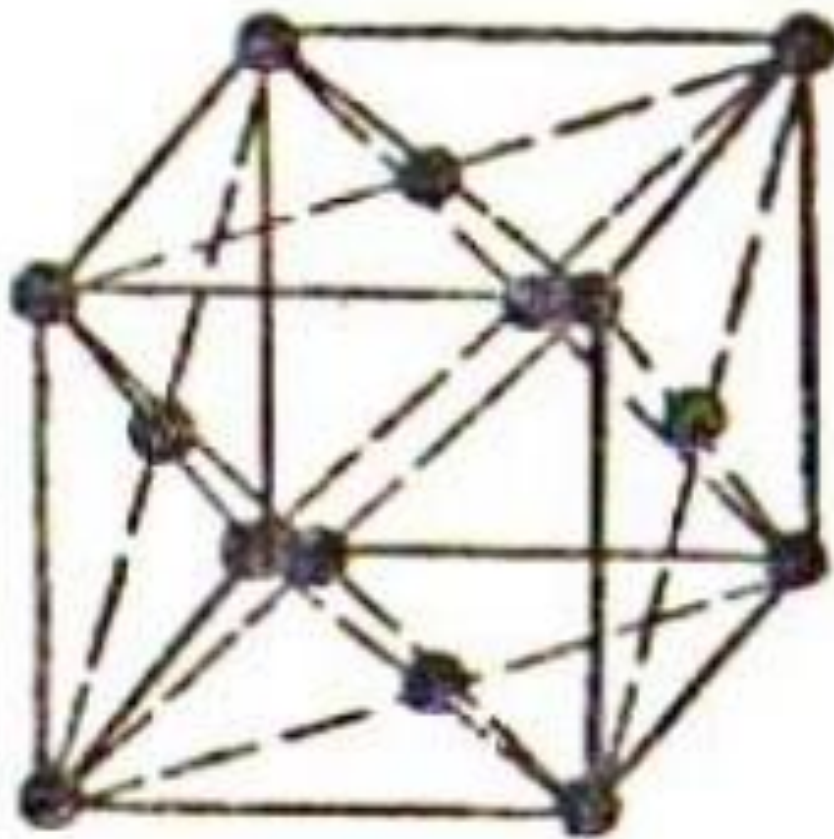
Схематическое изображение процесса распыления



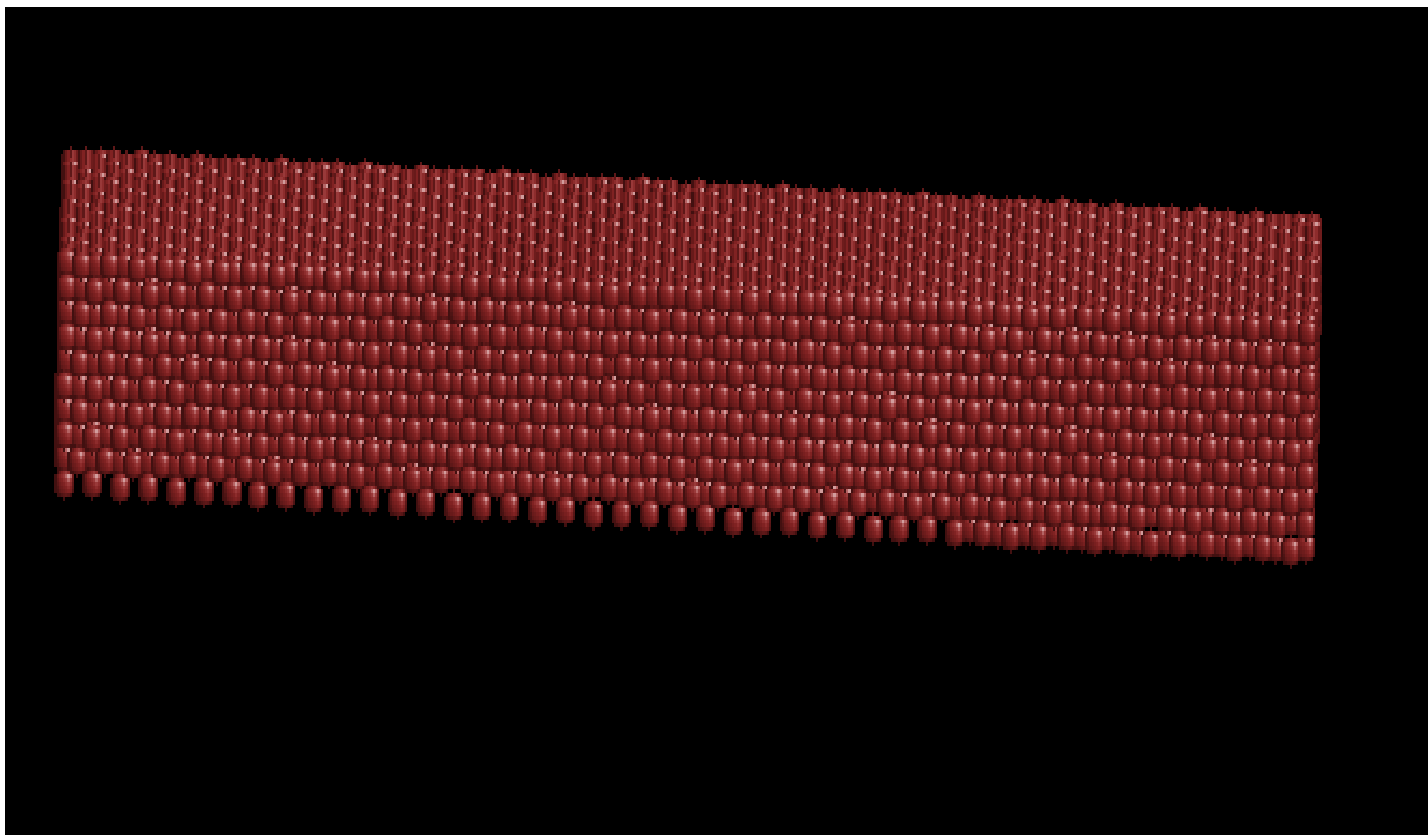
Потенциал Борна-Майера

$$U_{b-m}(r) = A_{b-m}(Z_1 Z_2)^{3/4} e^{-r/a_{b-m}}$$

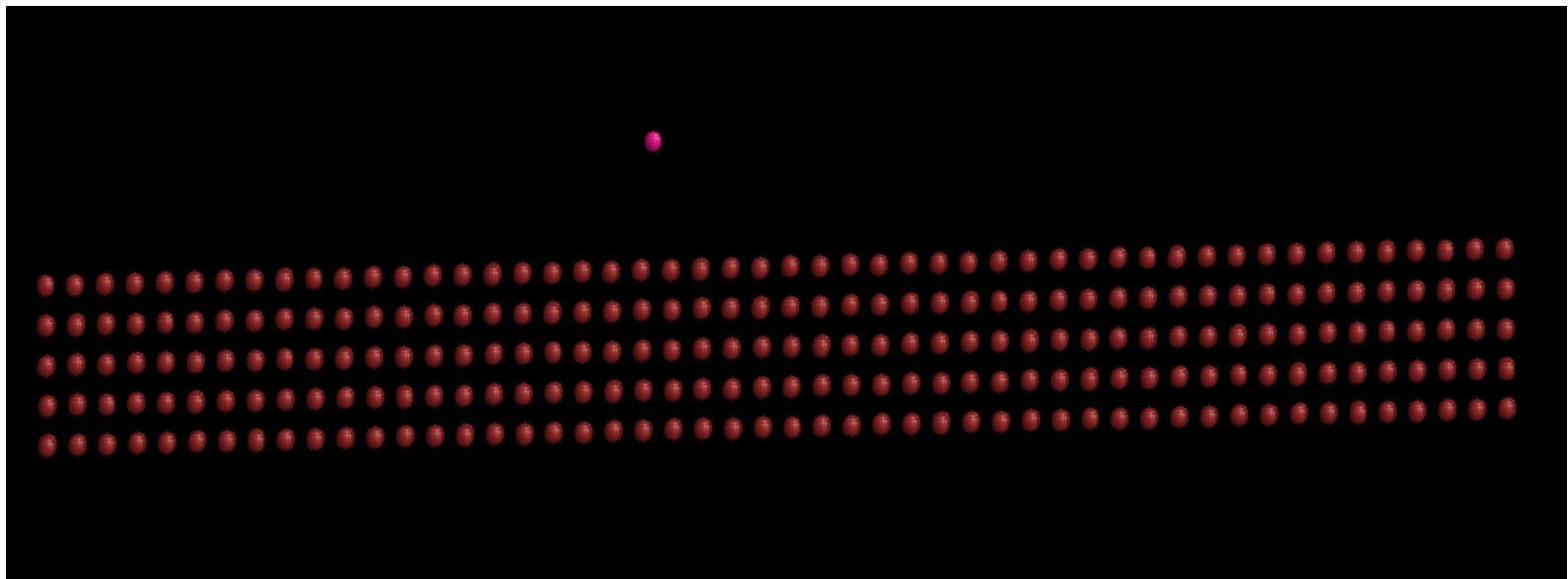
Структура ГЦК-кристалла



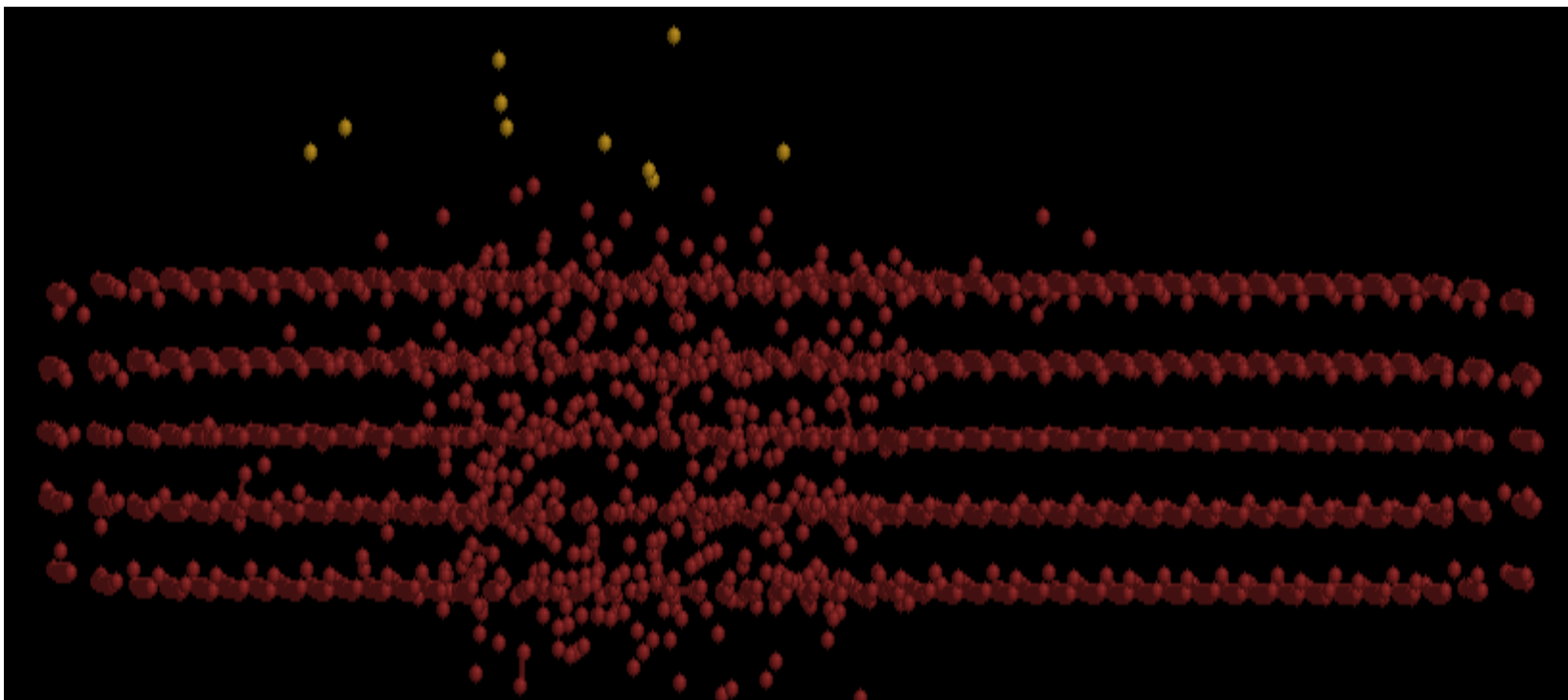
Кристалл меди



Взаимное расположение кристалла
мишени и налетающей частицы в
начальный момент времени



Результат столкновения



Потенциал Терсоффа

$$E = \sum_i E_j = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}), f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij})$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\pi \frac{(r_{ij} - R_{ij})}{(S_{ij} - R_{ij})} \right], R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, r_{ij} > S_{ij} \end{cases}$$

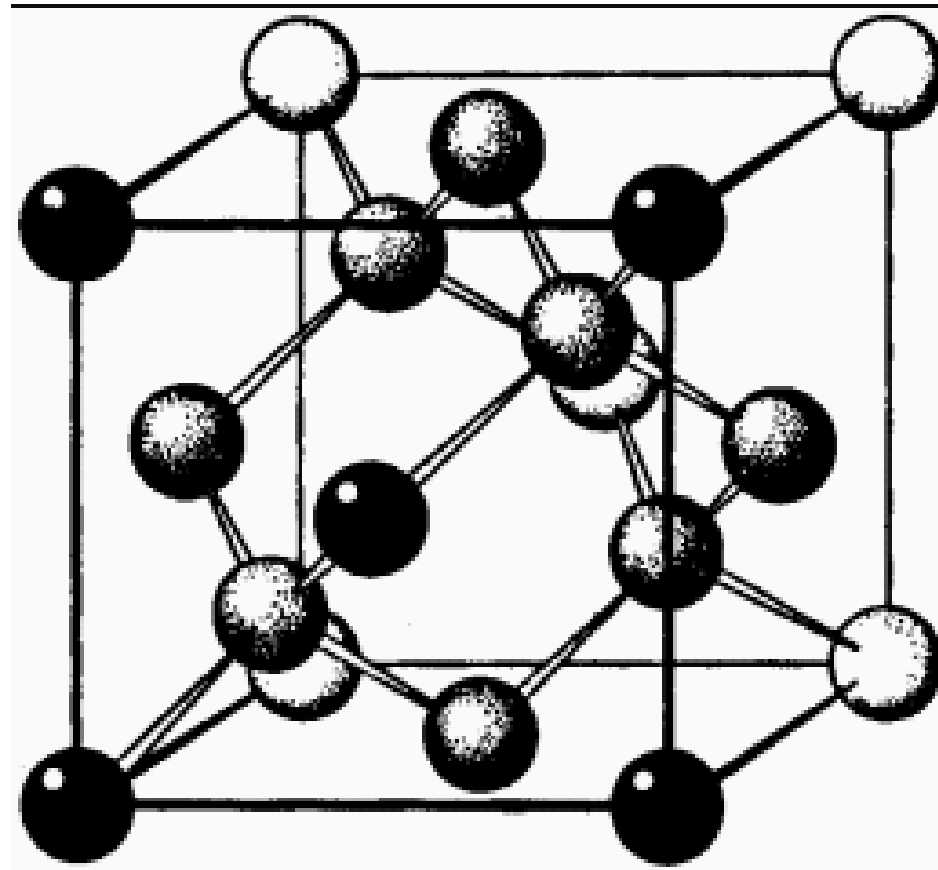
$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_i^{n_i} \zeta_{ij}^{n_j})^{-1/2n_j}$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk})$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{[d_i^2 + (h - \cos \theta_{ijk})^2]}$$

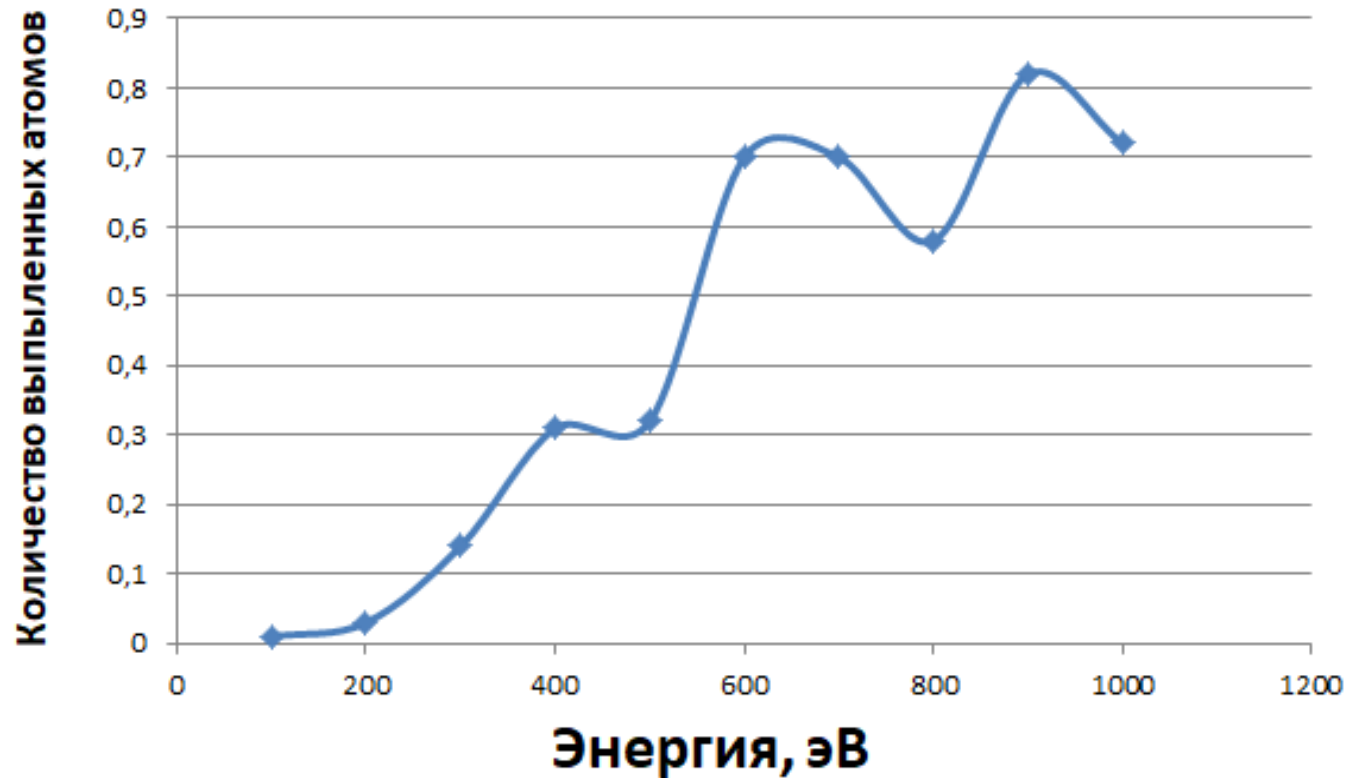
$$\lambda_{ij} = (\lambda_i + \lambda_j)/2, \mu_{ij} = (\mu_i + \mu_j)/2$$

Структура кремния

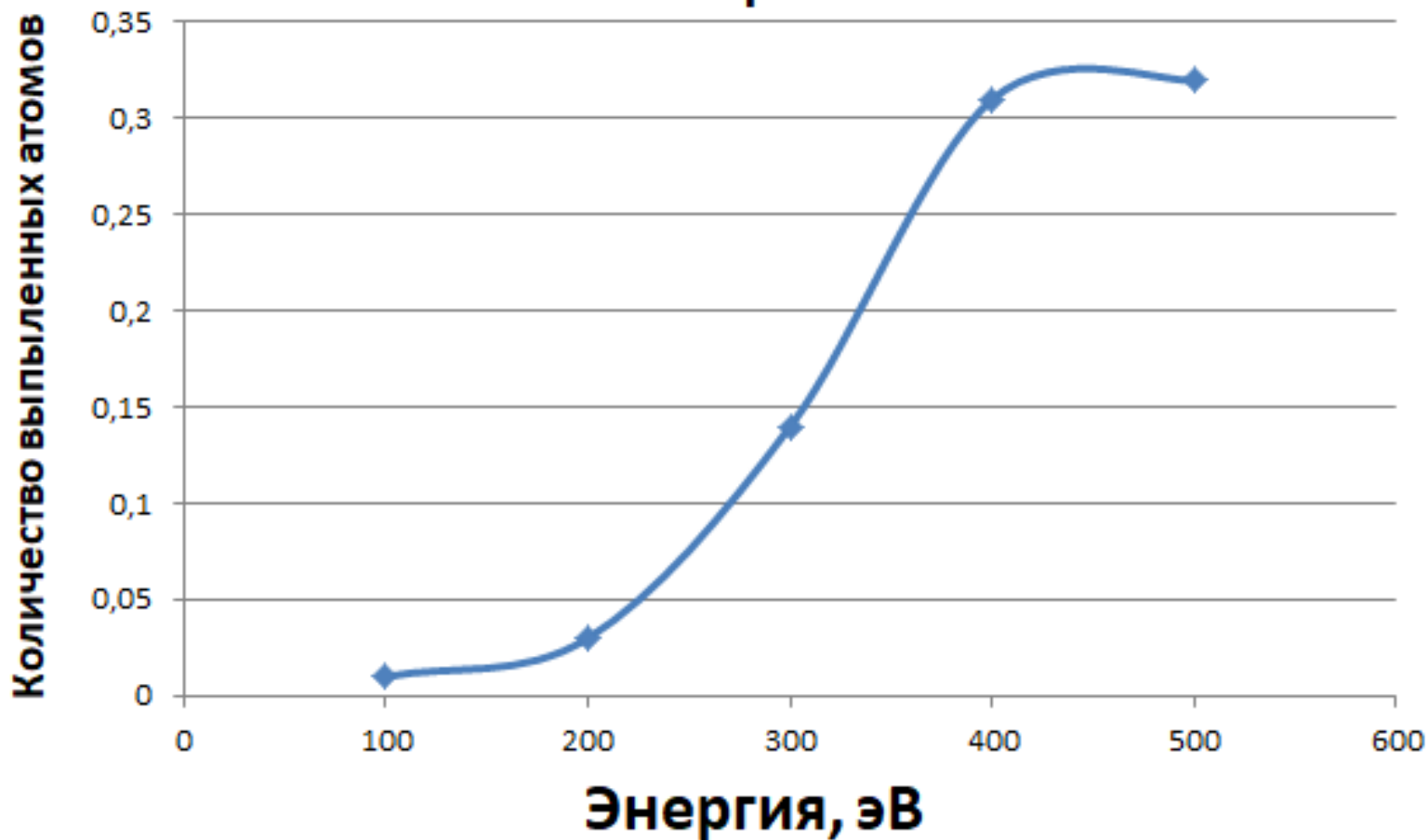


Результаты моделирования

Зависимость коэффициента распыления кристалла кремния от энергии налетающей частицы аргона



Зависимость коэффициента распыления кристалла кремния от энергии налетающей частицы



Выводы

- В процессе выполнения работы на языке C++ была написана программа, способная рассчитывать эрозию поверхности кристалла под воздействием ионной бомбардировки. Также был реализован скрипт в пакете LAMMPS, который также рассчитывает и моделирует аналогичный процесс для кристалла кремния;
- Было проведено по 100 испытаний для каждого значения энергии налетающей частицы;
- Опираясь на результаты предыдущего пункта, был сделан вывод, что зависимость коэффициента распыления от энергии налетающей частицы не является прямопропорциональной, а имеет участки возрастания и спадания.