

# Исследования Распыления Пленок Льда, Покрывающий Поверхность Au(111)

*У. О. Кутлиев<sup>1</sup>, К. У. Отабаева<sup>2</sup>, А. Ю. Саидова<sup>3</sup>*

**Абстракт:** В настоящей работе приведены результаты моделирования с помощью метода молекулярной динамики процесса распыления пленки, состоящие из шести и восьми слоёв льда, покрытой на поверхности Au(111) при бомбардировке ионами Ag<sup>+</sup> с начальной энергией 300 эВ. При исследовании рассмотрена одна траектория иона, который позволяет изучить механизмы распыления пленок. Определено, что при бомбардировке пленки льда, состоящих из шести слоев, процесс распыления происходит за счет сначала за счет прямого выбивания, а затем линейных каскадов в виде молекул и кластеров. А в случае восьми слоёв процесс распыления происходит за счет линейных каскадов, а затем через некоторое время за счет кулоновского взрыва происходит большой разрыв молекул воды и образуется область на поверхности подложки, которая очищена от молекул воды.

**Ключевые слова:** компьютерная моделирования, распыления, кластеры, ионная бомбардировка, тонкая пленка.

## Введение

Распыления молекул покрывающих металлических поверхностей представляют большой интерес в техническом направлении, так как множество молекул разных веществ образуют пленки на этих поверхностях и образуются разные дефекты, изменяются свойства поверхностей. Поэтому при очищении пленок металлических поверхностей используются разные спектроскопические методы. Один из них является метод масс-спектрометрия вторичных ионов [1-2]. Оно является один из мощнейших способов качественной идентификации веществ, допускающий также и количественное определение. Можно сказать, что масс-спектрометрия - это «взвешивание» молекул, находящихся в мишене. Метод исследования и анализа веществ основан на ионизации атомов и молекул вещества и последующем разделении образующихся ионов в соответствии с их массовым числом  $m/z$  - отношением массы иона к его заряду – в электрическом или магнитном поле. Наряду с экспериментальными методами вторичной ионной масс-спектрометрии также развивается теоретические методы исследования поверхностей. В этом направлении существует хорошо известный метод молекулярной динамики, которая полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. Моделирование молекулярной динамики (МД) позволяет воспроизвести широкий спектр свойств материалов и параметров процесса [3-8]. В этой статье мы используем моделирование МД для изучения распыления поверхности льда, с несколькими слоями, при бомбардировке ионами с энергией 300 эВ, при этом интерес также представляет механизмы распыления пленок льда. Основная цель в этой работе является определить механизмы распыления пленок льда с разными слоями с помощью МД моделирования и установления механизмов распыления пленок, покрывающих металлических поверхностей, а также металлических подложек.

## Метод моделирования и расчёты

В наших расчётах мы использовали метод молекулярной динамики. Один из основных частей в этом методе являются потенциалы взаимодействия, которые связывает всех атомов и бомбардирующей частицы в одной системе. Потенциал взаимодействия между частицами

<sup>1, 2, 3</sup> Ургенчский Государственный университет. Ургенч. Узбекистан



хорошо описано в работе[9]. Нами рассмотрена одна траектория иона аргона, чтобы понять механизмы распыления пленок льда, состоящих из 6 и 8 слоёв, расположенных на поверхности Au(111). Выбор в качестве подложки Au(111) связана с тем, что данный момент существуют потенциалы взаимодействия для этого кристалла, которые при использовании дают хорошую корреляцию с экспериментальными данными. Процесс распыления плёнки льда наблюдается с помощью программ VMD (visual molecular dynamic), который даёт возможность визуально смотреть динамику мишени после ионной бомбардировки[10].

На рис.1. представлена рисунки динамики мишени (состоящих из шести слоёв) при разных временах после столкновения иона  $Ar^+$  с мишенью. На рис.1а представлено мишень до начала бомбардировки. Время, которые используются ниже начинается с этого момента времени. На рис.1б представлено состояния мишени, который с момента столкновения иона  $Ar^+$  прошел 0,71пкс. Видно, что в этом моменте наблюдается распыления малых кластеров молекул воды. Они образуются за счет прямого выбивания(на месте столкновения иона и молекул пленки) пленки льда ионами  $Ar^+$ . То есть падающая частица передает свою энергию мишень и за счет этой энергии молекулы выбиваются, вращаясь двигаются по сторонам. Часть энергии передаются подложки в малом количестве, который приводит к колебанию атомов золота. С течением времени разрушается пленка льда. А на рис.1в приведено состояния мишени после 1,6пкс. Видно, что в месте где ударился ион начинает толщина пленки сильно уменьшается, некоторые молекулы воды вращаясь уходят на край кристалла. На рис.1г приведен состояния мишени после 4,76 пкс. Число молекул, которые двигались по краям кристалла золото увеличивались и кластеры водных молекул продолжают распыляться в основном от этих краев. Изучения распылении пленок льда, состоящих из шести слоёв показала, что начальном времени происходит прямая выбивания молекул, а затем доминирует режим линейных каскадов.

На рис.2. представлена рисунки динамики мишени (состоящих из восьми слоёв) при некоторых временах после бомбардировки ионов  $Ar^+$ . Состояния мишени до бомбардировки иона представлено на рис.2а.

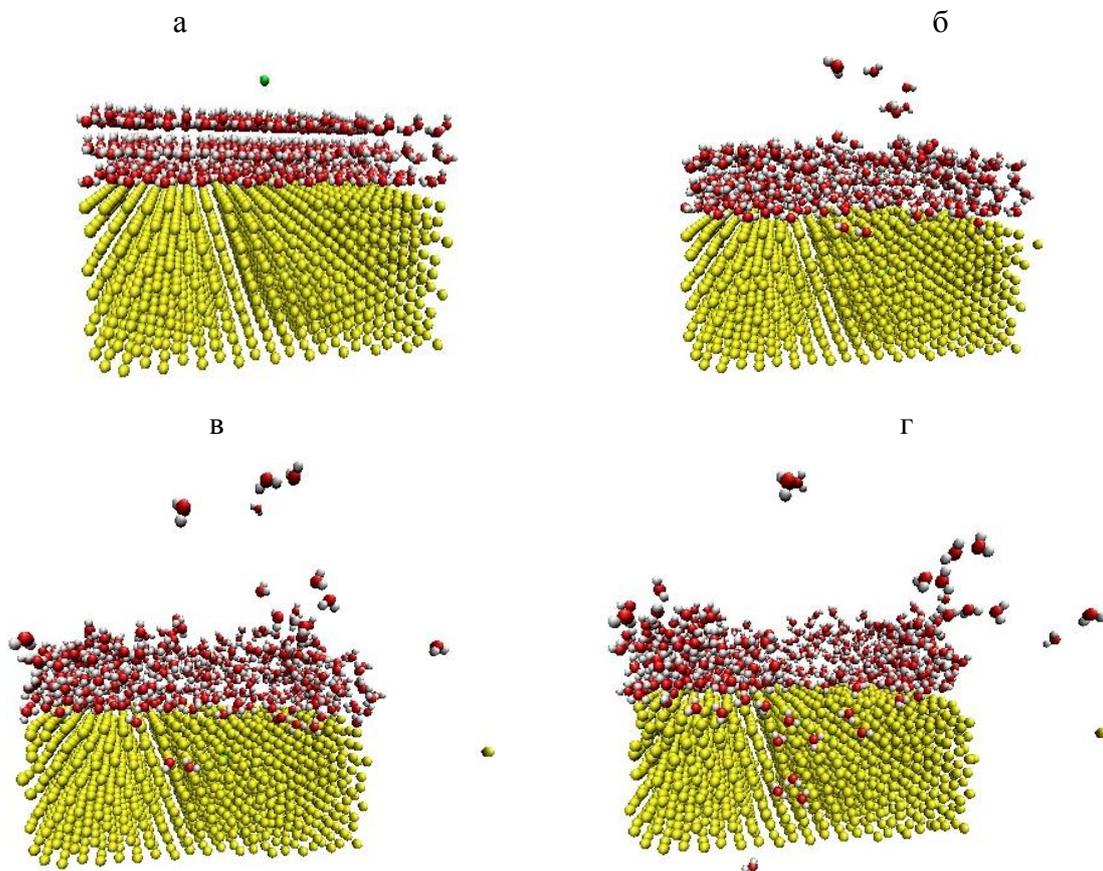


Рис.1. Динамика мишени (шести слоями льда) при  $t=0$ пкс(а),  $t=0.71$ пкс (б),  $t=1.6$ пкс (в) и  $t=4.76$ пкс (г)

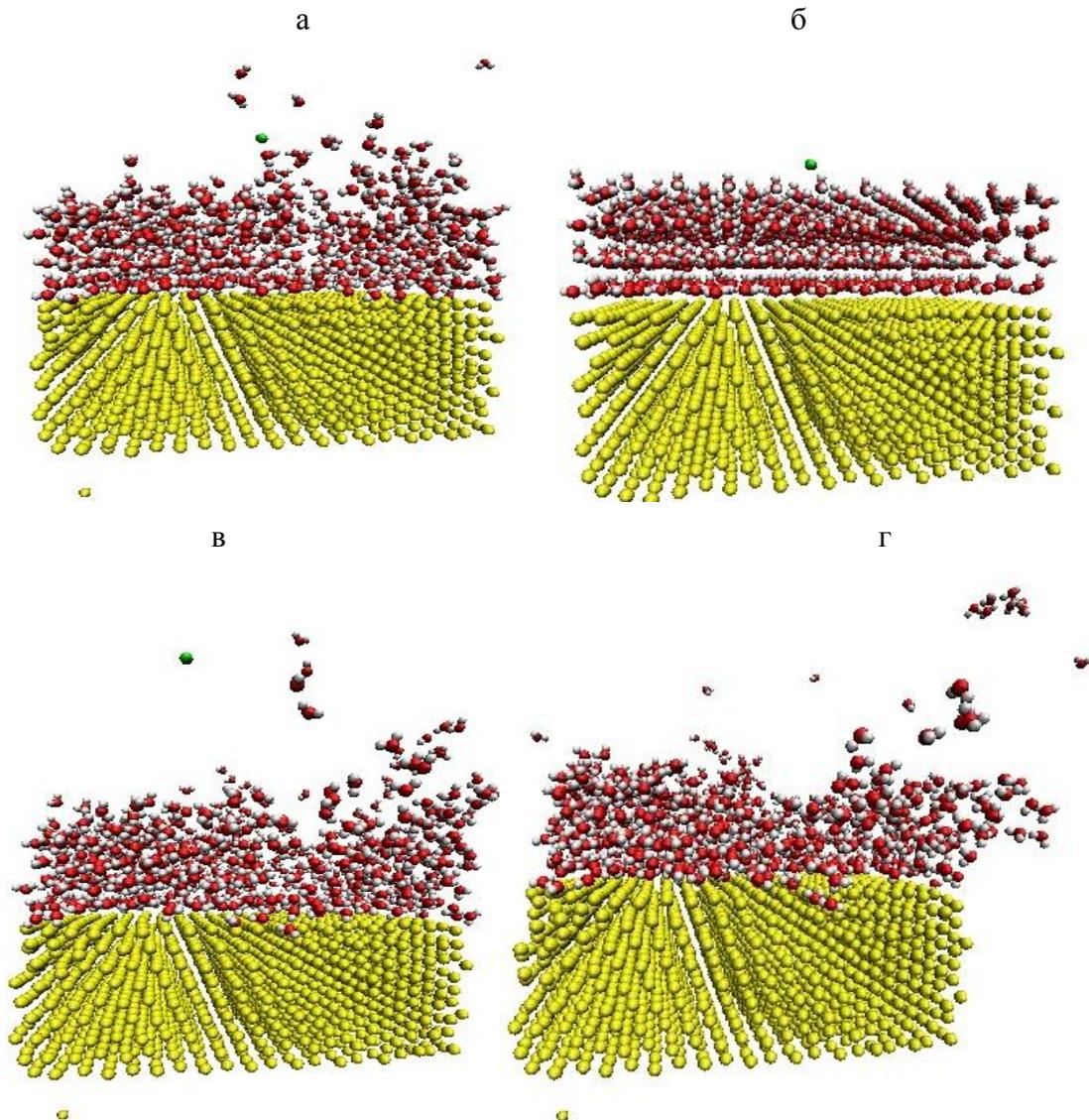


Рис.2. Динамика мишени(восьми слоями льда) при  $t=0$ пкс(а),  $t=1.43$ пкс (б),  $t=2.38$ пкс (в) и  $t=4.28$ пкс (г)

А на рис.2б. приведена состояния мишени при  $t=1.43$ пкс. К этому времени после столкновения ион отталкивался от мишени и происходит распыления молекул воды после прямого выбивания иона. Наши расчёты показали, что к этому времени на поверхности кристалла, где происходила столкновения иона все еще наблюдаются двигающиеся молекулы воды. Также видно, что один атом золото была выбита на нижней части подложки за счет каскада столкновения атомов подложки. Отметим, что за счет каскадного механизма один атом золото покинул кристалл в нижней части. На рис.2в. представлена состояния мишени при  $t=2.38$ пкс. Особенно в правой части мишени распыления молекул происходит интенсивнее. Следует отметить, что к этому времени процесса можно видеть начало образования большой открытой области на месте падения иона. Это объясняется с тем, что падающий ион отдал часть свою энергию мишень. И это энергия распределилась между пленкой и подложкой. Получая энергии молекулы воды начинают двигаться вращая при своих движениях. И это приводит к тому что часть молекул распыляются в виде молекул и кластера, а остальная часть остаются на краях подложки. А атомы подложки колеблется вокруг своих осей, так как они сильно связаны в кристаллических узлах. При  $t=4.28$ пкс (рис.2г.) процесс распыления водных молекул и кластеров происходит в малом количестве и на месте столкновения образовалось площадь освобожденный от водных молекул на поверхности подложки .т.е. молекул воды в этом месте



отсутствуют. Это область образовалось при движения молекул с вращением. Потому, что в какой-то момент при движении с вращением молекул происходит расположения одинаковых зарядов близко друг к другу и происходит процесс кулоновского взрыва, который разрывает молекулярные связи очень быстро и обрузует места свободных от молекул на поверхности кристалла золото.

## Выводы

Нами смоделирована процесс распыления пленок льда, покрывающий Au(111) при бомбардировке ионом  $\text{Ar}^+$  с начальной энергией 300эВ. При бомбардировке пленок, состоящих из шести слоёв наблюдается режим линейных каскадов характеризующиеся тем, что первично выбитый молекула получает энергию, достаточную для создания каскада выбитых молекул. Наши расчёты показали, что падающий ион сталкивается с молекулой и этот молекула сталкивается с соседними молекулами, и они образуют каскад столкновения. В случае бомбардировки восьми слоёв льда процесс распыления сперва происходит за счёт линейных каскадов, а потом множества вращательной движения наблюдается кулоновский взрыв, который очистит места падения иона от молекул воды на поверхности золото.

При мало энергетической ионной бомбардировке пленок льда, состоящих из восьми слоёв процесс распыления также наблюдается. С начала наблюдается режим линейного каскада, а за тем происходит кулоновский взрыв, который образует места свободных от молекул воды на поверхности золото. Следует отметить, что при таком значении начальной энергии подложка малую часть энергии и в основном атомы золото колеблется вокруг своих осей. то.есть распыления подложки не наблюдаются. Полученные результаты представляют большой интерес при очищении от разных молекул поверхностей металлов в производстве.

## Литература

1. S. Kim, R.Kramer, P.Hatcher. Graphical method for analysis of ultrahigh resolution broadband mass spectra of natural organic matter, the Van Krevelen diagram //Anal. Chem. 2003. Vol. 75, N 20. P. 5336–5344.
2. W. Kew, J.Blackburn, D.Clarke, D.Uhrín. Interactive van Krevelen diagrams – advanced visualisation of mass spectrometry data of complex mixtures // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2017. Vol. 31, P. 658–662
3. Y.Qi, R.Hempelmann, D.Volmer. Shedding light on the structures of lignin compounds: photo-oxidation under artificial UV light and characterization by high resolution mass spectrometry // Anal. Bioanal. Chem. 2016. Vol. 408. P. 8203–8210
4. A.Gras-Marti,R. Kirchner, R.Smith, R.P. Webb, K.Beardmore. Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact.with Mater. Atoms 2009, 102 (1–4), 211–217. doi:10.1016/0168-583x(95)80143-a
5. F.Stillinger,T. Weber. Fluorination of the Dimerized Si(100) Surface Studied by Molecular-Dynamics Simulation. Physical Review Letters. 1989, pp 2144–2147. doi:10.1103/Phys.Rev.Lett.62.2144
6. T.Senftle, S.Hong, M.Islam, S.Kylasa, Y. Zheng, Y.Shin,C. Junkermeier,R. Engel-Herbert, M.Janik, H.Aktulga, T.Verstraelen,A.Grama, A. Van Duin. Comput. Mater. 2016, 2 (November 2015).doi:10.1038/npjcompumats.2015.11
7. R.Abolfath, A.Van Duin, T.Brabec. Phys. Chem. A 2011, 115 (40), 11045-11049. doi:10.1021/jp204894m
8. M.Kowalik, M.Hossain, A. Lele, W. Zhu, R. Banerjee, T.Granzier-Nakajima, M.Terrones, E. Hudson, A.van Duin. Catalysts 2021, 11 (2), 1-12. doi:10.3390/catal11020208
9. K.Chenoweth, A.Van Duin,W. Goddard. Phys. Chem. A 2008, 112(5), 1040-1053. Doi: 10.1021/jp709896w.



10. U Kutliev, K Otabaeva, M Karimov, I Woiciechowski. Computer simulation of ice film sputtering from Au (111) surface //Journal of Physics: Conference Series 2388 (1), 012012.
11. К. М. Ерохин, Н.П.Калашников, А.С.Ольчак. Разрушение металла при нарушении условия суммарной нейтральности зарядов //Машиностроение и инженерное образование. 2010. 1 (22). С. 22–30.

