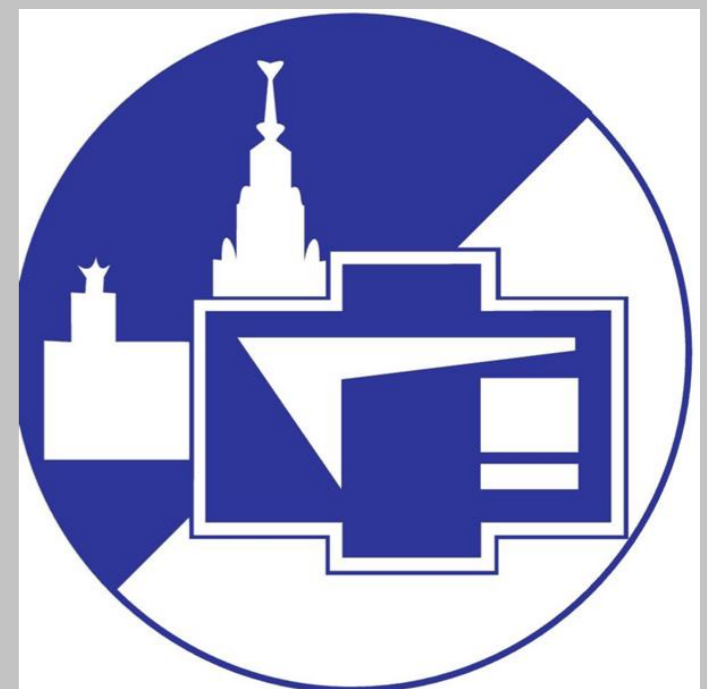




Моделирование распыления сплавов NiPd газовыми кластерными ионами методом молекулярной динамики

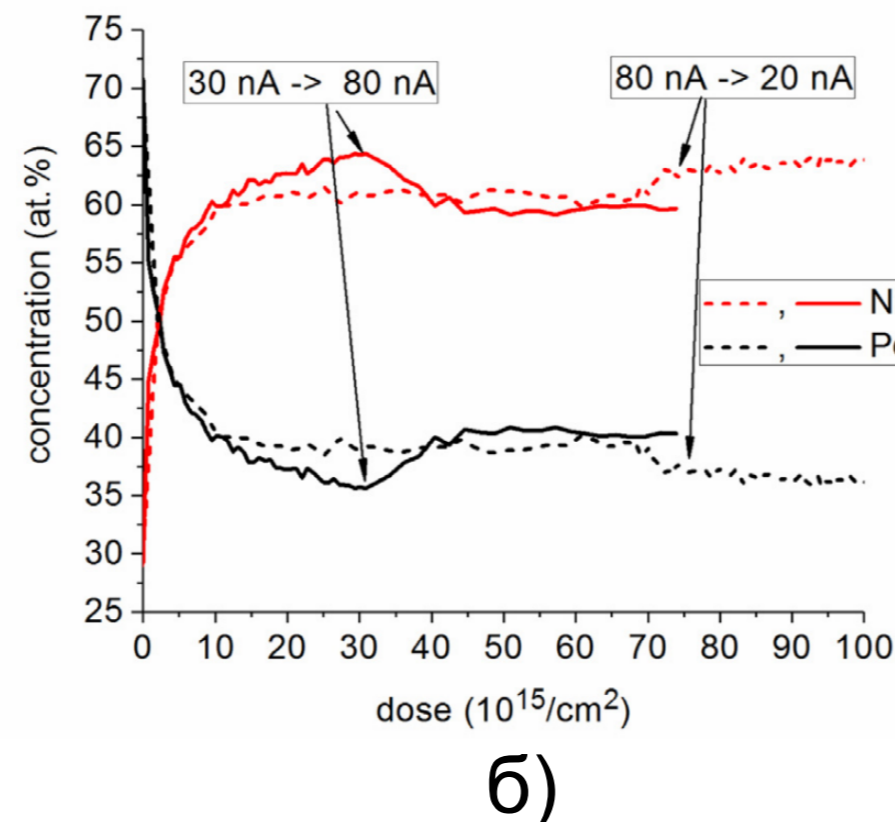
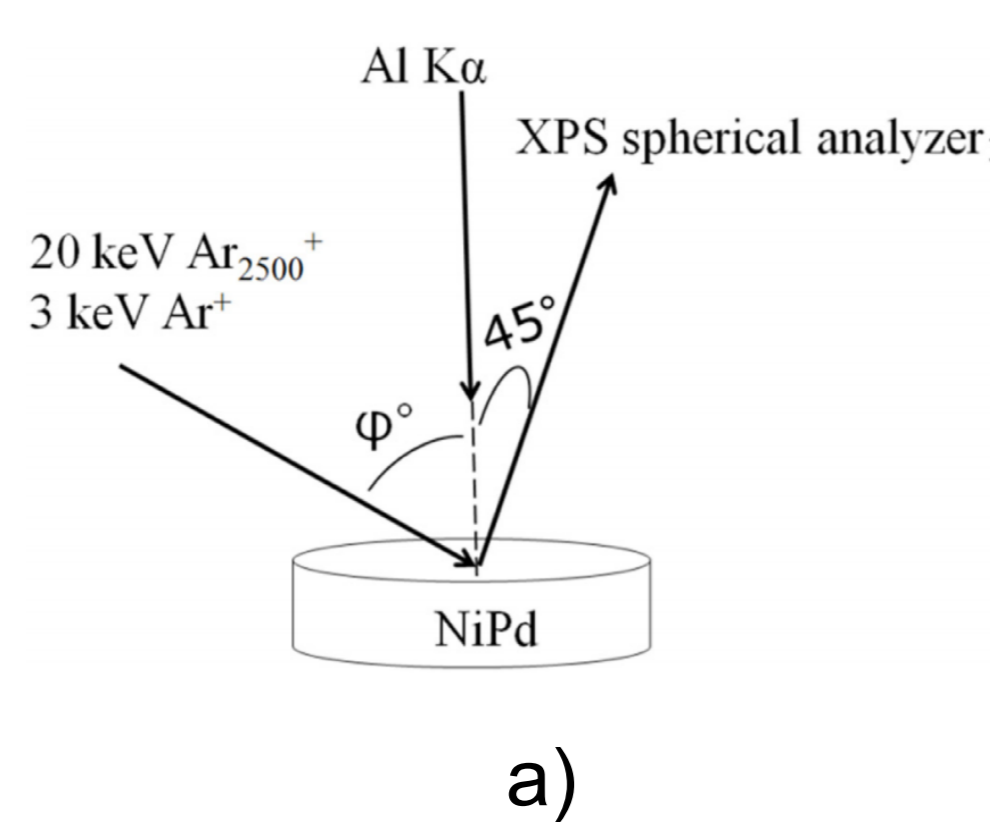


А.Д. Завильгельский¹, А.В. Назаров², В.С. Черныш¹

¹Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²НИИЯФ им. Д.В. Скобелева МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Эксперимент [1]



Моделирование методом молекулярной динамики

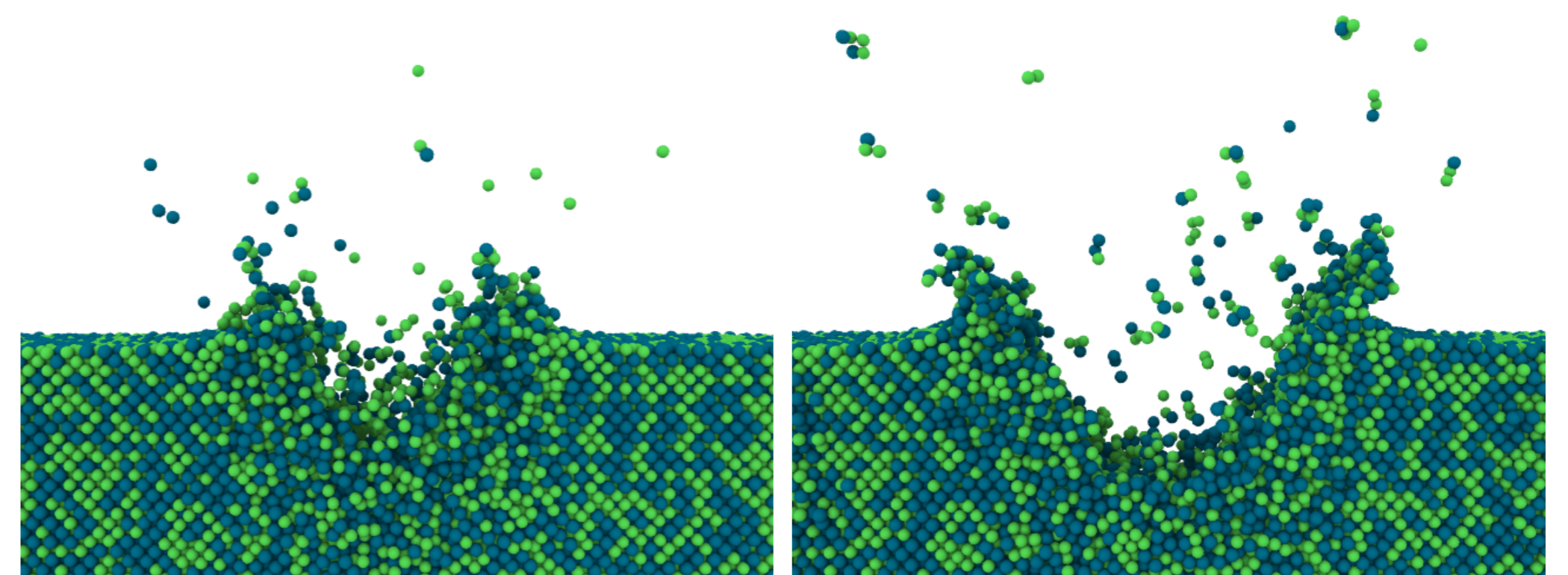


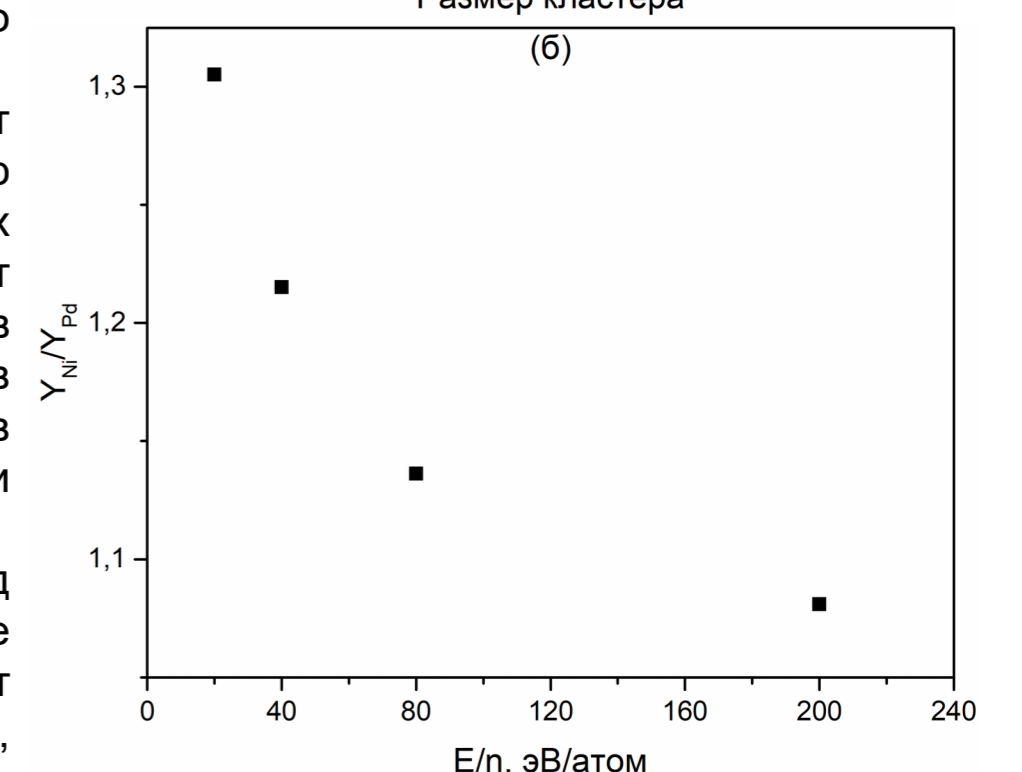
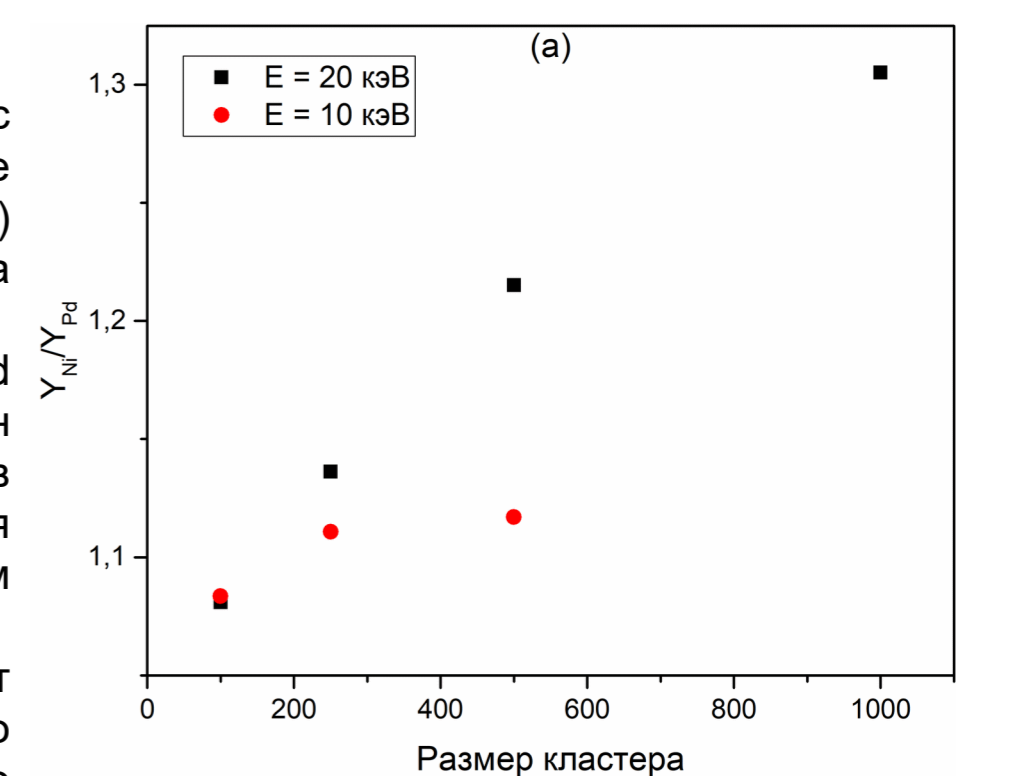
Схема эксперимента (а) и результаты по концентрации компонентов сплава (б)

Кадр из моделирования при t=700 фс (слева) и t=2000 фс (справа)

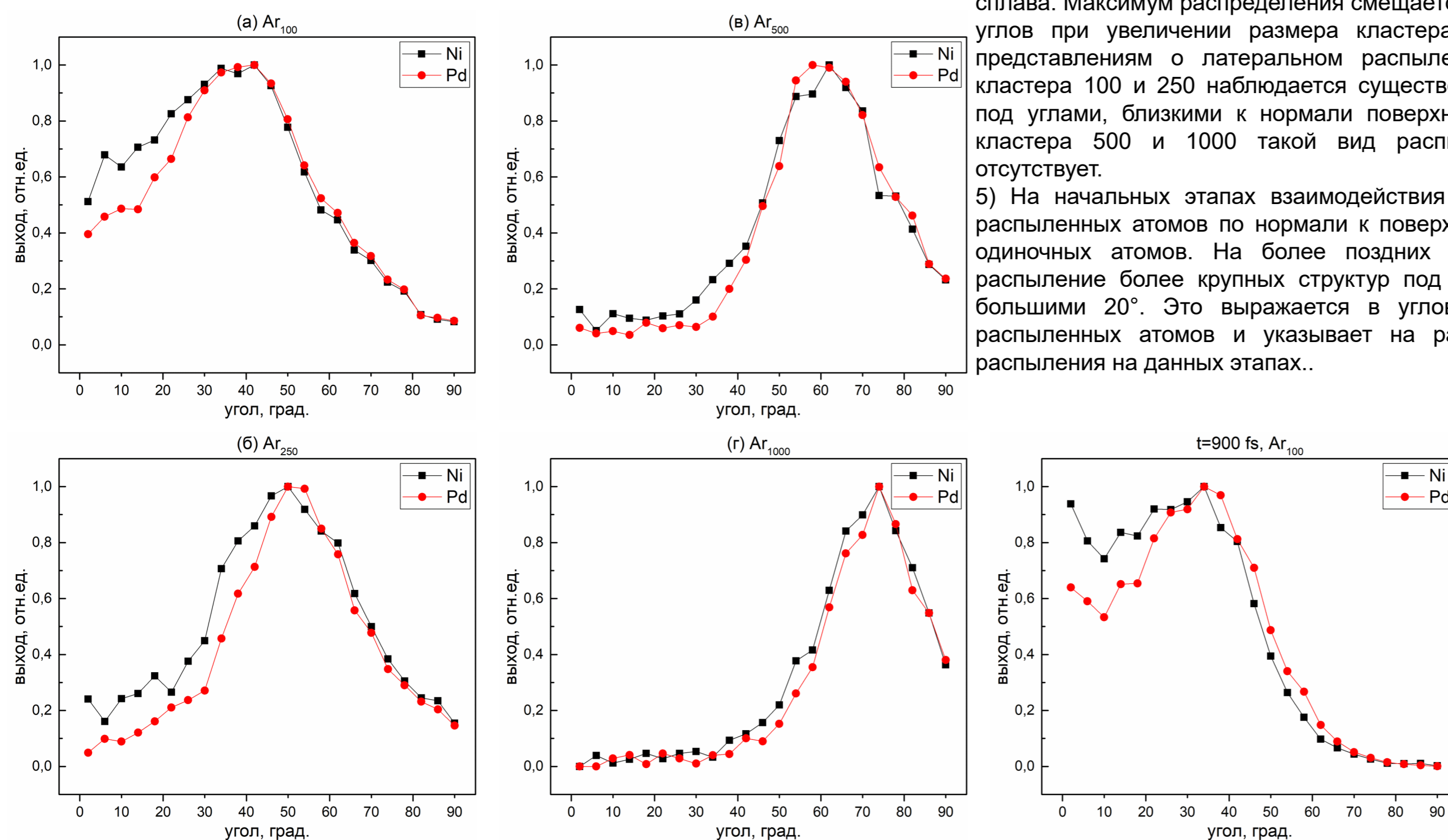
Результаты моделирования

Размер кластера	Энергия кластера, эВ	Количество запусков	Суммарное количество распыленных атомов
100	10000	79	7130
250	10000	150	5714
500	10000	150	997
100	20000	150	56062
250	20000	95	18952
500	20000	145	16664
1000	20000	178	6058

- 1) Отношение коэффициентов распыления Y_{Ni}/Y_{Pd} растет с увеличением размера кластера. Точки, соответствующие небольшим размерам кластера (100, 250, 500) аппроксимируются прямой. Данная зависимость выходит на насыщение при дальнейшем увеличении размера кластера.
- 2) Отношение коэффициентов распыления Y_{Ni}/Y_{Pd} уменьшается с увеличением энергии кластера в расчете на один атом (E/n). Это связано с количеством переданной энергии в мишень и энергией связи атомов Ni и Pd в сплаве. Доля переданной полной энергии в мишень уменьшается с размером кластера.
- 3) Значения энергии связи Ni и Pd в составе отличаются от соответствующих в однокомпонентных материалах. Это оказывает влияние на коэффициенты распыления каждого компонента.
- 4) Форма угловых распределений распыленных атомов зависит от размера кластера, взаимодействующего с поверхностью сплава. Максимум распределения смещается в сторону больших углов при увеличении размера кластера, что соответствует представлениям о латеральном распылении. Для размеров кластера 100 и 250 наблюдается существенный выход атомов под углами, близкими к нормали поверхности. Для размеров кластера 500 и 1000 такой вид распыления практически отсутствует.
- 5) На начальных этапах взаимодействия преобладает выход распыленных атомов по нормали к поверхности и распыление одиночных атомов. На более поздних этапах преобладает распыление более крупных структур под углами от нормали, большими 20° . Это выражается в угловых распределениях распыленных атомов и указывает на различие механизмов распыления на данных этапах.



Зависимость отношения коэффициентов распыления Y_{Ni}/Y_{Pd} от размера кластера (а) и E/n (б).



Угловые распределения распыленных атомов Ni и Pd. Энергия кластера Ar – 20 кэВ.

Количество распыленных атомов Ni и Pd для каждой серии расчетов.

Размер кластера, атомы	Энергия на один атом (E/n), эВ	Атомов Ni распылено в среднем	Атомов Pd распылено в среднем	Отношение коэффициентов распыления Y_{Ni}/Y_{Pd}
100	200	194,14	179,61	1,08
100	100	46,94	43,32	1,08
250	80	106,10	93,39	1,14
250	40	20,05	18,05	1,11
500	40	63,04	51,88	1,22
500	20	3,97	3,55	1,12
1000	20	19,27	14,76	1,31

Контакты



av.nazarov@physics.msu.ru
zavilgelsky.ad15@physics.msu.ru

Литература

1. Ieshkin A. E. et al. Surface topography and composition of NiPd alloys under oblique and normal gas cluster ion beam irradiation // Surface Science. – 2020. – Т. 700. – С. 121637.